

# Etude du comportement et du compactage de pâtes granulaires par simulation numérique discrète

Pierre-Emmanuel Peyneau

### ▶ To cite this version:

Pierre-Emmanuel Peyneau. Etude du comportement et du compactage de pâtes granulaires par simulation numérique discrète. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2009. Français. NNT: . tel-00667564

### HAL Id: tel-00667564 https://theses.hal.science/tel-00667564

Submitted on 7 Feb 2012

**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.



### ÉTUDE DU COMPORTEMENT ET DU COMPACTAGE DE PÂTES GRANULAIRES PAR SIMULATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE

Thèse présentée pour obtenir le diplôme de Docteur de l'École Nationale des Ponts et Chaussées

par

### Pierre-Emmanuel Peyneau

Soutenue le 02/11/2009 devant le jury composé de :

M. Jean-Louis Barrat	(président du jury)
M. Reinhard Höhler	(examinateur)
M. Jeffrey F. Morris	(examinateur)
M. Jean-Michel Piau	(examinateur)
M. Olivier Pouliquen	(rapporteur)
M. Farhang Radjaï	(rapporteur)
M. Jean-Noël Roux	(directeur de thèse)

### Sommaire abrégé

### Introduction

Ι	Les pâtes granulaires : présentation et simulation	7
1	Généralités sur les pâtes granulaires	9
	1.1 Qu'est-ce qu'une pâte granulaire?	9
	1.2 Matériau considéré	12
	1.3 Aspect granulaire	12
	1.4 Aspect hydrodynamique	18
	1.5 Interactions entre grains	23
	1.6 Analyse dimensionnelle	28
2	Simulation numérique des pâtes granulaires	31
	2.1 Méthodes utilisées dans la littérature	31
	2.2 Méthode employée	36
	2.3 Compactage isotrope	47
	2.4 Discussion	55

### II Assemblages secs de grains non frottants

#### $\mathbf{57}$

1

3 Comportement des assemblages granulaires constitués de grains non fr			
		5	59
	3.1	Matériau modèle et simulations numériques	30
	3.2	Régime liquide sous cisaillement simple	36
	3.3	Régime solide	31
	3.4	Aspects microstructurels et micromécaniques	94
	3.5	Relations constitutives	10
	3.6	Conclusion et perspectives	11

### III Cisaillement maintenu et compactage de pâtes granulaires 115

4	l Cisaillement de pâtes granulaires lubrifiées			
	4.1	Matériau considéré et méthode numérique employée	117	
	4.2	Grandeurs macroscopiques	118	
	4.3	Aspects microstructurels	128	
	4.4	Conclusion et perspectives	130	

5	Con	npactage de pâtes granulaires lubrifiées	131
	5.1	Compactage et génie civil	131
	5.2	Compactage de matériaux granulaires secs	134
	5.3	Essais alternés de compactage d'une pâte granulaire lubrifiée	135
	5.4	Essais biaxiaux de compactage d'une pâte granulaire lubrifiée	150
	5.5	Conclusion	153
C	oncl	usion	155
A	nne	xe	159
A	Lub	prification hydrodynamique	161
	A.1	Équations de lubrification	161
	A.2	Exemple de deux sphères identiques en mouvement relatif normal	162

Liste de publications	165

Références

167

### Sommaire détaillé

#### Introduction 1 Ι Les pâtes granulaires : présentation et simulation 7 9 Généralités sur les pâtes granulaires 1 1.1Qu'est-ce qu'une pâte granulaire? 9 1.2Matériau considéré 12 1.3Aspect granulaire 12 1.3.1Comportement quasi-statique des assemblages granulaires secs 131.3.2Géométrie et mécanique d'une pâte granulaire 161.418 1.4.1Hydrodynamique de Stokes et comportement des suspensions . . . . . 191.4.2Approximation de lubrification et pâtes granulaires 211.5Interactions entre grains 231.5.1Forces de contact 231.5.2Force de lubrification 24Cas idéal 24Cas réel 251.5.3Modélisation d'une connexion mécanique : récapitulatif 271.6281.6.1Cas des grains secs 291.6.2Cas des pâtes granulaires 30 2 Simulation numérique des pâtes granulaires $\mathbf{31}$ 2.1312.1.1Méthodes de simulation directe 31Méthode de Boltzmann sur réseau 2.1.233 2.1.3Méthodes semi-analytiques 342.2Méthode employée 36 2.2.1Principe 36 2.2.2Calcul de la matrice de résistance 392.2.3Propriétés de la matrice de résistance ..... 422.2.4Résolution numérique 452.3 Compactage isotrope 472.3.1472.3.2États d'équilibre isotrope 482.455

### II Assemblages secs de grains non frottants

3	Cor	portement des assemblages granulaires constitués de grains non frottants
	3.1	Matériau modèle et simulations numériques 60
	0.1	3.1.1 Système et interactions
		3.1.2 Préparation de l'état initial
		3.1.3 Analyse dimensionnelle et limite géométrique macroscopique
		3.1.4 Équations du mouvement
	32	Régime liquide sous cisaillement simple
	0.2	3.2.1 Aspects qualitatifs 67
		Contraintes 67
		Profils de vitesse 69
		3.2.2 Évaluation des incertitudes afférentes aux valeurs movennes
		3.2.3 Frottement interne 71
		Effet de I
		Effet de $\kappa$
		Effet de C
		Effet de $N$
		À proximité de la limite géométrique macroscopique
		3.2.4 Compacité
		Effets de $I$ , de $\kappa$ et de $\zeta$
		Effet de $N$
		À proximité de la limite géométrique macroscopique
		3.2.5 Influence du contrôle exercé
		3.2.6 Cas polydisperse
	3.3	Régime solide
		3.3.1 Tests numériques et conditions aux limites
		3.3.2 Critère de rupture
		3.3.3 Comparaison avec le frottement interne mesuré en cisaillement maintenu. 88
		3.3.4 Compacité
	3.4	Aspects microstructurels et micromécaniques
		3.4.1 Quantités scalaires
		3.4.2 Anisotropie
		Anisotropie géométrique
		Anisotropie mécanique
		Relation contrainte/anisotropie
		3.4.3 Modules élastiques
	3.5	Relations constitutives
	3.6	Conclusion et perspectives

### III Cisaillement maintenu et compactage de pâtes granulaires 115

4	Cisa	aillement de pâtes granulaires lubrifiées 1	17
	4.1	Matériau considéré et méthode numérique employée	17
	4.2	Grandeurs macroscopiques	18
		4.2.1 Frottement interne	18
		4.2.2 Compacité	23
		4.2.3 Pression de contact	25
		4.2.4 Viscosité effective	26
	4.3	Aspects microstructurels	28
	4.4	Conclusion et perspectives	30

5	Cor	npactage de pâtes granulaires lubrifiées	131
	5.1	Compactage et génie civil	131
	5.2	Compactage de matériaux granulaires secs	134
	5.3	Essais alternés de compactage d'une pâte granulaire lubrifiée	135
		5.3.1 Système considéré	135
		5.3.2 Étude paramétrique	137
		5.3.3 Comparaison avec le cas sec	143
		5.3.4 Déformation de cisaillement	146
		5.3.5 Aspects microscopiques	. 149
	5.4	Essais biaxiaux de compactage d'une pâte granulaire lubrifiée	150
	5.5	Conclusion	153

### Conclusion

### 155

A	nnexe	159
A	Lubrification hydrodynamique	161
	A.1 Équations de lubrification	. 161
	A.2 Exemple de deux sphères identiques en mouvement relatif normal	. 162

### Liste de publications

Références

167

165

### Remerciements

J'adresse les plus vifs remerciements à mon directeur de thèse, Jean-Noël Roux, pour sa confiance, sa bienveillance, sa disponibilité, sa rigueur scientifique et les nombreuses pistes de travail qu'il m'a généreusement suggérées.

Je souhaite également remercier Olivier Pouliquen et Farhang Radjaï, les rapporteurs de ce manuscrit, pour leur diligence et le soin qu'ils ont apporté à l'évaluation de cette thèse de doctorat. Il m'est également agréable de saluer l'importante contribution des examinateurs de ce travail, Jean-Louis Barrat, Reinhard Höhler, Jeffrey Morris et Jean-Michel Piau.

J'ai eu l'opportunité d'enseigner la physique statistique à l'École des Ponts pendant trois ans. J'ai beaucoup appris de cette expérience au contact de François Chevoir et d'Anaël Lemaître. Qu'ils en soient ici très chaleureusement remerciés !

Les repas et pauses café ont souvent été émaillés d'agréables et instructives discussions avec les chercheurs, techniciens, personnels administratifs, doctorants et post-doctorants de ce qui était encore le Laboratoire des Matériaux et Structures du Génie Civil. Merci Xavier, Guillaume, François, Anaël, Philippe, Stéphane, Paméla, Patrick, Teddy, Aza, Sabine, Éric, Yves, Carmen, Michelle, Délhia, Elsa, Julie, Kad, Alexandre, Fabien, Flavien, Abdoulaye... pour tous les agréables moments passés en votre compagnie entre 2006 et 2009.

### Introduction

Cette thèse est dédiée à la simulation numérique du comportement de pâtes granulaires constituées de grains non browniens baignant dans un liquide newtonien de grande viscosité. Les pâtes granulaires sont des matériaux dont les propriétés sont intermédiaires entre celles des matériaux granulaires secs et des suspensions. Comme dans les matériaux granulaires secs, les grains d'une pâte peuvent rentrer en contact et comme dans les suspensions, la présence de grains affecte l'écoulement du fluide, cet écoulement induisant lui-même des interactions de nature hydrodynamique entre les grains.

Ces deux domaines — matériaux granulaires et suspensions — ont une longue histoire et ont fait l'objet de très nombreuses études. Les premiers à s'être intéressés aux matériaux granulaires sont certainement les mécaniciens, en particulier les mécaniciens des sols, puisque de nombreux géomatériaux sont formés de grains. Quantités de matériaux granulaires présents dans la nature ont donc fait l'objet de campagnes expérimentales. Mais, même si notre connaissance de ce type de matériaux progresse d'année en année, l'un de leurs principaux défauts, du moins pour l'ingénieur (le chercheur peut considérer que c'est un des attraits du domaine), est de rester rétifs à toute tentative de modélisation mathématique complète de leur comportement. Du fait de leur omniprésence, des difficultés de formalisation qu'ils soulèvent, de leur structure désordonnée à l'échelle macroscopique, ces matériaux ont également excité la curiosité des physiciens. Ces derniers, forts des succès enregistrés dans l'étude des systèmes thermodynamiques, se sont employés à adapter les outils qui leur étaient familiers pour essayer de mieux comprendre et de décrire le comportement des matériaux granulaires. Particulièrement sensibles par tradition aux explications des comportements macroscopiques observés reposant sur des bases microscopiques, ils ont mené de nombreuses études dans cet esprit. Ce genre de raisonnement faisait certainement jusqu'alors un peu défaut — même si cette affirmation doit être tempérée puisque certains mécaniciens avaient lancé des études de ce type [1], qui ont notamment permis de mettre en évidence l'existence de chaînes de force, avant que les physiciens ne commencent à s'intéresser au domaine — et a profondément renouvelé notre vision des matériaux granulaires. Le développement et l'utilisation de diverses méthodes de simulation numérique (dynamique moléculaire bien sûr, mais aussi dynamique des contacts, méthodes pilotées par les événements, méthodes statiques basées sur l'utilisation d'une matrice de raideur, voire méthodes géométriques de construction d'empilements [2]) a aussi permis de faire de grands progrès. Les matériaux granulaires réels sont en effet souvent bien complexes (du point de vue géométrique, mécanique, de l'influence de leur environnement immédiat sur leur comportement...). Or, la simulation permet justement d'étudier le comportement d'un matériau idéalisé et de mettre en évidence l'origine des phénomènes observés. En l'absence de théorie clairement établie, la simulation constitue indéniablemement un outil de choix pour affiner notre compréhension du comportement de ce type de matériaux. Si les premiers travaux numériques consacrés à l'étude des empilements granulaires secs ont porté sur des matériaux assez simples, comme des grains sphériques tous identiques indéformables [3], la trousse à outils du simulateur n'a depuis cessé de s'étoffer<sup>1</sup> : des travaux ont été consacrés aux matériaux granulaires cohésifs [6, 7], aux systèmes de grains présentant de la résistance au roulement [8], aux assemblages de grains non sphériques ou circulaires (polygones [9], particules non convexes [10]) ou encore à des matériaux fortement polydisperses [11]. Parallèlement à ces développements, l'étude de l'effet des processus de fabrication d'un échantillon granulaire et de leurs propriétés mécaniques une fois en place a été entreprise [12, 13, 14, 15].

Les suspensions ont également fait l'objet de nombreux travaux depuis l'étude pionnière d'Albert Einstein sur la viscosité effective d'une suspension newtonienne de billes infiniment diluées [16]. Cette étude, qui date du tout début du XX<sup>e</sup> siècle, est assez représentative des préoccupations actuelles des gens travaillant dans le domaine des suspensions puisque, cent ans plus tard, l'étude des variations de la viscosité effective des suspensions en fonction de la fraction volumique en inclusions solides, du taux de cisaillement appliqué, etc. continue de faire l'objet de très nombreuses recherches (voir notamment les références indiquées dans l'article [17]). Cet intérêt marqué est certainement dû à leur omniprésence : les pâtes, les ciments, les boues, le sang, etc. sont autant d'exemples de suspensions. Le comportement de ces matériaux dépend fortement de la taille des particules qu'ils contiennent. Lorsqu'elles sont « petites », l'agitation thermique joue un rôle important, tandis que lorsqu'elles sont « grosses », ce sont les effets d'origine purement hydrodynamique qui prédominent; c'est en réalité la valeur du nombre de Péclet, Pe = Va/D (V étant la vitesse typique de l'écoulement, a la taille des particules et D le coefficient de diffusion des particules) qui régit de ce point de vue le comportement de la suspension : brownien lorsque  $Pe \ll 1$  et hydrodynamique lorsque  $Pe \gg 1$  (c'est ce régime qui nous intéressera). Outre les études portant sur la viscosité des suspensions, des expériences sont fréquemment effectuées afin de caractériser les propriétés de sédimentation de ces matériaux. Comprendre ces propriétés est en effet essentiel pour améliorer les procédés de filtration et de décantation. Il s'avère que la sédimentation au sein des suspensions est un phénomène complexe. La forme des particules a notamment un impact important sur la sédimentation [18, 19]. Mais, même en se limitant à des grains sphériques, la sédimentation est sensible aux interactions mutuelles entre sphères [20], mais aussi à la présence des parois du récipient [21], de gradients de concentration [22]... Les suspensions présentent un grand intérêt pour les hydrodynamiciens théoriciens. Comme dans le cas des matériaux granulaires, un écoulement conduit à la formation d'une microstructure qui modifie elle-même l'écoulement. En sus de ce comportement non linéaire commun à tous les fluides complexes, l'étude des suspensions à nombre de Péclet très élevé présente d'autres difficultés qui leur sont propres : les interactions hydrodynamiques sont en effet à longue portée et elles ne sont pas additives (l'interaction entre deux grains dépend explicitement de la configuration microscopique de la totalité de la suspension). Les travaux théoriques consacrés à ces systèmes ont longtemps exclusivement porté sur le cas où la fraction volumique solide  $\Phi$  est très petite. Les quantités d'intérêt (viscosité, vitesse de sédimentation...) sont alors données par des développements en puissances de  $\Phi$ . Ces développements en sont restés à l'ordre deux tant qu'on n'a su traiter que le problème hydrodynamique à deux corps. Finalement, les années 80 ont vu la résolution analytique — c'est-à-dire le calcul de la matrice de mobilité — du problème hydrodynamique à N sphères fixes [23]. Néanmoins, ce tour de force ne signifie pas que l'étude des suspensions hydrodynamiques est close, loin de là. D'une part, les expressions obtenues sont extrêmement complexes. Et surtout, ce résul-

<sup>1.</sup> Toutes les avancées que nous allons mentionner portent sur le comportement quasi-statique ou les écoulements denses d'assemblages granulaires secs. Si ces deux régimes sont certainement ceux qui focalisent le plus l'attention à l'heure actuelle, il en existe néanmoins un troisième, le régime « gazeux » — dans lequel les grains interagissent principalement par l'intermédiaire de collisions binaires rapides — qui a fait l'objet de nombreuses études, en particulier dans les années 80 et le début des années 90 [4, 5]. Ce régime n'est pas abordé dans ce travail et nous n'en dirons donc pas plus.

tat ne dit rien du couplage entre écoulement et microstructure de la suspension. L'étude de ce problème très important a heureusement bénéficié de l'apparition d'une nouvelle méthode numérique dans les années 80, appelée dynamique stokésienne par ses auteurs, John F. Brady et Georges Bossis [24]. La dynamique stokésienne s'est rapidement imposée comme un outil de choix pour étudier le comportement des suspensions, browniennes ou non browniennes, et ce malgré ses limitations initiales (dues aux ressources informatiques disponibles à l'époque), qui n'autorisaient que la simulation de systèmes ne comportant que quelques dizaines de grains. Grâce aux raffinements apportés à la méthode et aux ordinateurs dont on dispose actuellement, on peut aujourd'hui simuler le comportement de suspensions comptant jusqu'à un millier de grains. Enfin, dans toutes les études théoriques et numériques que nous venons de mentionner, l'écoulement du fluide est supposé respecter les équations de Stokes [25] — on parle alors d'écoulement de Stokes, ou encore d'écoulement rampant (*creeping flow* en anglais) — mais on a récemment commencé à s'intéresser également au comportement de suspensions dont l'écoulement est régi par les équations de Navier-Stokes (c'est-à-dire des écoulements dont le nombre de Reynolds n'est pas négligeable) [26].

\* \* \*

Notre travail se situe à la confluence de ces deux domaines qui se sont longtemps développés indépendamment l'un de l'autre. Ce mémoire, d'une certaine façon, illustre la manière dont nos connaissances sur les matériaux granulaires secs peuvent être mises à profit pour étudier certains aspects du comportement des suspensions très concentrées — comme la façon dont elles s'écoulent lorsqu'on leur applique un cisaillement maintenu — ou encore la manière dont elles se compactent, et ainsi explorer les similitudes et les dissemblances entre ces deux types de systèmes au voisinage du régime quasi-statique.

Nous distinguons ici volontairement le comportement d'un matériau une fois en place de la façon dont il est préparé, à l'aide d'un procédé de compactage par exemple. Les simulations numériques de matériaux complexes portent la plupart du temps sur les propriétés du matériau une fois celui-ci en place et font généralement l'impasse sur l'influence du mode de préparation des échantillons numériques. On sait pourtant que le procédé de fabrication joue un rôle absolument crucial sur le comportement ultérieur du matériau. Ainsi, on prend souvent soin de précisailler un fluide complexe avant de procéder à des mesures rhéologiques afin de partir d'un état initial reproductible d'une expérience à l'autre. Dans le cas des matériaux granulaires, l'impact de la configuration initiale sur le comportement de l'assemblage est surtout sensible en régime quasi-statique. La façon dont on fabrique un empilement granulaire a ainsi d'importantes répercussions sur l'état d'équilibre qu'il va adopter [27] et sur la manière dont il répond à de petites sollicitations mécaniques [28]. En mécanique des sols, on montre également que le comportement d'un massif de sable dépend fortement du mode de préparation (damage humide ou pluviation à sec) employé [29].

L'objectif initial de ce travail était d'étudier la façon dont une pâte granulaire modèle se compacte. Les pâtes granulaires sont en effet des matériaux couramment rencontrés dans le domaine du génie civil (les bétons ou encore les enrobés bitumineux font partie de cette classe) et comprendre la manière dont de tels matériaux se compactent pourrait avoir un intérêt significatif pour l'étude du comportement des chaussées routières ou aéroportuaires par exemple.

Néanmoins, contrairement aux suspensions modérément concentrées ou aux assemblages granulaires secs, les pâtes granulaires n'ont quasiment pas fait l'objet d'études numériques jusqu'à présent. Cela tient aux difficultés soulevées par la simulation de tels systèmes. Pour un mécanicien des fluides cherchant à simuler le comportement d'une suspension newtonienne par exemple, plus la concentration volumique en particules est importante, plus les problèmes à résoudre sont épineux. C'est la raison pour laquelle, fort de l'expertise accumulée depuis des années dans l'étude du comportement quasi-statique des matériaux granulaires secs, nous avons cherché à aborder le problème en adaptant certaines des méthodes développées pour étudier ces systèmes. Les matériaux étudiés dans ce mémoire sont donc des assemblages granulaires hautement concentrés en particules baignant dans un liquide dont il faut naturellement tenir compte. Compte tenu du type de matériau que nous cherchons à modéliser (enrobés bitumineux), et des densités volumiques solides élevées qui nous intéressent, nous avons décidé de considérer que la présence de fluide a pour seul effet de modifier les forces entre grains proches voisins en introduisant des interactions de lubrification et en ne tenant pas compte des interactions hydrodynamiques à plus longue portée (cette approximation, qui peut être justifiée dans le cas dense, simplifie beaucoup les choses puisque dans ce cadre, la force entre deux grains séparés par une mince couche de fluide ne dépend que des vitesses des deux grains impliqués et non de celles de tous les grains du système). Cette démarche est assez originale et explique le peu d'études numériques consacrées juqu'ici aux pâtes granulaires. Il nous a semblé que ce manque motivait une excursion en dehors de l'étude du seul compactage et c'est la raison pour laquelle nous nous sommes également intéressés à d'autres aspects du comportement des pâtes granulaires, indépendants du mode de fabrication des échantillons employé, comme la manière dont elles se comportent sous cisaillement maintenu. Chemin faisant, en mettant en évidence certains comportements des pâtes granulaires, nous est aussi venue l'envie d'étudier plus avant une classe particulière d'assemblages granulaires secs, les assemblages granulaires constitués de grains non frottants.

Avant de présenter l'organisation du manuscrit, je voudrais dire quelques mots de l'esprit qui anime ce travail. À mon sens, les études relevant de la physique des matériaux macroscopiques peuvent être classées en deux grandes catégories. Certaines s'attachent à décrire, à comprendre et à modéliser un phénomène physique, parce qu'il pique la curiosité, qu'il est amusant ou encore qu'il présente un intérêt pratique potentiel ou avéré. D'autres visent à mesurer, à comprendre et à modéliser le comportement intrinsèque d'un matériau, ainsi que la manière dont ce comportement est affecté par le procédé de fabrication dudit matériau. Il est bien évident que ces deux types d'approches sont complémentaires et se nourrissent l'une l'autre. Les études contenues dans ce mémoire relèvent de la seconde catégorie. Nous avons cherché à mieux comprendre certains aspects du comportement des pâtes granulaires à l'aide de la simulation numérique discrète. La simulation numérique est en effet un bon moyen de procéder à des expériences bien contrôlées sur un matériau modèle. À ce titre, cette thèse peut, dans une certaine mesure, être considérée comme une thèse expérimentale. Le banc d'essai est ici simplement remplacé par un ordinateur permettant d'effectuer des *expériences numériques*. Ces expériences vont nous permettre de mieux comprendre l'influence de certains paramètres sur un procédé comme le compactage ou sur le comportement du matériau une fois en place.

\* \* \*

Ce document est divisé en trois parties. Le chapitre 1 contient une présentation des pâtes granulaires et une définition précise du type de pâtes — les pâtes granulaires lubrifiées — auxquelles ce travail est consacré. Dans le chapitre 2, on introduit une méthode numérique pour simuler le comportement de pâtes granulaires lubrifiées. À l'aide de cette méthode, on s'intéresse alors aux états d'équilibre mécanique d'une pâte soumise à un chargement isotrope, à deux dimensions. Les résultats obtenus montrent que, pour certaines plages de valeurs des paramètres régissant le comportement du matériau, une pâte granulaire lubrifiée se comporte pratiquement comme un assemblage granulaire sec constitué de grains non frottants (ces assemblages seront

parfois appelés assemblages granulaires secs non frottants : il est entendu que le qualificatif « non frottant » s'applique aux grains eux-mêmes et non à l'empilement dans son ensemble). Cette étude clôt la partie I. Le comportement d'assemblages granulaires faits de tels grains, en trois dimensions, est étudié en détail dans le chapitre 3, qui constitue aussi la partie II : on y étudie les propriétés des assemblages granulaires secs faits d'un grand nombre de grains très rigides, avec un intérêt tout particulier pour la limite quasi-statique. Néanmoins, considérer qu'une pâte granulaire est assimilable à un matériau granulaire sec non frottant est simplificateur. En particulier, nous verrons que ces matériaux se comportent de façon triviale et non réaliste lorsqu'on les compacte. C'est pourquoi nous opérons un retour sur l'étude des pâtes granulaires proprement dites dans la partie III, à nouveau en deux dimensions. Dans le chapitre 4, nous comparons le comportement de pâtes granulaires lubrifiées et d'assemblages granulaires secs cisaillés de manière stationnaire. Enfin, le chapitre 5 est consacré à l'étude du compactage des pâtes granulaires lubrifiées.

### Première partie

## Les pâtes granulaires : présentation et simulation

### Chapitre 1

### Généralités sur les pâtes granulaires

### 1.1 Qu'est-ce qu'une pâte granulaire?

Une pâte granulaire est un assemblage de grains macroscopiques <sup>1</sup> (gravier, sable...), baignés par un liquide (newtonien ou même complexe) présentant une viscosité importante, et dont la fraction solide est élevée. La fraction solide peut être évaluée de plusieurs manières à partir du volume de l'espace poral  $\Omega_p$ , du volume des grains solides  $\Omega_s$  et du volume total  $\Omega$  de l'échantillon; les notions d'indice des vides  $e \equiv \Omega_p/\Omega_s$  ou de porosité  $\varphi \equiv \Omega_p/\Omega$  sont fréquemment employées mais dans ce travail, nous utiliserons plutôt la notion équivalente de compacité — ou fraction volumique solide —  $\Phi \equiv \Omega_s/\Omega$ . La valeur importante de la fraction solide distingue une pâte d'une suspension quelconque. La densité d'inclusions solides dans une pâte est en effet telle que les *connexions mécaniques* entre grains, qu'elles soient directes (contacts) ou indirectes (forces s'exerçant par l'intermédiaire d'une mince couche de fluide), jouent un rôle prépondérant dans le comportement du matériau. Les pâtes granulaires sont donc au point de rencontre entre les suspensions denses et les matériaux granulaires.

L'intérêt suscité par les pâtes granulaires s'explique de plusieurs manières. D'une part, ces matériaux sont omniprésents dans notre environnement : le béton frais, les enrobés bitumineux au cours de leur mise en place, les sols saturés ou encore les boues sont autant d'exemples qui illustrent l'ubiquité des matériaux pâteux (voir figure 1.1). Une meilleure compréhension des pâtes granulaires permettrait donc de mieux appréhender le comportement de très nombreux systèmes. Les exemples de pâtes granulaires que nous venons de mentionner font ressortir quelques traits saillants de ces matériaux. Comme le montre la figure 1.2, les grains présentent généralement une grande variété de formes et de textures et leur distribution de taille est étalée. De plus, ils peuvent être constitués de différents matériaux. Enfin, le fluide qui les baigne est souvent complexe. Ces caractéristiques microstructurales précises sont particulièrement difficiles à prendre en compte.

Les pâtes granulaires sont elles-mêmes ce qu'on appelle des fluides complexes, tout comme les mousses, les émulsions, les gels, les polymères, les matériaux granulaires secs, *etc.* Un fluide

<sup>1.</sup> Un tel système est donc insensible à l'agitation thermique.



Figure 1.1 : À gauche : coupe d'un échantillon de béton. À droite : coupe d'un échantillon d'enrobé bitumineux.



Figure 1.2 : Représentation schématique d'une pâte granulaire. Les grains sont dessinés en gris et la zone bleue mouchetée représente le fluide (éventuellement complexe). L'espace poral est ici complètement saturé par le liquide.

est qualifié de complexe lorsqu'il présente une ou plusieurs caractéristiques non linéaires (donc non newtoniennes en particulier) marquées : existence d'une contrainte seuil en decà de laquelle aucun écoulement n'est observé, viscoélasticité, thixotropie, comportement rhéofluidifiant ou rhéoépaississant [30]... Ces comportements sont toujours associés à l'existence d'une microstructure à l'échelle supramoléculaire. Enfin, contrairement aux fluides simples qui ne possèdent aucune configuration de référence, le comportement mécanique des fluides complexes est sensible à la répartition spatiale des éléments qui se trouvent en leur sein (inclusions solides dans le cas des pâtes, chaînes macromoléculaires dans le cas des fluides polymères, etc.) et dépend de l'histoire du matériau. Il est donc très important de pouvoir mettre en regard le comportement d'un fluide complexe avec la distribution spatiale de ses éléments constitutifs. Plusieurs techniques expérimentales, comme la diffusion de rayonnement ou la résonance magnétique nucléaire (RMN), permettent d'avoir accès à des détails plus ou moins fins de la microstructure de certains fluides complexes. Dans le cas des suspensions, les expériences de diffusion (électromagnétique ou neutronique [31]) permettent une mesure directe du facteur de structure  $S(\vec{k}) = 1 + n_0 \int d^3 \vec{r} \, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \left(g(\vec{r}) - 1\right) \left(n_0 \text{ étant le nombre de particules par unité de volume et } \right)$  $q(\vec{r})$  la fonction de corrélation de paires), tandis que les expériences RMN donnent notamment accès à la fraction volumique locale en particules solides [17]. La simulation numérique constitue également une approche particulièrement intéressante [24] et c'est d'ailleurs celle que nous emploierons par la suite. Elle permet de déterminer la microstructure du système considéré et, partant, ses propriétés macroscopiques. En outre, le comportement d'un fluide complexe est généralement régi par plusieurs paramètres qu'il est souvent délicat expérimentalement de faire varier indépendamment les uns des autres. L'un des avantages de la simulation numérique est de permettre de contrôler finement un seul paramètre et d'isoler ainsi des effets spécifiques. La simulation permet également de tester la validité de certaines théories. Il n'est pas rare que plusieurs théories entrent en concurrence pour expliquer un phénomène donné. Dans ce cas, la simulation numérique peut aider à clarifier les choses. Enfin, la simulation peut également soutenir le développement d'une théorie ou fournir des indices qualitatifs sur la façon dont se comporte le système.

Toutes les techniques d'investigation, qu'elles soient théoriques, numériques ou expérimentales, sont utilisées pour élucider le comportement des pâtes granulaires, et plus généralement des suspensions, qui est particulièrement difficile à cerner. Un tel système peut en effet se comporter comme un liquide lorsqu'on lui applique une contrainte de cisaillement suffisamment élevée ou comme un solide dans le cas contraire. L'une des quantités les plus fréquemment considérée est la viscosité apparente (parfois aussi qualifiée d'effective) d'une suspension soumise à un écoulement donné. L'étude de la viscosité des suspensions présente en effet un intérêt certain, que ce soit d'un point de vue appliqué ou plus fondamental. Les paramètres jouant un rôle sur la viscosité sont nombreux. Citons par exemple, la nature du liquide, celle des particules, la fraction volumique solide, la forme des particules ou encore leur distribution spatiale. Ainsi, loin d'être une simple constante comme dans le cas des liquides simples, la viscosité d'une suspension peut également être fonction des sollicitations mécaniques qui lui sont appliquées [32]<sup>2</sup>. Les suspensions sont en général rhéofluidifiantes. Il semble aussi qu'elles soient toutes rhéoépaississantes à condition que le taux de cisaillement appliqué soit suffisamment élevé. D'autre part, le rhéoépaississement s'observe d'autant plus facilement que la fraction volumique solide est importante et que les interactions colloïdales sont faibles. Ces quelques constatations rendent compte de la formidable richesse du comportement des suspensions et encore ne portent-elles que sur leur viscosité. Bien d'autres propriétés des suspensions, et des pâtes granulaires en particulier, sont bien sûr dignes

<sup>2.</sup> Une suspension n'est newtonienne que si la distribution des centres et des orientations des grains est isotrope et constante [33] ce qui n'est pas le cas des suspensions non diluées dont le comportement visqueux ne peut donc être caractérisé par un unique coefficient de viscosité.

d'intérêt : diffusion [34], sédimentation [20], réseau des contacts [3], critère de rupture [35], *etc.* Néanmoins, le seul exemple de la viscosité montre qu'il est sans doute illusoire de chercher une théorie susceptible de s'appliquer à toutes les suspensions ou même aux seules pâtes granulaires. Dès lors, l'attitude la plus raisonnable consiste à se cantonner à l'étude de classes particulières de pâtes granulaires.

### 1.2 Matériau considéré

Compte tenu de la difficulté considérable que représente l'étude générale des pâtes granulaires, nous avons pris le parti d'introduire un certain nombre de simplifications dans le cadre de notre travail : nous supposerons que les grains sont macroscopiques (donc non browniens et non colloïdaux), tous faits du même matériau, supposé élastique linéaire isotrope, de forme sphérique (à trois dimensions) ou circulaire (à deux dimensions) — cette approximation a le mérite de grandement simplifier la description cinématique des grains —, animés d'une vitesse faible et qu'ils baignent dans un liquide newtonien très visqueux. Le nombre de Reynolds Re  $\equiv \rho VL/\eta$  (V et L représentent la vitesse et la taille typiques de l'écoulement, tandis que  $\rho$  et  $\eta$  désignent la masse volumique et la viscosité dynamique du fluide) de l'écoulement est donc très petit. Enfin, nous ne chercherons pas à utiliser une distribution de taille des particules particulièrement réaliste et nous n'étudierons pas l'influence de cette distribution sur le comportement du matériau.

De même que le gaz parfait est un modèle de l'état gazeux qui permet de comprendre un certain nombre de propriétés des gaz réels, ou que le fluide de sphères dures est un archétype de liquide à densité élevée, le matériau que nous choisissons de considérer est un modèle idéal de pâte granulaire. Ce modèle n'est évidemment pas en mesure de rendre compte quantitativement de toutes les propriétés des pâtes granulaires réelles (il est clair que la forme des particules n'est pas sans conséquence sur les propriétés mécaniques d'une pâte, comme sa viscosité effective par exemple [36]) mais nous espérons qu'il permette de mieux comprendre le comportement d'une pâte granulaire quelconque, au moins d'un point de vue qualitatif. En dépit du caractère simplifié du modèle, une pâte granulaire idéale reste néanmoins un matériau dont le comportement est difficile à cerner.

La principale caractéristique des pâtes granulaires est d'être sensible à deux types d'interactions : les interactions de contact entre particules (aspect granulaire) et les interactions à distance dont le liquide interstitiel est le vecteur (aspect hydrodynamique). Ces deux aspects confèrent aux pâtes granulaires des caractéristiques intermédiaires entre celles des matériaux granulaires secs et celles des suspensions et font l'objet des deux prochaines sections.

### **1.3** Aspect granulaire

Les contacts qui se font et se défont lorsqu'une pâte granulaire est sollicitée mécaniquement sont susceptibles de jouer un grand rôle dans le comportement de la pâte et de lui conférer des propriétés proches de celles des matériaux granulaires secs. Nous allons maintenant énumérer quelques-unes des propriétés les plus marquantes de ce type de systèmes.

#### 1.3.1 Comportement quasi-statique des assemblages granulaires secs

Les assemblages granulaires secs sont des systèmes désordonnés formés d'un grand nombre de composantes (les grains). Lorsque la taille typique des grains est supérieure au micromètre, ces systèmes ne sont pas sensibles à l'agitation thermique et ne sont donc pas justiciables d'un traitement par la physique statistique. Ces difficultés de nature scientifique ainsi que l'omniprésence de ces matériaux dans notre environnement quotidien expliquent l'intérêt qu'ils suscitent dans des domaines commme la mécanique des sols, le génie des procédés, ou encore en physique de la matière condensée [37, 38, 39]. Pendant longtemps, les recherches portant sur le comportement mécanique d'assemblages de particules solides ont souvent été menées par les mécaniciens des sols [37, 40, 41] et sont restées cantonnées à l'échelle macroscopique. Ce n'est par exemple que depuis une quarantaine d'années que l'on sait que la distribution des forces de contact dans un matériau granulaire est très étendue [1] (voir figure 1.3), tandis que de nombreuses études numériques ont été entreprises depuis une trentaine d'années [42] afin de mieux cerner la physique des matériaux granulaires et d'expliquer leur comportement à partir des propriétés micromécaniques des assemblages [43].

À l'instar de nombreux fluides complexes, un matériau granulaire peut se comporter comme un solide ou un liquide en fonction du type de sollicitation appliquée. Si l'on suppose que les grains qui le forment sont très rigides, un assemblage granulaire ne présente aucune échelle de contrainte. Le comportement d'un tel système est donc gouverné par le rapport entre les éléments du tenseur des contraintes et la pression (la pression est égale à la trace du tenseur des contraintes divisée par la dimension de l'espace). On appelle frottement interne, ou frottement effectif, le rapport entre l'intensité du déviateur de contrainte et la contrainte moyenne subie par le matériau. La valeur de cette quantité joue donc un rôle important sur le comportement d'un assemblage granulaire sec. Le comportement d'un matériau granulaire dépend aussi de son état initial et de l'histoire des sollicitations dont il a fait l'objet, y compris pour de faibles déformations. Il n'existe pas de relation entre le tenseur des déformations  $\underline{\varepsilon}$  (ou des taux de déformations  $\underline{\dot{e}}$ ) et le tenseur des contraintes  $\underline{\sigma}$ , contrairement à ce que l'on observe pour les fluides newtoniens par exemple. Seule une formulation incrémentale, fonction de l'état initial du matériau, est à même de correctement décrire le comportement d'un échantillon granulaire. Bien que de nombreuses lois incrémentales aient été proposées [44], elles sont souvent complexes et aucune ne rend compte de tous les comportements observés, aussi des approches simplifiées sont-elles encore fréquemment employées (calcul à la rupture avec un critère de plasticité de Coulomb, modèle élastoplastique de Mohr-Coulomb), même si on sait qu'elles sont extrêmement caricaturales. Le régime élastique utilisé lorsque l'on procède à des calculs dans le cadre du modèle élastoplastique de Mohr-Coulomb n'est par exemple qu'un artifice, puisqu'on constate expérimentalement que les incréments de sollicitation exercés sur un assemblage granulaire ne sont véritablement réversibles que lorsque les déformations qu'ils engendrent sont inférieures à une valeur de l'ordre de  $10^{-5}$  [45]. Les véritables modules élastiques d'un matériau granulaire au voisinage d'un état donné sont donc difficiles à mesurer. Ces mesures peuvent néanmoins être effectuées à l'aide d'appareils triaxiaux équipés de capteurs très sensibles [45] ou encore par des méthodes acoustiques [46, 47].

L'appareil triaxial de révolution est le dispositif expérimental le plus utilisé pour étudier le comportement mécanique d'un assemblage granulaire cisaillé de manière quasi-statique. L'essai consiste à soumettre un échantillon, confiné à l'intérieur d'une membrane mise sous pression afin de garantir la tenue du matériau, à une contrainte latérale  $\sigma_3$  et à une contrainte axiale  $\sigma_1$  appliquée à l'aide d'un piston (voir figure 1.4). Cet appareil permet d'obtenir des contraintes et des déformations dans la partie centrale de l'éprouvette présentant un bon degré d'homogénéité



Figure 1.3 : Configuration d'équilibre d'un assemblage granulaire sec constitué de disques sous chargement isotrope. Les segments représentent les forces normales de contact et sont d'autant plus épais que la force est intense. Les conditions aux limites sont périodiques et un peu plus d'une période est ici représentée.



Figure 1.4 : Essai triaxial.

(hormis quand des problèmes de localisation surviennent lorsque les niveaux de déformation atteints deviennent importants), de contrôler les contraintes et les directions principales et de procéder à des essais drainés ou non drainés. La mesure des quantités d'eau échangées entre l'échantillon et l'extérieur de la cellule triaxiale permet en outre de mesurer la déformation volumique  $\varepsilon_v = \Delta V/V_0$  de l'assemblage granulaire. En règle générale, c'est le déplacement du piston qui est contrôlé au cours de l'essai ce qui permet de maîtriser le niveau de déformation de l'échantillon. On définit le déviateur de contrainte  $q = \sigma_1 - \sigma_3$ . La figure 1.4 montre la courbe de cisaillement et la courbe de déformation volumique observées sur un sable saturé testé en conditions drainées, dans un état initial lâche ou dense. Les courbes de cisaillement montrent que le sable dense est plus raide <sup>3</sup> que le sable lâche et qu'il atteint un pic de résistance avant que cette dernière ne se stabilise au même niveau que celle du sable lâche. D'autre part, on constate que la déformation volumique du sable lâche est systématiquement négative (« contractance »), tandis que celle du sable dense devient rapidement positive (« dilatance ») après un courte phase de contractance. Dans tous les cas, le volume de l'échantillon finit par se stabiliser.

Ces essais triaxiaux mettent en évidence plusieurs propriétés très importantes des assemblages granulaires secs. D'une part, un matériau granulaire dense est généralement dilatant. On sait en effet depuis la fin du XIX<sup>e</sup> siècle et les travaux pionniers d'Osborne Reynolds que déformations de cisaillement et volumique sont couplées dans les matériaux granulaires [48]. Un matériau réel formé de grains densément disposés ne peut être déformé sans voir son volume augmenter : c'est le phénomène de dilatance. Cette caractéristique des assemblages granulaires compacts a d'ailleurs des conséquences spectaculaires <sup>4</sup>. Ainsi, frottement interne et dilatance semblent inextricablement liés dans ce type de matériau ce qui a conduit certains auteurs à proposer des relations liant ces deux grandeurs [40, 49, 50]. Nous montrerons néanmoins que ce n'est pas toujours le cas dans le chapitre 3. D'autre part, tant que la valeur du frottement interne reste suffisamment modérée, un échantillon granulaire est en mesure d'atteindre un état d'équilibre mécanique sous cisaillement <sup>5</sup>, même s'il ne se comporte pas *stricto sensu* de manière élastique

<sup>3.</sup> Au vu du comportement linéaire de la courbe de cisaillement en fonction de la déformation axiale au voisinage de l'origine, on pourrait être tenté de croire que le matériau se comporte de manière élastique sur une bonne partie du domaine de variation représenté sur la figure 1.4, mais il n'en est rien. Comme nous l'avons déjà mentionné, le domaine élastique d'un assemblage granulaire est extrêmement réduit. De plus, le module effectif que l'on peut inférer à partir de la valeur de la pente n'est pas du tout du même ordre de grandeur que le module d'Young « véritable » mesuré par une méthode acoustique.

<sup>4.</sup> Si l'on place un matériau granulaire dense saturé en eau dans une enveloppe élastique et que l'on repère les variations de volume de l'assemblage à l'aide du niveau atteint par l'eau dans un tube planté dans l'échantillon, on constate que lorsque l'on comprime la poche, le niveau d'eau dans le tube descend [48].

<sup>5.</sup> On modélise généralement ce comportement en supposant que le matériau est élastoplastique et écrouissable.

(du fait du frottement entre grains et de la réorganisation spatiale des particules qui intervient la plupart du temps). Ce n'est plus le cas lorsque le frottement interne atteint une valeur seuil : on assiste alors à une rupture du matériau et à sa mise en écoulement. Cette valeur seuil donne une information sur le critère de rupture du matériau ; en procédant à d'autres types d'essais mécaniques et en mesurant les seuils de rupture correspondants, on peut reconstruire ce critère. Enfin, dans la limite où les sollicitations appliquées à l'échantillon sont très lentes (limite quasistatique), l'état du matériau converge vers un état unique lorsqu'il est suffisamment cisaillé (c'est l'état final que l'on observe sur la figure 1.4 lorsqu'un sable a suffisamment été cisaillé, que l'on soit parti d'un état initial dense ou lâche). Cet état, dans lequel la compacité  $\Phi_c$ , le volume, le tenseur des contraintes *etc.*, ne dépendent pas de la configuration initiale du matériau et restent constants lorsque l'on poursuit l'essai en déformation monotone, est qualifié d'*état critique* en mécanique des sols [40]. C'est un état de plasticité parfaite qui est atteint lorsque la déformation due au cisaillement devient suffisamment grande : l'assemblage se déforme alors continûment et de manière stationnaire.

#### 1.3.2 Géométrie et mécanique d'une pâte granulaire

Nous allons brièvement rappeler dans cette section quelques notions évoquées dans [51] qui nous seront utiles par la suite. Ces notions ont une portée très générale puisqu'elles sont utilisées pour l'étude mécanique des systèmes à degrés de liberté discrets comme les réseaux de câbles ou de poutres, les assemblages granulaires, *etc*.

**Matrice de rigidité :** Considérons une pâte granulaire comportant N grains sphériques (cette restriction sur la forme des grains pourrait aisément être levée) rigides. Le champ des vitesses des grains peut être décrit par la donnée de toutes les vitesses des centres des grains  $\vec{V_i}$  et des vitesses angulaires  $\vec{\omega_i}$ . Les coordonnées de ces vecteurs, ainsi que d'éventuels autres scalaires (comme des taux de déformation de l'enceinte dans laquelle se trouve le système par exemple), peuvent être rassemblés dans un grand vecteur-vitesse  $\underline{\mathcal{V}}$  appartenant à un espace vectoriel noté  $\mathfrak{V}$ , de dimension le nombre  $N_l$  de degrés de liberté. D'autre part, on peut appliquer une force  $F_i^{\text{ext}}$  et un couple  $\Gamma_i^{\text{ext}}$  extérieurs sur les centres de chacun des N grains. On peut rassembler les composantes de tous ces vecteurs ainsi que les forces généralisées (efforts) associées aux autres degrés de liberté dans un grand vecteur-force  $\underline{\mathcal{F}}^{\text{ext}}$  appartenant à un espace vectoriel  $\mathfrak{F}$  de dimension  $N_l^6$ .

Les connexions mécaniques entre grains, en nombre  $N_c$ , portent des forces intérieures. La donnée du système, de ses degrés de liberté et de la liste des connexions définit ce que l'on appelle une structure. Enfin, la donnée d'une structure et d'un chargement, c'est-à-dire d'un élément de  $\mathfrak{F}$ , définit un problème. Les équations d'équilibre du problème sont au nombre de  $N_l$  et comportent  $N'_c$  inconnues (les composantes des forces intérieures).  $N_l$  diffère en général de  $N'_c$ . Si les équations sont indépendantes et que  $N_l < N'_c$ , le problème est surdéterminé (il est alors qualifié d'hyperstatique) et on ne pourra trouver la valeur des forces intérieures qu'en utilisant une loi de comportement de la connexion reliant ces dernières aux déplacements ou aux vitesses. Inversement, il se peut qu'aucune solution n'existe.

Pour bien traiter ces questions de dénombrement des équations d'équilibre indépendantes, on introduit la matrice (ou opérateur) de rigidité  $\underline{\underline{G}}$  qui, lorsqu'elle agit sur un élément de  $\mathfrak{V}$ , donne les vitesses relatives au niveau des connexions mécaniques. On introduit également la matrice

<sup>6.</sup>  $\mathfrak{F}$  n'est autre que le dual de  $\mathfrak{V}$ , manière mathématique de dire que la puissance est le produit scalaire du vecteur-force avec le vecteur-vitesse.

 $\underline{\mathbf{H}}$  (dont nous verrons plus loin qu'elle est reliée de manière simple à  $\underline{\mathbf{G}}$ ) qui, lorsqu'elle agit sur les forces intérieures, donne l'élément de  $\mathfrak{F}$  qu'elles équilibrent.  $\underline{\mathbf{G}}$  est donc un opérateur qui agit de  $\mathfrak{V}$  dans l'espace vectoriel des vitesses relatives correspondant aux connexions  $\mathfrak{C}$ , de dimension égale à  $N'_c$ . Quant à l'opérateur  $\underline{\mathbf{H}}$ , il agit de l'espace vectoriel  $\mathfrak{S}$  des forces intérieures, de dimension égale à  $N'_c$ , dans  $\mathfrak{F}$ . Le noyau de  $\underline{\mathbf{G}}$  est le sous-espace vectoriel de  $\mathfrak{V}$ constitué des grands vecteurs-vitesse tels que les vitesses relatives au niveau des connexions de la structure sont nulles. Les vecteurs non nuls de Ker  $\underline{\mathbf{G}}$  sont appelés mouvements de mécanismes (ou modes mous). La dimension de Ker  $\underline{\mathbf{G}}$ , notée k, s'appelle le degré d'hypostaticité de la structure, ou encore le degré d'indétermination des vitesses <sup>7</sup>. L'image de  $\underline{\mathbf{G}}$  est le sous-espace de  $\mathfrak{C}$  constitué des vitesses relatives compatibles. Le noyau de  $\underline{\mathbf{H}}$  correspond à l'ensemble des forces intérieures auto-équilibrées. La dimension de Ker  $\underline{\mathbf{H}}$ , notée  $\overline{h}$ , s'appelle le degré d'hyperstaticité de la structure. Lorsqu'un vecteur de  $\mathfrak{S}$  est solution d'un problème, c'est aussi le cas de la somme de ce vecteur avec un élément quelconque de Ker  $\underline{\mathbf{H}}$ . L'image de  $\underline{\mathbf{H}}$  correspond à l'ensemble des chargements pour lesquels il est possible de trouver des forces intérieures assurant l'équilibre ; de tels chargements sont dits supportables <sup>8</sup>.

Le théorème des puissances virtuelles stipule que, pour tout vecteur des forces intérieures  $\underline{f}$  statiquement admissible (c'est-à-dire équilibrant le chargement extérieur  $\underline{\mathcal{F}}^{\text{ext}}$ ) et pour tout grand vecteur-vitesse  $\underline{\mathcal{V}}$  correspondant à un vecteur des vitesses relatives  $\delta \underline{v}$ , on a :

$$\underline{\mathcal{F}}^{\text{ext}} \cdot \underline{\mathcal{V}} = \underline{f} \cdot \delta \underline{v} \tag{1.1}$$

En d'autres termes,  $\langle \underline{\underline{\mathbf{H}}} \cdot \underline{f} | \underline{\mathcal{V}} \rangle = \langle \underline{f} | \underline{\underline{\mathbf{G}}} \cdot \underline{\mathcal{V}} \rangle$ , ce qui implique que la matrice  $\underline{\underline{\mathbf{H}}}$  est la transposée de la matrice  $\underline{\underline{\mathbf{G}}}$  :

$$\underline{\underline{\mathbf{H}}} = \underline{\underline{\mathbf{G}}}^{\top} \tag{1.2}$$

Cette égalité fait le pont entre des propriétés mécaniques associées aux forces et des propriétés géométriques associées aux déplacements : par exemple, un chargement est supportable si et seulement s'il ne travaille pas dans des mouvements de mécanismes; de même un vecteur de vitesses relatives est compatible si et seulement s'il est orthogonal à l'espace des forces intérieures auto-équilibrées. En utilisant le théorème du rang et le fait que l'image d'une matrice est égale à l'orthogonal du noyau de sa transposée, il vient :

$$N_c' + k = N_l + h \tag{1.3}$$

Cette relation n'est que l'expression rigoureuse de la possibilité d'équilibrer une structure connaissant le nombre de forces intérieures inconnues.

**Tenseurs des contraintes de Cauchy :** Nous allons montrer que le tenseur des contraintes de Cauchy macroscopique d'une pâte granulaire équilibrant un chargement extérieur est donné par l'expression suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\text{connexions}} \vec{F}_{ij} \otimes \vec{r}_{ij}$$
(1.4)

 $\Omega$  est le volume du système (ou sa surface à deux dimensions),  $\vec{F}_{ij}$  est la force exercée par le grain *i* sur le grain *j* et  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$  avec  $\vec{r}_k$  le rayon vecteur du centre du grain *k*. La convention adoptée dans l'expression du tenseur des contraintes est celle de la mécanique des sols : les tractions sont négatives et les compressions positives. Cette expression macroscopique

<sup>7.</sup> Il arrive, lorsque les conditions aux limites autorisent le mouvement de l'ensemble du système comme un seul corps rigide, que l'on exclue de tels mouvements dans l'évaluation du degré d'hypostaticité.

<sup>8.</sup> Tout chargement supportable n'est pas nécessairement supporté puisque les forces intérieures doivent safisfaire l'inégalité de Coulomb au niveau des contacts frottants pour être plastiquement admissibles.

n'a un intérêt que si on peut définir une contrainte macroscopique homogène dans au moins une partie de l'échantillon.  $\Omega$  doit donc être plus grand que le volume élémentaire représentatif.

L'équation 1.4 peut être établie à l'aide du théorème des puissances virtuelles. Considérons en effet une pâte granulaire. On peut imposer les vitesses  $\vec{V_i}$  des centres des grains appartenant à la périphérie du système (on note  $I_p$  l'ensemble de ces grains périphériques); le plus simple est de faire l'hypothèse d'un taux de déformation homogène en choisissant  $\vec{V_i} = -\underline{\dot{\varepsilon}} \cdot \vec{r_i}$ , ce qui revient à imposer un taux de déformation macroscopique  $\underline{\dot{\varepsilon}}$  à l'échantillon. On définit alors le tenseur des contraintes  $\underline{\sigma}$  via la relation :

$$\Omega \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} : \underline{\underline{\sigma}} = \sum_{i \in I_p} \vec{F}_i^{\text{ext}} \cdot \vec{V}_i \tag{1.5}$$

D'après le théorème des puissances virtuelles, le membre de droite de l'équation précédente est égal à  $\sum_{i < j} \vec{F_{ij}} \cdot \delta \vec{V_{ij}}^9$ , pour des forces intérieures équilibrant le chargement extérieur imposé et pour des vitesses relatives telles que les vitesses soient compatibles avec les conditions aux limites. En choisissant comme forces  $\vec{F_{ij}}$  les forces intérieures qui régnaient au sein du système à l'équilibre et comme vitesses relatives  $\delta \vec{V_{ij}} = \underline{\dot{\varepsilon}} \cdot \vec{r_{ij}}$  au niveau de chaque connexion, on obtient :

$$\Omega \underline{\dot{\underline{\varepsilon}}} : \underline{\underline{\sigma}} = \sum_{i < j} \vec{F}_{ij} \cdot \left(\underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \cdot \vec{r}_{ij}\right) = \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} : \left(\sum_{i < j} \vec{F}_{ij} \otimes \vec{r}_{ij}\right)$$
(1.6)

La dernière égalité vient de ce que  $\underline{\dot{\underline{e}}}$  est un tenseur symétrique. L'équation précédente étant vraie quelle que soit la valeur de  $\underline{\dot{\underline{e}}}$ , on en tire l'équation 1.4. Enfin,  $\sum_{i < j} \vec{F}_{ij} \otimes \vec{r}_{ij}$  est aussi un tenseur symétrique en raison de l'équilibre des moments sur les grains.

En toute rigueur, le tenseur des contraintes  $\underline{\sigma}$  tel que défini dans l'équation 1.4 n'est pas le tenseur des contraintes total  $\underline{\sigma}^{\text{tot}}$  de la pâte granulaire mais le tenseur des contraintes effectives (notion introduite par Karl von Terzaghi dans les années 1930 et qui joue un rôle important en mécanique des sols saturés; cette notion permet notamment d'expliquer le phénomène de liquéfaction des sols). Considérons une pâte granulaire saturée en équilibre. La pression Pdu liquide peut être considérée comme lentement variable à l'échelle de la taille d'un grain et tout se passe comme si l'empilement granulaire était soumis aux contraintes effectives  $\underline{\sigma} =$  $\underline{\sigma}^{\text{tot}} - P\underline{\mathbf{1}}$  (toujours avec la convention de la mécanique des sols). Pour le comprendre, considérons la situation décrite sur la figure 1.5. La contrainte macroscopique de Cauchy est la somme des forces transmises à travers un plan. Ce calcul n'est pas modifié, aux efforts transmis au niveau des connexions mécaniques et aux efforts extérieurs sur les grains coupés près, si on remplace la surface plane par une surface bosselée proche qui ne coupe pas les grains comme sur la figure 1.5. Toutefois, si une description continue du matériau est possible, la différence due aux efforts extérieurs au niveau des grains coupés doit être négligeable. Ainsi, à la pression P du liquide s'ajoute l'effet des forces au niveau des connexions mécaniques responsables des contraintes transmises par l'empilement granulaire (équation 1.4). Le fluide a simplement pour effet d'imposer un chargement isotrope sur l'assemblage granulaire et dans la suite de ce travail, nous ne nous intéresserons plus à la valeur de la pression du fluide interstitiel.

### 1.4 Aspect hydrodynamique

La présence de liquide visqueux entre les grains conduit à des difficultés théoriques majeures puisque le fluide est susceptible d'être le vecteur d'interactions hydrodynamiques à longue por-

<sup>9.</sup>  $\sum_{i < j}$  est une notation abrégée pour désigner la somme sur les connexions mécaniques entre grains.



Figure 1.5 : Représentation de deux surfaces traversant une pâte granulaire. La surface en traits pointillés est horizontale tandis que celle dessinée en trait plein contourne les grains pour rester dans le domaine fluide, sauf en des points de connexion mécanique isolés.

tée. En effet, le déplacement d'une particule perturbera l'écoulement, ce qui aura donc une influence sur le mouvement des autres particules et ainsi de suite. Nous verrons également que le liquide visqueux peut conduire à des difficultés dans la modélisation des interactions entre grains proches ou au contact.

#### 1.4.1 Hydrodynamique de Stokes et comportement des suspensions

En régime stationnaire, dans la limite des très petits nombres de Reynolds (Re  $\ll$  1), les équations de Navier-Stokes se simplifient et la dynamique du liquide est régie par les équations linéaires de Stokes [25, 52] :

$$-\vec{\nabla}P + \eta \triangle \vec{v} = \vec{0} \tag{1.7}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \tag{1.8}$$

Dans l'équation précédente, P désigne le champ de pression du fluide,  $\eta$  sa viscosité dynamique et  $\vec{v}$  le champ de vitesse. Les solutions de ces équations présentent un certain nombre de propriétés générales (unicité de la solution à conditions aux limites données, réversibilité de l'écoulement, additivité des solutions, propriété de dissipation minimale à conditions aux limites fixées, théorème de réciprocité de Lorentz) découlant de la linéarité des équations 1.7 et 1.8 [52, 53]. Ces propriétés sont assez contre-intuitives car très différentes de celles vérifiées par les écoulements newtoniens lorsque Re est fini. D'autre part, les équations de Stokes étant linéaires, elles admettent une solution fondamentale (ou fonction de Green ou encore propagateur). À trois dimensions, dans un espace infini, cette solution s'écrit, en notant  $\vec{F}^e$  la force ponctuelle appliquée à l'origine :

$$\vec{v}^{s}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta} \left( \frac{1}{\overline{r}} + \frac{\vec{r} \otimes \vec{r}}{r^{3}} \right) \cdot \vec{F}^{e} \equiv \underline{\underline{\mathcal{G}}}(\vec{r}) \cdot \vec{F}^{e}$$
(1.9)

$$P^{s}(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi r^{3}} \vec{r} \cdot \vec{F}^{e} \equiv \underline{\mathcal{P}}(\vec{r}) \cdot \vec{F}^{e}$$
(1.10)

$$\underline{\underline{\sigma}}^{s}(\vec{r}) = -\frac{3}{4\pi} \frac{\vec{r} \otimes \vec{r} \otimes \vec{r}}{r^{5}} \cdot \vec{F}^{e} \equiv \underline{\underline{\mathcal{S}}}(\vec{r}) \cdot \vec{F}^{e}$$
(1.11)

Le tenseur  $\underline{\underline{\mathcal{G}}}$  porte le nom de tenseur d'Oseen-Burgers. Ce tenseur et le champ de pression  $\underline{\underline{\mathcal{P}}}$  qui lui est associé jouent un rôle analogue au potentiel newtonien que l'on rencontre lorsque l'on

étudie la gravitation ou l'électrostatique. Ces quantités permettent en particulier d'exprimer la solution du problème de Stokes suivant

$$-\vec{\nabla}P + \eta \triangle \vec{v} = -\vec{f}(\vec{r}) \tag{1.12}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \tag{1.13}$$

sous forme d'un produit de convolution :

$$\vec{v}(\vec{r}) = \int \underline{\underline{\mathcal{G}}}(\vec{r} - \vec{r'}) \cdot \vec{f}(\vec{r}) \,\mathrm{d}^3 \vec{r'}$$
(1.14)

$$P(\vec{r}) = \int \underline{\mathcal{P}}(\vec{r} - \vec{r}') \cdot \vec{f}(\vec{r}) \,\mathrm{d}^3 \vec{r}' \qquad (1.15)$$

L'équation 1.9 montre que la perturbation en vitesse engendrée par une force ponctuelle ne décroît qu'en 1/r. Les interactions hydrodynamiques entre particules solides ont donc une très longue portée. Elles ne peuvent être négligées que dans la limite où les inclusions solides sont infiniment diluées. C'est la raison pour laquelle les premiers travaux théoriques consacrés aux suspensions ont porté sur la limite diluée. C'est dans cette limite que différents auteurs ont cherché à calculer des développements en puissance de grandeurs comme la viscosité effective ou la vitesse de sédimentation en fonction de la fraction volumique solide  $\Phi$ . En 1906, Albert Einstein est parvenu à établir sa célèbre formule liant la viscosité effective d'une suspension à la viscosité du fluide suspendant et à la fraction volumique  $\Phi$  en particules, supposées sphériques [54] :

$$\eta_{\text{eff}} = (1 + \frac{5}{2}\Phi)\eta \tag{1.16}$$

Ce résultat simple a un caractère très général (il est indépendant de la nature brownienne ou non des billes et du type d'écoulement) mais n'est valable que lorsque  $\Phi \ll 1$  ( $\Phi < 2\%$ typiquement). Il repose sur l'évaluation du surcroît de dissipation engendré par la présence d'une particule, considérée comme infiniment éloignée de ses voisines, dans un écoulement. Il est naturellement possible de pousser plus loin l'analyse théorique des suspensions dans le régime de Stokes, notamment en ce qui concerne la viscosité effective, en tenant compte des interactions hydrodynamiques entre particules. Batchelor et Green ont notamment étudié l'effet des interactions hydrodynamiques entre deux particules ce qui leur a permis de pousser le développement de  $\eta_{\text{eff}}$  en fonction de  $\Phi$  jusqu'au deuxième ordre [55, 56] :

$$\eta_{\rm eff} = (1 + \frac{5}{2}\Phi + c\Phi^2)\eta \tag{1.17}$$

La situation se complique singulièrement dès cet ordre puisque c dépend du type d'écoulement considéré, ainsi que du caractère brownien ou non des particules. La valeur de c est comprise entre 5.2 et 7.6. Expérimentalement, l'équation 1.17 est valable lorsque  $\Phi < 10\%$ . Lorsque la fraction volumique en particules est encore plus élevée (comme dans le cas des pâtes), il ne suffit plus de tenir compte des interactions à deux corps et il faut résoudre le problème hydrodynamique à N sphères. C'est ce que sont parvenus à faire de manière analytique Carlo Beenaker, Peter Mazur et Wim van Saarlos au début des années 80 [23] grâce à la méthode des forces induites développée par les deux derniers auteurs en collaboration avec Dick Bedeaux [57]. Ces auteurs sont ainsi parvenus à calculer le coefficient d'auto-diffusion aux temps courts [58, 59, 60] et le coefficient de viscosité effective d'une suspension [61]. Beenakker a notamment obtenu des résultats satisfaisants pour la viscosité effective aux temps courts d'une suspension non brownienne jusqu'à une fraction solide de 35% environ [57]. Néanmoins, même si la méthode des forces induites permet de calculer exactement les interactions hydrodynamiques entre un nombre quelconque de sphères, les expressions obtenues sont complexes et le calcul de grandeurs physiques d'intérêt nécessite de faire des approximations. Beenakker utilise une technique de resommation qui fait apparaître des intégrales contenant les fonctions de corrélation des fluctuations de densité à s points. La fonction de corrélation des fluctuations de densité à 2 points fait par exemple intervenir la fonction de corrélation de paires  $q(\vec{r})$ .  $q(\vec{r})$  doit donc être spécifiée pour pouvoir mener le calcul à terme. Un choix commode consiste à supposer que la fonction  $q(\vec{r})$  est égale à la fonction de corrélation de paires de Percus-Yevick [62]. Ce choix n'est pas déraisonnable mais constitue néanmoins une hypothèse et il n'est pas forcément étonnant qu'il soit mis en défaut lorsque la fraction  $\Phi$  est très élevée, d'autant que l'on s'attend à ce que la répartition spatiale des grains au sein d'une suspension ait de plus en plus d'influence sur ses propriétés macroscopiques à mesure que la fraction volumique solide augmente. D'ailleurs, des calculs exacts effectués sur les suspensions dans lesquelles les grains sont placés sur les nœuds d'un réseau montrent que la viscosité diverge lorsque  $\Phi$  atteint la compacité maximale du réseau considéré, à cause des forces de lubrification qui s'exercent entre deux grains lorsqu'ils sont très proches [63, 64]. Cette divergence de la viscosité pour une certaine valeur maximale  $\Phi_m$  de la fraction volumique solide est en accord avec les observations expérimentales. De nombreux modèles rendant compte de cette divergence, comme celui de Krieger-Dougherty [65], et reposant sur des bases physiques plus ou moins solides ont été proposés dans la littérature. Ces résultats montrent qu'il est sans doute vain d'essaver de calculer les propriétés « hydrodynamiques » des pâtes granulaires en utilisant uniquement la méthode de Beenakker car d'une part, cette méthode ne tient pas compte des effets liés à la modification de la distribution spatiale des grains dans la suspension (or, comme nous l'avons déjà mentionné, cette distribution a une grande importance sur les propriétés d'une suspension concentrée) et d'autre part, la resommation utilisée converge lentement et ne permet pas de prendre correctement en compte les forces de lubrification [57].

#### 1.4.2 Approximation de lubrification et pâtes granulaires

Il est clair que les forces de lubrification jouent un rôle de premier plan dans le comportement des pâtes granulaires que nous avons choisi de considérer. On s'attend à ce que ce comportement soit dominé du point de vue hydrodynamique par les interactions de lubrification au niveau des quasi-contacts. Considérons par exemple deux sphères identiques, de diamètre a, plongées dans un fluide visqueux de viscosité  $\eta$ , dont les surfaces sont séparées d'une distance h. On suppose de plus que les vitesses des particules sont de normes comparables, l'ordre de grandeur de cette norme étant noté U. Si l'on suppose h petit devant a, la force d'origine hydrodynamique exercée par une sphère sur l'autre peut être évaluée dans le cadre de l'approximation de lubrification (voir annexe A) et son intensité est approximativement égale à :

$$|F_{\rm lub}| \sim \eta a^2 U/h \tag{1.18}$$

En revanche, si la distance h est très grande devant a et que l'on suppose que les grains sont suffisamment éloignés des parois du récipient contenant le système pour que celles-ci n'affectent en rien leur mouvement, les deux particules pourront être considérées comme quasi-indépendantes l'une de l'autre. L'intensité de la force d'origine hydrodynamique  $\vec{F}_{\infty}$  s'exerçant sur une particule (due au cisaillement du fluide environnant) sera donc en bonne approximation égale à :

$$|F_{\infty}| \sim \eta a U \tag{1.19}$$

Cette approximation n'est valable que dans la limite où  $h/a \to +\infty$ . Lorsque le milieu fluide, supposé d'extension infinie, ne compte qu'une seule particule, on peut résoudre le problème de

Navier-Stokes correspondant et ainsi déterminer précisément la force s'exerçant sur la particule : cette dernière est donnée par la loi de Stokes. La méthode des réflexions <sup>10</sup>, utilisée pour la première fois par Marian Smoluchowski, permet de raffiner le résultat précédent lorsque les sphères, bien qu'éloignées, ont une influence notable l'une sur l'autre, et ainsi d'estimer l'intensité des interactions hydrodynamiques à longue portée. Ceci étant, les corrections que l'on peut calculer [25] ne remettent pas en cause la loi d'échelle donnée par l'équation 1.19. La comparaison des équations 1.18 et 1.19 montre clairement que les forces de lubrification dominent très largement les forces hydrodynamiques à plus longue portée.

En outre, ces interactions sont écrantées par le milieu poreux constitué par l'assemblage granulaire [57, 66]. Dans le cas des pâtes granulaires, la phase solide se comporte en effet comme un milieu poreux du point de vue de la transmission des interactions hydrodynamiques [57]. L'écoulement d'un liquide newtonien dans un milieu poreux, dont la perméabilité est notée  $\alpha^{-2}$ , peut être modélisé à l'aide de l'équation de Brinkman :

$$-\vec{\nabla}P + \eta \triangle \vec{v} - \eta \alpha^2 \vec{v} = \vec{0} \tag{1.20}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \tag{1.21}$$

Sur de petites échelles de longueur, le gradient de pression équilibre le laplacien de la vitesse et l'écoulement est assimilable à un écoulement de Stokes. En revanche, aux grandes échelles de longueur, la vitesse varie peu et c'est alors le terme proportionnel à la vitesse qui est contrebalancé par le gradient de pression. L'écoulement est alors darcéen. La longueur caractéristique séparant ces deux régimes est donnée par la racine carrée de la perméabilité,  $\alpha^{-1}$ . Comme l'équation de Stokes, l'équation de Brinkman est linéaire et admet donc une fonction de Green pour la vitesse et la pression. La fonction de Green donnant le champ vitesse résultant de l'application d'une force ponctuelle décroît comme  $1/r^3$  lorsque  $r \gg \alpha^{-1}$ , alors que la décroissance n'est qu'en 1/r pour un écoulement de Stokes. Les interactions hydrodynamiques sont donc écrantées dans un milieu poreux ce qui renforce encore l'importance des interactions de lubrification.

Nous ferons donc l'approximation que le liquide visqueux a pour seul effet de lubrifier les quasi-contacts entre grains proches et nous négligerons les éventuelles interactions à longue portée. Cette approximation est d'autant plus justifiée que l'espace poral est désaturé et que la phase fluide est peu connectée. On pourrait même penser qu'elle devient exacte dans la limite pendulaire, c'est-à-dire lorsque l'espace occupé par le liquide visqueux n'est plus constitué que de ponts liquides entre paires de grains, deux à deux indépendants. Ceci étant, des phénomènes non pris en compte dans notre modèle pourraient avoir une influence notable sur le comportement de pâtes granulaires réelles en régime pendulaire. D'une part, les forces capillaires peuvent être importantes. La force attractive résultant de l'existence de ponts liquides est connue et a été déjà été utilisée dans des travaux numériques [7]. D'autre part, l'expression de la force de lubrification est fortement modifiée lorsque la couche de fluide séparant deux grains a un volume fini [67].

<sup>10.</sup> Cette méthode asymptotique, décrite en détail dans l'ouvrage [25], repose sur la linéarité des équations de Stokes et est basée sur une succession d'itérations. L'idée est que le champ de vitesse créé par la première sphère modifie la vitesse de la seconde sphère, ce qui entraîne un changement du champ de vitesse induit par cette dernière, d'où une rétroaction sur la vitesse de la première sphère et ainsi de suite...



Figure 1.6 : Représentation schématique du modèle de pâte ganulaire que nous avons choisi d'étudier. Les grains sont sphériques (circulaires à deux dimensions), tous faits dans le même matériau élastique linéaire isotrope, et baignent dans un liquide newtonien en écoulement de Stokes. Les interactions entre grains peuvent être de contact (lorsque deux grains se touchent) ou d'origine hydrodynamique (quasi-contact dans lequel une mince couche de liquide sépare deux grains.)

### **1.5** Interactions entre grains

Le comportement d'une pâte granulaire est régi par les interactions directes entre les grains ainsi que par le couplage hydrodynamique entre particules dû à la présence du liquide newtonien (voir figure 1.6). Lorsque deux grains sont en contact, les efforts sont transmis via une zone quasi-ponctuelle (c'est-à-dire très petite devant la taille caractéristique des grains). En effet, sauf dans des conditions extrêmes, le module d'Young E du matériau dont les grains sont faits est beaucoup plus grand que la pression de confinement P appliquée au système et les déflexions élastiques sont très petites devant le rayon des grains. Dans le cas d'un quasi-contact, le champ de pression de la couche fluide située entre deux grains en mouvement varie de manière beaucoup moins abrupte que lorsqu'il y a contact élastique. On peut néanmoins considérer que la force de lubrification exercée sur un grain s'applique au niveau du centre de la couche fluide. Les différents contacts ou quasi-contacts entre une bille et ses voisines peuvent donc être considérés comme indépendants. Les (quasi-)contacts ne couplent que les degrés de liberté des deux grains concernés qui, de plus, peuvent être considérés comme des solides indéformables <sup>11</sup>.

#### 1.5.1 Forces de contact

Élasticité de Hertz : Lorsque deux solides élastiques linéaires et isotropes dont les surfaces sont régulières rentrent en contact, il y a apparition d'une déformation locale et formation d'une surface de contact. Toute la difficulté du problème réside dans le fait que ni le champ de contrainte, ni l'aire de contact ne sont connus *a priori*. Ce problème, dit du contact de Hertz, peut néanmoins être résolu analytiquement pour différentes géométries, notamment lorsque les deux corps sont des sphères élastiques de rayons  $R_1$  et  $R_2$ , de module d'Young E et de coefficient

<sup>11.</sup> À condition de négliger les effets élastohydrodynamiques (couplages fluide-structure existants du fait de l'élasticité des solides en présence), ce que nous faisons dans ce travail.

de Poisson  $\nu$ . En posant  $\tilde{E} = E/(1-\nu^2)$  et  $2/R_{eq} = 1/R_1 + 1/R_2$ , la force normale (répulsive) exercée par une bille sur l'autre s'écrit :

$$F_N = \frac{\tilde{E}}{3} \sqrt{2R_{\rm eq}} \, h^{3/2} \tag{1.22}$$

avec  $h = |d - R_1 - R_2|$ , où d est la distance entre les centres des deux billes. L'équation 1.22 constitue la loi de Hertz [68]. Cette expression est valable à trois dimensions. En revanche, à deux dimensions, on peut montrer que la force élastique normale varie linéairement avec h:

$$F_N = k_N h \tag{1.23}$$

**Force de frottement :** Les contacts entre grains sont également suceptibles de transmettre une force tangentielle. Le modèle le plus fréquemment utilisé pour en rendre compte est sans nul doute celui de Coulomb. Ses trois principales caractéristiques sont les suivantes : la force de frottement  $F_T$  est proportionnelle à la force normale de contact  $F_N$  et indépendante de l'aire apparente de contact (ceci résulte de la présence d'aspérités à la surface d'un solide réel), et le coefficient de frottement  $\mu$  est indépendant de la vitesse de glissement. Nous supposerons également que les coefficients de frottement statique et dynamique coïncident. La force tangentielle vérifie

$$|F_T| \le \mu F_N \tag{1.24}$$

et appartient donc au cône de Coulomb de demi-angle au sommet  $\varphi = \arctan \mu$ . Ce modèle est naturellement très rustique d'un point de vue tribologique<sup>12</sup>. Néanmoins, il intègre les principales caractéristiques des efforts tangentiels de contact et constitue donc une bonne base de travail. Ce modèle ne peut cependant pas être utilisé directement dans une simulation de dynamique moléculaire puisqu'il ne permet pas de calculer la valeur de la force tangentielle à partir de la seule connaissance de la configuration du système. Pour ce faire, nous utilisons un modèle élasto-plastique parfait en introduisant une raideur tangentielle  $k_T$  dans les contacts. Ce modèle est justifié physiquement et ne fait que simplifier le comportement tangentiel qui comprend de l'élasticité et du frottement. La force tangentielle est alors calculée de la manière suivante. Considérons un contact entre deux particules au temps t, dont on suppose qu'il persiste jusqu'au pas de temps suivant, c'est-à-dire jusqu'à l'instant  $t + \delta t$ . Si l'on note  $F_T(t)$  la force tangentielle au sein du contact à l'instant t, alors on a :

$$\begin{cases} F_T(t+\delta t) = F_T(t) + \delta F_T & \text{avec} \quad \delta F_T = -k_T v_T \delta t \\ \text{Si} |F_T(t+\delta t)| > \mu F_N(t+\delta t) & \text{alors} \quad F_T(t+\delta t) = -\mu F_N(t+\delta t) \frac{v_T}{|v_T|} \quad (v_T \neq 0) \end{cases}$$
(1.25)

où  $v_T$  désigne la vitesse relative tangentielle.

#### 1.5.2 Force de lubrification

#### Cas idéal

La théorie de la lubrification a pour objet l'étude des écoulements de Stokes confinés entre deux parois solides parfaitement lisses très proches en mouvement relatif. Considérons la situation

<sup>12.</sup> De manière générale, le coefficient de frottement dynamique est toujours inférieur au coefficient de frottement statique pour un contact solide. De plus, le coefficient de frottement dynamique n'est pas *stricto sensu* indépendant de la vitesse de glissement et le coefficient de frottement statique a tendance à augmenter avec le temps. Il est également possible de modifier la théorie hertzienne du contact pour prendre en compte des efforts tangentiels à la manière de Cattaneo, Mindlin et Deresiewicz [69].



Figure 1.7 : Film de lubrification entre deux solides.

schématisée sur la figure 1.7 et supposons le solide 1 au repos et le solide 2 animé d'une vitesse  $\vec{V}$ . Les parois, dont la taille typique dans le plan (Oxy) est notée L, délimitent une zone accessible au fluide, d'épaisseur typique  $h \ll L$ . La force de lubrification totale est la somme d'une composante normale et d'une composante tangentielle. Supposons que les deux solides soient des sphères et posons  $2/R_{\rm eq} = 1/R_1 + 1/R_2$ . La force normale est proportionnelle à la vitesse relative normale, c'est-à-dire à la composante de la vitesse relative selon l'axe joignant le centre des particules et qui tend à les rapprocher ou à les éloigner l'une de l'autre. Cette force s'écrit :

$$F_N^{\text{lub}} = -\frac{3}{2}\pi\eta \frac{R_{\text{eq}}^2}{h} V_N \equiv -\xi_N^{\text{ideal}}(h) V_N \tag{1.26}$$

Quant à la force tangentielle, elle est proportionnelle à la vitesse relative tangentielle, c'est-àdire à la composante de la vitesse relative dans le plan perpendiculaire à la direction normale joignant le centre des deux sphères :

$$F_T^{\text{lub}} = \pi \eta R_{\text{eq}} \ln \left(\frac{2R_{\text{eq}}}{h}\right) V_T \equiv -\xi_T^{\text{ideal}}(h) V_T \tag{1.27}$$

En toute rigueur, la composante tangentielle de la vitesse relative induit également une force normale [30], mais cette dernière est dominée par la composante normale dont l'expression fait l'objet de l'équation 1.26, aussi la négligerons-nous.

#### Cas réel

L'expression de la force de lubrification est singulière en la distance entre les deux parois solides. On peut montrer mathématiquement que la variation en 1/h de la force de lubrification normale empêche tout contact entre deux solides parfaitement lisses en temps fini [70]. En revanche, toute valeur strictement positive de l'interstice h peut être atteinte. Ce résultat de nature mathématique n'est pas satisfaisant d'un point de vue physique pour au moins deux raisons. D'une part, on sait bien que les grains sont susceptibles de se toucher dans une pâte granulaire réelle et ce fait peut d'ailleurs avoir des conséquences spectaculaires [71]. Les inclusions solides ne sont jamais parfaitement lisses et le modèle de lubrification idéale est nécessairement mis en défaut lorsque la distance entre les solides est de l'ordre de la taille des aspérités <sup>13</sup>. D'autre part, quand bien même les solides seraient extrêmement lisses, les équations de la lubrification

<sup>13.</sup> François Chevoir et Stéphane Roux ont par exemple pu montrer qu'il n'y a pas de contact possible en temps fini lorsque l'on applique une force constante pour rapprocher une surface auto-similaire d'un demi-espace parfaitement rigide dès que l'exposant de rugosité de la surface est supérieur ou égal à 2 [72].


Figure 1.8 : Coupure de la force de lubrification ;  $\xi(h)$  est égal à  $\xi_N^{\text{ideal}}(h)$  (voir équation 1.26) lorsque  $h > h_{\min}$ , varie linéairement pour  $0 < h < h_{\min}$  et est constante lorsque h < 0.

sont issues d'une théorie macroscopique qui n'a plus aucune justification physique aux échelles sub-nanométriques. Enfin, des simulations numériques de suspensions constituées de particules sphériques considérées comme parfaitement lisses effectuées il y a quelques années ont montré que ces systèmes se comportent de manière bizarre [73] : il semble en effet qu'une telle suspension ne puisse atteindre un régime stationnaire lorsqu'elle est soumise à un cisaillement maintenu. Des simulations réalisées avec une autre méthode numérique à l'Institut Navier ont confirmé le caractère pathologique de ce type de matériau idéal [74].

Lorsque l'on considère des grains macroscopiques comme dans ce travail, la taille des aspérités est supérieure au nanomètre de plusieurs ordres de grandeur [75] et les équations de l'hydrodynamique sont amplement suffisantes. La présence d'aspérités complique néanmoins considérablement la recherche de solutions analytiques (puisqu'elle induit une complexification de la géométrie de l'écoulement de lubrification) et a vraisemblablement un impact non négligeable sur la rhéologie des pâtes granulaires. Plusieurs propositions, basées sur des modélisations très idéales, ont été avancées pour prendre en compte la rugosité des grains [75, 76]. En première approximation, tout se passe comme si lorsque deux sphères rugueuses sont animées d'un mouvement relatif normal, le terme h au dénominateur de l'équation 1.26 était remplacé par  $h + h_s$ où  $h_s$  est de l'ordre de grandeur de la taille des aspérités des particules. Des expériences récentes ont d'ailleurs confirmé ce résultat [77]. La correction à apporter est néanmoins toujours sujette à débat. De plus, que vaut la force de lubrification lorsque deux grains se touchent et que le liquide se retrouve piégé dans des cavités du fait de la rugosité ?

Nous avons choisi pour notre part de modéliser la rugosité des grains en introduisant une coupure  $h_{\min}$  en deçà de laquelle la force de lubrification normale ne varie plus comme 1/hmais linéairement en h (voir figure 1.8). Du point de vue numérique, les grains peuvent être considérés comme sphériques, mais nous allons modifier les expressions 1.26 et 1.27 de manière à modéliser la rugosité. Considérons une paire de grains sphériques, de rayons  $R_1$  et  $R_2$ . On note d la distance entre les deux grains et  $h \equiv d - R_1 - R_2$  la distance (algébrique) entre leurs surfaces. Dans le cadre de notre modélisation, on considère que ces deux grains sont connectés mécaniquement si et seulement si  $h \leq h_{\max}$  (cf. figure 1.9). Pour deux grains connectés, les



Figure 1.9 : À gauche : grains connectés mécaniquement (de couleur grise) à un grain donné (dessiné en noir). À droite : zoom sur le voisinage du grain considéré. Le paramètre  $h_{\max}/a$  est ici choisi égal à 0.75, tandis que  $h_{\min}/a$  est fixé à 0.1. La couronne circulaire comprise entre le grain noir et le cercle en pointillés bleus a pour épaisseur  $h_{\max}$ , tandis que la couronne circulaire orange a pour épaisseur  $h_{\min}$ . Un grain est connecté mécaniquement au grain noir si et seulement s'il est contenu — au moins en partie — dans la surface délimité par le cercle pointillé.

expressions de  $\xi_N$  et de  $\xi_T$  sont les suivantes :

$$\xi_N(h) = \begin{cases} \frac{3}{2}\pi\eta R_{\rm eq}^2/h & \text{si} \quad h_{\rm min} \le h \le h_{\rm max} \\ \frac{3}{2}\pi\eta R_{\rm eq}^2 \left(2/h_{\rm min} - h/h_{\rm min}^2\right) & \text{si} \quad 0 \le h < h_{\rm min} \\ 3\pi\eta R_{\rm eq}^2/h_{\rm min} & \text{si} \quad h < 0 \end{cases}$$
(1.28)

$$\xi_T(h) = \begin{cases} \pi \eta R_{\rm eq} \ln (2R_{\rm eq}/h) & \text{si} \quad h_{\rm min} \le h \le h_{\rm max} \\ \pi \eta R_{\rm eq} \left( 1 + \ln(2R_{\rm eq}/h_{\rm min}) - h/h_{\rm min} \right) & \text{si} \quad 0 \le h < h_{\rm min} \\ \pi \eta R_{\rm eq} \left( 1 + \ln(2R_{\rm eq}/h_{\rm min}) \right) & \text{si} \quad h < 0 \end{cases}$$
(1.29)

Cette modélisation, à défaut d'être exacte, a le mérite d'être simple. La valeur de  $h_{\min}$  peut être considérée comme la taille typique des aspérités. Le caractère fini de  $h_{\max}$  permet de ne pas considérer que toutes les paires de grains partagent une connexion mécanique (dire que la force d'origine hydrodynamique entre deux grains dont les surfaces sont séparées d'une distance égale au rayon d'un grain (par exemple) est donnée en bonne approximation par l'approximation de lubrification n'a de toute façon aucun sens) et simplifie la résolution numérique du problème, puisque seules les paires de grains constituées de particules suffisamment « proches » l'une de l'autre seront connectées. D'autre part, dans le cadre de notre modélisation,  $\xi_N$  et  $\xi_T$  ne divergent pas vers l'infini lorsque h tend vers 0 et varient continûment lorsque  $h = h_{\min}$  et lorsque h = 0. Enfin, en l'absence de résultats théoriques concernant le cas de deux particules rugueuses en contact, nous avons décidé de considérer que les coefficients  $\xi_N$  et  $\xi_T$  sont constants lorsque h < 0.

#### 1.5.3 Modélisation d'une connexion mécanique : récapitulatif

En résumé, les connexions mécaniques au sein d'une pâte granulaire lubrifiée peuvent être modélisées à l'aide d'associations d'éléments rhéologiques — ressorts, amortisseurs, patins —



Figure 1.10 : Mécanique d'un contact. À gauche : composante normale. À droite : composante normale.



Figure 1.11 : Mécanique d'un quasi-contact. À gauche : composante normale. À droite : composante normale.

représentées sur les figures 1.10 et 1.11. La figure 1.10 montre le type d'association modélisant le comportement d'un contact tandis que la figure 1.11 montre le type d'association modélisant le comportement d'un quasi-contact.

## 1.6 Analyse dimensionnelle

Le comportement d'une pâte granulaire sollicitée de manière quasi-statique dépend d'un certain nombre de paramètres (taux de déformation, pression de confinement, caractéristiques élastiques des grains, viscosité du liquide interstitiel, coefficient de restitution, *etc.*). Ces paramètres, tout comme les variables que l'on peut souhaiter mesurer ou calculer, ont la plupart du temps une dimension (longueur, masse ou encore temps par exemple). Une démarche fréquemment employée et bien souvent fructueuse consiste à analyser le comportement d'un système physique à l'aide de combinaisons adimensionnelles pertinentes des paramètres. Ces nombres sans dimension sont les véritables paramètres de contrôle du problème<sup>14</sup>.

<sup>14.</sup> Par exemple, la transition laminaire/turbulent d'un écoulement n'est contrôlée *in fine* ni par la viscosité du liquide, ni par sa vitesse, ni par la taille caractéristique de l'écoulement, ni par sa masse volumique, mais par la valeur du nombre de Reynolds, combinaison adimensionnelle des quantités précitées.

#### 1.6.1 Cas des grains secs

Le comportement d'un matériau granulaire sec constitué de grains sphériques (ou de disques) faits d'un matériau élastique linéaire isotrope, de diamètre typique a et dont la distribution de taille est fixée, est essentiellement contrôlé par plusieurs paramètres sans dimension.

Le premier est lié au caractère dissipatif des matériaux granulaires secs. On choisit souvent de caractériser cette dissipation à l'aide d'un coefficient de restitution normal  $e_N$  et d'un coefficient de restitution tangentiel  $e_T$ . Dans cette étude, nous avons systématiquement considéré un coefficient de restitution tangentiel nul. On peut aussi choisir de modéliser la dissipation en introduisant une force visqueuse normale (proportionnelle à la différence de vitesses normales) lorsque deux grains sont en contact. Cette modélisation est plus adaptée à des simulations de dynamique moléculaire. L'intensité de la force visqueuse peut être caractérisée par un nombre pur  $\zeta$ , que l'on appelle le niveau d'amortissement visqueux.

Le deuxième paramètre sans dimension est le nombre inertiel

$$I = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{m}{a^{d-2}P}} \tag{1.30}$$

où d est la dimension du problème (d = 2 ou 3 en pratique). I est égal au rapport entre un temps inertiel  $\tau_i$  vérifiant la loi d'échelle  $ma\tau_i^{-2} \sim Pa^{d-1}$  issue du principe fondamental de la dynamique et un temps caractéristique  $\tau_e = \dot{\gamma}^{-1}$  des sollicitations extérieures imposées au système ( $\dot{\gamma}^{-1}$  peut représenter un taux de cisaillement ou un taux de déformation). Ce nombre, introduit pour la première fois pour l'étude des équations constitutives des écoulements granulaires denses [78, 79], caractérise l'importance des effets inertiels et intervient dans l'écriture de lois constitutives [80]. Il permet de définir quantitativement la limite quasi-statique comme  $I \to 0$ .

La déformation des contacts entre grains est caractérisée par un troisième nombre sans dimension [13], le paramètre de raideur  $\kappa$ . À trois dimensions,  $\kappa$  vaut :

$$\kappa = \left(\frac{\tilde{E}}{P}\right)^{2/3} \tag{1.31}$$

Ce nombre est défini de sorte que la déflexion h des contacts sous une pression P est typiquement de l'ordre de  $\kappa^{-1}a$  (la puissance 2/3 dans l'équation 3.6 est due à l'exposant 3/2 dans la loi de Hertz). Plus précisément, on peut montrer que pour un assemblage monodisperse de grains sphériques à l'équilibre mécanique sous une pression P, on a [13] :

$$\frac{\langle h^{3/2} \rangle^{2/3}}{a} = \left(\frac{3\pi}{z\Phi}\right)^{2/3} \kappa^{-1} \tag{1.32}$$

Ainsi, le facteur C dans la relation  $\langle h \rangle / a = C \kappa^{-1}$  est en pratique proche de 1. L'expression de  $\kappa$  est plus simple à deux dimensions :

$$\kappa = \frac{k_N}{P} \tag{1.33}$$

Dans tous les cas, la limite rigide correspond à  $\kappa \to +\infty$ .

Le quatrième paramètre sans dimension est le nombre de grains N puisqu'on ne peut *a priori* exclure l'occurence d'effets de taille finie. On s'attend à ce que l'effet de N s'estompe à mesure que l'on s'approche de la limite thermodynamique.

Le cinquième paramètre sans dimension est le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$ . Sa valeur précise n'affecte pas les résultats obtenus d'un point de vue qualitatif sauf lorsqu'il est pris égal à 0. Cette limite présente un intérêt particulier pour l'étude des pâtes granulaires comme nous le verrons par la suite.

Le sixième paramètre adimensionnel, noté  $r_k$ , est le rapport entre les raideurs des forces élastiques tangentielle et normale. Nous n'avons pas étudié l'influence de ce nombre parce que nous pensons qu'elle est marginale. Dans ce travail, ce paramètre est choisi égal à 0.5.

## 1.6.2 Cas des pâtes granulaires

Le comportement d'une pâte granulaire sollicitée de façon quasi-statique, constituée de grains sphériques (ou de disques) faits d'un matériau élastique linéaire isotrope, de diamètre typique a, dont la distribution de taille est fixée, plongés dans un liquide newtonien de viscosité  $\eta$ , est régi par plusieurs paramètres sans dimension.

Comme pour les matériaux granulaires secs, le paramètre de raideur  $\kappa$ , le nombre de grains N, le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  et le rapport  $r_k$  sont suceptibles d'influer sur le comportement d'une pâte granulaire sollicitée de manière quasi-statique. Nous ne les ferons néanmoins pas varier dans ce travail; on pense en effet généralement que, pourvu qu'ils soient non nuls, ces paramètres n'affectent que peu le comportement des systèmes.

Dans la limite quasi-statique, à la différence de ce qui se passe pour les matériaux granulaires secs que nous avons simulé par dynamique moléculaire, nous nous affranchirons du terme de masse dans les équations régissant le comportement d'une pâte granulaire du fait de la viscosité du liquide interstitiel. Le paramètre sans dimension associé au temps caractéristique  $\tau_e$  des sollicitations appliquées est le nombre visqueux défini comme :

$$\operatorname{Vi} = \frac{1}{\tau_e} \frac{\eta}{P} \tag{1.34}$$

L'inverse du temps caractéristique  $\tau_e$  peut être pris égal au taux de cisaillement lorsque la pâte est cisaillée, au taux de déformation lorsqu'elle est déformée, à la pulsation des sollicitations lorsqu'un chargement cyclique est appliqué, *etc.* 

Enfin, un autre nombre sans dimension important est le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  qui donne l'échelle de rugosité des particules constitutives de la pâte. On s'attend à ce que ce paramètre joue un rôle très important dans la géométrie de la pâte (c'est-à-dire l'arrangement spatial des grains) puisqu'elle sera d'autant mieux lubrifiée que ce paramètre sera petit.

## Chapitre 2

# Simulation numérique des pâtes granulaires

### 2.1 Méthodes utilisées dans la littérature

Il existe un grand nombre de méthodes permettant de simuler le comportement d'une suspension d'inclusions rigides dans un fluide newtonien. Sans chercher à être exhaustif, nous commencerons par présenter succintement les méthodes de simulation directe, c'est-à-dire les méthodes utilisées pour résoudre numériquement les équations de Navier-Stokes couplées aux équations du mouvement des grains considérés comme des corps rigides, puis la méthode de Boltzmann sur réseau et enfin, quelques méthodes de résolution semi-analytiques, valables uniquement lorsque Re  $\ll 1$ . Précisons d'ores et déjà que la méthode que nous avons choisi d'employer fait partie de cette dernière famille.

#### 2.1.1 Méthodes de simulation directe

Les méthodes de simulation directe visent à résoudre numériquement le système d'équations aux dérivées partielles constitué par les équations de Navier-Stokes pour le fluide et les équations du mouvement des particules solides rigides. On note  $\Omega$  le domaine de l'espace dans lequel évolue le système et  $(B_i)_{i=1..N}$  les N inclusions rigides de la suspension. Le domaine rigide  $\bigcup_{i=1}^{N} B_i$  est noté B. Le fluide situé en dehors du domaine rigide obéit à la loi de comportement des fluides newtoniens incompressibles :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -P\underline{\underline{1}} + \eta \left( \vec{\nabla} \vec{v} + (\vec{\nabla} \vec{v})^{\top} \right)$$
(2.1)

où  $\vec{v}$  désigne le champ de vitesse et P la pression du fluide. Le but est de déterminer les champs de vitesse et de pression du fluide ainsi que les vitesses  $\vec{V}_i$  des centres de chaque grain (ces centres peuvent être choisis arbitrairement) et les vitesses angulaires  $\vec{\omega}_i$  correspondantes. Le liquide vérifie les équations de Navier-Stokes dans  $\Omega \setminus B(t)$  avec des conditions aux limites de Dirichlet :

-31 -

$$\begin{cases}
\rho_f \frac{\mathrm{D}\vec{v}}{\mathrm{D}t} - \eta \Delta \vec{v} + \vec{\nabla}P &= \vec{f}_f \quad \mathrm{dans} \; \Omega \backslash B \\
\vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= 0 \quad \mathrm{dans} \; \Omega \backslash B \\
\vec{v} &= 0 \quad \mathrm{sur} \; \partial\Omega
\end{cases}$$
(2.2)

avec  $\rho_f$  la masse volumique du liquide et  $\vec{f}_f$  une éventuelle densité de force s'appliquant sur le fluide. D'autre part, la condition de non glissement à l'interface solide/liquide s'écrit :

$$\vec{v}(t,\vec{x}) = \vec{V}_i(t) + \vec{\omega}_i \times (\vec{x} - \vec{x}_i(t)) \text{ sur } \partial B_i(t)$$
(2.3)

où  $\vec{x}_i(t)$  désigne la position du centre du grain *i*. Enfin, les particules solides obéissent au principe fondamental de la dynamique :

$$\begin{cases} m_i \frac{\mathrm{d}\vec{V}_i}{\mathrm{d}t} &= \int_{B_i} \vec{f}_i \,\mathrm{d}\Omega + \int_{\partial B_i} \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n} \,\mathrm{d}S \\ \underline{\mathbf{J}}_i \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{\omega}_i}{\mathrm{d}t} &= \int_{B_i} (\vec{x} - \vec{x}_i) \times \vec{f}_i \,\mathrm{d}\Omega + \int_{\partial B_i} (\vec{x} - \vec{x}_i) \times (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n}) \,\mathrm{d}S \end{cases}$$
(2.4)

Les équations 2.2, 2.3 et 2.4 constituent le problème à résoudre. De nombreuses méthodes numériques de résolution ont été proposées depuis une vingtaine d'années. Différentes approches possibles sont recensées dans les références [81, 82], dont cette section s'inspire largement. Une première façon de procéder consiste à faire comme si le système considéré était un milieu poreux (avec des conditions aux limites certes un peu baroques) et non une suspension. Connaissant la géométrie du domaine solide à l'instant t, on commence par résoudre l'équation 2.2 avec des conditions de Dirichlet en imposant les vitesses au bord du domaine solide à l'aide des vitesses et des vitesses angulaires des particules calculées au pas de temps précédent, puis on réinjecte les champs de vitesse et de pression obtenus dans l'équation 2.4 pour obtenir les nouvelles vitesses des particules. Cette séquence est itérée à chaque pas de temps pour obtenir la solution du problème couplé global.

Toutefois, la plupart des travaux effectués s'attachent à proposer une résolution couplée des équations 2.2, 2.3, 2.4, souvent basée sur une formulation variationnelle, ce qui permet d'avoir ensuite recours aux éléments finis. Ces méthodes se répartissent en deux grandes familles : les méthodes utilisant un maillage conforme et les méthodes de domaine fictif. La première famille de méthodes repose sur l'emploi d'un maillage conforme du domaine fluide, c'est-à-dire d'un maillage adapté à la géométrie du domaine solide, géométrie qui elle-même est fonction du temps ce qui nécessite donc de remailler régulièrement. L'idée la plus simple, mais coûteuse en temps de calcul, consiste à remailler à chaque pas de temps et à projeter sur le nouveau maillage la solution obtenue au pas de temps précédent. On peut néanmoins s'abstenir de calculer un nouveau maillage à chaque fois en déplaçant les points de l'ancien de manière douce et en remaillant lorsque le maillage devient inadapté pour le calcul numérique au bout d'un certain nombre de déplacements : il s'agit de la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian). La seconde famille de méthodes repose sur une formulation variationelle du problème étendue à l'ensemble du domaine  $\Omega$ , grâce à l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange ou à l'emploi de techniques de pénalisation (l'idée sous-tendant ces techniques est d'approcher un problème contraint par un problème non contraint qui peut être facilement résolu). Le principal avantage de ces méthodes est qu'on peut alors utiliser un maillage indépendant du temps et qui peut être simple si la forme du domaine  $\Omega$  n'est pas trop compliquée.

Comme nous avons eu l'occasion de le mentionner dans la section 1.5.2, les forces de lubrification interdisent tout contact en temps fini entre deux surfaces parfaitement lisses. Cette propriété des systèmes lubrifiés est très difficile à satisfaire numériquement du fait de la discrétisation en temps et en espace du problème. Une manière classique de contourner le problème consiste à introduire des forces répulsives à courte portée (qui peuvent par exemple modéliser des interactions colloïdales ou des interactions entre polymères adsorbés à la surface des grains). Ceci étant, la propriété de non contact en temps fini n'est pas vérifiée expérimentalement pour les raisons évoquées dans la section 1.5.2. Si l'on admet qu'il n'est donc pas nécessaire d'empêcher à tout prix les contacts entre grains, le modèle doit alors les prendre en compte [83].

Les méthodes numériques faisant appel à une discrétisation de l'espace souffrent néanmoins d'une faiblesse rédhibitoire dès que l'on s'intéresse aux pâtes granulaires, systèmes pour lesquels les forces de lubrification jouent un grand rôle. Ces forces s'exercent en effet entre deux particules solides séparées d'une mince couche de liquide; or, pour qu'une force de lubrification puisse être évaluée à l'aide d'une méthode numérique directe (de type éléments finis par exemple), il faudrait que la zone de l'espace correspondant à la couche fluide contiennent plusieurs points du maillage. De manière générale, ce type de méthode n'est pas capable de correctement estimer la force de lubrification, ce qui est gênant lorsque l'on souhaite simuler des pâtes granulaires. La solution la plus naturelle consiste à imposer « à la main » la force de lubrification. Cette idée a fait et continue de faire l'objet de nombreux travaux, en physique (nous le verrons dans la suite de ce chapitre) et en mathématiques appliquées [84, 82].

#### 2.1.2 Méthode de Boltzmann sur réseau

La méthode de Boltzmann sur réseau (lattice Boltzmann) est parfois utilisée lorsque la géométrie du domaine solide devient complexe comme dans le cas d'une suspension [85, 86, 87] ou d'un milieu poreux [88, 89]. Conceptuellement, cette méthode est assez éloignée de celles que nous venons de mentionner puisque l'on ne simule pas directement les équations de Navier-Stokes, mais plutôt l'équation de Boltzmann. Cette équation cinétique, proposée initialement à la fin du XIX<sup>e</sup> siècle par Ludwig Boltzmann pour décrire la dynamique d'un gaz dilué, s'applique à des systèmes tels que les gaz classiques, les gaz porteurs de charges dans les semi-conducteurs et les métaux, ou encore en neutronique. Ces systèmes peuvent en effet être considérés comme des ensembles de particules où la portée des interactions est faible par rapport à la distance typique entre particules. L'équation de Boltzmann permet de décrire la dynamique de ces systèmes sur des temps longs devant la durée des collisions. Elle est obtenue à l'aide d'un bilan des déplacements des particules dans l'espace des phases à une particule, déplacements dûs aux collisions interparticulaires et aux mouvements balistiques entre collisions. Notons  $f(\vec{r},\vec{p},t)$  la densité réduite à un corps (la quantité  $f d^3 \vec{r} d^3 \vec{p}$  représente le nombre de particules situées dans un élément de volume de l'espace des phases); alors, en l'absence de forces extérieures, l'équation de Boltzmann s'écrit [90] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} f = \left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{coll}} \tag{2.5}$$

La principale difficulté consiste ensuite à déterminer la forme du terme de collision (terme de droite dans l'équation 2.5). L'approximation du temps de relaxation<sup>1</sup> est fréquemment utilisée pour simplifier le problème. Dans le cadre de cette approximation, on considère que :

$$\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{coll}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \tag{2.6}$$

où  $f_0$  est une distribution d'équilibre local et où  $\tau$  peut être interprété comme un temps de relaxation vers l'équilibre local. On peut montrer que cette approximation conduit aux équations de Navier-Stokes (c'est pourquoi la méthode de Boltzmann sur réseau permet de simuler les équations de Navier-Stokes). Dans le cadre de cette méthode, le fluide est constitué de particules fictives qui se déplacent entre les nœuds d'un réseau et subissent des collisions au niveau de ces nœuds suivant un ensemble de règles bien précises. Compte tenu de la nature locale de ces règles, la méthode de Boltzmann sur réseau est aisément parallélisable, ce qui constitue bien sûr un atout indéniable. De plus, la méthode peut également être adaptée de manière à incorporer des forces de lubrification [91].

<sup>1.</sup> Cette approximation porte également parfois le nom d'approximation BGK (pour Bhatna-gar-Gross-Krook).

#### 2.1.3 Méthodes semi-analytiques

Il existe un certain nombre de méthodes de résolution semi-analytiques lorsque l'écoulement peut être décrit par les équations de Stokes 1.7 et 1.8. Compte tenu de leur linéarité, elles se prêtent en effet beaucoup mieux à l'analyse mathématique que les équations de Navier-Stokes et on dispose de résultats généraux les concernant qui peuvent être mis à profit de manière pratique. Il existe plusieurs méthodes qui permettent d'obtenir une estimation correcte du champ de vitesse loin d'une particule (développement multipolaire) et des interactions hydrodynamiques entre deux grains (méthode des réflexions) plongés dans un écoulement de Stokes, mais elles s'avèrent inaptes à bien prédire le champ de vitesse et les interactions hydrodynamiques lorsque la distance entre particules est inférieure à une valeur de l'ordre de leur taille [53]. Ces méthodes ne sont donc pas d'une grande utilité pour qui souhaite calculer numériquement le comportement d'une suspension et a fortiori celui d'une pâte granulaire. Certaines méthodes se prêtent toutefois davantage à ce type de calculs. En utilisant le théorème de réciprocité, on peut montrer que le champ de vitesse d'un écoulement de Stokes peut s'écrire comme somme de deux intégrales surfaciques [53]. Ainsi, il suffit de connaître le champ de vitesse et la valeur du tenseur des contraintes sur le bord du domaine liquide pour être en mesure de calculer la vitesse de l'écoulement en un point quelconque à l'intérieur du domaine en question. Ce résultat est à la base d'une méthode puissante, appelée méthode des éléments de frontière, pour laquelle la dimensionnalité du problème est réduite puisque la formulation du problème à résoudre est alors bidimensionnel [53]. Cette méthode est néanmoins extrêmement coûteuse en temps de calcul.

La méthode de simulation semi-analytique la plus fréquemment employée par les chercheurs intéressés par les suspensions est certainement la dynamique stokésienne (*Stokesian dynamics*) développée par John F. Brady et Georges Bossis à partir des années 80 [24, 92]. Cette méthode, basée sur les formalismes de résistance et de mobilité (nous expliquerons ces formalismes un peu plus loin) permet de tenir compte des interactions hydrodynamiques à longue portée et de la lubrification entre particules très proches. Elle est donc bien adaptée à la simulation numérique de suspensions concentrées dans un domaine donné. La dynamique stokésienne permet de simuler le comportement d'une suspension comportant N particules rigides sphériques, browniennes ou non, plongées dans un écoulement de Stokes. Lorsque les particules ne sont pas browniennes, c'est-à-dire lorsque le nombre de Péclet est très grand devant 1 comme c'est le cas pour les matériaux qui nous intéressent, le problème mécanique à résoudre s'écrit :

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} \cdot \frac{\mathrm{d}\vec{\mathcal{V}}}{\mathrm{d}t} = \vec{\mathcal{F}}^H + \vec{\mathcal{F}}^P \tag{2.7}$$

<u>M</u> est une matrice  $6N \times 6N$  (en trois dimensions) qui comprend les masses et les moments d'inertie de chaque particule,  $\vec{\mathcal{V}}$  est un grand vecteur vitesse à 6N composantes regroupant la vitesse et le vecteur rotation de chaque particule :

$$\vec{\mathcal{V}} = \begin{pmatrix} \vec{V}_1 \\ \vec{\omega}_1 \\ \vec{V}_2 \\ \vec{\omega}_2 \\ \vdots \\ \vec{V}_N \\ \vec{\omega}_N \end{pmatrix}$$
(2.8)

 $\vec{\mathcal{F}}^H$  et  $\vec{\mathcal{F}}^P$  sont deux grands vecteurs force comptant chacun 6N composantes (force et couple d'origine hydrodynamique s'exerçant sur chaque particule pour  $\vec{\mathcal{F}}^H$  et force et couple extérieurs

ou intergranulaires s'exerçant sur chaque particule pour  $\vec{\mathcal{F}}^P$ ) :

$$\vec{\mathcal{F}}^{H,P} = \begin{pmatrix} \vec{F}_{1}^{H,P} \\ \vec{\Gamma}_{1}^{H,P} \\ \vec{F}_{2}^{H,P} \\ \vec{\Gamma}_{2}^{H,P} \\ \vdots \\ \vec{F}_{N}^{H,P} \\ \vec{\Gamma}_{N}^{H,P} \end{pmatrix}$$
(2.9)

Lorsque les particules sont plongées dans un écoulement de cisaillement ambiant, compte tenu de la linéarité des équations de Stokes et de celle des équations 2.3 et 2.4, on a :

$$\vec{\mathcal{F}}^{H} = -\underline{\underline{\mathbf{R}}}_{FV} \cdot \left(\vec{\mathcal{V}} - \vec{\mathcal{V}}^{\infty}\right) + \underline{\underline{\mathbf{R}}}_{FE} : \underline{\underline{\mathbf{E}}}^{\infty}$$
(2.10)

 $\vec{\mathcal{V}}^{\infty}$  est la valeur prise au niveau du centre des particules du grand vecteur vitesse correspondant à l'écoulement de cisaillement imposé à l'infini, tandis que  $\underline{\mathbf{E}}^{\infty}$  est la partie symétrique du gradient du champ de vitesse. Enfin, les tenseurs de résistance hydrodynamique  $\underline{\mathbf{R}}_{FV}$  et  $\underline{\mathbf{R}}_{FE}$  ne dépendent que de la configuration des particules au sein de la suspension et permettent d'avoir accès aux forces connaissant la cinématique du problème à un instant donné. Le principal problème est donc d'estimer ces deux quantités pour pouvoir ensuite prédire l'évolution du système. Ces deux tenseurs sont en fait deux sous-blocs d'un grand tenseur de résistance  $\mathcal{R}$ qui relie la force, le couple et le stresslet exercés sur chaque particule à la vitesse et à la rotation des particules, ainsi qu'au taux de cisaillement appliqué [53]. L'inverse de ce grand tenseur de résistance est le grand tenseur de mobilité  $\mathcal{M}$ . Ces deux tenseurs peuvent être écrits sous forme matricielle et les matrices correspondantes sont toutes deux symétriques (c'est une conséquence du théorème de réciprocité) et définies positives (de par le caractère dissipatif du problème). Brady et Bossis construisent  $\mathcal{R}$  en commençant par calculer une approximation de  $\mathcal{M}$ . Les interactions à longue portée sont calculées en partant de la représentation intégrale du champ de vitesse et en procédant à un développement multipolaire jusqu'à l'ordre 1 (le terme d'ordre 0 correspond à la résultante des forces s'exerçant sur la particule, tandis que le terme d'ordre 1 est la somme du couple exercé par le fluide sur la particule et du stresslet). Les termes d'ordre plus élevé sont négligés afin de ne pas compliquer la résolution numérique du problème. Ce développement est ensuite combiné avec les lois de Faxén [53] afin d'obtenir une estimation du grand tenseur de mobilité, noté  $\mathcal{M}^{\infty}$ . L'inverse de  $\mathcal{M}^{\infty}$  fournit une approximation du grand tenseur de résistance faisant intervenir des interactions hydrodynamiques multicorps. Cette approximation n'est pas satisfaisante lorsque les interactions hydrodynamiques mettent en jeu des particules proches. Elle doit donc être raffinée en tenant compte des interactions de lubrification entre paires de grains très proches. À cette fin, le plus simple est de poser

$$\mathcal{R} \simeq (\mathcal{M}^{\infty})^{-1} + \mathcal{R}_{\text{lub}}$$
(2.11)

pour tenir compte des effets de la lubrification. Brady et Bossis proposent quant à eux de calculer la matrice de résistance correspondant aux interactions hydrodynamiques à deux corps  $\mathcal{R}_{2B}$ , dont les termes sont bien connus [93], et d'ajouter cette matrice à  $(\mathcal{M}^{\infty})^{-1}$  en prenant garde à bien soustraire les interactions à deux corps déjà présentes dans  $(\mathcal{M}^{\infty})^{-1}$  afin de ne pas les compter deux fois :

$$\mathcal{R} \simeq (\mathcal{M}^{\infty})^{-1} + \mathcal{R}_{2B} - \mathcal{R}_{2B}^{\infty}$$
(2.12)

Une fois le grand tenseur de résistance formé, les équations 2.7 et 2.10 permettent de calculer les nouvelles vitesses des particules. La configuration du système change, le grand tenseur de résistance doit à nouveau être calculé, et ainsi de suite. Cette méthode a rencontré un franc succès. Elle présente néanmoins l'inconvénient d'être gourmande en temps de calcul puisque le coût de l'inversion de la matrice (pleine)  $\mathcal{M}^{\infty}$  est en  $\mathcal{O}(N^3)$ . À titre d'exemple, la plupart des simulations de dynamique stokésienne portaient sur des suspensions comptant moins de 100 grains jusqu'à la fin des années 90. Une amélioration notable de la méthode, la dynamique stokésienne accélérée (accelerated Stokesian dynamics), a été proposée par Asmina Sierou et John F. Brady en 2001 [92]. L'idée consiste à se passer du calcul de la matrice de mobilité  $\mathcal{M}^{\infty}$  (ce qui évite donc d'avoir à l'inverser) et à se contenter d'évaluer les 6N composantes du grand vecteur force hydrodynamique à longue portée. Dans cette approche, la seule quantité matricielle restante est la matrice de résistance correspondant aux interactions hydrodynamiques entre deux particules proches. Cette matrice est creuse, ce qui facilite grandement son inversion [94]. Le problème à résoudre en dynamique stokésienne accélérée est donc du type  $\underline{\mathbf{A}} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ , où  $\vec{x}$  est le grand vecteur vitesse,  $\underline{\mathbf{A}}$  une matrice de résistance (creuse) correspondant aux interactions hydrodynamiques à courte portée qui comporte  $\mathcal{O}(N)$  éléments non nuls. Quant à  $\vec{b}$ , c'est un vecteur dont les éléments sont les forces ou les couples exercés sur chaque particule par le cisaillement et l'extérieur; de plus,  $\vec{b}$  contient également les forces hydrodynamiques à longue portée. La principale difficulté de la méthode consiste justement à calculer ces forces à longue portée. Pour ce faire, Sierou et Brady ont utilisé une méthode de type particle-mesh [95] combinée avec une sommation d'Ewald pour calculer les termes de  $\vec{b}$  dûs aux interactions hydrodynamiques à longue portée. La complexité de ce calcul est en  $\mathcal{O}(N \ln N)$ . Cette complexité est également celle de la méthode de dynamique stokésienne accélérée. Celle-ci est donc beaucoup moins gourmande en temps de calcul que sa version classique. Compte tenu de la puissance des microprocesseurs actuels, on peut aujourd'hui simuler jusqu'à environ un millier de grains avec cette méthode. Ce nombre reste toutefois modeste par rapport au nombre de particules solides que l'on peut trouver dans la plupart des systèmes pâteux de taille macroscopique.

## 2.2 Méthode employée

#### 2.2.1 Principe

Comme nous l'avons expliqué dans la section 1.4.2, le comportement de nos pâtes est contrôlé du point de vue hydrodynamique par les interactions de lubrification. Les interactions hydrodynamiques à longue portée peuvent donc être négligées. Seules les forces de lubrification sont donc prises en compte dans le calcul de la matrice de résistance. Cette idée à déjà exploitée par Robin C. Ball et John R. Melrose à la fin des années 90 [66]. La méthode de simulation que nous avons développée est proche de la leur, à ceci près que dans notre cas, les contraintes s'exerçant sur la boîte de simulation peuvent être contrôlées et que nos grains, qui sont supposés élastiques, peuvent rentrer en contact (voir la figure 2.1).

La méthode que nous employons est une méthode quasi-statique. Nous négligerons donc les termes inertiels, approximation d'autant plus justifiée que le liquide interstitiel est visqueux. On écrit donc l'équilibre des forces et des couples pour chaque grain, ainsi que l'équilibre des éléments diagonaux du tenseur des contraintes :

$$\vec{\mathcal{F}}^{\text{lub}}(\vec{\mathcal{X}}, \vec{\mathcal{V}}) + \vec{\mathcal{F}}^{\text{cont}}(\vec{\mathcal{X}}, \delta \vec{u}_T^{\text{el}}) + \vec{\mathcal{F}}^{\text{ext}} = \vec{0}$$
(2.13)

L'exposant « lub » désigne les composantes visqueuses dissipatives au niveau des connexions mécaniques (quasi-contacts lubrifiés et contacts), l'exposant « cont » celles liées aux contacts entre grains et enfin, l'exposant « ext » fait référence aux termes imposés de l'extérieur. Le



Figure 2.1 : Représentation bidimensionnelle du système considéré. La pâte comprend des grains qui se touchent et d'autres séparés par une mince couche de liquide. Les dimensions latérales de la boîte de simulation sont susceptibles de varier de manière à imposer la valeur des composantes diagonales du tenseur des contraintes.

vecteur  $\vec{\mathcal{X}}$  est le grand vecteur position englobant les positions et les orientations de chacune des N particules du système, ainsi que les déformations de la boîte suivant les d directions de l'espace. Le veteur  $\vec{\mathcal{V}} = d\vec{\mathcal{X}}/dt$  est le grand vecteur vitesse. Quant à  $\delta \vec{u}_T^{\text{el}}$ , c'est le grand vecteur qui contient les valeurs des déplacements relatifs tangentiels élastiques dans les contacts.

En utilisant le formalisme de résistance, il vient :

$$\vec{\mathcal{F}}^{\text{lub}}(\vec{\mathcal{X}}, \vec{\mathcal{V}}) = -\underline{\Xi}_{0}(\vec{\mathcal{X}}) \cdot \vec{\mathcal{V}}$$
(2.14)

 $\underline{\underline{\Xi}}_{0}$  est la matrice de résistance hydrodynamique. Elle ne dépend que de la configuration  $\vec{\mathcal{X}}$  du système. L'équation 2.13 peut donc être réécrite de la sorte :

$$\Xi_{0}(\vec{\mathcal{X}}) \cdot \vec{\mathcal{V}} = \vec{\mathcal{F}}^{\text{cont}}(\vec{\mathcal{X}}, \delta \vec{u}_{T}^{\text{el}}) + \vec{\mathcal{F}}^{\text{ext}}$$
(2.15)

Connaissant  $\vec{\mathcal{F}}^{\text{ext}}$ , la configuration actuelle et son histoire, on peut calculer  $\vec{\mathcal{F}}^{\text{cont}}(\vec{\mathcal{X}}, \delta \vec{u}_T^{\text{el}})$  et  $\underline{\Xi}_0(\vec{\mathcal{X}})$  (cf. section 2.2.2). La force au niveau d'un contact est en effet la somme d'une composante normale et d'une composante tangentielle, toutes deux explicitées dans la section 1.5. La valeur de la composante normale (donnée par la théorie du contact de Hertz) n'est fonction que de la configuration actuelle  $\vec{\mathcal{X}}$ , tandis que la valeur de la composante tangentielle (donnée par un modèle de type élastoplastique parfait) résulte d'un calcul incrémental.

Il suffit donc en principe d'inverser  $\underline{\Xi}_0$  pour pouvoir résoudre le système linéaire 2.15. Néanmoins, la matrice  $\underline{\Xi}_0$  n'est pas inversible. En effet, les forces de lubrification ne dépendent que des vitesses relatives entre particules, aussi tout vecteur  $\vec{X}$  correspondant à une translation en bloc de tous les grains de la pâte appartiendra au noyau de  $\underline{\Xi}_0$ . En conséquence, la dimension du noyau de la matrice  $\underline{\Xi}_0$  est nécessairement supérieure ou égale à d. Afin de régler ce problème, nous avons choisi de fixer un grain. Cette procédure permet de briser l'invariance galiléenne du problème à l'origine du caractère non inversible de  $\underline{\Xi}_0$ . Dans la suite de ce travail, on chosisit d'immobiliser le grain noté 1. Enfin, tous nos calculs de comportement de pâtes granulaires portent sur des systèmes bidimensionnels (d = 2) afin de limiter autant que possible les temps de calcul. Le grand vecteur vitesse, qui compte 3N composantes, s'écrit :

$$\vec{\mathcal{V}} = \begin{pmatrix} \omega_{1} \\ V_{2,x} \\ V_{2,y} \\ \omega_{2} \\ \vdots \\ V_{N,x} \\ V_{N,y} \\ \omega_{N} \\ \dot{\varepsilon}_{1} \\ \dot{\varepsilon}_{2} \end{pmatrix}$$
(2.16)

Le grand vecteur force de lubrification, produit de la matrice de résistance hydrodynamique et du grand vecteur vitesse, est donc égal à :

$$\vec{\mathcal{F}}^{\text{lub}} = \begin{pmatrix} \Gamma_1^{\text{lub}} \\ F_{2,x}^{\text{lub}} \\ F_{2,y}^{\text{lub}} \\ \Gamma_2^{\text{lub}} \\ \vdots \\ F_{N,x}^{\text{lub}} \\ F_{N,y}^{\text{lub}} \\ \Gamma_N^{\text{lub}} \\ A\sigma_{11}^{\text{lub}} \\ A\sigma_{22}^{\text{lub}} \end{pmatrix} = -\underline{\Xi}(\vec{\mathcal{X}}) \cdot \begin{pmatrix} \omega_1 \\ V_{2,x} \\ V_{2,y} \\ \omega_2 \\ \vdots \\ V_{N,x} \\ V_{N,y} \\ \omega_N \\ \dot{\varepsilon}_1 \\ \dot{\varepsilon}_2 \end{pmatrix}$$
(2.17)

Quant aux grands vecteurs forces,  $\vec{\mathcal{F}}^{\rm cont}$  et  $\vec{\mathcal{F}}^{\rm ext},$  ils valent :

$$\vec{\mathcal{F}}^{\text{cont}} = \begin{pmatrix} \Gamma_1^{\text{cont}} \\ F_{2,x}^{\text{cont}} \\ F_{2,y}^{\text{cont}} \\ \Gamma_2^{\text{cont}} \\ \vdots \\ F_{N,x}^{\text{cont}} \\ F_{N,y}^{\text{cont}} \\ \Gamma_N^{\text{cont}} \\ A\sigma_{11}^{\text{cont}} \\ A\sigma_{22}^{\text{cont}} \end{pmatrix} \qquad \vec{\mathcal{F}}^{\text{ext}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ A\Sigma_{11} \\ A\Sigma_{22} \end{pmatrix}$$
(2.18)

A représente l'aire du système  $(A = L_1L_2)$  et les  $(\sigma_{ii})$  sont les composantes diagonales du

tenseur de contrainte. Le système linéaire à résoudre à chaque pas de temps est donc le suivant :

$$\Xi(\vec{\mathcal{X}}) \cdot \begin{pmatrix} \omega_{1} \\ V_{2,x} \\ V_{2,y} \\ \omega_{2} \\ \vdots \\ V_{N,x} \\ V_{N,y} \\ \omega_{N} \\ \dot{\varepsilon}_{1} \\ \dot{\varepsilon}_{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_{1}^{\text{cont}} \\ F_{2,y}^{\text{cont}} \\ F_{2,y}^{\text{cont}$$

La matrice  $\underline{\underline{\Xi}}$  de taille  $3N \times 3N$  peut facilement être déduite de la matrice  $\underline{\underline{\Xi}}_0^2$  de taille  $(3N+2) \times (3N+2)$ . Il suffit en effet de supprimer les deux premières lignes et les deux premières colonnes de  $\underline{\underline{\Xi}}_0$  pour obtenir  $\underline{\underline{\Xi}}$ . La structure par blocs de la matrice  $\underline{\underline{\Xi}}_0$  est la suivante :

$$\Xi_{0} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1i} & \cdots & A_{1j} & \cdots & \cdots & A_{1N} & B_{1} \\ A_{21} & A_{22} & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & B_{2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & \cdots & \cdots & A_{ii} & \cdots & A_{ij} & \cdots & \cdots & A_{iN} & B_{i} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{j1} & \cdots & \cdots & A_{ji} & \cdots & A_{jj} & \cdots & \cdots & A_{jN} & B_{j} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} & B_{N} \\ C_{1} & C_{2} & \cdots & C_{i} & \cdots & C_{j} & \cdots & \cdots & C_{N} & D \end{pmatrix}$$

$$(2.20)$$

Les blocs  $(A_{kl})_{1 \le k,l \le N}$  sont des matrices  $3 \times 3$  couplant les vitesses (de translation et de rotation) des grains avec la force et le couple de lubrification qu'ils subissent. Les blocs  $(B_k)_{1 \le k \le N}$  sont des matrices  $3 \times 2$  couplant le tenseur de déformation de la boîte de simulation avec les forces et les couples de lubrification. Les blocs  $(C_k)_{1 \le k \le N}$  sont des matrices  $2 \times 3$  couplant les vitesses des grains avec le tenseur des contraintes de lubrification. Enfin, le bloc D est une matrice  $2 \times 2$ couplant le tenseur de déformation de la boîte de simulation avec le tenseur des contraintes de lubrification.

#### 2.2.2 Calcul de la matrice de résistance

La matrice de résistance résultant d'un ensemble d'interactions à deux corps lorsque seules les forces de lubrification sont prises en compte, nous allons commencer par nous pencher sur le cas de deux grains en contact ou en quasi-contact. Soit un grain i. Ce grain est en général en quasi-contact ou en contact avec plusieurs autres grains. Considérons la connexion du grain i avec un autre grain, que nous noterons j. En adoptant les conventions de la figure 2.2, la vitesse

<sup>2.</sup> Rappelons que cette matrice, lorsqu'elle agit sur  $(V_{1,x}, V_{1,y}, \omega_1, V_{2,x}, V_{2,y}, \omega_2, \cdots, V_{N,x}, V_{N,y}, \omega_N, \dot{\varepsilon}_1, \dot{\varepsilon}_2)^\top$ donne l'opposé de  $(F_{1,x}^{\text{lub}}, F_{1,y}^{\text{lub}}, \Gamma_1^{\text{lub}}, F_{2,x}^{\text{lub}}, \Gamma_2^{\text{lub}}, \cdots, F_{N,x}^{\text{lub}}, F_{N,y}^{\text{lub}}, \Gamma_N^{\text{lub}}, A\sigma_{11}^{\text{lub}}, A\sigma_{22}^{\text{lub}})^\top$ .



Figure 2.2 : Paire de grains connectés mécaniquement : notations.

relative au niveau d'un (quasi-)<br/>contact s'écrit, en notant  $\delta \vec{V}_{ij} = \vec{V}_i - \vec{V}_j$  :

$$\vec{V}_{ij} = \delta \vec{V}_{ij} + (R_i \omega_i + R_j \omega_j) \vec{t}_{ij} - \underline{\dot{\epsilon}} \cdot \vec{r}_{ij}$$
(2.21)

La composante normale de cette vitesse relative vaut :

$$V_{ij}^N = \vec{V}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} = \vec{n}_{ij} \cdot \delta \vec{V}_{ij} - \vec{n}_{ij} \cdot \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \cdot \vec{r}_{ij}$$
(2.22)

tandis que la composante tangentielle est égale à :

$$\vec{V}_{ij}^T = \delta \vec{V}_{ij} - \vec{n}_{ij} \cdot \delta \vec{V}_{ij} \vec{n}_{ij} + \left(\vec{n}_{ij} \cdot \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \cdot \vec{r}_{ij}\right) \cdot \vec{n}_{ij} + \left(R_i \omega_i + R_j \omega_j\right) \vec{t}_{ij} - \underline{\underline{\dot{\varepsilon}}} \cdot \vec{r}_{ij}$$
(2.23)

La force de lubrification exercée par le grain j sur le grain i vaut :

$$\vec{F}_{i\leftarrow j}^{\text{lub}} = -\xi_{ij}^N V_{ij}^N \vec{n}_{ij} - \xi_{ij}^T \vec{V}_{ij}^T$$
(2.24)

Le couple de lubrification exercé par la connexion mécanique i - j sur le grain i vaut :

$$\Gamma^{\text{lub}}_{i\leftarrow j} = \vec{\Gamma}^{\text{lub}}_{i\leftarrow j} \cdot \vec{e}_z = -\left(R_i \vec{n}_{ij} \times \xi^T_{ij} \vec{V}^T_{ij}\right) \cdot \vec{e}_z \tag{2.25}$$

Les coefficients  $\xi_{ij}^N$  et  $\xi_{ij}^T$  sont donnés par les équations 1.28 et 1.29<sup>3</sup>.

Matriciellement, en combinant les équations 2.22, 2.23, 2.24 et 2.25, il vient :

$$\begin{pmatrix} F_{i\leftarrow j,x}^{\text{lub}} \\ F_{i\leftarrow j,y}^{\text{lub}} \\ \Gamma_{i\leftarrow j}^{\text{lub}} \end{pmatrix} = -\blacksquare_{ij} \begin{pmatrix} V_{j,x} \\ V_{j,y} \\ \omega_j \end{pmatrix} - \blacksquare_{ii,j} \begin{pmatrix} V_{i,x} \\ V_{i,y} \\ \omega_i \end{pmatrix} - \Box_{ij} \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}_1 \\ \dot{\varepsilon}_2 \end{pmatrix}$$
(2.26)

Les quantités notées  $\blacksquare$  sont des matrices  $3 \times 3$ , tandis que celles notées  $\square$  sont des matrices  $3 \times 2$ . Nous expliciterons plus loin ces matrices. La résultante des efforts transmis par les connexions

<sup>3.</sup> Notons à ce propos que le fait de considérer qu'il y a de la lubrification « solide » entre grains en contact (c'est-à-dire que les coefficients de lubrification sont non nuls lorsque h < 0) fait que la structure de la matrice de résistance hydrodynamique reste inchangée lorsque deux particules, en quasi-contact lors du pas de temps précédent, entrent en contact, ou vice-versa. Cette propriété est avantageuse du point de vue numérique.

mécaniques sur le grain i vaut :

$$\begin{pmatrix} F_{i,x}^{\text{lub}} \\ F_{i,y}^{\text{lub}} \\ \Gamma_{i \leftarrow k}^{\text{lub}} \end{pmatrix} = \sum_{k \vdash i} \begin{pmatrix} F_{i \leftarrow k,x}^{\text{lub}} \\ F_{i \leftarrow k,y}^{\text{lub}} \\ \Gamma_{i \leftarrow k}^{\text{lub}} \end{pmatrix}$$
$$= -\left(\sum_{k \vdash i} \blacksquare_{ii,k}\right) \begin{pmatrix} V_{i,x} \\ V_{i,y} \\ \omega_i \end{pmatrix} - \sum_{k \vdash i} \left( \blacksquare_{ik} \begin{pmatrix} V_{k,x} \\ V_{k,y} \\ \omega_k \end{pmatrix} \right)$$
$$- \left(\sum_{k \vdash i} \square_{ik}\right) \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}_1 \\ \dot{\varepsilon}_2 \end{pmatrix}$$
(2.27)

 $l \vdash m$  signifie que le grain l est connecté mécaniquement au grain m. En utilisant les notations introduites dans l'équation 2.20, on en déduit que :

$$A_{ii} = \sum_{k \vdash i} \blacksquare_{ii,k} \tag{2.28}$$

$$A_{ik} = \begin{cases} \blacksquare_{ik} \text{ si } k \vdash i \\ 0 \text{ si } k \nvDash i \end{cases}$$
(2.29)

$$B_i = \sum_{k \vdash i} \Box_{ik} \tag{2.30}$$

D'autre part, d'après l'équation 1.4 :

$$A\underline{\underline{\sigma}}^{\text{lub}} = \sum_{k \leftrightarrow l} \vec{F}^{\text{lub}}_{l \leftarrow k} \otimes \vec{r}_{kl}$$
(2.31)

 $\sum_{k \leftrightarrow l}$  désigne une somme sur toutes les connexions mécaniques entre grains de la pâte. On en déduit immédiatement :

$$\begin{pmatrix} A\sigma_{11} \\ A\sigma_{22} \end{pmatrix} = \sum_{k \leftrightarrow l} \begin{pmatrix} F_{l \leftarrow k, x}^{\text{lub}} r_{kl, x} \\ F_{l \leftarrow k, y}^{\text{lub}} r_{kl, y} \end{pmatrix}$$
(2.32)

$$= -\sum_{k \leftrightarrow l} \left( \blacklozenge_{kl} \begin{pmatrix} V_{l,x} \\ V_{l,y} \\ \omega_l \end{pmatrix} + \blacklozenge_{lk} \begin{pmatrix} V_{k,x} \\ V_{k,y} \\ \omega_k \end{pmatrix} + \diamondsuit_{kl} \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}_1 \\ \dot{\varepsilon}_2 \end{pmatrix} \right)$$
(2.33)

Les quantités notées  $\blacklozenge$  sont des matrices  $2 \times 3$  et celles notées  $\diamondsuit$  sont des matrices  $2 \times 2$ . Les éléments de ces matrices seront précisés un peu plus loin. La première égalité provient directement de l'équation 2.31, tandis que la deuxième résulte d'une combinaison des équations 2.22, 2.23, 2.24 et 2.25. En utilisant les notations de l'équation 2.20, on obtient :

$$C_i = \sum_{k \vdash i} \blacklozenge_{ki} \tag{2.34}$$

$$D = \sum_{k \leftrightarrow l} \Diamond_{kl} \tag{2.35}$$

Écrivons maintenant ce que valent les matrices  $\blacksquare$ ,  $\Box$ ,  $\blacklozenge$  et  $\Diamond$  :

$$\blacksquare_{ij} = \begin{pmatrix} -\xi_{ij}^T + (\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,1}^2 & (\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,1} n_{ij,2} & -\xi_{ij}^T R_j n_{ij,2} \\ (\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,1} n_{ij,2} & -\xi_{ij}^T + (\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,2}^2 & \xi_{ij}^T R_j n_{ij,1} \\ \xi_{ij}^T R_i n_{ij,2} & -\xi_{ij}^T R_i n_{ij,1} & \xi_{ij}^T R_i R_j \end{pmatrix}$$
(2.36)

$$\mathbf{v}_{ij} = \begin{pmatrix} \varsigma_{ij} + \xi_{j,1} & \varsigma_{ij} & \varsigma_{ij} & \gamma_{ij,1} + \xi_{j,1} & \varsigma_{ij} & \varsigma_{ij} & \gamma_{ij,1} + \xi_{j,1} & \varsigma_{ij} - \gamma_{ij,2} + \xi_{j,1} & \varsigma_{ij} - \gamma_{ij,2} + \xi_{ij} & \gamma_{ij,2} + \xi_{ij} & \gamma_{ij,2} + \xi_{ij} & \gamma_{ij,2} & \gamma_{ij} - \gamma_{ij} & \gamma_{ij,2} + \xi_{ij} & \gamma_{ij,2} & \gamma_{ij} & \gamma_{ij,2} & \gamma_{ij} & \gamma_{ij,2} + \xi_{ij} & \gamma_{ij,2} & \gamma_{ij} & \gamma_{ij}$$

$$\Diamond_{ij} = \begin{pmatrix} \xi_{ij}^T r_{ij,1}^2 - (\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,1}^2 r_{ij,1}^2 & -(\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,1} n_{ij,2} r_{ij,1} r_{ij,2} \\ -(\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,1} n_{ij,2} r_{ij,1} r_{ij,2} & \xi_{ij}^T r_{ij,2}^2 - (\xi_{ij}^T - \xi_{ij}^N) n_{ij,2}^2 r_{ij,2}^2 \end{pmatrix}$$
(2.40)

#### 2.2.3 Propriétés de la matrice de résistance

**Symétrie :** Nous allons montrer de façon explicite que la matrice de résistance  $\underline{\Xi}$  est symétrique. Pour ce faire, il suffit de prouver que la matrice  $\underline{\Xi}_0$  l'est. Compte tenu de la structure par blocs de  $\underline{\Xi}_0$  (voir l'équation 2.20), il s'agit donc de montrer que

$$\begin{pmatrix}
A_{ii} = A_{ii}^{\top} \\
A_{ij} = A_{ji}^{\top} \\
C_i = B_i^{\top} \\
D = D^{\top}
\end{cases}$$
(2.41)

et ce pour  $1 \leq i, j \leq N$ . D'après l'équation 2.28, la matrice  $A_{ii}$  est égale à la somme des matrices  $\blacksquare_{ii,k}$  pour  $k \vdash i$ . Or, l'écriture explicite de  $\blacksquare_{ii,k}$  donnée par l'équation 2.37 montre que  $\blacksquare_{ii,k}$  est symétrique. Il s'ensuit que c'est également le cas de  $A_{ii}$ . L'expression de  $A_{ij}$  est donnée par l'équation 2.29; or, l'équation 2.36 montre que  $\blacksquare_{ij} = \blacksquare_{ji}^{\top}$ , d'où  $A_{ij} = A_{ji}^{\top}$ . Les expressions de  $B_i$  et de  $C_i$  font l'objet des équations 2.30 et 2.34. Étant donné que les expressions 2.38 et 2.39 montrent que  $\square_{ij} = \blacklozenge_{ij}^{\top}$ , il s'ensuit que  $C_i = B_i^{\top}$ . Enfin, en vertu de l'équation 2.35, D est somme de matrices de type  $\diamondsuit$ , ce qui implique la symétrie de D puisque les matrices  $\diamondsuit$  sont symétriques d'après l'équation 2.40.

**Factorisation :** Nous allons maintenant utiliser les notions introduites dans la section 1.3.2 pour montrer que la matrice de résistance  $\Xi$  peut s'écrire comme un produit de trois matrices dont le sens physique est clair. Considérons le grand vecteur formé à partir de la composante normale et de la composante tangentielle des forces intergranulaires de lubrification, noté  $\vec{f}^{\text{lub}}$ , et le grand vecteur formé à partir de la composante tangentielle des vitesses relatives entre grains connectés mécaniquement, noté  $\delta \vec{v}$ . Ces vecteurs comptent chacun un nombre de composantes égal à  $2N_c$  (on rappelle que  $N_c$  est le nombre de connexions mécaniques). D'après l'équation 2.24, ces deux vecteurs vérifient la relation suivante :

$$\vec{f}^{\rm lub} = -\underline{\xi} \cdot \delta \vec{v} \tag{2.42}$$

 $\xi$  est une matrice diagonale  $2N\times 2N$  valant :

$$\underline{\underline{\xi}} = \operatorname{diag}\left(\xi_1^N, \xi_1^T, \cdots, \xi_{N_c}^N, \xi_{N_c}^T\right)$$
(2.43)

D'autre part, on peut écrire :

$$\vec{\mathcal{F}}^{\text{lub}} = \underline{\mathbf{G}}^{\top} \cdot \vec{f}^{\text{lub}}$$
(2.44)

$$\delta \vec{v} = \underline{\mathbf{G}} \cdot \vec{\mathcal{V}} \tag{2.45}$$

-42 -

La matrice  $\underline{\mathbf{G}}$  est de taille  $3N \times 2N$ . Elle ne dépend que de la géométrie du système. En combinant ces deux relations avec l'équation 2.42, on obtient :

$$\vec{\mathcal{F}}^{\text{lub}} = -\left(\underline{\underline{\mathbf{G}}}^{\top} \cdot \underline{\underline{\xi}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{G}}}\right) \cdot \vec{\mathcal{V}}$$
(2.46)

D'où la factorisation de  $\underline{\Xi}$  suivante :

$$\underline{\underline{\Xi}} = \underline{\underline{G}}^{\top} \cdot \underline{\underline{\xi}} \cdot \underline{\underline{G}}$$
(2.47)

Cette factorisation est intéressante à plusieurs titres. D'une part, cette écriture distingue l'effet de la géométrie de celui de la mécanique dans l'expression de  $\underline{\Xi}$  puisque  $\underline{\underline{G}}$  ne dépend que de la géométrie tandis que  $\underline{\underline{\xi}}$  ne dépend que de la mécanique des connexions. D'autre part, cette factorisation constitue une autre preuve du caractère symétrique de la matrice de résistance  $\underline{\underline{\Xi}}$  (en effet,  $\underline{\underline{\xi}}$  est diagonale et donc symétrique).

**Définie positivité :** La factorisation que nous venons d'obtenir permet également de prouver la positivité de la matrice  $\underline{\Xi}$ . En effet :

$$\langle \vec{\mathcal{V}} | \underline{\underline{\Xi}} \cdot \vec{\mathcal{V}} \rangle = \langle \vec{\mathcal{V}} | \left( \underline{\underline{\mathbf{G}}}^{\top} \cdot \underline{\underline{\xi}} \cdot \underline{\underline{\mathbf{G}}} \right) \cdot \vec{\mathcal{V}} \rangle = \langle \underline{\underline{\mathbf{G}}} \cdot \vec{\mathcal{V}} | \underline{\underline{\xi}} \cdot \left( \underline{\underline{\mathbf{G}}} \cdot \vec{\mathcal{V}} \right) \rangle = \langle \delta \vec{v} | \underline{\underline{\xi}} \cdot \delta \vec{v} \rangle \ge 0$$
(2.48)

La dernière inégalité <sup>4</sup> vient de ce que  $\underline{\xi}$  est une matrice symétrique définie positive. Si le noyau de  $\underline{\underline{G}}$  ne contient pas d'autre élément que le vecteur nul, l'inégalité est stricte quel que soit  $\vec{\mathcal{V}} \neq \vec{0}$ . Dans ce cas,  $\underline{\underline{\Xi}}$  est définie positive, donc inversible en particulier. Ce résultat signifie que l'inversibilité de  $\underline{\underline{\Xi}}$  ne dépend que de la géométrie de la pâte.  $\underline{\underline{\Xi}}$  est donc inversible si et seulement si Ker  $\underline{\underline{G}} = \{\vec{0}\}$ . Lorsque ce n'est pas le cas (si le graphe des connexions mécaniques n'est pas connexe par exemple), alors on ne peut inverser  $\underline{\underline{\Xi}}$  et la méthode quasi-statique est inutilisable.

**Portée des interactions de lubrification :** Si la matrice de résistance  $\underline{\Xi}$  ne couple que les grains connectés mécaniquement (c'est-à-dire les paires de grains constituées de grains assez proches), ce n'est pas le cas de la matrice de mobilité  $\underline{\Xi}^{-1}$  dont la portée est beaucoup plus grande. À titre d'exemple, considérons une pâte granulaire unidimensionnelle et périodique dont les grains, tous identiques, de diamètre a, sont disposés de la manière suivante :

On suppose que les grains sont espacés de manière régulière. On note D la distance entre les centres de deux grains successifs. On considère qu'il existe une connexion mécanique entre paires de grains lorsque ceux-ci sont voisins. Le système compte donc N connexions. Compte tenu de la dimension du problème, la matrice  $\underline{\Xi}_0$  est de taille  $(N + 1) \times (N + 1)$  et s'écrit, en notant

<sup>4.</sup> Cette inégalité peut également s'écrire  $\vec{\mathcal{F}}^{lub} \cdot \vec{\mathcal{V}} \leq 0$  ce qui est l'expression mathématique du caractère dissipatif des forces de lubrification.

$$\xi \equiv \xi_{i,i+1}^N (D-a) :$$

$$\Xi_{0} = \xi \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \vdots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \cdots & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & \vdots \\ -1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & ND \end{pmatrix}$$
(2.49)

La matrice  $\underline{\Xi}_0$  est diagonale par blocs. Elle comprend un bloc diagonal  $N \times N$  et un bloc diagonal  $1 \times 1$ . Le vecteur  $(1, \dots, 1, 0)^{\top}$ , qui correspond à une translation d'ensemble du système, appartient au noyau de la matrice  $\underline{\Xi}_0$ . En gelant le degré de liberté associé à la particule 1, on brise l'invariance galiléenne. La matrice de résistance  $\underline{\Xi}$  correspondant à cette situation est inversible et se déduit de  $\underline{\Xi}_0$  en supprimant la première ligne et la première colonne. La matrice  $\underline{\Xi}$ , de taille  $N \times N$  est également diagonale par blocs. Elle est constituée d'un bloc diagonal  $(N-1) \times (N-1)$ , noté  $\underline{T}$  et d'un bloc diagonal  $1 \times 1$ :

$$\underline{\underline{\Xi}} = \xi \left( \begin{array}{cc} \underline{\underline{T}} & 0\\ 0 & ND \end{array} \right) \quad \text{d'où} \quad \underline{\underline{\Xi}}^{-1} = \frac{1}{\xi} \left( \begin{array}{cc} \underline{\underline{T}}^{-1} & 0\\ 0 & \frac{1}{ND} \end{array} \right)$$
(2.50)

La matrice  $\underline{\mathbf{T}}$  est tridiagonale symétrique :  $\underline{\mathbf{T}}$  = tridiag<sub>N-1</sub>(-1, 2, -1). Son inverse<sup>5</sup> est également symétrique et ses éléments valent  $T_{ij}^{-1} = (N-i)j/N$  lorsque  $j \leq i$ . Cet exemple montre que contrairement à la matrice de résistance  $\underline{\Xi}$ , la matrice de mobilité est à longue portée. Cette propriété n'est pas liée à la forme particulière de la configuration que nous avons choisie. Elle est également valable lorsque l'assemblage granulaire est bidimensionnel et désordonné.

$$\begin{cases} -\frac{d^2 G_{x_0}}{dx^2} = \delta(x - x_0) \\ G_{x_0}(0) = G_{x_0}(L) = 0 \end{cases}$$
(2.51)

 $G_{x_0}$  est la fonction de Green de l'opérateur  $-\frac{d^2}{dx^2}$  avec des conditions aux limites d'annulation au bord du domaine (en 0 et en L).  $G_{x_0}$  se calcule facilement et vaut :

$$G_{x_0}(x) = \begin{cases} (1 - x_0/L)x & \text{si } x \le x_0\\ (x_0/L)(L - x) & \text{si } x \ge x_0 \end{cases}$$
(2.52)

En revenant dans le domaine discret  $(L \leftrightarrow N, x_0 \leftrightarrow i, G_{x_0}(x) \leftrightarrow G_{ij})$ , on en déduit :

$$G_{ij} = \begin{cases} \frac{N-i}{N}j & \text{si } j \le i\\ \frac{N-j}{N}i & \text{si } j \ge i \end{cases}$$
(2.53)

Les  $G_{ij}$  sont les éléments de la matrice  $\underline{\mathbf{T}}^{-1}$ .

<sup>5.</sup> L'inverse de  $\underline{\underline{\mathbf{T}}}$  peut se calculer facilement en remarquant que les éléments de  $\underline{\underline{\mathbf{T}}}^{-1}$  sont donnés par des fonctions de Green discrètes. Considérons le système linéaire  $\underline{\underline{\mathbf{T}}} \cdot \vec{t}_i = \vec{e}_i$  avec  $\vec{e}_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^{\top}$  (le 1 est en position *i*).  $\vec{t}_i$  n'est autre que la *i*-ème colonne de  $\underline{\underline{\mathbf{T}}}^{-1}$ . Cette équation linéaire peut être vue comme une discrétisation du problème continu suivant :

#### 2.2.4 Résolution numérique

Le problème que nous avons à résoudre (équation 2.19) est semblable à celui sur lequel on tombe lorsque l'on traite un problème élastique bidimensionnel par la méthode des éléments finis, à ceci près que nos inconnues ne sont pas des déplacements mais des vitesses (les ressorts sont remplacés par des amortisseurs) et que notre problème compte un degré de liberté supplémentaire (de rotation) à chaque « nœud », c'est-à-dire au niveau de chaque grain.

Nous avons montré dans la section précédente que la matrice de résistance  $\Xi$  est symétrique et définie positive. Ces caractéristiques sont très appréciables puisque nombreuses sont en effet les méthodes numériques permettant d'inverser des matrices de ce type [96]. D'autre part, la matrice de résistance  $\Xi$  est très creuse puisque chacun des N grains de la pâte ne compte que quelques connexions avec d'autres grains. En effet, d'après l'équation 2.29, le bloc  $A_{ij}$  est égal à zéro lorsqu'il n'y a pas de connexion mécanique entre les grains i et j. Ainsi, sur les N-1 matrices blocs  $(A_{ij})_{1\leq j\leq N, j\neq i}$ , seule une poignée sont non nulles et leur nombre devient négligeable devant N dans la limite  $N \to \infty$ .

Nous avons choisi de résoudre le système linéaire 2.19 à l'aide de la méthode du gradient conjugué avec préconditionnement de Cholesky (nous reviendrons sur ce que nous entendons par là dans ce qui suit). La méthode du gradient conjugué [96] (sans préconditionnement) est une méthode itérative permettant de résoudre un système linéaire du type  $\underline{\mathbf{A}} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ , où  $\underline{\mathbf{A}}$  est une matrice symétrique définie positive, de taille  $n \times n$ , sans avoir à inverser  $\underline{\mathbf{A}}$ . Toutes les étapes de l'algorithme ne font intervenir que des produits de  $\underline{\mathbf{A}}$  avec des vecteurs. Cette méthode est donc particulièrement performante lorsque la matrice  $\underline{\mathbf{A}}$  est creuse, comme c'est le cas dans la situation qui nous intéresse. Rappelons brièvement le principe de la méthode. Puisque  $\underline{\mathbf{A}}$  est symétrique et définie positive, résoudre  $\underline{\mathbf{A}} \cdot \vec{x} = \vec{b}$  équivaut à trouver le vecteur  $\vec{x}$  minimisant

$$\phi(\vec{x}) = \frac{1}{2}\vec{x} \cdot \underline{\underline{\mathbf{A}}} \cdot \vec{x} - \vec{x} \cdot \vec{b}$$
(2.54)

La façon la plus simple de minimiser  $\phi$  consiste, à partir d'un point  $\vec{x}_c$  donné, à chercher un nouveau point  $\vec{x}'_c$  (tel que  $\phi(\vec{x}'_c) < \phi(\vec{x}_c)$ ) selon l'opposé du gradient de  $\phi$  en  $\vec{x}_c$ . Cette méthode n'est toutefois pas optimale puisque si les lignes de niveau de  $\phi$  sont très allongées (c'est-à-dire si la matrice  $\underline{\mathbf{A}}$  est mal conditionnée, ce qui signifie que ses valeurs propres de  $\underline{\mathbf{A}}$  sont très différentes les unes des autres), les gradients de  $\phi$  calculés à chaque itération sont très proches les uns des autres ce qui complique la recherche du minimum. L'idéal serait de parvenir à trouver des vecteurs  $\vec{p_i}$  tels que le  $\vec{x_k}$  calculé à chaque itération résoud le problème de la minimisation de  $\phi$  dans le sous-espace vectoriel engendré par  $\{\vec{p}_1, \cdots, \vec{p}_k\}$ . Ceci prouverait la convergence de la méthode et même plus, à savoir l'obtention de la solution en au plus n itérations. Il s'avère qu'il est possible de trouver de tels vecteurs. Leur existence est à la base de la méthode du gradient conjugué. Néanmoins, même si cette méthode itérative présente en théorie l'avantage de fournir la valeur exacte de  $\vec{x}$  en au plus n itérations, ce n'est pas le cas en pratique puisque tout calcul numérique fait intervenir des manipulations de nombres à virgule flottante [97]. Ce qu'il faut retenir, c'est que numériquement, la méthode du gradient conjugué converge d'autant plus rapidement que la matrice  $\underline{A}$  est proche de la matrice identité. Plus précisément, la vitesse de convergence est d'autant meilleure que le conditionnement de la matrice  $\underline{\mathbf{A}}$  est proche de 1. Lorsque la matrice  $\underline{\mathbf{A}}$  ne vérifie pas ces propriétés, on peut utiliser un préconditionneur, c'està-dire une matrice  $\underline{\tilde{A}}$ , telle que la matrice  $\underline{\tilde{A}}^{-1}$ .  $\underline{A}$  est proche de  $\underline{1}$  et, plutôt que de résoudre le système linéaire  $\underline{\mathbf{A}} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ , résoudre le système linéaire équivalent  $(\underline{\tilde{\mathbf{A}}}^{-1} \cdot \underline{\mathbf{A}}) \cdot \vec{x} = \underline{\tilde{\mathbf{A}}}^{-1} \cdot \vec{b}$ . Le choix d'un bon préconditionneur est critique pour la vitesse de convergence de l'algorithme. Dans notre cas, la matrice  $\underline{A}$  est bien entendu la matrice de résistance  $\underline{\Xi}$ . Si l'on suppose que

les éléments de la matrice  $\Xi$  ne changent pas trop à mesure que le système évolue (ce qui a toutes les chances d'être le cas lorsque les deux états du système ne sont pas séparés par un très grand nombre de pas de temps), on peut espérer que la matrice de résistance calculée lors d'un pas de temps précédent constitue un bon préconditionneur. À cettre fin, nous avons décidé d'enregistrer la matrice de résistance tous les p pas de temps, p étant un paramètre de notre programme. Lors du pas de temps t, on utilise donc comme préconditionneur la matrice de résistance précédemment enregistrée au pas de temps ip, p étant tel que  $ip \le t \le (i+1)p$  (i, p) et t sont bien entendu des entiers naturels). Or, il s'avère que la méthode du gradient conjugué avec préconditionnement passe en partie par la résolution de systèmes linéaires faisant intervenir le préconditionneur [94]. Il faut donc disposer d'un moyen rapide pour inverser ce type de systèmes (autrement, la méthode du gradient conjugué avec précondionnement n'apportera aucune plusvalue). C'est la raison pour laquelle nous calculons également la décomposition de Cholesky de la matrice de résistance enregistrée tous les p pas de temps. Toute matrice <u>M</u> symétrique définie positive admet en effet une factorisation, dite de Cholesky, de la forme  $\underline{\mathbf{M}} = \underline{\mathbf{L}} \cdot \underline{\mathbf{L}}^{\top}$ , où  $\underline{\mathbf{L}}$  est une matrice triangulaire inférieure [96]. Cette factorisation présente l'avantage d'être assez robuste numériquement. Elle est très coûteuse  $^{6}$  puisque sa complexité algorithmique est général en  $\mathcal{O}(n^3)$ , mais nous n'avons heureusement pas à la calculer très fréquemment et, une fois connue, elle permet de calculer très facilement la solution d'un système linéaire faisant intervenir la matrice  $\mathbf{M}$ . En pratique, quelques pas de temps suffisent (moins de 10 dans les cas que nous avons traités) pour trouver la solution de l'équation 2.19 avec une bonne précision ce qui confirme le bien-fondé de la méthode utilisée.

Une fois le système linéaire 2.19 résolu, la vitesse  $\vec{\mathcal{V}}$  est connue. La valeur de l'incrément du grand vecteur position,  $\delta \vec{\mathcal{X}} = \delta t \vec{\mathcal{V}}$ , ne dépend alors plus que de la valeur de  $\delta t$ . Contrairement à ce qui se passe en dynamique moléculaire par exemple, où un ordre de grandeur convenable du pas de temps peut être déduit lorsque l'on connaît la raideur des interactions entre éléments constituant le système et leurs masses, une telle prescription n'existe pas pour notre méthode quasi-statique. Nous avons donc décidé de commencer la simulation avec un pas de temps  $\delta t$  très petit (inférieur au rapport  $\eta/P$  de plusieurs ordres de grandeur). À chaque itération, la valeur du pas de temps est multipliée par un certain facteur (strictement supérieur à 1) qui est un paramètre du programme (nous l'avons toujours fixé entre 1.1 et 1.5), sauf si la variation relative (entre le pas de temps courant et le pas de temps précédent) d'un élément de la matrice de

<sup>6.</sup> On peut néanmoins faire usage d'une astuce. La factorisation de Cholesky présente en effet une propriété intéressante d'un point de vue numérique : elle conserve la structure en bandes de la matrice originale. Considérons la  $i^{e}$  ligne d'une matrice M symétrique et définie positive et supposons que tous les éléments non nuls de cette ligne sont concentrés au-delà de la colonne  $j_0 \leq i$ . Dans ce cas, les éléments  $L_{ii}$  sont tous nuls lorsque  $j < j_0$ . On peut donc se passer de calculer ces éléments, ce qui accélère la factorisation. Cette dernière sera donc d'autant plus rapide que les éléments non nuls de la matrice de résistance hydrodynamique **Ξ** seront concentrés près de la diagonale. La topologie du réseau des connexions mécaniques est bien entendu ce qu'elle est, mais on peut choisir de renuméroter les particules du système de manière à minimiser l'« embonpoint » de Ξ. Considérons N particules, numérotés de 1 à N de manière quelconque; une renumérotation de ces particules est une permutation de l'ensemble  $\{1, 2, \ldots, N\}$ . On note  $k_i$  le nouveau numéro de cette particule (anciennement une permutation de l'ensemble  $\{1, 2, ..., i_{\beta}\}$ . On note  $k_i$  le notation minimise le score  $\sum_{\text{connexions } \alpha-\beta} |k_{\alpha}-k_{\beta}|$ . De manière générale, il est bien entendu hors de question de trouver la ou les renumérotations optimales en calculant tous les scores possibles puisqu'il existe N! permutations possibles sur un ensemble de N élements et que ce nombre croît très rapidement avec N. C'est la raison pour laquelle on fait fréquemment appel à des algorithmes moins lourds à mettre en œuvre, reposant sur des heuristiques approchées [98], comme l'algorithme de Cuthill-McKee. On rencontre également ce genre de problème de renumérotation des nœuds lorsque l'on souhaite optimiser des calculs aux éléments finis. Compte tenu de la nature bidimensionnelle de notre problème, nous avons pour notre part utilisé une méthode de renumérotation très simple : le domaine de simulation (c'est un rectangle) est découpé selon des bandes horizontales et les particules sont renumérotées en partant de la particule la plus à gauche dans la bande la plus haute jusqu'à la particule la plus à droite de la bande située tout en bas. La largeur des bandes est choisie de sorte à ce que deux particules dont les centres n'appartiennent pas à deux bandes adjacentes ne partagent pas de connexion mécanique.



Figure 2.3 : Pâte granulaire soumise à un chargement isotrope.

résistance hydrodynamique ou d'un élément du second membre de l'équation 2.19 est supérieure à une valeur donnée, la valeur en question étant elle aussi un paramètre du programme (on la choisit typiquement inférieure à 1%). Dans ce cas, le facteur multiplicatif appliqué au pas de temps précédent est inférieur à 1 et est d'autant plus petit qu'un élément de la matrice de résistance ou du grand vecteur résultant de la somme des grands vecteurs force de contact et force extérieure a connu une variation relative importante.

L'étape la plus coûteuse du code que nous avons développé en termes de temps de calcul est la factorisation de Cholesky de la matrice de résistance qu'on effectue tous les p pas de temps. Grâce à l'astuce que nous venons de mentionner en note de bas de page (renumérotation des particules), la matrice de résistance hydrodynamique est une matrice bande, la longueur des bandes étant d'ordre  $N^{1/2}$  à deux dimensions. En utilisant le fait que le facteur de Cholesky a la même structure que la matrice de résistance, on peut le calculer en un nombre d'opérations élémentaires d'ordre  $N^{5/2}$ . Cette factorisation étant l'étape cinétiquement déterminante de notre code de calcul, la complexité algorithmique asymptotique de ce dernier est en  $\mathcal{O}(N^{5/2})$ . Cette complexité est donc moins bonne que celle de la dynamique stokésienne accélérée par exemple, méthode qui tient compte des interactions de lubrification et des interactions hydrodynamiques à longue portée, puisque la complexité de celle-ci est en  $\mathcal{O}(N \ln N)$  [92]. Néanmoins, notre méthode est très robuste grâce à la factorisation de Cholesky. D'autre part, la comparaison des complexités n'a pas nécessairement grande signification compte tenu de la taille des systèmes considérés puisque cette comparaison n'a de sens que pour des valeurs suffisamment élevées de N.

## 2.3 Compactage isotrope

### 2.3.1 Système considéré et préparation de l'état initial

Nous avons choisi de commencer par étudier le comportement d'une pâte granulaire soumise à un chargement isotrope (*cf.* figure 2.3). Ce chargement est en effet le plus simple que l'on puisse imaginer. Précisons les caractéristiques de nos échantillons et la manière dont ils sont préparés. Tous les échantillons sont constitués de N (N = 224 en général<sup>7</sup>) grains circulaires

<sup>7.</sup> La plupart des simulations de compactage isotrope ont été effectuées avec 224 grains. Les calculs peuvent en effet être très longs lorsque le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  est très petit. Les simulations de chargement

dont les diamètres sont tirés aléatoirement de façon indépendante et uniforme entre 0.7a et a. Les grains sont supposés élastiques, de raideur normale  $k_N$ . Leur coefficient de frottement est noté  $\mu$  et dans toutes les simulations de pâtes granulaires effectuées,  $\mu$  est choisi égal à 0.3. Enfin, il existe des interactions de lubrification entre grains en quasi-contact ou en contact puisque l'assemblage est supposé baigner dans un liquide newtonien de viscosité  $\eta$ . Les interactions au niveau des connexions mécaniques sont celles qui ont été décrites dans la section 1.5 : la composante normale de l'interaction est la somme d'un terme de lubrification (1.28) et d'un éventuel (s'il y a contact) terme hertzien (1.22), tandis que la composante tangentielle est la somme d'un autre terme de lubrification (1.29) et d'un éventuel terme de frottement solide (1.25).

Le matériau est préparé de la manière suivante. Les grains sont d'abord disposés aux nœuds d'un réseau triangulaire. La distance entre deux nœuds voisins du réseau est fixée égale à 1.2 a. Chaque grain se voit ensuite attribué une certaine vitesse selon une loi gaussienne et suit une trajectoire rectiligne entre deux collisions. Ces dernières sont supposées élastiques. Après de nombreuses collisions, toute trace de l'ordre cristallin initial a disparu. On annule alors la vitesse de tous les grains et on équilibre le système – supposé sec – par dynamique moléculaire sous une pression P telle que  $k_N/P = 10^{4.8}$ . Cette procédure de fabrication est assez communément employée en simulation numérique discrète de matériaux granulaires secs et n'a absolument rien de spécifique aux pâtes. On obtient ainsi un état d'équilibre isotrope d'un matériau granulaire sec constitué de disques frottants. La dernière étape du processus de fabrication consiste à multiplier les coordonnées des centres de chaque grain par un facteur  $\Lambda$  strictement supérieur à 1 (généralement choisi égal à 1.1). Les différentes étapes de la construction d'un état initial sont schématisées sur la figure 2.4.

### 2.3.2 États d'équilibre isotrope

Une fois l'état initial préparé, on lui applique une pression P. On considère que le système a atteint l'équilibre mécanique lorsque la résultante des forces de contact sur chaque grain est égale à zéro avec une tolérance fixée à  $10^{-4}a^2P$  et que la valeur des éléments diagonaux du tenseur des contraintes de Cauchy est égale à P avec une erreur relative inférieure à  $10^{-4}$ . Les paramètres utilisés sont récapitulés dans le tableau 2.1. Lorsque la pâte granulaire est équilibrée, on peut ensuite procéder à diverses mesures : compacité, nombre de coordination, mobilisation du frottement au niveau des contacts entre grains, *etc.* Ces mesures étant entachées d'incertitudes statistiques, nous les répétons systématiquement sur cinq configurations d'équilibre fabriquées de la même façon à partir de cinq états initiaux différents. L'un des paramètres sans dimension les plus importants de notre modèle de pâtes granulaires lubrifiées est sans conteste le rapport  $h_{\min}/a$  qui fixe le degré de rugosité des particules de la pâte. Les résultats que nous présentons dans ce qut suit portent essentiellement sur l'influence de ce paramètre sur diverses quantités.

La figure 2.5 montre comme varie la compacité  $\Phi$  d'une pâte granulaire lubrifiée en fonction de l'échelle de rugosité  $h_{\min}/a$ . On constate que la compacité est une fonction décroissante de  $h_{\min}/a$ .  $\Phi$  ne varie pas énormément lorsque  $h_{\min}/a$  est compris entre  $10^{-5}$  et  $10^{-1}$ . L'évolution de la compacité est en revanche plus sensible lorsque le paramètre  $h_{\min}/a$  est inférieur à  $10^{-5}$ . Sont également reportées sur la figure la compacité moyenne et l'incertitude statistique

isotrope de pâtes comptant 224 grains avec un paramètre de rugosité égal à  $10^{-8}$  ont par exemple mis plusieurs semaines à aboutir sur un microprocesseur AMD Opteron cadencé à 2.2 GHz muni d'une mémoire cache de 1024 ko.

<sup>8.</sup> À deux dimensions, le rapport  $k_N/P$  correspond au nombre  $\kappa$  défini par l'équation 3.6. Compte tenu de la valeur numérique employée, le système considéré est assez proche de la limite rigide.



Figure 2.4 : Les quatre étapes de préparation d'un état initial comptant 224 grains. En haut à gauche : les grains sont initialement disposés sur une grille triangulaire. En haut à droite : état obtenu suite à un grand nombre de collisions élastiques entre les grains. En bas à gauche : matériau granulaire sec équilibré sous un chargement isotrope. En bas à droite : état initial utilisé dans les simulations, déduit de l'état précédent par une simple dilatation des positions des centres des particules.

N	Ø	$\mu$	$k_N/P$	$k_T/k_N$	$h_{\rm max}/a$	Λ
224	0.7a-a	0.3	$10^{4}$	0.5	0.5	1.1

Tableau 2.1 : Paramètres employés (sauf mention contraire) dans les calculs simulant l'application d'un chargement isotrope.

mesurée sur des assemblages granulaires secs constitués de grains, présentant les mêmes propriétés (à ceci près que nous considérerons que ces grains sont non frottants dans un certain nombre de calculs) que les pâtes granulaires lubrifiées dont il est question ici, équilibrés par dynamique moléculaire sous un chargement isotrope (la méthode numérique que nous avons employée est en tout point similaire à celle qui est utilisée dans la référence [13]). Ainsi, nous avons mesuré la fraction solide d'assemblages granulaires secs frottants (avec un frottement intergranulaire  $\mu = 0.3$ ) et non frottants (pour lesquels  $\mu$  est fixé à zéro). D'après les simulations effectuées sur des échantillons comptant 224 particules,  $\Phi_{sec, \mu=0.3} = 0.802 \pm 0.010$  tandis que  $\Phi_{\rm sec, \ \mu=0} = 0.836 \pm 0.002$ . La figure 2.5 montre que la compacité moyenne d'une pâte granulaire lubrifiée est systématiquement comprise entre ces deux valeurs, et ce quelle que soit la valeur prise par  $h_{\min}/a$ . Ce résultat est tout à fait logique. Le liquide newtonien lubrifiant les interstices entre grains, une pâte granulaire atteindra une compacité supérieure à celle qu'elle atteindrait si elle était dépourvue de liquide (matériau granulaire sec). D'autre part, de nombreuses expériences et simulations montrent que la compacité d'un assemblage de billes (ou de disques) ne présentant aucune trace d'ordre cristallin ne dépasse pas une valeur maximum qui correspond à la fraction volumique solide  $\Phi_{\rm RCP}$  d'un état de type RCP (pour random close packing) [99], dont les propriétés statistiques sont bien connues. Assez remarquablement, on peut aisément obtenir un état de ce type de manière numérique en équilibrant relativement rapidement (afin d'éviter l'apparition de tout germe cristallin) un ensemble initialement désordonné de billes rigides non frottantes sous un chargement isotrope [13]. Il s'ensuit que la compacité d'une pâte granulaire ne peut donc pas elle non plus dépasser  $\Phi_{\rm RCP}$ <sup>9</sup>, dont  $\Phi_{\rm sec, \mu=0}$  donne justement une bonne estimation. Néanmoins, la compacité d'une pâte granulaire lubrifiée tend à se rapprocher de celle d'un assemblage granulaire sec constitué de grains non frottants lorsque  $h_{\min}/a \rightarrow 0$ . Cette observation suggère qu'une pâte granulaire lubrifiée se comporte comme un assemblage granulaire sec fait de particules non frottantes lorsque la taille relative des aspérités des particules devient nulle.

La figure 2.6 conforte notre interprétation. Elle montre en effet que le nombre de coordination  $z^*$ , qui est égal au nombre moyen de contacts qu'un grain appartenant au squelette granulaire (défini comme l'ensemble des grains du système, à l'exclusion des grains que l'on qualifie de « flottants », c'est-à-dire des grains qui ne sont en contact avec aucun autre grain) du système entretient avec ses voisins, augmente à mesure que  $h_{\min}/a$  tend vers zéro, et semble tendre vers la coordinence d'un assemblage granulaire sec fait de disques non frottants. Comme nous l'avons expliqué dans le précédent paragraphe, un tel assemblage sec est très proche d'un état RCP. Or, on sait que ces assemblages sont isostatiques (nous reparlerons plus longuement de cette propriété dans le chapitre 3) et que leur nombre de coordination est donc égal à 4 à deux dimensions (la valeur légèrement inférieure mesurée sur nos assemblages de grains non frottants est due à la rigidité finie des disques employés dans les simulations).

On observe la même similitude entre pâtes granulaires lubrifiées et assemblages secs de grains non frottants sur la figure 2.7, qui montre comment varie la mobilisation du frottement intergranulaire, notée M, avec le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ . M est défini comme la valeur moyenne du rapport entre la valeur absolue de la force tangentielle de frottement et la force normale hertzienne au niveau de chaque contact. M est donc nécessairement inférieur ou égal au coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$ , ici choisi égal à 0.3. La mobilisation du frottement croît avec le paramètre de rugosité. On constate d'ailleurs qu'elle est légèrement supérieure à la mobilisation du frottement que l'on peut mesurer sur des assemblages granulaires secs frottants lorsque  $h \ge 10^{-4}$ . En revanche, la valeur de M s'approche de 0 lorsque  $h_{\min}/a$  est très petit. La nullité de M correspond au cas limite où tous les contacts sont non frottants, limite que l'on

<sup>9.</sup> La valeur de la compacité d'un état RCP, bien que présentant un certain caractère universel, dépend néanmoins fortement de la distribution granulométrique des particules de l'assemblage.



Figure 2.5 : Évolution de la compacité moyenne d'une pâte granulaire lubrifiée comptant 224 particules en fonction du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ . La ligne horizontale noire du bas et les deux traits pointillés l'entourant représentent la compacité moyenne et l'incertitude statistique associée d'un assemblage granulaire sec frottant dont les grains sont identiques à ceux de la pâte granulaire lubrifiée, tandis que la ligne horizontale du haut et les deux traits pointillés l'accompagnant correspondent au cas d'un assemblage granulaire sec constitué de billes non frottantes.



Figure 2.6 : Évolution de la coordinence  $z^*$  du squelette granulaire d'une pâte granulaire lubrifiée comptant 224 particules en fonction du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ . La ligne horizontale noire du bas et les deux traits pointillés l'entourant représentent la coordinence moyenne et l'incertitude statistique associée d'un assemblage granulaire sec frottant dont les grains sont identiques à ceux de la pâte granulaire lubrifiée, tandis que la ligne horizontale du haut et les deux traits pointillés l'accompagnant correspondent au cas d'un assemblage granulaire sec constitué de billes non frottantes.



Figure 2.7 : Évolution de la mobilisation du frottement  $M \equiv \langle |F_T|/F_N \rangle$  d'une pâte granulaire lubrifiée comptant 224 particules en fonction du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ . La ligne horizontale noire et les deux traits pointillés l'entourant représentent la mobilisation du frottement moyenne et l'incertitude statistique associée d'un assemblage granulaire sec frottant dont les grains sont identiques à deux de la pâte granulaire lubrifiée.

ne peut atteindre qu'en considérant des systèmes constitués de grains non frottants.

Les résultats représentés sur les figures 2.5, 2.6 et 2.7 suggèrent donc que les pâtes granulaires lubrifiées se comportent de manière analogue aux assemblages secs de grains non frottants lorsque le paramètre de rugosité tend vers zéro, c'est-à-dire lorsque l'on utilise la véritable expression des forces de lubrification 1.26 et 1.27, même pour des valeurs de plus en plus petites de la taille de l'interstice entre grains. C'est un résultat intéressant, que l'on peut assez facilement expliquer. Dans le cas parfaitement lisse, la force de lubrification tangentielle (équation 1.27) est en effet négligeable devant la force de lubrification normale (équation 1.26) lorsque  $h \to 0$ . Dit autrement, un mouvement relatif normal de deux billes séparées par une couche de lubrifiant est beaucoup plus pénalisant qu'un mouvement relatif tangentiel. Le modèle que nous avons adopté (équations 1.28 et 1.29) coupe la divergence vers l'infini du rapport entre la composante normale et la composante tangentielle de la force de lubrification lorsque  $h \to 0$ . Néanmoins, la limite de ce rapport devient de plus en plus grande lorsque le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ tend vers 0. Le rapport entre la composante normale et la composante tangentielle de la force de contact est égal au rapport précédent et tend donc à devenir de plus en plus grand à mesure que  $h_{\min}/a$  diminue. Tout se passe donc un peu comme si une pâte granulaire lubrifiée se comportait comme un assemblage granulaire sec constitué de grains dont le coefficient de frottement effectif dépendrait de la valeur de  $h_{\min}/a$  et tendrait vers 0 lorsque  $h_{\min}/a \to 0^{10}$ . Ce raisonnement est corroboré par des expériences, réalisées à l'aide d'un MEMS (microelectromechanical system), permettant de mesurer le champ de contraintes au niveau d'un contact avec une bonne résolution spatiale [100]. Grâce à ce dispostif, on peut en effet montrer que la répartition des contraintes au niveau d'un contact entre une sphère en verre et un plan élastomère lubrifié par une goutte de glycérol est quasiment identique à celle d'un contact sec et glissant présentant la

<sup>10.</sup> Cette image ne doit toutefois pas être prise au pied de la lettre comme en témoigne la figure 2.7, sur laquelle on peut constater que la mobilisation du frottement au sein d'une pâte granulaire est légèrement supérieure à celle que l'on observe sur un assemblage sec de rugosité modérée dont les grains ont même coefficient de frottement intergranulaire.



Figure 2.8 : Évolution de la pression transmise par les contacts  $P_{\rm cont}$  divisée par la pression totale P en fonction du temps t divisé par le temps total de la simulation T. À gauche : variation de  $P_{\rm cont}/P$  au cours d'un chargement isotrope appliqué sur cinq configuratations initiales différentes de 224 grains avec  $h_{\rm min}/a = 0.01$ . À droite : variation de  $P_{\rm cont}/P$  au cours d'un chargement isotrope appliqué à une seule configuration initiale de 224 grains avec  $h_{\rm min}/a = 10^{-1}$ ,  $10^{-2}$ ,  $10^{-3}$ ,  $10^{-4}$  et  $10^{-5}$  (courbes allant du rose au rouge en passant par le orange).

même géométrie sphère/plan.

Naturellement, du fait de la pénalisation croissante de tout mouvement relatif normal entre deux grains lorsque le paramètre de rugosité tend vers 0, il est de plus en plus difficile d'équilibrer une pâte granulaire lubrifiée. On le voit bien sur la figure 2.8 qui montre comment évolue le rapport  $P_{\rm cont}/P$  entre la pression transmise par les contacts et la pression totale imposée en fonction du temps t adimensionné par la durée totale T de la simulation (on rappelle qu'une des conditions pour que le calcul s'achève est que  $P_{\rm cont}$  soit égal à P à  $10^{-4}$  près). Le graphe de droite de la figure 2.8 montre qu'à mesure que le paramètre de rugosité décroît, la proportion du temps de simulation pendant lequel  $P_{\rm cont}/P$  passe d'une valeur proche de 0 à une valeur proche de 1 augmente très nettement. Le durée totale T de la simulation augmente également de manière très significative pour un état initial donné lorsque le paramètre de rugosité diminue (voir le tableau 2.2; les valeurs indiquées sont très dépendantes de l'état initial choisi mais la tendance mise en évidence est la même indépendamment du choix de la configuration de départ). Les cinq expériences dont le comportement est représenté sur la partie gauche de la figure 2.8 ne diffèrent que par l'état initial. Ceci montre donc que même lorsque tous les paramètres de la simulation sont les mêmes, l'évolution de  $P_{\text{cont}}/P$  en fonction de t/T peut sensiblement différer d'un état initial à l'autre. Ce point nous amène à discuter de l'influence de l'état initial sur les résultats obtenus et restitués dans cette section. S'il se peut que l'observation que nous venons de faire sur la consolidation de la pression de contact en fontion du temps adimensionné t/T ne soit qu'un effet de taille finie, on peut se poser plus largement la question de l'influence du mode de fabrication des échantillons sur leur comportement sous chargement isotrope. Celle-ci s'avère cruciale. En effet si, au lieu de considérer que les disques ont un coefficient de frottement  $\mu = 0.3$ au cours de la troisième étape de fabrication d'échantillons initiaux (compactage de l'assemblage sec sous une pression P), on impose par exemple que les grains soient non frottants au cours de cette seule étape et que l'on soumet les états initiaux ainsi obtenus à un chargement isotrope (en prenant soin de rétablir la valeur de  $\mu$  à 0.3), on constate que les états d'équilibre obtenus pour une pâte granulaire lubrifiée diffèrent très nettement de ceux que nous avons précédemment

$h_{\min}/a$	$10^{-2}$	$10^{-3}$	$10^{-4}$	$10^{-5}$	$10^{-6}$	$10^{-7}$	$10^{-8}$
$TP/\eta$	$4.69  imes 10^2$	$2.91  imes 10^2$	$1.71 \times 10^2$	$2.08 \times 10^3$	$2.45 \times 10^3$	$2.46 \times 10^4$	$2.41 \times 10^5$

Tableau 2.2 : Durée adimensionnée de la simulation ayant permis d'équilibrer un échantillon isotrope sous une pression P en fonction du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ .

présentés, notamment en ce qui concerne leur compacité à l'équilibre mécanique, quelle que soit la valeur de  $h_{\min}/a$ . La compacité mesurée est en effet systématiquement égale à celle de l'état RCP, aux incertitudes statistiques près. En revanche, le nombre de coordination et la mobilisation du frottement sont assez proches de ceux que l'on mesure lorsque les grains sont considérés comme frottants durant la fabrication des états initiaux. En somme, lorsque l'on part d'un état initial RCP « dilaté », on obtient un état qui n'est pas de type RCP, mais qui en a néanmoins la compacité. Cet exemple montre encore une fois l'importance du procédé de fabrication sur le comportement d'un matériau granulaire ou présentant des caractéristiques voisines de ce genre de matériaux. Il atteste également que compacité et coordinence ne sont pas nécessairement corrélés, un résultat déjà mis en évidence dans [13].

Nous avons vu l'influence que peut avoir la troisième étape du procédé de fabrication des échantillons initiaux sur le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée soumise à un chargement isotrope. On peut aussi se demander que lest l'effet du paramètre de dilatation  $\Lambda$  dont il est fait usage dans la quatrième et dernière étape. D'autre part, la fabrication de l'état initial n'est pas l'unique facteur susceptible d'affecter les résultats que nous avons obtenus. Il est également légitime de s'interroger sur la « robustesse » du modèle (exprimé à travers les équations 1.28 et 1.29) que nous avons choisi. Le paramètre  $h_{\max}/a$  joue-t-il un rôle important dans le comportement du système? Aurait-on pu adopter un autre type de coupure que le prologement linéaire (lorsque  $h \leq h_{\min}$ ) que nous avons choisi? Quel est l'effet de la taille N du système? C'est pour répondre à ces questions que nous avons procédé à des simulations complémentaires dans lesquelles nous avons fait varier ces différents facteurs. Il s'avère qu'aux incertitudes statistiques près, les quantités mesurées — mis à part la mobilisation du frottement qui semble un peu plus affectée par ce paramètre — à l'issue de simulations pour les quelles  $\Lambda$  est pris égal à 1.2 sont identiques à celles mesurées lorsque  $\Lambda = 1.1$ , et ce pour  $h_{\min}/a = 10^{-3}$  et  $10^{-5}$ . La valeur de  $h_{\rm max}/a$  semble également ne pas avoir grande importante : aux incertitudes statistiques près, les quantités mesurées – y compris la mobilisation du frottement – sont égales lorsque  $h_{\rm max}/a = 0.5$  et  $h_{\rm max}/a = 0.75$ . Enfin, nous avons effectué des simulations pour lesquelles la coupure de l'expression des coefficients de lubrification, au lieu d'être linéaire lorsque  $0 \le h \le h_{\min}$ , est constante, avec  $h_{\min}/a = 10^{-3}$  et  $h_{\min}/a = 10^{-5}$ . Ces calculs montrent que la compacité  $\Phi$  atteinte à l'équilibre mécanique n'est pas sensible à la forme de la coupure; en revanche, le nombre de coordination  $z^*$  et la mobilisation du frottement M le sont un peu (voir le tableau 2.3). La façon dont les interactions de lubrification sont coupées a donc un léger impact sur le comportement d'une pâte. Néanmoins, cette perturbation reste modérée et devient imperceptible lorsque le paramètre de rugosité est suffisamment grand (supérieur à  $10^{-3}$ ). Enfin, comme on pouvait s'y atteindre compte tenu de ce que l'on sait sur les assemblages granulaires secs [101], le nombre de grains N affecte légèrement les résultats obtenus. En particulier, la compacité  $\Phi$  d'une pâte granulaire équilibrée sous un chargement isotrope est une fonction légèrement croissante de N: des simulations de pâtes comptant 896 grains effectuées avec des valeurs de  $h_{\min}/a$  comprises entre  $10^{-1}$  et  $10^{-7}$  le montrent clairement. D'autre part, les résultats obtenus sont plus précis lorsque la taille du système augmente. Malheureusement, comme nous l'avons expliqué un peu avant, les temps de calcul deviennent prohibitifs pour ces systèmes lorsque  $h_{\min}/a$  est inférieur ou égal à  $10^{-6}$ .

	type de coupure	$\Phi$	$z^*$	Μ
$\frac{h_{\min}}{a} = 10^{-3}$	linéaire constante	$\begin{array}{c} 0.806 \pm 0.010 \\ 0.806 \pm 0.010 \end{array}$	$3.30 \pm 0.03$ $3.28 \pm 0.02$	$\begin{array}{c} 0.144 \pm 0.007 \\ 0.145 \pm 0.006 \end{array}$
$\frac{h_{\min}}{a} = 10^{-5}$	linéaire constante	$\begin{array}{c} 0.809 \pm 0.009 \\ 0.809 \pm 0.010 \end{array}$	$3.41 \pm 0.03$ $3.34 \pm 0.04$	$\begin{array}{c} 0.123 \pm 0.004 \\ 0.106 \pm 0.007 \end{array}$

Tableau 2.3 : Effet de la forme de la coupure des interactions de lubrification sur les quantités mesurées une fois la pâte granulaire équilibrée de manière isotrope, pour deux valeurs différentes du paramètres de rugosité  $h_{\min}/a$ .

## 2.4 Discussion

Après avoir évoqué plusieurs méthodes de simulation numérique de pâtes granulaires, nous avons exposé notre propre technique, d'essence quasi-statique, qui repose sur l'écriture de l'équilibre des forces et des moments sur chaque grain, ainsi que sur celle de l'équilibre des éléments diagonaux du tenseur des contraintes de Cauchy. La force (et le moment) que ressent chaque grain est la somme de forces (et de moments) transmis au niveau des connexions mécaniques présentes entre certaines paires de grains. Ces connexions mécaniques sont le siège d'interactions de contact et de lubrification. Le problème que l'on doit résoudre est donné par l'équation 2.19. Les forces et moments de lubrification au niveau d'une connexion mécanique dépendant linéairement des vitesses des grains impliqués dans ladite connexion, le grand vecteur force de lubrification  $\vec{\mathcal{F}}^{\text{lub}}$ , uniquement fonction de la configuration  $\vec{\mathcal{X}}$  du système, peut s'écrire comme l'opposé du produit d'une matrice, appelée matrice de résistance hydrodynamique (creuse, symétrique et définie positive), par le grand vecteur vitesse. Dès lors, du point de vue numérique, le problème se ramène à la résolution d'un grand système linéaire, que nous avons traité à l'aide de la méthode du gradient conjugué préconditionné.

À l'aide de cette technique de simulation, nous nous sommes ensuite intéressés à l'effet de l'application d'un chargement isotrope sur une pâte granulaire. Nos résultats montrent que l'un des paramètres de notre modèle, le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ , a une grande influence sur le comportement des pâtes granulaires lubrifiées. En particulier, la compacité d'une pâte granulaire équilibrée sous un chargement isotrope est une fonction décroissante de  $h_{\min}/a$ . En outre, les calculs numériques effectués suggèrent fortement qu'une pâte granulaire lubrifiée faite de grains frottants se comporte comme un assemblage sec de grains non frottants (constitué des mêmes grains que ceux formant la pâte, à ceci près que leur coefficient de frottement est nul). Cette présomption s'appuie sur le fait que la compacité  $\Phi$  d'une pâte semble tendre vers  $\Phi_{\rm RCP}$ lorsque le paramètre de rugosité tend vers zéro, que la coordinence de son squelette granulaire semble également tendre vers celle d'un assemblage granulaire de type RCP dans les mêmes conditions et que la mobilisation du frottement décroît notablement lorsque  $h_{\min}/a$  décroît également.

Dans ces conditions, il est tentant de modéliser une pâte granulaire lubrifiée de manière encore plus épurée que nous ne l'avons fait jusqu'à présent. Au vu des résultats que nous venons de mentionner, il semble séduisant de considérer qu'une telle pâte, lorsqu'elle est sollicitée de manière quasi-statique, peut être considérée comme un assemblage granulaire *sec* faits de particules non frottantes. Cette simplification est très attrayante du point de vue numérique puisqu'on sait bien mieux simuler des matériaux granulaires secs que des pâtes granulaires (de nombreuses méthodes éprouvées, chacune ayant leurs avantages et leurs inconvénients, comme la dynamique moléculaire, la dynamique des contacts, ou encore les méthodes event-driven sont par exemple mentionnées dans [2]). Néanmoins, il convient de garder à l'esprit que les caractéristiques géométriques et mécaniques d'une pâte granulaire lubrifiée se trouvant dans un état d'équilibre isotrope ne sont très proches de celles d'un assemblage granulaire sec non frottant fait des mêmes grains (à ceci près que  $\mu = 0$ ) que pour des valeurs extrêmement petites du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  (inférieures à  $10^{-9}$ ). Or, si l'on considère que la valeur du paramètre de rugosité donne un ordre de grandeur de la taille des aspérités à la surface des billes, des valeurs aussi faibles de  $h_{\min}/a$  ne sont pas physiques. Les résultats de mesure de la rugosité de différentes billes fréquemment utilisées en rhéologie présentés dans l'article [75] montrent que la taille des aspérités est typiquement comprise entre un centième et un millième de rayon des grains, ce qui correspondrait donc à un paramètre de rugosité  $h_{\min}/a \gtrsim 10^{-3} \, {}^{11}$ . Dans cette gamme de valeur du paramètre de rugosité, les quantités mesurées sur des états d'équilibre isotrope de pâtes granulaires lubrifiées — compacité, coordinence, mobilisation du frottement — sont éloignées de celles correspondant à un assemblage granulaire sec constitué de grains non frottants. Il ne faut donc peut-être pas fonder de grands espoirs sur une modélisation dans laquelle une pâte granulaire lubrifiée est assimilée à un assemblage sec de grains non frottants. Mais cette approche mérite tout de même d'être tentée, et c'est ce que nous allons faire dans la prochaine partie de ce mémoire (partie II). Nous verrons alors que même si les propriétés des assemblages granulaires secs non frottants ne présentent qu'un intérêt assez limité du point de vue de l'étude des procédés de compactage par exemple, le comportement de ces assemblages est néanmoins intéressant et assez surprenant.

Finalement, les différentes quantités que nous avons mesurées ne sont pas très sensibles au paramètre de rugosité dans sa plage de valeurs physiques possibles (disons entre  $10^{-3}$  et  $10^{-1}$ ), pas plus qu'elles ne le sont aux détails du modèle de lubrification utilisé (du moins dans la plage de valeurs susmentionnée du paramètre de rugosité) ou au facteur de dilatation initiale  $\Lambda$ . Nous explorerons plus avant les propriétés des pâtes granulaires lubrifiées qui peuvent être déduites de notre modèle dans la partie III et nous verrons alors que ces propriétés peuvent effectivement différer de celles des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants pour des valeurs physiques du paramètre de rugosité.

<sup>11.</sup> Des métrologues australiens travaillant pour le compte de l'Australia's Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation sont parvenus à fabriquer des boules de silicium d'environ 93 mm de diamètre telles que la différence entre le rayon d'une sphère passant par le haut des aspérités de la boule de silicium et celle d'une sphère passant par le bas des aspérités de la boule est de 35 nm [102]. Leur but est en effet de construire un étalon pour le kilogramme encore plus précis que le cylindre en alliage platine-iridium entreposé dans le pavillon de Breteuil qui joue aujourd'hui ce rôle, d'où cette recherche effrénée de précision. Cette sphère a donc un paramètre de rugosité d'ordre  $10^{-7}$  et on peut difficilement espérer faire mieux...

## Deuxième partie

# Assemblages secs de grains non frottants

## Chapitre 3

# Comportement des assemblages granulaires constitués de grains non frottants

Les empilements désordonnés de sphères <sup>1</sup> très rigides et non frottantes représentent l'archétype des matériaux amorphes constitués d'un ensemble de particules insensibles à l'agitation thermique, avec des interactions de très courte portée. Les matériaux granulaires [103, 37, 104, 38, 39], les suspensions concentrées [105, 17] et certains verres [106] sont des exemples de tels matériaux.

Les empilements de sphères suscitent la curiosité depuis plusieurs siècles. Il existe en particulier une très ancienne tradition d'étude de leur propriétés géométriques. En 1610, Johannes Kepler énonça sa fameuse conjecture<sup>2</sup> qui affirme que l'empilement cubique à faces centrées (de densité  $\pi/(3\sqrt{2}) = 0.7404...$ ) constitue l'empilement le plus dense possible dans l'espace tridimensionnel [108]. Cette conjecture ne fut démontrée qu'en 1997 par Thomas C. Hales. Un autre problème célèbre est celui des treize sphères (*kissing number problem* en dimension 3) dont l'origine remonte à 1694 et à un désaccord entre Isaac Newton et David Gregory : Newton pensait qu'un maximum de douze sphères identiques pouvaient être en contact avec une sphère centrale de même rayon, tandis que Gregory croyait qu'il était possible d'en placer treize. Il fallut attendre 1953 pour que Kurt Schütte et Bartel Leendert van der Waerden prouvent de manière rigoureuse que Newton avait raison [108]. Ces quelques exemples montrent que la résolution des problèmes d'empilements peut être subtile en dépit de leur apparente simplicité. Signalons enfin que ce type de problèmes entretient des liens profonds avec nombre de branches des mathématiques [109] : réseaux en dimension arbitraire, théorie des nombres, théorie des codes, *etc.* 

Bien que les interactions microsopiques au sein de matériaux réels puissent être d'origines très diverses (colloïdale, hydrodynamique, élastique...), l'encombrement stérique et la géométrie de l'assemblage ont une influence plus ou moins prépondérante dans le comportement de ces matériaux. Nous en voulons pour preuve qu'en dépit du caractère épuré du modèle des assem-

<sup>1.</sup> Dans ce manuscrit, le terme sphère désigne une sphère pleine.

<sup>2.</sup> L'histoire – passionnante d'ailleurs – de cette conjecture et de problèmes connexes est racontée de manière très vivante dans l'ouvrage [107].

blages granulaires non frottants (c'est-à-dire constitués des grains non frottants), ces systèmes peuvent être considérés comme des pâtes granulaires idéalement lubrifiées (cf. chapitre 2) et semblent donc en mesure de saisir certaines propriétés des supensions très denses de particules athermiques et non colloïdales.

Le comportement sous sollicitation quasi-statique des assemblages granulaires non frottants résulte des seuls effets de l'exclusion stérique et de la géométrie. À l'équilibre, dans la limite des billes parfaitement rigides, ce système présente deux propriétés tout à fait remarquables [51]. D'une part, lorsque le chargement est isotrope, l'énergie potentielle est proportionnelle à la déformation volumique, l'assemblage réalise un maximum local de densité dans l'espace des configurations et s'identifie, si la méthode d'assemblage est suffisamment rapide pour qu'aucune zone cristalline n'apparaisse, à un empilement dense aléatoire de type *random close packing* (RCP) dont les propriétés statistiques sont bien connues, de compacité proche de 64% lorsque toutes les billes ont même taille. D'autre part, le réseau des contacts est isostatique, ce qui signifie que, à forces extérieures imposées, la seule donnée de la position des grains suffit à déterminer de manière univoque l'intensité de la force au niveau de chaque contact entre particules.

Les empilements considérés sont des systèmes idéaux et ne peuvent donc faire l'objet d'études expérimentales<sup>3</sup>. De plus, dans les matériaux granulaires secs réels, il est évident que les particules frottent lorsqu'elles sont en contact. Néanmoins, comme nous venons de le rappeler, les grains non frottants permettent de modéliser le comportement d'une suspension très concentrée sollicitée de manière quasi-statique. Cette observation justifie une étude détaillée du comportement mécanique des empilements désordonnés de sphères très rigides et non frottantes. En effet, si de nombreux travaux ont été consacrés aux propriétés rhéologiques des assemblages granulaires frottants (nous avons donné un aperçu de ces propriétés en régime quasi-statique dans la section 1.3 et le lecteur intéressé par les écoulements denses pourra consulter avec profit les références [79, 111]), les études portant sur les propriétés des assemblages non frottants sont quant à elles beaucoup plus rares [112, 113, 13, 14, 15]. La suite de ce chapitre est consacrée aux travaux que j'ai effectués sur ces systèmes, travaux qui ont fait l'objet de deux publications [114, 115]. Ces deux articles ont respectivement trait au comportement d'assemblages secs non frottants en régime liquide (lorsque le matériau s'écoule de manière stationnaire sous l'effet d'une contrainte de cisaillement) et en régime solide (lorsque le matériau parvient à atteindre l'équilibre mécanique après application d'un chargement mécanique extérieur).

## 3.1 Matériau modèle et simulations numériques

#### 3.1.1 Système et interactions

Le système considéré est constitué de N grains sphériques identiques, de diamètre a et de masse m, enfermés dans une boîte de simulation ayant la forme d'un parallélépipède rectangle. Les longueurs des trois côtés de la boîte, suivant les trois axes de coordonnées, sont notées  $(L_{\alpha})_{1 \leq \alpha \leq 3}$ . Elles sont susceptibles d'évoluer dans le temps en réponse à une sollicitation externe exercée sur le matériau. Les trois côtés de la boîte de simulation sont assujettis à rester deux à deux orthogonaux et aucune rotation globale de la boîte n'est autorisée. Enfin, on note  $\Omega \equiv L_1 L_2 L_3$  le volume de la boîte.

<sup>3.</sup> Néanmoins, certaines mousses humides se comportent de manière analogue aux empilements que nous considérons [110]

Les billes sont faites d'un matériau supposé élastique, linéaire et isotrope, dont le module d'Young est noté E et le coefficient de Poisson  $\nu$ . Le poids des grains est négligé. Lorsque deux billes sont en contact, la force (comptée positivement lorsqu'elle est répulsive) qu'exerce l'une sur l'autre est supposée être la somme de deux termes purement normaux (rappelons que nous ne souhaitons pas tenir compte d'un éventuel frottement solide entre grains). Le premier terme est lié à la déflexion élastique h du contact. Son expression, classique, est donnée par la loi de Hertz (voir section 1.5.1) :

$$F_N^e = \frac{E}{3}\sqrt{a}h^{3/2}$$
(3.1)

Ici,  $\tilde{E} \equiv E/(1-\nu^2)$ . La raideur tangente  $K_N$  associée à l'équation 3.1 vaut :

$$K_N = \frac{\mathrm{d}F_N^e}{\mathrm{d}h} = \frac{\tilde{E}}{2}\sqrt{a}h^{3/2} = \frac{3^{1/3}}{2}\tilde{E}^{2/3}a^{1/3}(F_N^e)^{1/3}$$
(3.2)

Les assemblages granulaires n'étant pas des systèmes conservatifs, on introduit une seconde composante de la force normale. Cette composante est supposée de type visqueux et s'oppose au mouvement relatif normal  $\delta V_N = \dot{h}$  de deux billes en contact. Aucune expression simple fondée physiquement n'étant connue à ce jour, on trouve différentes formules dans la littérature. Nous avons pour notre part choisi d'utiliser l'expression qui suit [13] :

$$F_N^v = \zeta \sqrt{2mK_N} \delta V_N = \zeta (m\tilde{E})^{1/2} (ah)^{1/4} \delta V_N$$
(3.3)

Le coefficient  $\zeta$  est supposé constant. La justification de l'équation 3.3 est la suivante : bien que le coefficient d'amortissement varie dans le temps, il reste en permanence égal à une certaine fraction  $\zeta \leq 1$  de la valeur qu'aurait le coefficient d'amortissement critique si le système considéré était constitué de deux masses m attachées aux deux extrémités d'un ressort linéaire de raideur  $K_N$ . L'équation 3.3 présente en outre l'avantage de conduire à un coefficient de restitution normal  $e_N$  indépendant de la vitesse initiale lors d'un choc binaire, et ce malgré la non-linéarité de l'équation différentielle régissant la dynamique du choc [116]. En résolvant numériquement l'équation régissant un choc binaire, on peut trouver la relation entre  $e_N$  et  $\zeta$ (voir la figure 3.1). Toutefois, l'équation 3.3 n'étant pas basée sur de véritables arguments physiques, il convient d'étudier de manière détaillée l'influence de  $\zeta$  sur les résultats obtenus. Nous montrerons, en nous appuyant sur des simulations effectuées avec  $\zeta = 0.98$  ( $e_N = 3.3 \times 10^{-3}$ ),  $\zeta = 0.55$  ( $e_N = 0.17$ ),  $\zeta = 0.25$  ( $e_N = 0.49$ ) et  $\zeta = 0.05$  ( $e_N = 0.87$ ), que cette influence est négligeable dans la situtation qui nous intéresse. Ainsi, notre méconnaissance de la modélisation des processus dissipatifs régnant au sein des matériaux granulaires ne porte pas à conséquence.

D'après notre modèle, la force normale  $F_N = F_N^e + F_n^v$  entre deux grains peut parfois être négative (donc attractive); les simulations numériques montrent que cette situation est d'autant plus rare que le système est proche de l'équilibre mécanique. Cette caractéristique du modèle n'a aucun impact sur les résultats obtenus comme nous avons pu nous en apercevoir en remplaçant  $F_N$  par max $(F_N, 0)$  dans plusieurs simulations. Enfin, la rotation des billes n'est pas prise en compte dans cette étude puisque les forces de contact considérées sont purement normales et n'induisent donc pas de couples par rapport aux centres des grains.

Les équations newtoniennes du mouvement des particules sont résolues à l'aide d'un schéma explicite de discrétisation couramment employé en dynamique moléculaire, le schéma de Gear prédicteur-correcteur d'ordre 3 [117]. Le pas de temps utilisé est une petite fraction du temps caractéristique des oscillations au niveau d'un contact :

$$\Delta t = \delta \sqrt{\frac{m}{K_N}} \quad \text{avec } \delta \ll 1 \tag{3.4}$$


Figure 3.1 : Coefficient de restitution normal  $e_N$  (en rouge) en fonction de  $\zeta$  pour le modèle de contact défini par les équations 3.1 et 3.3. La courbe verte dessinée en traits pointillés représente la valeur du coefficient de restitution pour le modèle de contact le plus simple possible, pour lequel raideur et coefficient d'amortissement visqueux sont constants.

### 3.1.2 Préparation de l'état initial

Chaque essai numérique porte systématiquement sur un matériau qui se trouve initialement dans un état RCP isotrope. La procédure employée pour préparer les configurations initiales est appelée « procédure O » (comme « origine »). Elle comprend plusieurs étapes que nous allons brièvement décrire. Dans un premier temps, on place les grains sur un réseau cubique à faces centrées et on fixe la compacité du système à 45% (compacité inférieure à celle de la transition solide d'un gaz de sphères dures [118]). Chaque grain se voit ensuite assigné une vitesse aléatoire tirée selon une loi gaussienne et on laisse le système évoluer de manière conservative à l'aide d'une méthode de simulation pilotée par les événements (dite event-driven) [119] similaire à celle utilisée pour étudier un fluide de sphères dures [62, 118]. Après un nombre de chocs grand devant le nombre de particules, tout ordre spatial disparaît (on peut le vérifier en calculant la fonction de corrélation de paires  $q_2(r)$ ). La vitesse de chaque grain est alors fixée à zéro et l'assemblage est soumis à une pression P. On considère dès lors que les forces de contacts sont données par les équations 3.1 et 3.3 et la compression est simulée par dynamique moléculaire. La taille de la boîte diminue jusqu'à ce que le système atteigne l'équilibre mécanique, lorsque les composantes diagonales  $\sigma_{\alpha\alpha}$  du tenseur des contraintes de Cauchy sont égales à la pression P imposée. Numériquement, on considère que le système a atteint l'équilibre mécanique lorsque la résultante des forces sur chaque grain est égale à zéro, avec une tolérance égale à  $10^{-4}a^2P$ , que chaque composante diagonale du tenseur des contraintes de Cauchy est égale à P avec une erreur relative inférieure à  $10^{-4}$ , et que l'énergie cinétique par particule est inférieure à  $10^{-8}a^3P$ . Cette procédure permet d'obtenir des configurations RCP<sup>4</sup>. Cette procédure de fabrication est en tout point analogue aux trois premières étapes de la méthode exposée dans la section 2.3, à ceci près que le système considéré dans ce chapitre est tridimensionnel.

<sup>4.</sup> À trois dimensions, la monodispersité de l'assemblage n'entraîne pas la cristallisation du système pourvu que la compression soit suffisamment rapide [13].

# 3.1.3 Analyse dimensionnelle et limite géométrique macroscopique

Le but de ce chapitre est de déterminer les lois constitutives et la microstructure des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants dans la limite quasi-statique, c'est-à-dire de trouver des relations entre des grandeurs intensives globales comme les contraintes, la densité ou encore le taux de déformation, dans la limite des grands systèmes  $N \to +\infty$ . On s'attend à ce que les résultats obtenus soient indépendants du type de sollicitation mécanique appliquée, pourvu que le matériau compte suffisamment de particules. Ceci va nous amener à étudier les effets de taille finie et la façon dont ils disparaissent à mesure que la taille du système augmente. D'autre part, les grandeurs mesurées devant être spatialement uniformes pour être exploitées, nous serons amenés à vérifier l'absence de localisation au sein du matériau.

Si l'on suppose que le matériau reste homogène lorsqu'il est sollicité, l'analyse dimensionnelle montre que toutes les variables d'état sans dimension, comme la compacité  $\Phi$  par exemple, ne dépendent que des quatre nombres purs présentés dans la section 1.6.1. Le premier est le niveau d'amortissement visqueux  $\zeta$ . Du fait de la nature dynamique de ce paramètre, on s'attend à ce que sa valeur n'ait que très peu d'impact sur le comportement du système dans la limite quasi-statique [78]. Néanmoins, il convient de choisir  $\zeta > 0$  puisque les assemblages granulaires sont des systèmes dissipatifs<sup>5</sup>. Le deuxième paramètre sans dimension est le nombre inertiel

$$I = \dot{\gamma} \sqrt{\frac{m}{aP}} \tag{3.5}$$

avec  $\dot{\gamma}$  le taux de cisaillement appliqué au matériau. On rappelle que la limite  $I \to 0$  correspond à la limite quasi-statique. Nous explorerons des valeurs de I allant de  $1 \times 10^{-5}$  à 0.56 pour l'étude du régime liquide tandis que dans le régime solide, nous forcerons I à ne pas dépasser  $10^{-4}$  au moyen d'un contrôle sur le taux de déformation de la boîte de simulation [13, 14]. Le troisième nombre sans dimension est le paramètre de raideur

$$\kappa = \left(\frac{\tilde{E}}{P}\right)^{2/3} \tag{3.6}$$

On rappelle que la limite rigide correspond à  $\kappa \to +\infty$ . Supposant que les billes sont en verre, on choisit E = 70 GPa et  $\nu = 0.3$ . Avec ce jeu de paramètres, des pressions égales à P = 10 kPa et P = 100 kPa correspondent à des paramètres de raideur respectivement égaux à  $\kappa_1 \simeq 39000$ et  $\kappa_2 \simeq 8400$ . On sait que ces valeurs de  $\kappa$  sont suffisamment grandes pour approcher la limite des grains rigides [13], ce qui n'est pas le cas lorsque  $\kappa$  est de l'ordre de  $10^2$  : quand le paramètre de raideur est aussi petit, les propriétés du réseau des contacts diffèrent nettement de celles observées dans le cas de grains parfaitement rigides [14] et il y a de grandes chances pour que cette différence ait des répercussions sur le comportement du matériau sous sollicitation. Enfin, le quatrième et dernier paramètre sans dimension est le nombre de grains N (des effets de taille finie sont toujours possibles et nous verrons qu'on en observe effectivement). Les systèmes étudiés comptent typiquement quelques milliers de grains. Les plages de valeurs des quatre nombres sans dimension que nous avons explorées sont regroupées dans les tableaux 3.1 (pour le régime liquide) et 3.2 (pour le régime solide).

La situation qui nous intéresse est la triple limite  $I \to 0$  (limite quasi-statique),  $\kappa \to +\infty$  (limite rigide) et  $N \to +\infty$  (limite macroscopique). Dans cette limite, la microstructure et le comportement des assemblages ne doivent dépendre que de la seule géométrie de l'assemblage. C'est la raison pour laquelle nous avons décidé d'appeler cette triple limite la *limite géométrique* 

<sup>5.</sup> La limite  $\zeta \to 0$  est probablement singulière.

N	Ι	$\kappa$	ζ
256 - 19652	$1 \times 10^{-5} - 0.56$	$\kappa_1 = 3.9 \times 10^4$ ; $\kappa_2 = 8.4 \times 10^3$	0.05 - 0.98

Tableau 3.1 : Plages de valeurs explorées pour l'étude du régime liquide.

N	Ι	$\kappa$	ζ
$\{1372,4000,8788\}$	$< 10^{-4}$	$\kappa_1 = 3.9 \times 10^4$ ; $\kappa_2 = 8.4 \times 10^3$	0.98

Tableau 3.2 : Plages de valeurs explorées pour l'étude du régime solide.

macroscopique. Le but de ce chapitre est d'étudier les propriétés des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants dans cette limite. Néanmoins, il convient de noter qu'elle est particulièrement difficile à étudier numériquement puisque le nombre de pas de temps nécessaire pour atteindre une déformation  $\gamma$  est de l'ordre de  $\gamma\sqrt{\kappa}/I$ . (En effet, le nombre  $\mathcal{N}$  de pas de temps vérifie  $I\Delta t = \frac{\gamma}{\mathcal{N}}\sqrt{\frac{m}{aP}}$ , d'où  $\mathcal{N} \sim \gamma I^{-1}\sqrt{\frac{K_N}{aP}} \sim \gamma\sqrt{\kappa}I^{-1}$  en utilisant les équations 3.2 et 1.32.) Ainsi, avec la méthode de dynamique moléculaire utilisée, le coût de calcul est proportionnel à  $\gamma N \kappa^{1/2}I^{-1}$ . Ce coût explose à mesure que l'on s'approche de la limite géométrique macroscopique.

## 3.1.4 Équations du mouvement

Les quantités scalaires susceptibles de varier dans le temps sont au nombre de 3N + 4: les trois degrés de liberté de translation de chaque particule (le système en compte N), les trois longueurs  $(L_{\alpha})_{1 \leq \alpha \leq 3}$  de la boîte de simulation et un taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ . Dans toutes les simulations numériques présentées dans ce chapitre, on souhaite contrôler entre une et trois composantes diagonales du tenseur des contraintes. Le contrôle d'une composante diagonale  $\sigma_{\alpha\alpha}$  est assuré par le pilotage de la longueur  $L_{\alpha}$ . Ce contrôle est inspiré de la méthode de Parrinello et Rahman [120, 121, 117] et les équations utilisées (sauf celle portant sur le taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$  qui est originale) sont celles de la référence [13]. Dans le cadre de cette méthode, la boîte de simulation est supposée être cubique de côté unité. Plutôt que d'utiliser le vecteur position  $\mathbf{r}_i$  de la particule i, on travaille avec le vecteur normalisé  $\mathbf{s}_i$ :

$$\mathbf{s}_i \equiv \underline{\underline{\mathbf{L}}}^{-1} \mathbf{r}_i \quad \text{pour } 1 \le i \le N \tag{3.7}$$

avec

$$\underline{\mathbf{L}} = \operatorname{diag}\left(L_1, L_2, L_3\right) \tag{3.8}$$

La matrice  $\underline{\underline{L}}^{-1}$  transforme la boîte de simulation parallélépipédique rectangulaire en un cube de côté 1. Les vecteurs position normalisés  $\mathbf{s}_i$  encodent la position du grain *i* dans ce cube. D'après l'équation 3.7, la vitesse  $\mathbf{v}_i$  de la particule *i* vaut :

$$\mathbf{v}_i = \underline{\underline{\mathbf{L}}} \dot{\mathbf{s}}_i + \underline{\underline{\dot{\mathbf{L}}}} \mathbf{s}_i \quad \text{pour } 1 \le i \le N$$
(3.9)

Les équations newtoniennes du mouvement pour les vecteurs positions normalisés s'écrivent (en notant  $m_i$  la masse de la bille i et  $\mathbf{F}_i$  la résultante des forces dues aux contacts avec les grains voisins de i) :

$$m_i \ddot{\mathbf{s}}_i = \underline{\underline{\mathbf{L}}}^{-1} \mathbf{F}_i \quad \text{pour } 1 \le i \le N \tag{3.10}$$

L'équation 3.10 régit l'évolution temporelle des 3N degrés de liberté associés aux particules. Cette équation comporte d'autres termes dans la méthode originale de Parrinello-Rahman.

Ι	М	$\mu^*$	Φ
$3.16  imes 10^{-1}$	$\frac{Nm}{1000}$	$\begin{array}{c} 0.415 \\ 0.415 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.566 \\ 0.566 \end{array}$
$3.16 \times 10^{-2}$	$\frac{Nm}{1000}$	$0.212 \\ 0.213$	$0.620 \\ 0.620$
$3.16 \times 10^{-3}$	$\frac{Nm}{1000}$	$\begin{array}{c} 0.146 \\ 0.146 \end{array}$	$0.632 \\ 0.632$
$3.16\times 10^{-4}$	$\frac{Nm}{1000}$	$\begin{array}{c} 0.118\\ 0.120\end{array}$	$0.637 \\ 0.637$

Tableau 3.3 : Influence de la masse M de la boîte de simulation sur le frottement interne et sur la compacité moyenne d'un assemblage granulaire constitué de grains non frottants cisaillé de manière stationnaire, avec N = 4000,  $\kappa = \kappa_1$  et  $\zeta = 0.98$ .

Cette méthode a en effet été conçue pour simuler des systèmes hamiltoniens contraints et la présence de ces termes est nécessaire pour garantir le caractère conservatif du système dynamique. Mais on sait que ces termes n'ont quasiment aucune influence sur le comportement d'un système dissipatif lorsque le nombre inertiel I est petit devant 1 [13] et c'est pourquoi nous avons omis de les écrire.

En ce qui concerne la longueur de la boîte selon la direction  $\alpha$ , elle est maintenue constante si l'on ne cherche pas à imposer la valeur de  $\sigma_{\alpha\alpha}$  ou bien évolue selon une dynamique inspirée de la méthode de Parrinello-Rahman,

$$M\ddot{L}_{\alpha} = \frac{1}{L_{\alpha}} \left[ L_{\alpha}^2 \sum_{i=1}^N m_i (\dot{s}_i^{(\alpha)})^2 + \sum_{1 \le i < j \le N} F_{ij}^{(\alpha)} r_{ij}^{(\alpha)} \right] - \frac{\Omega}{L_{\alpha}} \Sigma_{\alpha\alpha}$$
(3.11)

si l'on cherche à ce que  $\sigma_{\alpha\alpha}$  vaille  $\Sigma_{\alpha\alpha}$ . Le paramètre M a la dimension d'une masse. Nous l'avons choisi égal à la somme Nm des masses de tous les grains formant le système. Des simulations ont montré que ce choix n'avait pas d'influence sur les quantités physiques d'intérêt pour les valeurs de I considérées. (Le tableau 3.3 montre l'effet de la valeur de la masse M de la boîte de simulation sur le frottement interne  $\mu^*$  — cette quantité sera précisément définie dans la section 3.2.3 — et la compacité  $\Phi$  mesurés pour différentes valeurs du nombre inertiel I lorsque le système est cisaillé de manière stationnaire.)  $\mathbf{r}_{ij}$  est le vecteur joignant le centre de la bille i à celui de la bille j, compte tenu des conditions aux limites employées. L'expression entre crochets de l'équation 3.11 vaut  $\Omega \sigma_{\alpha\alpha}$ . La vitesse de variation de la longueur de la boîte de simulation selon la direction  $\alpha$  diminuera donc si la contrainte mesurée est inférieure à la contrainte imposée et vice-versa.

Le dernier degré de liberté potentiel est le taux de cisaillement  $\dot{\gamma}$ . Nous avons systématiquement imposé un déplacement macroscopique de cisaillement selon la direction 1 avec un gradient de vitesse orienté en moyenne selon la direction 2. On impose le taux de cisaillement macroscopique  $\dot{\gamma} = -\frac{\partial v_1}{\partial x_2} \,^6$  via des conditions aux limites de Lees-Edwards (LE) : la copie voisine de la boîte de simulation pour des valeurs de  $x_2$  plus grande se déplace selon la direction 1 avec une vitesse égale à  $-\dot{\gamma}L_2$ . Ces conditions aux limites sont illustrées sur la figure 3.2. Elles fixent le taux de cisaillement macroscopique mais il n'y a aucune raison particulière pour qu'elles conduisent à

<sup>6.</sup> Le signe moins s'explique par la convention adoptée pour les contraintes (convention de la mécanique des sols : les compressions sont comptées positivement) qui doit être cohérente avec celle des déformations.

un profil de vitesse linéaire et un champ de déformation hétérogène peut a priori tout à fait être observé. On définit la déformation  $\gamma$  comme l'opposé du gradient de déplacement moyen,



Figure 3.2 : Vue selon la direction 3 des conditions aux limites de Lees-Edwards. Le déplacement macroscopique de cisaillement est orienté en moyenne suivant la direction 1 tandis que le gradient de vitesse est orienté en moyenne suivant la direction 2. Les copies des particules ayant des valeurs de  $x_2$  qui diffèrent de celle correspondant à la boîte de simulation sont décalées le long de la direction 1 selon des multiples entiers de  $\gamma L_2$ , où  $\gamma$  est la déformation macroscopique de cisaillement. Quant aux copies de la boîte de simulation, elles de déplacent le long de la direction 1 avec une vitesse égale à un multiple entier de  $\dot{\gamma}L_2$ .

c'est-à-dire  $\gamma = -\Delta(t)/L_2$ , où  $\Delta(t)$  représente l'unité de décalage selon la direction 1 des copies de la boîte de simulation. La dérivée temporelle de  $\gamma$  n'est donc pas exactement égale à  $\dot{\gamma}$  si  $L_2$ fluctue dans le temps (comme c'est le cas dans toutes nos simulations). Lorsque l'on souhaite imposer une valeur  $\Sigma_{12}$  à la composante  $\sigma_{12}$  du tenseur des contraintes, on pose, en s'inspirant de l'équation 3.11 :

$$ML_1 \frac{d\dot{\gamma}}{dt} = \frac{1}{L_2} \Big[ L_1 L_2 \sum_{i=1}^N m_i \dot{s}_i^1 \dot{s}_i^2 + \sum_{1 \le i < j \le N} F_{ij}^2 r_{ij}^1 \Big] - \frac{\Omega}{L_2} \Sigma_{12}$$
(3.12)

Les équations 3.10, 3.11 et 3.12 caractérisent complètement la dynamique du système (elles ne sont toutefois pas toujours toutes utilisées). La phase d'assemblage initial (procédure O) fait intervenir les équations 3.10 et 3.11. On utilisera l'équation 3.10 et l'équation 3.11 portant sur  $L_2$ afin d'étudier le régime liquide, tandis que la totalité des équations dynamiques sera mobilisée lorsque nous discuterons du régime solide. Les conditions aux limites utilisées sont périodiques ou bien de Lees-Edwards. Ces conditions aux limites permettent de s'affranchir autant que possible des effets de bord et d'étudier le cœur du matériau (*bulk*). Les informations concernant les équations et les conditions aux limites utilisées sont regroupées dans le tableau 3.4.

# 3.2 Régime liquide sous cisaillement simple

Nous appelons régime liquide l'état obtenu en imposant au matériau un écoulement de cisaillement en régime stationnaire. Ce régime coïncide avec l'état stationnaire en déformation quasi-statique quand  $I \rightarrow 0$  (écoulement plastique). Partant d'une configuration initiale (préparée à l'aide de la procédure O), on simule un écoulement de cisaillement plan à l'aide d'une condition limite de Lees-Edwards. On commence par vérifier l'homogénéité du matériau et on s'intéresse ensuite à son frottement interne et à ses propriétés de dilatance, en particulier à proximité de la limite quasi-statique  $I \ll 1$ .

	Procédure O	Régime liquide	Régime solide
$(\mathbf{s}_i)_{1 \le i \le N}$	Eq. 3.10	Eq. <b>3.10</b>	Eq. <b>3.10</b>
$L_1$	Eq. <mark>3.11</mark>	constant	Eq. <b>3.11</b>
$L_2$	Eq. <mark>3.11</mark>	Eq. 3.11	Eq. <b>3.11</b>
$L_3$	Eq. <mark>3.11</mark>	constant	Eq. <b>3.11</b>
$\dot{\gamma}$	0	constant	Eq. <mark>3.12</mark>
Direction 1	PBC	PBC	PBC
Direction 2	PBC	LE	$\operatorname{LE}$
Direction 3	PBC	PBC	PBC

Tableau 3.4 : Partie haute du tableau : équations utilisées pour les longueurs de la boîte et le taux de cisaillement selon le type de simulation. Partie basse du tableau : conditions aux limites en fonction du type de simulation (PBC désigne une condition limite périodique et LE une condition limite de Lees-Edwards).

# 3.2.1 Aspects qualitatifs

Nous cherchons à obtenir un régime d'écoulement stationnaire pour établir des lois constitutives du matériau à partir de mesures (séries temporelles) faisant intervenir la totalité de l'échantillon. Nous devons donc prendre soin de vérifier que le système – au moins d'un point de vue statistique – est homogène et invariant dans le temps. D'autre part, nous avons également cherché à estimer la qualité du contrôle exercé sur  $\sigma_{22}$  et la valeur des autres composantes diagonales du tenseur des contraintes.

### Contraintes



Figure 3.3 :  $|\sigma_{12}|$  (axe de gauche, en noir) et  $\sigma_{22}$  (axe de droite, en rouge) en fonction de la déformation de cisaillement  $\gamma$ . Les échelles de droite et de gauche diffèrent. Séries temporelles obtenues avec  $I = 3.2 \times 10^{-5}$ ,  $\kappa = \kappa_1$ ,  $\zeta = 0.98$  et N = 4000.

La figure 3.3 montre la façon dont deux composantes du tenseur des contraintes,  $\sigma_{22}$  et  $\sigma_{12}$ 

évoluent avec la déformation  $\gamma$ . On constate que  $\sigma_{22}$  est bien contrôlé puisque le rapport entre  $\sigma_{12}$  et va valeur cible P fluctue dans un intervalle étroit autour de 1. En ce qui concerne la courbe  $\gamma - \sigma_{12}/P$ , elle part à proximité de l'origine (la configuration initiale est isotrope) et fluctue autour de sa valeur moyenne après passage par un état transitoire (dans l'expérience numérique de la figure 3.3, on peut considérer que l'état stationnaire est atteint après une déformation de 0.1). Contrairement au cas des matériaux granulaires frottants [122, 123, 50], où l'on observe un pic de déviateur avant que ce dernier n'atteigne un plateau pour des valeurs supérieures de la déformation, la contrainte de cisaillement des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants sollicités de manière quasi-statique semble être une fonction croissante de  $\gamma$  (à condition bien sûr de lisser les séries temporelles obtenues) tendant vers une valeur stationnaire. Une autre caractéristique remarquable de la courbe montrant l'évolution de la contrainte de cisaillement est l'importance des fluctuations, qui dépassent fréquemment de 30% la valeur moyenne de  $\sigma_{12}$  mesurée dans l'état stationnaire pour la simulation de la figure 3.3, qui compte pourtant 4000 grains.

Dans ce travail, on considère que le régime stationnaire est atteint à partir du moment où certaines quantités physiques ne présentent plus de tendance d'évolution notables. Ces quantités sont la contrainte de cisaillement  $\sigma_{12}$ , la compacité  $\Phi$ , la coordinence z et l'énergie cinétique par particule associée aux fluctuations de vitesse  $\delta e_c$ , définie comme :

$$\delta e_c = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N m_i \left[ (v_1 - \dot{\gamma} x_2)^2 + v_2^2 + v_3^2 \right]$$
(3.13)

 $(\delta e_c$  est une mesure de la déviation entre l'écoulement provoqué par la condition limite de Lees-Edwards et le champ affine de vitesse que l'on obtiendrait dans un milieu continu cisaillé.) Ces quatre quantités atteignent un état stationnaire autour duquel elles fluctuent lorsque  $\gamma$  est supérieure à une certaine valeur  $\gamma_s$ .  $\gamma_s$  dépend du nombre inertiel : il est de l'ordre de  $10^{-1}$  pour les plus petites valeurs de I testées (~  $10^{-5}$ ), il augmente jusqu'à une valeur typique de 0.5 pour  $I = 10^{-2}$  jusqu'à atteindre plusieurs unités pour  $I \sim 10^{-1}$ .

À la différence de ce qui se passe pour  $L_2$ , les longueurs  $L_1$  et  $L_3$  restent constantes lorsque l'on étudie le régime liquide, ce qui implique que  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{33}$  sont susceptibles de varier au cours de la simulation. Pour I < 0.01, on observe que dans l'état stationnaire, les valeurs moyennes temporelles de  $\sigma_{11}$  et de  $\sigma_{33}$  diffèrent de moins de 3% de la pression de confinement P de l'état initial. Cette différence devient de plus en plus petite à mesure que le nombre inertiel décroît : pour  $I = 10^{-3}$ , les différences relatives  $(\langle \sigma_{11} \rangle / P) - 1$  et  $(\langle \sigma_{33} \rangle / P) - 1$  valent respectivement 1.0% et 2.2%. Ces quantités deviennent égales à 0.9% et 0.7% pour  $I = 10^{-4}$ , et à 0.6% et 1.6% pour  $I = 10^{-5}$ . Même s'il ne semble pas évident que ces différences relatives tendent vers zéro dans la limite quasi-statique, l'écart à P des composantes diagonales non contrôlées est de toute façon très faible dans la limite géométrique macroscopique et nous n'en tiendrons pas compte dans la suite.

Pour un nombre de grains donné, les fluctuations relatives (rapport entre l'écart quadratique moyen et la valeur moyenne) des valeurs instantanées de  $\sigma_{12}$ ,  $\Phi$  et z semblent être indépendantes du nombre inertiel I. En revanche, si l'on considère le rapport entre la valeur moyenne de  $\delta e_c$  et l'énergie cinétique du champ de déformation macroscopique qui varie comme  $\dot{\gamma}^2$ , on constate que c'est une fonction décroissante de I. La figure 3.4, où  $\langle \delta e_c \rangle / (ma^2 \dot{\gamma}^2)$  est représenté en fonction du nombre inertiel, montre que ce rapport diverge à peu près comme 1/I dans la limite  $I \to 0$ . Ce résultat est en accord avec des mesures issues de simulations bidimensionnelles [78] pour lesquelles le même comportement a été observé et expliqué. La divergence observée suggère que les profils de vitesse sont de moins en moins linéaires à mesure que I diminue. C'est ce que nous allons maintenant mettre directement en évidence.



Figure 3.4 : Énergie cinétique par particule associée aux fluctuations de vitesse, définie par l'équation 3.13, normalisée par  $ma^2\dot{\gamma}^2$ , en fonction de I, pour N = 4000,  $\kappa \in \{\kappa_1, \kappa_2\}$  et  $\zeta = 0.98$ .

### Profils de vitesse

Des profils de vitesse instantanés  $v_1(x_2)$  enregistrés à des instants choisis au hasard pour différentes valeurs de I sont représentés sur la figure 3.5. Ils ont été obtenus en moyennant la vitesse des particules selon des tranches orthogonales à la direction 2 de la boîte de simulation (une particule participe à autant de moyennes différentes qu'elle chevauche de tranches). Le nombre inertiel I a une influence considérable. Comme le montre la figure 3.5, les profils de vitesse instantanés sont linéaires lorsque  $I = 3.2 \times 10^{-2}$ , tandis que des bandes apparaissent lorsque  $I = 3.2 \times 10^{-4}$ , comme sur le profil marqué « L » (pour « localisé ») sur la partie inférieure de la figure 3.5. La transition entre ces deux régimes semble graduelle, ainsi que le montre la partie médiane de la figure 3.5, qui correspond à  $I = 3.2 \times 10^{-3}$ .

La localisation apparaît ici dans le cœur du matériau, puisque ce dernier n'est bordé par aucune paroi. C'est donc un phénomène intrinsèque du matériau étudié qui survient pour de petites valeurs de I. D'après les simulations numériques de la référence [124], ce type de localisation intrinsèque est facilité par une grande pression de confinement et/ou un petit taux de cisaillement, c'est-à-dire qu'il intervient d'autant plus facilement que la valeur de I est petite, un résultat corroboré par nos propres observations. D'autre part, il est probable que la localisation apparaisse d'autant plus facilement que le système est mou puisque la longueur de corrélation du champ de déformation est une fonction croissante de  $\kappa$  [78].

Contrairement à ce que l'on pourrait croire de prime abord, l'allure erratique des profils de vitesse ne rend pas nécessaire des analyses fastidieuses destinées à distinguer l'état du matériau selon son état de cisaillement. En effet, la localisation ne persiste pas puisqu'on obtient des profils de vitesse linéaires en moyennant sur le temps, même lorsque  $I \ll 1$ . Cela signifie que l'écoulement est homogène en moyenne. La figure 3.6 montre la disparition progressive de la localisation de la déformation (toute localisation semble avoir disparue après un intervalle de déformation égal à 0.1). Les bandes de cisaillement apparaissent, se déplacent et disparaissent aléatoirement. Ce comportement est étayé par la croissance des fluctuations relatives d'énergie



Figure 3.5 : Deux profils de vitesse à des instants choisis au hasard, pour  $I = 3.2 \times 10^{-2}$  (haut),  $I = 3.2 \times 10^{-3}$  (milieu),  $I = 3.2 \times 10^{-4}$  (bas);  $\kappa = \kappa_1$ ,  $\zeta = 0.98$  et N = 4000.

cinétique à mesure que l'on s'approche de la limite quasi-statique. Nous n'avons pas cherché à étudier la durée de vie et la dynamique des bandes de cisaillement : il nous suffit de savoir que le système est homogène en moyenne pour pouvoir exploiter les séries temporelles issues de mesures portant sur la totalité du système.

### 3.2.2 Évaluation des incertitudes afférentes aux valeurs moyennes

La plupart des résultats que nous allons présenter par la suite concernant le régime liquide sont extraits de séries temporelles après que le système a atteint un état stationnaire. En effet,



Figure 3.6 : Profils de vitesse après un intervalle de déformation de cisaillement égal à 0.004 (courbe pointillé rouge), 0.02 (courbe en traits pointillés bleue) et 0.1 (courbe continue noire) résultant de l'évolution temporelle du profil localisé instantané marqué « L » représenté sur la partie inférieure de la figure 3.5.

nous mesurons et enregistrons différentes grandeurs à chaque pas de temps tout au long d'une simulation. On souhaite bien évidemment obtenir une information condensée et pertinente à partir de ces données brutes. C'est un problème très général, qui dépasse largement le cadre de cette étude, puisque toute simulation numérique de dynamique moléculaire (ou par une méthode de Monte-Carlo) génère invariablement des séries de données qu'il faut ensuite traiter. Le calcul d'une valeur moyenne à partir d'une série temporelle stationnaire ne pose pas de problème particulier. Néanmoins, il convient de remarquer qu'en pratique, cette moyenne est une quantité fluctuante puisque calculée à partir d'une série temporelle de durée nécessairement limitée. Une autre simulation du même système donnera vraisemblablement une valeur moyenne différente de celle obtenue à l'aide de la première simulation. Ainsi, il nous faut pouvoir également évaluer l'incertitude statistique associée à la valeur moyenne mesurée<sup>7</sup>. La difficulté principale vient de ce que les données issues des simulations sont corrélées entre elles. Néanmoins, il existe une méthode, dite de regroupement par blocs (parce qu'on regroupe les données de manière itérative afin de parvenir à éliminer les corrélations entre données successives), qui permet d'évaluer de manière fiable l'incertitude recherchée à condition de disposer d'une série temporelle suffisamment longue [125]. C'est cette méthode que nous avons utilisée tout au long de ce chapitre pour évaluer les incertitudes statistiques pesant sur les valeurs moyennes calculées à partir de séries temporelles.

## 3.2.3 Frottement interne

Le coefficient de frottement interne  $\mu^*$  du matériau granulaire est défini par analogie avec la loi de frottement de Coulomb [79, 126]. Pour les simulations à taux de cisaillement contrôlé (régime liquide),  $\mu^*$  est défini comme la valeur moyenne temporelle (dans l'état stationnaire)

<sup>7.</sup> J'insiste sur le fait que l'on cherche à estimer l'incertitude portant sur la valeur moyenne elle-même et non l'écart-type des valeurs brutes de la série temporelle.

du rapport entre la contrainte de cisaillement  $\sigma_{12}$  et de la contrainte normale  $\sigma_{22}$  :

$$u^* = \langle \frac{|\sigma_{12}|}{\sigma_{22}} \rangle_t \tag{3.14}$$

Nous aurions tout aussi bien pu choisir de définir  $\mu^*$  non comme la valeur moyenne d'un rapport, mais comme le rapport de valeurs moyennes, sans que les résultats n'en soient sensiblement affectés car les fluctuations de  $\sigma_{22}$  sont beaucoup plus petites que celles de  $\sigma_{12}$  (voir figure 3.3).

On sait qu'un matériau granulaire, lorsqu'il est continûment cisaillé, finit par atteindre un état stationnaire spécifique dans lequel sa microstructure ne varie pas : c'est l'état critique de la mécanique des sols [40, 126, 127, 128]. On sait que l'état critique obtenu ne dépend pas de la configuration initiale du matériau. C'est donc un attracteur vers lequel tend le système une fois qu'il a « oublié » sa configuration initiale. Pour notre part, nous avons pu vérifier que les séries temporelles de toutes les quantités physiques mesurées fournissaient en effet des résultats identiques quelle que soit la configuration initiale choisie.

 $\mu^*$  est néanmoins susceptible de dépendre des quatre paramètres sans dimension gourvernant le comportement du système, I,  $\kappa$ ,  $\zeta$  et N. L'étude de ces effets potentiels fait l'objet des prochains paragraphes.

#### Effet de I

De tous les paramètres sans dimension intervenant dans le problème, le nombre inertiel I est celui dont l'influence est la plus importante sur  $\mu^*$ . La variation de  $\mu^*$  en fonction de I est représentée sur la figure 3.7. Ce type de dépendance a déjà été mis en évidence lors de précédentes études, tant expérimentales que numériques [79, 78, 113] (la plupart de ces travaux portaient toutefois sur des matériaux faits de grains frottants). La figure 3.7 montre nettement que  $\mu^*$  est une fonction croissante de I et que dans la limite quasi-statique  $I \rightarrow 0$ ,  $\mu^*$  tend vers une valeur strictement positive que l'on note  $\mu_0^*$ .  $\mu_0^*$  est le coefficient de frottement interne du matériau lorsqu'il se trouve dans l'état critique et qu'il est cisaillé suffisamment lentement pour qu'un comportement quasi-statique (c'est-à-dire indépendant du taux de cisaillement) soit observé. Les assemblages de billes non frottantes sollicitées de manière quasi-statique présentent donc un frottement interne non nul en raison des contraintes stériques entravant le mouvement des particules.

Lorsque l'écoulement est établi, la puissance dissipée par unité de volume vaut  $\sigma_{12}\dot{\gamma} = \mu^* P \dot{\gamma}$ . En l'absence de frottement intergranulaire, la force visqueuse  $F_N^v$  donnée par l'équation 3.3 est la seule source de dissipation possible. Nous reviendrons plus loin sur le lien entre amortissement visqueux et frottement interne.

Les points obtenus numériquement et représentés sur la figure 3.7 sont très précis : les incertitudes statistiques mesurées à l'aide de la méthode de regroupement par blocs détaillée dans la section 3.2.2 sont comprises entre  $10^{-4}$  et  $10^{-3}$  et sont à peine visibles sur la figure.

### Effet de $\kappa$

On s'attend à ce que la valeur des rapports de composantes du tenseur des contraintes  $\underline{\sigma}$  et des quantités qui en découlent – comme le coefficient de frottement interne – soient indépendantes



Figure 3.7 : Frottement macroscopique  $\mu^*$  fonction de I pour  $\kappa \in {\kappa_1, \kappa_2}$ ,  $\zeta = 0.98$  et N = 4000. Les incertitudes associées à chaque point sont si petites qu'elles ne peuvent pratiquement pas être distinguées des symboles. La ligne continue est donnée par l'équation 3.16 avec les paramètres du tableau 3.7 (il n'y a pas de différence visible lorsque l'on utilise les meilleurs paramètres correspondant à  $\kappa_1$  ou à  $\kappa_2$ ).

de la contrainte moyenne à proximité de la limite rigide ( $\kappa \gg 1$ ). Les résultats de simulations numériques regroupés dans le tableau 3.5 montrent effectivement que  $\mu^*$  ne varie pratiquement pas lorsque  $\kappa$  est pris égal à  $\kappa_1$  ou à  $\kappa_2$ , ce qui montre que les niveaux de raideur retenus induisent un comportement du matériau compatible avec celui qu'il aurait dans la limite rigide  $\kappa \to +\infty$ . Les simulations ont été effectuées avec  $\zeta = 0.98$  pour  $1.8 \times 10^{-4} \leq I \leq 5.6 \times 10^{-1}$ ; la variation relative de la valeur de  $\mu^*$  est inférieure à 2% dans cet intervalle de nombre inertiel lorsque le paramètre de raideur passe de  $\kappa = \kappa_1$  à  $\kappa = \kappa_2$ . Néanmoins, malgré les valeurs élevées de  $\kappa$  utilisées, une petite tendance systématique peut être décelée sur les valeurs prises par  $\mu^*$ ( $\mu^*$  est toujours un peu plus important lorsque le niveau de raideur augmente). Nous avons tout de même choisi de fusionner les valeurs de  $\mu^*$  obtenues avec  $\kappa = \kappa_1$  et  $\kappa = \kappa_2$  sur la figure 3.7 en raison de l'incertitude grevant la limite géométrique macroscopique de  $\mu^*$  que nous estimerons plus loin et dont nous verrons qu'elle excède les petits écarts mesurés sur  $\mu^*$ .

Ι	$\kappa$	$\mu^*$
$5.6 \times 10^{-4}$	$rac{\kappa_1}{\kappa_2}$	$\begin{array}{c} 0.1250 \pm 0.0006 \\ 0.1225 \pm 0.0003 \end{array}$
$5.6  imes 10^{-3}$	$rac{\kappa_1}{\kappa_2}$	$\begin{array}{c} 0.1571 \pm 0.0004 \\ 0.1554 \pm 0.0003 \end{array}$
$5.6\times10^{-2}$	$rac{\kappa_1}{\kappa_2}$	$\begin{array}{c} 0.2435 \pm 0.0003 \\ 0.2428 \pm 0.0002 \end{array}$
$5.6  imes 10^{-1}$	$rac{\kappa_1}{\kappa_2}$	$\begin{array}{c} 0.5031 \pm 0.0009 \\ 0.5049 \pm 0.0004 \end{array}$

Tableau 3.5 : Effet de  $\kappa$  sur  $\mu^*$  pour  $\zeta = 0.98$  et N = 4000 ( $\kappa_1 = 3.9 \times 10^4$ ,  $\kappa_2 = 8.4 \times 10^3$ )

3.2 -	Régime	liquide	sous	cisaillement	simple
		1			1

Ι	N	$\mu^*$	$\Delta \mu / \mu^*$	$\mu^{*,100}$	Φ	$\Delta \Phi / \Phi$	$\Phi^{,100}$
$3.2 \times 10^{-5}$	$500 \\ 1372 \\ 4000$	$0.1169 \\ 0.1101 \\ 0.1090$	$\begin{array}{c} 0.3100 \\ 0.1907 \\ 0.1245 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.2188 \\ 0.1609 \\ 0.1431 \end{array}$	$0.6367 \\ 0.6380 \\ 0.6387$	$\begin{array}{c} 0.0022 \\ 0.0015 \\ 0.0008 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.6403 \\ 0.6408 \\ 0.6404 \end{array}$
$3.2  imes 10^{-4}$	$500^{\ddagger} \\ 1372 \\ 4000$	$0.1432^{\ddagger} \ 0.1209 \ 0.1197$	$1.263^{\ddagger}$ 0.1689 0.1002	$\begin{array}{c} 0.8378^{\ddagger} \\ 0.1779 \\ 0.1519 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.6738^{\ddagger} \\ 0.6365 \\ 0.6368 \end{array}$	$\begin{array}{c} 0.0178^{\ddagger} \\ 0.0016 \\ 0.0010 \end{array}$	$0.7148^{\ddagger} \ 0.6390 \ 0.6388$
$3.2  imes 10^{-3}$	$500 \\ 1372 \\ 4000$	$0.1473 \\ 0.1457 \\ 0.1458$	$0.2091 \\ 0.1293 \\ 0.0764$	$0.2275 \\ 0.1966 \\ 0.1752$	$0.6316 \\ 0.6322 \\ 0.6323$	$0.0027 \\ 0.0016 \\ 0.0009$	$0.6360 \\ 0.6346 \\ 0.6338$
$3.2  imes 10^{-2}$	$500 \\ 1372 \\ 4000$	$\begin{array}{c} 0.2112 \\ 0.2123 \\ 0.2125 \end{array}$	$0.2045 \\ 0.1197 \\ 0.0694$	$0.3317 \\ 0.2802 \\ 0.2517$	$0.6193 \\ 0.6197 \\ 0.6200$	$0.0025 \\ 0.0015 \\ 0.0009$	$0.6234 \\ 0.6223 \\ 0.6215$

Tableau 3.6 : Effet de N sur  $\mu^*$  et  $\Phi$  pour différentes valeurs de I, avec  $\kappa = \kappa_1$  et  $\zeta = 0.98$ . L'exposant « ,100 » désigne la moyenne des valeurs appartenant au centile supérieur d'une série temporelle une fois l'état stationnaire atteint.

### Effet de $\zeta$

Comme mentionné précédemment, le terme d'amortissement visqueux est un ingrédient essentiel du modèle puisqu'il constitue la seule et unique source de dissipation. En effet, bien que de l'énergie soit continûment injectée dans les simulations à taux de cisaillement contrôlé menées afin d'étudier le régime liquide, l'assemblage granulaire finit par atteindre un état stationnaire grâce à la composante visqueuse de la force normale (équation 3.3). Ceci étant, on s'attend à ce que l'ampleur de cette force n'ait aucune espèce d'importance dans la limite quasi-statique. Afin de le vérifier, nous avons effectué des simulations pour différentes valeurs de I avec  $\zeta = 0.98$ ,  $\zeta = 0.55$ ,  $\zeta = 0.25$  et  $\zeta = 0.05$ . Lorsque  $I < 10^{-3}$ , la variation relative maximale du frottement interne  $\mu^*$  due à I est inférieure à 1%. En revanche, si le système n'est pas sollicité de manière quasi-statique, l'effet de  $\zeta$  n'est plus du tout négligeable : la variation relative de  $\mu^*$  peut être supérieure à 10% quand  $I > 10^{-1}$ .

### Effet de N

Nous avons étudié l'influence de la taille de l'échantillon sur le coefficient de frottement apparent  $|\sigma_{12}|/\sigma_{22}$  en comparant des résultats obtenus avec trois valeurs différentes de N : N = 500, N = 1372 et N = 4000 (voir tableau 3.6). Le tableau 3.6 indique également l'écart-type  $\Delta \mu$  ainsi que la moyenne  $\mu^{*,100}$  des valeurs appartenant au centile supérieur de la série temporelle  $|\sigma_{12}|/\sigma_{22}$ . Les fluctuations dont il est question ici sont celles des séries temporelles et ne doivent pas être confondues avec les incertitudes statistiques entachant les valeurs moyennes mesurées en régime stationnaire.

La taille de l'échantillon n'a aucun impact sur le frottement macroscopique lorsque N varie de 1372 à 4000 : en effet, la différence entre les coefficients de frottement interne relatifs à ces deux tailles est inférieure à l'incertitude statistique portant sur la valeur de  $\mu^*$ . L'influence de N sur  $\mu^*$  ne peut toutefois plus être négligée dans la limite quasi-statique pour un système de 500 billes, comme le montrent les résultats indicés d'un  $\ddagger$  du tableau 3.6. Il s'avère qu'il y a



Figure 3.8 :  $\Delta \mu / \mu^*$  fonction de N pour  $I = 3.2 \times 10^{-5}$ ,  $\kappa = \kappa_1$  et  $\zeta = 0.98$ . L'équation de la droite est donnée par 3.15.

apparition d'ordre induit par le cisaillement dans cette expérience numérique (*cf.* l'appendice C de [114] pour des résultats quantitatifs). Le frottement effectif est beaucoup plus grand que celui mesuré pour des systèmes de plus grande taille sollicités de la même manière et la compacité est anormalement élevée puisqu'elle dépasse largement  $\Phi_{\text{RCP}}$ . Cet phénomène d'ordre ne se manifeste pas pour les systèmes comptant au moins 1000 billes. Ainsi, approcher la limite thermodynamique requiert  $N \gtrsim 1000$ .

Les données exposées dans le tableau 3.6 montrent également que les fluctuations de la série temporelle  $|\sigma_{12}|/\sigma_{22}$  diminuent dans la limite des grands systèmes. On observe que la régression des fluctuations est compatible avec la forme classique, *i.e.*  $\Delta \mu/\mu^* \propto N^{-1/2}$ . Plus précisément, pour  $I = 3.2 \times 10^{-5}$ ,  $\kappa = \kappa_1$  et  $\zeta = 0.98$ , l'interpolation suivante est statistiquement admissible :

$$\Delta \mu / \mu^* = (7.6 \pm 0.7) N^{-1/2} \tag{3.15}$$

La figure 3.8 permet d'apprécier la qualité de ce fit (deux autres tailles d'échantillons, N = 2048 et N = 2916, ont été simulées en vue d'améliorer la précision de ce dernier). D'après l'équation 3.15, les fluctuations relatives tendent vers zéro dans la limite macroscopique. La courbe  $\sigma_{12} - \gamma$ , bruitée pour des échantillons de taille finie comme en témoigne la figure 3.3, devrait donc devenir lisse dans la limite des grands systèmes.

### À proximité de la limite géométrique macroscopique

D'après l'étude paramétrique que nous venons de présenter, le coefficient de frottement interne  $\mu^*$  dépend essentiellement de I et est quasiment indépendant de  $\kappa$  et de  $\zeta$  pour  $I \leq 0.01$ . De plus,  $\mu^*$  ne dépend pas de la taille du système pourvu que le nombre de billes de l'échantillon soit suffisamment grand (typiquement  $N \gtrsim 1000$ ). On peut donc considérér qu'en bonne approximation, la limite géométrique macroscopique coïncide avec la limite quasi-statique ( $I \to 0$ ) de systèmes comportant 4000 billes, de niveau de raideur  $\kappa \geq \kappa_2$  et de niveau d'amortissement visqueux  $\zeta = 0.98$ .

En conséquence,  $\mu^*$  devrait être une fonction du seul nombre inertiel I lorsque  $I \leq 0.01$ , et ce avec une très bonne précision. En l'absence de tout facteur d'échelle, nous avons essayé

$\kappa$	$\mu_0^*$	$\alpha$	c
$\kappa_1$	$0.101\pm0.004$	$0.38\pm0.04$	$0.40\pm0.07$
$\kappa_2$	$0.100\pm0.003$	$0.39\pm0.02$	$0.42\pm0.03$

Tableau 3.7 : Meilleurs paramètres d'interpolation pour l'équation 3.16 à partir de données obtenues avec N = 4000 et  $\zeta = 0.98$  pour  $\kappa = \kappa_1$  et  $\kappa = \kappa_2$ .

d'interpoler les points obtenus numériquement (cf. figure 3.7) par une fonction de la forme :

$$\mu^* = \mu_0^* + cI^{\alpha} \tag{3.16}$$

Étant donné que ce fit n'est pas censé être précis pour I > 0.01, nous nous sommes restreints aux points tels que  $I \leq 0.01$ , même si la courbe est tracée pour la totalité de la plage de valeurs de I explorée (ce qui explique d'ailleurs l'écart important entre les données et la fonction d'interpolation pour les plus grandes valeurs de I). La toute petite influence de  $\zeta$ , dont nous avons vu qu'elle s'amenuise à mesure que l'on s'approche de la limite quasi-statique, peut être négligée; en revanche, les paramètres  $\mu_0^*$ ,  $\alpha$  et c sont évalués séparément pour  $\kappa = \kappa_1$  et  $\kappa = \kappa_2$ (avec  $\zeta = 0.98$  et N = 4000). Les valeurs des paramètres sont indiquées dans le tableau 3.7.

Le paramètre  $\mu_0^*$  de l'équation 3.16 est le coefficient de frottement géométrique macroscopique. À tout coefficient de frottement  $\mu^*$  est associé un angle de frottement  $\varphi$  tel que tan  $\varphi \equiv \mu^* : \varphi$  est l'angle que fait  $\underline{\sigma} \cdot \mathbf{e}_2$ , le vecteur contrainte sur les plans orthogonaux au vecteur unitaire  $\mathbf{e}_2$  de l'axe  $x_2$ , avec  $\mathbf{e}_2$ . L'angle de frottement géométrique macroscopique  $\varphi_0^*$  qui correspond à  $\mu_0^*$  vaut (pour  $\kappa = \kappa_1$ )

$$\varphi_0^* = 5.76^\circ \pm 0.22^\circ \tag{3.17}$$

Dans le cas d'assemblages bidimensionnels de disques polydisperses, Alfredo Taboada et coll. [50] ont trouvé que l'angle de frottement géométrique macroscopique est compris entre  $4^{\circ}$  et  $7^{\circ}$ , tandis que Frédéric Da Cruz et coll. [78] ont obtenu  $\mu_0^* \simeq 0.1$  à l'aide de simulations de cisaillement simple pour de petites valeurs de I. Enfin, des simulations tridimensionnelles portant sur des systèmes polydisperses comptant environ 10000 billes ont été effectuées par Takahiro Hatano pour différentes valeurs du coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  [113]. Hatano a trouvé un coefficient de frottement macroscopique dans la limite quasi-statique approximativement égal à 0.06 lorsque  $\mu = 0$ , valeur inférieure à la nôtre. Néanmoins, il convient de remarquer que son étude est motivée par des considérations portant sur des matériaux granulaires fortement confinés, tels qu'on en trouve dans les failles de la croûte terrestre, raison pour laquelle les niveaux de raideur qu'il utilise ( $\kappa = 1840, 136, 84$  et 42) sont très inférieurs à ceux de notre étude. De plus, les niveaux de raideur simulés par Hatano sont d'autant plus faibles que la valeur de I est petite. Bien que Hatano utilise le même type de fonction interpolante que nous (équation 3.16), il estime que  $\alpha$  vaut  $0.28 \pm 0.05$ , valeur qui diffère assez nettement de celle que nous avons trouvée (voir tableau 3.7). Cet écart est peut-être dû en partie à la polydispersité de l'assemblage, mais les petites valeurs de  $\kappa$  utilisées dans la référence [113] ne sont certainement pas non plus étrangères à la différence observée. Seules les simulations de [113] effectuées avec  $\kappa = 1840$  sont suceptibles d'être suffisamment représentatives de la limite rigide. Hatano n'a effectué des simulations à ce niveau de raideur que pour  $I \ge 3 \times 10^{-4}$  et les valeurs de coefficient de frottement interne qu'il trouve dans ce cas sont en excellent accord avec les nôtres (par exemple,  $\mu^* = 0.17$  pour I = 0.01).

# 3.2.4 Compacité

On sait depuis au moins la fin du XIX<sup>e</sup> siècle que les matériaux granulaires denses se dilatent lorsqu'ils sont soumis à une contrainte déviatorique croissante [48, 40, 49, 50]. La densité de l'état stationnaire est principalement fonction de I si  $\kappa$  est suffisamment grand [78]. La présente étude est à notre connaissance la première à sonder les propriétés d'un matériau constitué de grains non frottants si près de la limite quasi-statique. Nous souhaitons en particulier identifier la compacité critique  $\Phi_c$  dans la limite rigide.

De même que le coefficient de frottement macroscopique, la moyenne temporelle dans l'état stationnaire de la compacité,  $\Phi \equiv \langle \Phi(t) \rangle_t$ , est une propriété indépendante de la configuration initiale. Nous allons maintenant étudier l'effet des quatre paramètres sans dimension du problème sur  $\Phi$ .

#### Effets de I, de $\kappa$ et de $\zeta$

Une nouvelle fois, les simulations numériques montrent que de tous les paramètres sans dimension gouvernant le comportement du système, le nombre inertiel I est celui dont l'effet sur  $\Phi = \langle \Phi(t) \rangle$  est le plus prononcé. La figure 3.9 montre que  $\Phi$  est une fonction décroissante de I, comme précédemment observé [78, 113]. La compacité vaut  $\Phi_0$  dans la limite quasi-statique et le volume du système augmente avec I. Les incertitudes statistiques portant sur la valeur de  $\Phi$ mesurées à l'aide de la méthode de regroupement par blocs sont comprises entre  $10^{-5}$  et  $10^{-4}$ , ce qui explique qu'elles ne sont pas visibles sur la figure.  $\Phi_0$  est très proche de  $\Phi_{\rm RCP}$  [101, 13] et coïncide (à une petite correction près liée à la finitude de  $\kappa$ ) avec la compacité  $\Phi^{\rm iso}$  des états initiaux préparés à l'aide de la procédure O. Pour N = 4000, on mesure  $\Phi^{\rm iso} = 0.6382 \pm 0.0011$ pour  $\kappa = \kappa_2$ , et  $\Phi^{\rm iso} = 0.6369 \pm 0.0009$  pour  $\kappa = \kappa_1$  (les moyennes et les écarts-types sont évalués à l'aide de cinq échantillons différents). Le matériau ne semble donc pas dilatant dans la limite quasi-statique.

La compacité augmente d'à peu près 0.1% lorsque le paramètre de raideur  $\kappa$  passe de  $\kappa_1$  à  $\kappa_2$ , quelle que soit la valeur de I. En dépit de la faiblesse de l'influence de  $\kappa$ , cette variation est supérieure aux incertitudes statistiques. La diminution de la densité lorsque  $\kappa$  augmente n'est bien entendu pas surprenante puisque des forces plus grandes ou un matériau constitutif des billes plus mou vont provoquer de plus grandes déflexions élastiques et vont donc entraîner une diminution du volume de l'échantillon. Des simulations ont également été effectuées avec  $\zeta = 0.98$ ,  $\zeta = 0.55$ ,  $\zeta = 0.25$  et  $\zeta = 0.05$  pour une large gamme de valeurs de I. L'effet de  $\zeta$  sur  $\Phi$  est tout à fait notable pour de grandes valeurs de I: lorsque I > 0.1, la variation relative de  $\Phi$  due à  $\zeta$  peut atteindre 30%. L'impact de  $\zeta$  diminue comme prévu à mesure que l'on s'approche de la limite quasi-statique et pour  $I \leq 0.01$ , la variation relative de  $\Phi$  liée à  $\zeta$  est inférieure à 0.1%.

### Effet de N

D'après le tableau 3.6,  $\Phi$  varie peu avec le nombre N de particules comme dans le cas statique isotrope [101, 13]. Le fit suivant,

$$\Phi(\kappa = \kappa_1, I = I_1, N) = \Phi_1 - k_1 N^{-1/2}, \qquad (3.18)$$
  
- 77 ---



Figure 3.9 : Compacité  $\Phi$  en fonction de I (pour  $\zeta = 0.98$  et N = 4000) pour  $\kappa = \kappa_1$  (carrés bleus) et  $\kappa = \kappa_2$  (triangles rouges). Les lignes continues ont pour équation l'expression 3.21 avec les paramètres du tableau 3.8.

basé sur des données obtenues pour la plus petite valeur de I étudiée avec  $\kappa = \kappa_1$ , à savoir  $I = I_1 = 3.2 \times 10^{-5}$ , est admissible d'un point de vue statistique avec les paramètres suivants :

$$\begin{cases} \Phi_1 = 0.6398 \pm 0.0002 \\ k_1 = 0.070 \pm 0.008 \end{cases}$$
(3.19)

Comme pour le coefficient de frottement macroscopique  $\mu^*$ , les fluctuations relatives de  $\Phi$  varient comme l'inverse de la racine carrée du nombre de grains. Pour  $I = I_1$ ,  $\kappa = \kappa_1$  et  $\zeta = 0.98$ , les résultats présentés sur la figure 3.10 permettent de montrer que la relation suivante est statistiquement admissible

$$\frac{\Delta\Phi}{\Phi} = \frac{A}{\sqrt{N}}, \text{ avec } A = 0.051 \pm 0.011$$
 (3.20)

#### À proximité de la limite géométrique macroscopique

Compte tenu de l'étude paramétrique précédente, on peut considérer que la compacité  $\Phi$  est une fonction de I pas trop loin de la limite quasi-statique, disons pour I < 0.01, avec de petites corrections liées à l'effet de N et de  $\kappa$ .  $\Phi$  peut être considéré comme indépendant de  $\zeta$  (au moins lorsque  $I \leq 0.01$ ). Le type d'interpolation utilisé est :

$$\Phi^{-1} = \Phi_0^{-1} + eI^{\nu} \tag{3.21}$$

Avec N = 4000 et  $\zeta = 0.98$ , les meilleurs paramètres d'interpolation de l'équation 3.21 sont donnés dans le tableau 3.8.



Figure 3.10 :  $\Delta \Phi / \Phi$  en fonction de N pour les mêmes séries temporelles que celles utilisées pour tracer la figure 3.8. L'équation de la droite est donnée par 3.20.

$\kappa$	$\Phi_0$	ν	e
$\kappa_1$	$0.6398 \pm 2.10^{-4}$	$0.39\pm0.01$	$0.1786 \pm 8.10^{-4}$
$\kappa_2$	$0.6405 \pm 2.10^{-4}$	$0.42\pm0.02$	$0.2038 \pm 310^{-4}$

Tableau 3.8 : Meilleurs paramètres d'interpolation pour l'équation 3.21 à partir de données obtenues avec N = 4000,  $\zeta = 0.98$  pour  $\kappa = \kappa_1$  et  $\kappa = \kappa_2$ .

Afin d'évaluer la densité  $\Phi_0^*$  (densité dans la double limite  $I \to 0$  et  $N \to +\infty$ ), il semble raisonnable de supposer que les petites corrections à  $\Phi_0^*$  dues à la valeur finie de N et à la valeur non nulle de I sont additives. En admettant cela et en utilisant les équations 3.18-3.19 pour estimer la correction de taille finie à la valeur  $\Phi_0$  de la densité dans la limite quasi-statique obtenue par une interpolation de la forme 3.21 sur des résultats issus de simulations de systèmes comportant 4000 grains, on obtient, pour  $\kappa = \kappa_1$ :

$$\Phi_0^* = 0.6410 \pm 0.0005 \tag{3.22}$$

La correction sur  $\Phi$  due à la valeur finie de  $\kappa$  est d'ordre  $\kappa^{-1}$  pour un assemblage équilibré de sphères rigides non frottantes [13]

$$\Delta \Phi = 3^{5/3} \Phi^{1/3} \frac{\langle (F_N^e)^{5/3} \rangle}{\langle F_N^e \rangle^{5/3}} \left(\frac{\pi}{z}\right)^{2/3} \kappa^{-1}, \tag{3.23}$$

et est inférieure à l'incertitude statistique de l'expression 3.22. La valeur de  $\Phi_0^*$  donnée par l'équation 3.22 constitue donc notre meilleure estimation de la compacité des assemblages de sphères cisaillés dans la limite géométrique macroscopique.

### 3.2.5 Influence du contrôle exercé

Les résultats que nous avons obtenus sont indépendants du type de contrôle exercé sur le système. La figure 3.11 montre les variations de la compacité, de la composante  $\sigma_{22}$  du tenseur des contraintes et du frottement effectif en fonction de la déformation  $\gamma$  subie par le système. Tant que  $\gamma < 1$ , c'est  $\sigma_{22}$  qui est contrôlé. La compacité  $\Phi$  fluctue donc autour d'une valeur



Figure 3.11 : À gauche :  $\sigma_{22}$  est contrôlé pour  $\gamma < 1$ ,  $\Phi$  fluctue et on mesure  $\langle \Phi \rangle = \Phi_1$  (axe de droite), tandis que pour  $\gamma > 1$ ,  $\Phi = \Phi_1$  est imposé et  $\sigma_{22}$  est libre de fluctuer (axe de gauche). À droite : coefficient de frottement effectif  $\mu^*$  en fonction de la déformation  $\gamma$ .

Ι	$\mu^*$	$\Phi$
$3.16 \times 10^{-3}$	$0.157 \pm 0.001$	$0.6952 \pm 0.0001$
$1.78  imes 10^{-3}$	$0.148 \pm 0.001$	$0.6967 \pm 0.0001$
$1 \times 10^{-3}$	$0.141 \pm 0.002$	$0.6980 \pm 0.0001$
$5.62  imes 10^{-4}$	$0.133 \pm 0.001$	$0.6987 \pm 0.0001$
$3.16 \times 10^{-4}$	$0.129 \pm 0.001$	$0.6993 \pm 0.0001$
$1 \times 10^{-4}$	$0.124 \pm 0.003$	$0.7008 \pm 0.0002$

Tableau 3.9 : Influence du nombre inertiel I sur le frottement interne  $\mu^*$  et la compacité moyenne  $\Phi$  d'un assemblage granulaire non frottant polydisperse, avec N = 1372,  $\kappa = \kappa_2$  et  $\zeta = 0.98$ .

moyenne notée  $\Phi_1$ . Dès que  $\gamma$  devient supérieur à 1, on attend que la compacité devienne égale à  $\Phi_1$  (à 10<sup>-4</sup> près). On fige alors les dimensions de la boîte de simulation, ce qui a pour effet de fixer la compacité du système, tout en laissant  $\sigma_{22}$  fluctuer librement. Les simulations à volume fixé conduisent aux mêmes valeurs moyennes que les simulations à contrainte normale  $\sigma_{22}$  contrôlée, à condition bien sûr de choisir comme compacité la compacité moyenne mesurée avec l'essai à contrainte contrôlée correspondant. À volume fixé,  $\sigma_{12}$  et  $\sigma_{22}$  fluctuent considérablement, mais de façon corrélée, de sorte que la valeur moyenne de  $\sigma_{12}/\sigma_{22}$  est la même que lorsque la composante  $\sigma_{22}$  est contrôlée. Nous avons toutefois pu constater que les séries temporelles issues des simulations à volume fixé sont plus bruitées que celles tirées de calculs à contrainte normale contrôlée, et donc moins faciles à exploiter.

### 3.2.6 Cas polydisperse

Nous avons également cherché à étendre les résultats obtenus au cas polydisperse. À cette fin, nous avons effectué des calculs sur des systèmes de 1372 billes constitués de particules de deux tailles différentes : des particules de diamètre a et des particules de diamètre 3a. La proportion volumique de chacune des classes de particules est de 50%. Le paramètre de raideur  $\kappa$  est choisi égal à  $\kappa_2$  et le paramètre d'amortissement  $\zeta$  vaut 0.98. Les valeurs du frottement interne  $\mu^*$  et de la compacité moyenne  $\Phi$  mesurées en régime stationnaire pour différentes valeurs du nombre inertiel I sont données dans le tableau 3.9. Les frottements internes mesurés pour différentes valeurs de I sont proches de ceux calculés pour des assemblages faits de grains tous identiques. Le frottement effectif des assemblages polydisperses considérés est néanmoins systématiquement supérieur à celui des systèmes monodisperses, et l'écart relatif est compris entre 9% et 11%. Cette relative indépendance du frottement effectif vis-à-vis de la polydispersité du matériau a déjà été observée et peut être interprétée comme résultant du fait que dans les assemblages polydisperses, les chaînes de force les plus intenses, principales responsables de l'existence de frottement interne, sont portées par les particules les plus grosses [11]. Tout se passe donc comme si, du point de vue du frottement interne, les plus petites particules n'existaient pas, expliquant ainsi la relative insensibilité de  $\mu^*$  vis-à-vis l'étalement granulométrique.

Comme dans le cas monodisperse, les données regroupées dans le tableau 3.9 peuvent être interpolées par des fonctions du type 3.16 pour le frottement interne et du type 3.21 pour le compacité moyenne. Concernant le frottement interne, on trouve :

$$\begin{cases} \mu_0^* = 0.111 \pm 0.003 \\ \alpha = 0.41 \pm 0.02 \\ c = 0.49 \pm 0.05 \end{cases}$$
(3.24)

Comme on peut le constater en comparant ces valeurs avec celles fournies dans le tableau 3.7, ces valeurs sont assez proches de celles obtenues dans le cas monodisperse. Le frottement interne dans la limite géométrique macroscopique est de 10% supérieur à celui extrapolé dans le cas où toutes les billes ont la même taille. Concernant la compacité moyenne, on trouve :

$$\begin{cases} \Phi_0 = 0.7021 \pm 0.0010 \\ \nu = 0.42 \pm 0.04 \\ e = 0.16 \pm 0.03 \end{cases}$$
(3.25)

Encore une fois, les paramètres  $e \text{ et } \nu$  sont assez proches de ceux indiqués dans le tableau 3.8. En revanche, la densité  $\Phi_0$  extrapolée dans la limite quasi-statique est assez largement supérieure à celle que l'on trouve lorsque toutes les billes sont de même taille. C'est une conséquence directe de la polydispersité du matériau considéré.

# 3.3 Régime solide

Cette section est dédiée à l'étude des propriétés mécaniques des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants dans le régime solide sous divers chargements quasi-statiques. Un matériau isotrope assemblé selon la procédure O est soumis à différents chargements déviatoriques afin d'identifier le critère de rupture délimitant le domaine solide macroscopique dans l'espace des contraintes principales. Les chargements déviatoriques imposés provoquent des modifications de la microstructure et de la répartition des forces au sein de l'assemblage. Il s'avère que les contraintes sont liées aux paramètres d'anisotropie de la texture et de la distribution des forces à travers une formule simple. Enfin, il semble qu'il existe une relation contrainte—déformation bien définie dans la limite des grands systèmes.

## 3.3.1 Tests numériques et conditions aux limites

Trois tests mécaniques différents sont mis en œuvre numériquement afin d'étudier le comportement solide et la limite de rupture des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants (le tenseur des contraintes de Cauchy imposé est noté  $\underline{\Sigma}$ ) :

Test	$\sigma_{ m I}$	$\sigma_{\mathrm{II}}$	$\sigma_{ m III}$
$\mathrm{TC}$	$\sigma_{33}$	$\sigma_{11}$	$\sigma_{11}$
TE	$\sigma_{11}$	$\sigma_{11}$	$\sigma_{33}$
$\mathbf{S}$	$\sigma_{33} +  \sigma_{12} $	$\sigma_{33}$	$\sigma_{33} -  \sigma_{12} $

Tableau 3.10 : Contraintes principales pour les tests de compression triaxiale (TC), d'extension triaxiale (TE) et de cisaillement (S).

- Test de compression triaxiale axisymétrique (« TC » en abrégé) :  $\underline{\Sigma} = \Sigma_1 \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \Sigma_2 \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \Sigma_3 \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$ , avec  $\Sigma_1 = \Sigma_2 < \Sigma_3$ ;
- Test d'extension triaxiale axisymétrique (« TE » en abrégé) :  $\underline{\underline{\Sigma}} = \Sigma_1 \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \Sigma_2 \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \Sigma_3 \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3$ , avec  $\Sigma_1 = \Sigma_2 > \Sigma_3$ ;

- Test de cisaillement (« S » en abrégé) :  $\underline{\underline{\Sigma}} = P(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3) + \tau(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1).$ 

Chaque test permet d'étudier le comportement du matériau selon une direction donnée de l'espace des contraintes principales<sup>8</sup>. Les contraintes principales  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  et  $\sigma_3$ , sont notées  $\sigma_I$ ,  $\sigma_{II}$  et  $\sigma_{III}$  lorsqu'elles sont classées par ordre décroissant. Le tableau 3.10 donne l'expression des contraintes principales en fonction des composantes du tenseur des contraintes pour les trois tests numériques utilisés.

Pour chacun de ces tests, la pression  $P = \text{Tr} \underline{\Sigma}/3$  reste constante tandis que le déviateur  $\underline{\Sigma} - P \underline{1}$ est augmenté incrémentalement de  $\delta \underline{\Sigma}$ . Nous avons opté pour un pas de  $\delta \Sigma_3 = 0.005 \times \overline{P}$  pour les tests TC, de  $\delta \Sigma_3 = -0.005 \times \overline{P}$  pour les tests TE (d'où  $\delta \Sigma_1 = \delta \Sigma_2 = \mp 0.0025 \times P$ ) et de  $\delta \tau = 0.005 \times P$  pour les tests S. Le rapport  $\delta \Sigma/P$  de l'incrément de déviateur est un paramètre de contrôle qui doit être choisi suffisamment petit pour pouvoir suivre précisément l'évolution quasi-statique du système sous un chargement donné. Les valeurs mentionnées ciavant sont satisfaisantes à cet égard. D'autre part, des tests de compression triaxiale effectués avec  $\delta \Sigma_3/P = 5 \times 10^{-3}$  et  $\delta \Sigma_3/P = 2 \times 10^{-2}$  donnent des résultats similaires (quoique moins précis lorsque  $\delta \Sigma_3/P$  vaut  $2 \times 10^{-2}$ );  $\delta \Sigma_3/P$  n'affecte donc pas le comportement du matériau s'il est choisi petit devant 1.

Les trajectoires des trois chargements mécaniques appartiennent à un plan déviatorique de l'espace des contraintes principales, c'est-à-dire à un plan orthogonal à la trisectrice <sup>9</sup>. Les trois chemins de contrainte étudiés sont représentés sur la figure 3.13. Une fois la valeur cible du tenseur des contraintes  $\underline{\Sigma}$  fixée, on laisse le système évoluer selon le jeu d'équations décrit dans la colonne « Régime solide » du tableau 3.4. On considère que le système est équilibré lorsque la résultante des forces sur chaque bille est nulle, avec une tolérance fixée à  $10^{-4}a^2P$  et que  $\sigma_{\alpha\beta} = \Sigma_{\alpha\beta}$  pour chaque composante contrôlée du tenseur des contraintes, avec une erreur relative inférieure à  $10^{-4}$ . On stoppe le calcul si l'assemblage n'arrive pas à équilibrer statiquement le chargement imposé après  $5 \times 10^7$  pas de temps et une déformation totale de 10%. La dernière valeur du tenseur des contraintes  $\underline{\Sigma}$  pour laquelle le système est parvenu à atteindre un état d'équilibre mécanique constitue une estimation du seuil de rupture. La démarche suivie est schématisée sur la figure 3.12. Chaque simulation est répétée à l'identique sur un certain nombres de configurations initiales indépendantes afin d'obtenir des résultats représentatifs (moyenne et écart-type).

<sup>8.</sup> On rappelle que l'espace des contraintes principales est l'espace euclidien tridimensionnel engendré par les valeurs propres du tenseur des contraintes de Cauchy  $\underline{\sigma}$ .

<sup>9.</sup> La trisectrice est la droite de l'espace des contraintes principales d'équation  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$ .



Figure 3.12 : Procédure incrémentale employée pour étudier les propriétés de rupture des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants.



Figure 3.13 : Représentation schématique dans un plan déviatorique des trois directions testées : test de compression triaxiale (avec  $\sigma_3 = \sigma_I$ ), test d'extension triaxiale (avec  $\sigma_3 = \sigma_{III}$ ) et test de cisaillement (avec ( $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ) = ( $\sigma_I, \sigma_{III}, \sigma_{II}$ )).

### 3.3.2 Critère de rupture

Une fois le matériau assemblé dans un état initial isotrope, l'intervalle de contrainte que le matériau est capable d'encaisser sans se mettre à s'écouler indéfiniment peut être représenté dans l'espace des contraintes principales. D'après ce que l'on sait du comportement des matériaux non cohésifs pulvérulents comme les sols [129, 41, 122, 123], on s'attend à ce qu'il faille s'éloigner de l'état isotrope pour atteindre la limite du domaine solide du matériau. On définit habituellement une fonction de charge f qui dépend des contraintes principales ( $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ), telle que f < 0 définit le domaine des chargements supportés (on pense que ce domaine est toujours convexe [129]) et f = 0 le bord dudit domaine.

Une assemblée de grains non cohésifs et parfaitement rigides ( $\kappa = +\infty$ ) ne présente aucune échelle de contrainte, ce qui implique que  $f(\lambda \underline{\sigma}) = f(\underline{\sigma})$  pour tout  $\lambda > 0$ . La surface de rupture, d'équation f = 0, a donc la forme d'un cône dans l'espace des contraintes principales et on peut supposer que c'est encore approximativement le cas lorsque le système considéré est proche de la limite rigide. Il nous suffit donc de connaître l'allure de la courbe de rupture dans un plan déviatorique pour pouvoir reconstruire la totalité de la courbe de rupture. D'autre part, en raison de l'isotropie des configurations initiales, f est une fonction symétrique de ( $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ) et la courbe de rupture est invariante par permutation des contraintes principales.

Le critère de Mohr-Coulomb non cohésif

$$f_{\rm MC}(\underline{\sigma}) = \sigma_{\rm I} - \sigma_{\rm III} - (\sigma_{\rm I} + \sigma_{\rm III}) \sin \varphi \tag{3.26}$$

est fréquemment invoqué (au moins implicitement) dans le domaine des matériaux granulaires [130]. De nombreuses études ont été consacrées au frottement effectif d'assemblages granulaires cisaillés dans plusieurs géométries [79], et il est tentant de supposer que l'angle mesuré correspond à l'angle de frottement  $\varphi$  d'un critère de Mohr-Coulomb qui décrirait complètement la limite de rupture du matériau. Les choses ne sont cependant pas si simples comme le montre la quatrième colonne du tableau 3.11 :  $\varphi$ , en plus de dépendre de N, dépend également du type de test mécanique effectué. Aucun angle de frottement putatif n'est à même de concilier les résultats issus des différents essais et les propriétés de rupture du matériau ne peuvent donc être décrites par un critère de Mohr-Coulomb. On peut noter que les seuls tests de type TC et TE ne sont pas suffisants pour écarter le critère de Mohr-Coulomb puisque  $\varphi^{TE} - \varphi^{TC}$  est inférieur à l'incertitude entachant les résultats : en revanche, les résultats des tests de type S sont sans appel.

Il n'en reste pas moins qu'il serait intéressant de pouvoir caractériser les propriétés de rupture des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants à l'aide d'un seul paramètre indépendant de la direction du chargement appliqué. Cet espoir a déjà pris corps pour les assemblages monodisperses de sphères frottantes [122, 123, 131]; la courbe de rupture de ce système vérifie en effet un critère de Lade-Duncan [132] :

$$f_{\rm LD}(\underline{\underline{\sigma}}) = \frac{(\sigma_{\rm I} + \sigma_{\rm II} + \sigma_{\rm III})^3}{\sigma_{\rm I}\sigma_{\rm II}\sigma_{\rm III}} - k \tag{3.27}$$

Le paramètre scalaire k est nécessairement supérieur ou égal à 27. Si ce n'était pas le cas, le domaine d'équation  $f \leq 0$  serait réduit à l'ensemble vide (lorsque k = 27, seule la trisectrice appartient au domaine solide et le matériau se met à s'écouler dès l'application d'un déviateur des contraintes, aussi infime soit-il). D'après le tableau 3.11, ce critère de rupture est aussi adapté aux assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants : les valeurs de k déduites des trois chemins de chargement sont cohérentes entre elles (voir tableau 3.12).

Test	N	$S_N$	$\varphi$	$\Delta \varphi$	k	$\Delta k$
	1372	8	$8.3^{\circ}$	$0.6^{\circ}$	27.80	0.11
TC	4000	8	$6.8^{\circ}$	$0.5^{\circ}$	27.52	0.08
	8788	8	$6.0^{\circ}$	$0.2^{\circ}$	27.41	0.03
	1372	8	$8.6^{\circ}$	$0.5^{\circ}$	27.81	0.10
TE	4000	8	$6.9^{\circ}$	$0.2^{\circ}$	27.52	0.02
	8788	8	$6.0^{\circ}$	$0.4^{\circ}$	27.40	0.05
	1372	6	$9.7^{\circ}$	$0.3^{\circ}$	27.80	0.04
$\mathbf{S}$	4000	10	$7.8^{\circ}$	$0.3^{\circ}$	27.51	0.07
	8788	6	$7.0^{\circ}$	$0.4^{\circ}$	27.41	0.04

Tableau 3.11 : Angle de frottement macroscopique  $\varphi$  et paramètre de Lade-Duncan k mesurés juste avant la rupture sur  $S_N$  configurations initiales distinctes, pour différents tests et différentes tailles de système.  $\Delta \varphi$  et  $\Delta k$  sont les écarts-types correspondants.

Test	$\sin \varphi$	k
TC	$\frac{\Sigma_3 - \Sigma_1}{\Sigma_3 + \Sigma_1}$	$\frac{(3-\sin\varphi)^3}{1-\sin\varphi-\sin^2\varphi+\sin^3\varphi}$
TE	$\frac{\Sigma_1 - \Sigma_3}{\Sigma_1 + \Sigma_3}$	$\frac{(3+\sin\varphi)^3}{1+\sin\varphi-\sin^2\varphi-\sin^3\varphi}$
$\mathbf{S}$	$\frac{\tau}{P}$	$\frac{27}{1-\sin^2\varphi}$

Tableau 3.12 : Expressions des paramètres de Mohr-Coulomb et de Lade-Duncan pour les trois chargements utilisés en fonction des composantes du tenseur des contraintes imposées.  $\sin \varphi$ , défini dans la deuxième colonne, est utilisé dans la troisième colonne comme une variable intermédiaire.



Figure 3.14 : Points calculés appartenant à la courbe de rupture et leurs barres d'erreur associées. Critère de Lade-Duncan (k = 27.80, ligne continue bleue) et critères de Mohr-Coulomb sans cohésion correspondant à essais de type TC ( $\varphi = 8.3^{\circ}$ , ligne rouge en traits pointillés), TE ( $\varphi = 8.6^{\circ}$ , ligne rouge pointillée), S ( $\varphi = 9.7^{\circ}$ , ligne rouge en pointillés et traits pointillés) pour N = 1372 particules.

En utilisant l'invariance de f par permutation des contraintes principales, les contraintes à la rupture calculées pour N = 1372 sont tracées dans le plan déviatorique sur la figure 3.14, avec la courbe de Lade-Duncan de paramètre k(1372) et les trois courbes de rupture de Mohr-Coulomb correspondant aux trois types d'essais numériques effectués. Il est clair que le critère de Lade-Duncan est le meilleur.

Numériquement, on constate que le domaine entouré par la courbe de rupture est fonction de la taille du système et décroît lorsque N croît (*cf.* tableau 3.11), comme en témoigne la figure 3.15. Ce comportement diffère de celui observé en régime liquide, dans lequel les effets de taille finie disparaissent dès que le système compte plus d'un millier de billes. Nous avons déterminé l'allure de la courbe de rupture dans la limite macroscopique en supposant que la valeur des contraintes principales de rupture mesurées sur des échantillons de taille finie variait linéairement en fonction de  $N^{-1/2}$ . Des calculs de  $\chi^2$  [94] montrent que cette hypothèse est statistiquement admissible. La courbe macroscopique trouvée est tracée sur la figure 3.15. Le paramètre

$$k_{\infty} = 27.22 \pm 0.02 \tag{3.28}$$

donne la meilleure interpolation de Lade-Duncan des points extrapolés.  $k_{\infty}$  étant strictement supérieur à 27, le domaine solide s'étend au-delà de la seule trisectrice : des assemblages macroscopiques peuvent être équilibrés sous un petit chargement déviatorique. La valeur du paramètre de Lade-Duncan dans la limite macroscopique correspond à :

$$\varphi_{\infty}^{\text{TC}} = 4.4^{\circ} \pm 0.2^{\circ}$$
 en compression triaxiale (3.29)

$$\varphi_{\infty}^{11} = 4.5^{\circ} \pm 0.3^{\circ} \quad \text{en extension triaxiale}$$
(3.30)  
$$\varphi_{\infty}^{S} = 5.2^{\circ} \pm 0.3^{\circ} \quad \text{en cisaillement}$$
(3.31)

La figure 3.16 montre que la courbe de rupture obtenue dans la limite macroscopique a une



Figure 3.15 : Contraintes principales à la rupture et fits de Lade-Duncan corrrespondants pour N = 1372, 4000 et 8788 (lignes rouges en traits pointillés). La courbe continue bleue correspond à la limite macroscopique (k = 27.22), tandis que les deux courbes bleues en pointillés, correspondant à k = 27.20 et k = 27.24, bornent l'intervalle d'incertitude.

forme assez proche de celle d'un cercle. Or, de nombreux critères ont des courbes de rupture quasi-circulaires dans une certaine gamme de valeurs de leur(s) paramètre(s) [133]. Même si le critère de Lade-Duncan est admissible d'un point de vue statistique, on peut se poser la question de la pertinence de ce modèle : n'existerait-il pas un autre critère encore mieux à même de décrire les propriétés de rupture des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants ? La réponse est sûrement affirmative puisque le critère de Lade-Duncan, comme la plupart des critères de rupture, est phénoménologique et ne repose pas sur un principe physique fondamental. Plutôt que de proposer un critère *ad hoc* (qui nécessiterait soit des résultats numériques plus précis, soit des calculs analytiques qui semblent hors de portée), nous avons cherché si un autre critère classique ne serait pas plus pertinent que celui de Lade-Duncan. Le critère de Drücker-Prager [134] (dont la courbe de rupture est toujours parfaitement circulaire dans le plan déviatorique) est inapte à interpoler les points et leurs barres d'erreur obtenus numériquement. En revanche, le critère de Matsuoka-Nakai [135], spécifiquement développé pour rendre compte des propriétés de rupture de certains sables, défini comme

$$f_{\rm MN}(\underline{\sigma}) = \frac{(\sigma_{\rm I} + \sigma_{\rm II} + \sigma_{\rm III})(\sigma_{\rm I}\sigma_{\rm II} + \sigma_{\rm II}\sigma_{\rm III} + \sigma_{\rm III}\sigma_{\rm I})}{(\sigma_{\rm I}\sigma_{\rm II}\sigma_{\rm III})} - m^{10}, \qquad (3.32)$$

interpole avec précision les contraintes principales extrapolées dans la limite macroscopique (avec  $m = 9.05 \pm 0.01$ ). Néanmoins, contrairement au critère de Lade-Duncan, ce critère n'est pas en mesure de rendre précisément compte des seuils de rupture mesurés sur les échantillons de petite taille.

<sup>10.</sup> Pour que le domaine  $f_{\rm MN} \leq 0$  ne soit pas réduit à l'ensemble vide, il faut  $m \geq 9.$ 

Ν	$S_N$	$\langle \mu^{\rm S} \rangle$	$\Delta \mu^{\rm S}$
256	4	0.246	0.022
500	4	0.210	0.007
1372	6	0.169	0.004
2048	6	0.154	0.004
2916	6	0.145	0.007
4000	10	0.136	0.007
8788	6	0.122	0.005

Tableau 3.13 : Moyennes  $\langle \mu^{\rm S} \rangle$  et écarts-types  $\Delta \mu^{\rm S}$  du coefficient de frottement effectif en cisaillement statique issus de  $S_N$  échantillons de N grains pour différentes valeurs de N. Les résultats correspondants à  $\kappa = \kappa_1$  et  $\kappa = \kappa_2$  ( $S_N/2$  échantillons chacun) sont regroupés.

# 3.3.3 Comparaison avec le frottement interne mesuré en cisaillement maintenu

Nous allons maintenant comparer l'extrapolation macroscopique des essais de cisaillement statiques avec les résultats issus de simulations à taux de cisaillement contrôlé ayant servi à étudier le régime liquide. Le frottement macroscopique

$$\mu^{\rm S} = \frac{|\tau_{\rm max}|}{P} \tag{3.33}$$

où  $\tau_{\text{max}}$  désigne la contrainte de cisaillement maximale qu'a pu soutenir le matériau de façon statique, est fonction de la taille N de l'échantillon. Les coefficients de frottement effectif en cisaillement statique sont regroupés dans le tableau 3.13. Les valeurs de  $\mu^{\text{S}}$  calculées sont supérieures à la valeur du coefficient de frottement géométrique macroscopique  $\mu_0^* = 0.101 \pm$ 0.004 (voir tableau 3.7). Les auteurs de la référence [112] ont fait des observations similaires pour des systèmes bidimensionnels de disques non frottants : dans la limite des taux de cisaillement nuls, la contrainte de cisaillement atteint sa valeur macroscopique à partir de quelques centaines de particules, alors que la contrainte de cisaillement minimale à appliquer pour forcer le matériau à s'écouler indéfiniment de manière stationnaire est beaucoup plus sensible à N. La figure 3.16 montre l'effet de N sur  $\mu^{\text{S}}$ . Les données sont bien fittées par l'expression suivante :

$$\mu^{\rm S} = \mu_{\infty}^{\rm S} + dN^{-1/2}, \tag{3.34}$$

avec

$$\begin{cases} \mu_{\infty}^{\rm S} &= 0.091 \pm 0.009 \\ d &= 2.87 \pm 0.32 \end{cases}$$
(3.35)

La valeur de  $\mu_{\infty}^{S}$  est compatible avec la valeur de  $\mu_{0}^{*}$ , qui correspond régime liquide (voir tableau 3.7). Une telle concordance a déjà été observée à deux dimensions [112]. L'influence de la taille du système sur le coefficient de frottement mesuré par des essais de cisaillement statique peut être expliquée de la manière suivante. Le coefficient de frottement mesuré en régime liquide est la moyenne des valeurs (fluctuantes) d'une série temporelle. Lorsque  $I \ll 1$ , le système reste en permanence proche de l'équilibre; si l'on suppose qu'il est possible de trouver un état d'équilibre très proche de chaque configuration explorée en cisaillement maintenu, et ce quelle que soit la valeur instantanée de la contrainte de cisaillement, cet état d'équilibre doit pouvoir être atteint par un essai de cisaillement statique. D'après cette vision très simplifiée des choses, il existerait des états d'équilibre même lorsque  $\sigma_{12}$  est de l'ordre des valeurs maximales prises



Figure 3.16 : Dépendance de  $\langle \mu^{\rm S} \rangle$  en la taille N du système. L'équation de la droite est donnée par 3.34–3.35. Les croix représentent la moyenne du centile supérieur des valeurs extraites de séries temporelles  $|\sigma_{12}|/\sigma_{22}$  issues de l'étude du régime liquide (voir tableau 3.6). La région hachurée correspond à l'estimation de  $\mu_0^*$  avec la barre d'erreur afférente (*cf.* tableau 3.7). Le gros point bleu et sa barre d'erreur est l'estimation du coefficient de frottement effectif en cisaillement statique dans la limite macroscopique,  $\mu_{\infty}^{\rm S}$ .

par les séries temporelles mesurées en cisaillement maintenu. Cette explication est étayée par l'expérience : la figure 3.16 montre en effet que  $\mu^{\rm S}$  varie en fonction de N à peu près de la même manière que la valeur moyenne du centile supérieur des valeurs prises par des séries temporelles  $|\sigma_{12}|/\sigma_{22}$  obtenues en étudiant le régime liquide avec un nombre inertiel I de l'ordre de  $10^{-5}$ .

La décroissance de la différence  $\mu^{\rm S} - \mu_0^*$  en fonction de N pourrait expliquer pourquoi la localisation du cisaillement apparaît plus facilement dans les systèmes de petite taille. Dans les systèmes de taille finie, l'existence d'une différence entre les coefficients de frottement effectif statique et dynamique implique que la contrainte de cisaillement est une fonction multivaluée du taux de déformation dans la limite quasi-statique. L'intervalle de multivaluation est d'autant plus grand que N est petit. Des bandes de cisaillement sont donc d'autant plus susceptibles d'apparaître que le système compte peu de grains [78, 136, 137]. La concordance entre  $\mu_0^*$  et  $\mu_\infty^S$ n'est pas une propriété commune à tous les systèmes désordonnés : on sait par exemple que dans la limite macroscopique, le coefficient de frottement statique est plus grand que le coefficient de frottement dynamique dans des verres de Lennard-Jones à température T > 0 [136, 137] et pour les avalanches granulaires [138, 139]. Dans le cas des verres de Lennard-Jones, cette différence est liée à l'existence d'un pic de cisaillement visible sur les courbes contrainte-déformation. Ce pic est également visible lorsque l'on cisaille des matériaux granulaires denses sauf si les grains sont non frottants (voir figure 3.3). Concernant les avalanches granulaires, on sait que  $\theta_{\text{stop}}(h) < \theta_{\text{start}}(h)$ , où  $\theta$  est l'inclinaison du plan sur lequel repose le matériau et h l'épaisseur de la couche en écoulement stationnaire. La faible épaisseur de la couche en question (moins de dix diamètres de grain typiquement) et le frottement intergranulaire sont certainement responsables de ce phénomène d'hystérésis.



Figure 3.17 :  $\Phi$  en fonction de  $\sin \varphi$  (défini dans le tableau 3.12) pour N = 8788 et  $\kappa = \kappa_1$ . Les carrés correspondent à un test de type TC, les triangles à un test de type TE et les cercles à un test de type S. Les courbes s'interrompent lorsque  $\sin \varphi$  atteint sa valeur de rupture.

# 3.3.4 Compacité

L'évolution de la compacité  $\Phi$  avec la contrainte déviatorique appliquée, caractérisée par sin  $\varphi = (\sigma_{\rm I} - \sigma_{\rm III})/(\sigma_{\rm I} + \sigma_{\rm III})$ , est représentée sur la figure 3.17 pour les trois essais numériques. Quel que soit le chargement appliqué, la valeur de la compacité  $\Phi$  reste à peu près égale à  $\Phi_{\rm RCP} \simeq 0.639$  entre l'état initial isotrope et le seuil de rupture. Les variations relatives de  $\Phi$  sont inférieures d'au moins un ordre de grandeur à la déformation du matériau.  $\Phi$  varie avec sin  $\varphi$  de manière assez erratique. Cependant,  $\Phi$  semble augmenter systématiquement tant que la contrainte appliquée est faiblement anisotrope, la courbe atteint ensuite un maximum et décroît lorsque l'on s'approche du seuil de rupture du matériau. Nous ne sommes pour le moment pas en mesure d'expliquer ce phénomène. Les sauts de  $\Phi$  sont corrélés avec les réarrangements intervenant au sein du réseau des contacts entre deux états d'équilibre successifs. Nous avons vérifié que plus le saut de compacité est important, plus les changements du réseau des contacts sont nombreux.

Penchons-nous maintenant plus particulièrement sur la compacité au seuil de rupture des échantillons soumis à un essai de cisaillement statique, notée  $\Phi^{S}$ .  $\Phi^{S}$  dépend très modérément de N. Si l'on suppose que  $\Phi^{S}$  varie linéairement en  $N^{-1/2}$ , il vient, pour  $\kappa = \kappa_1$ :

$$\Phi^{\rm S} = \Phi^{\rm S}_{\infty} - k/\sqrt{N} \tag{3.36}$$

avec

$$\begin{cases} \Phi_{\infty}^{S} = 0.6403 \pm 0.0004 \\ k = 0.125 \pm 0.026 \end{cases}$$
(3.37)

Les valeurs de densité correspondant à  $\kappa = \kappa_2$ , sont légèrement plus grandes, d'environ  $10^{-3}$ . Aux incertitudes statistiques près, les valeurs de  $\Phi_{\infty}^{\rm S}$  et  $\Phi_0^*$  (voir équation 3.22) coïncident. La densité de l'échantillon est donc la même, que celui-ci soit cisaillé de manière quasi-statique ou bien continûment. En négligeant la toute petite correction due à la valeur finie de  $\kappa_1$  (de l'ordre de  $10^{-4}$  d'après la formule 3.23), cela signifie que comme pour le coefficient de frottement interne, compacité statique et dynamique coïncident dans la limite géométrique macroscopique. Quant à la valeur  $\Phi^{\text{iso}}$  de la compacité dans l'état initial isotrope, elle vérifie (nous avons utilisé les échantillons du tableau 3.13 avec  $\kappa = \kappa_1$  et  $N \ge 500$ ) :

$$\Phi^{\rm iso} = \Phi^{\rm iso}_{\infty} - \frac{k_0}{\sqrt{N}} \tag{3.38}$$

avec

$$\begin{cases} \Phi_{\infty}^{\text{iso}} = 0.6397 \pm 0.0008 \\ k_0 = 0.15 \pm 0.03 \end{cases}$$
(3.39)

 $\Phi_{\infty}^{\text{iso}}$  est la compacité d'un assemblage RCP macroscopique. Aux incertitudes près, les résultats 3.22, 3.37 et 3.39 coïncident : le système est donc non dilatant dans la limite géométrique macroscopique.

Ce résultat reste valable pour des assemblages polydisperses. Pour un matériau constitué de 1372 grains de deux tailles différentes (des billes de diamètre a et des billes de diamètre 3a) en proportions volumiques 50-50, la compacité de l'état initial isotrope vaut  $\Phi_{iso} = 0.7034 \pm 0.0006$ . Or, d'après l'équation 3.25, issue de mesures de cisaillement simple extrapolées dans la limite quasi-statique,  $\Phi_0 = 0.7021 \pm 0.0010$ . Si on admet que les corrections de taille finie ont à peu près la même valeur lorsqu'on équilibre un échantillon sous une pression isotrope et lorsqu'on le cisaille, on en déduit que la compacité d'un assemblage RCP macroscopique reste égale dans le cas polydisperse à la compacité moyenne d'un assemblage cisaillé dans la limite géométrique macroscopique et donc que le matériau ne se dilate pas.

**Sur l'absence de dilatance :** Le fait que les assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants ne se dilatent pas en moyenne <sup>11</sup> lorsqu'elles sont lentement cisaillées contredit l'image fréquemment invoquée (due à Reynolds [48]) pour justifier le caractère apparemment inéluctable de la dilatance : on imagine un matériau granulaire dont les grains sont arrangés selon des plans parallèles ; lorsque ce matériau est cisaillé, le plan supérieur se déplace et, pour des raisons stériques, passe au-dessus des grains situés en-dessous, provoquant ainsi l'augmentation de volume du système. On peut toutefois objecter qu'il est assez malaisé de se représenter ce qui se produit lorsque les grains sont disposés de manière complètement désordonnée, et que la représentation précédente fait la part belle à la phase durant laquelle un plan passe par-dessus le reste des grains constituant le système et néglige celle où les grains redescendent sous l'effet du confinement. Généralisant les idées de Reynolds, J. D. Goddard et A. K. Didwania ont estimé la dilatance des assemblages de sphères non frottantes en étudiant statistiquement les simplexes de Delaunay pavant la boîte de simulation [131]. Contrairement à ce que nous observons, leurs calculs numériques prédisent une augmentation du volume du matériau lorsqu'il est cisaillé. Nous proposerons un modèle rendant compte de nos observations dans le paragraphe suivant.

L'absence de dilatance est également en contradiction avec l'idée que le frottement intergranulaire et la dilatance sont à l'origine du frottement effectif [49, 131]. D'après la référence [50], il existe une troisième composante  $\varphi_0$  du frottement effectif, provenant de la dissipation intervenant dans les collisions entre grains. Cette contribution permet d'expliquer l'existence d'un frottement effectif non nul pour un assemblage de particules non frottantes et n'est autre que l'angle de frottement interne mesuré dans la limite géométrique. Les auteurs de l'article [50], bien qu'ils ne se soient pas intéressés aux grains non frottants, semblent néanmoins penser que ces systèmes sont dilatants, une prédiction infirmée par nos calculs. Niels Kruyt et Leo Rothenburg, dans un article consacré à des assemblages bidimensionnels, prédisent que le matériau

<sup>11.</sup> Nos simulations du régime liquide montrent que la contrainte instantanée est corrélée à la densité, ce qui suggère l'existence d'un couplage entre cisaillement et dilatance à l'échelle des structures transitoires qui n'arrêtent pas de se former lorsque le matériau est cisaillé. Ce couplage disparaît lorsque l'on s'intéresse à des moyennes temporelles.

reste dilatant lorsque le frottement intergranulaire tend vers zéro [128] et montrent que le taux de dilatance augmente linéairement avec la différence de frottement interne entre le pic et l'état stationnaire. Contrairement à ce qu'indiquent nos résultats, ces deux quantités sont considérées comme non nulles dans la limite des grains non frottants et leur estimation de  $\mu_0^*$  surpasse largement la nôtre (3D) et celle (2D) de la référence [50]. Le cas où le frottement intergranulaire  $\mu_0$  est nul ne fait l'objet d'aucun traitement spécifique et rend donc indétectables d'éventuelles variations très rapides du frottement interne et de la dilatance au voisinage de  $\mu_0 = 0$ .

**Un modèle jouet :** Nous allons maintenant présenter un modèle simple permettant d'expliquer l'existence d'un frottement interne et l'absence de dilatance des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants. Ce modèle se veut analogique et ne doit pas être considéré au pied de la lettre. Le matériau est représenté par un objet non frottant susceptible de se déplacer sur une surface bosselée comportant des « collines » et des « cuvettes ». L'objet mobile, de masse M, est soumis à son poids W. On peut le déplacer de deux façons : soit en lui appliquant une force horizontale constante F, soit en le poussant à l'aide d'un piston animé d'une vitesse horizontale V. Les contacts entre le piston et l'objet, et entre la surface et l'objet, sont supposés unilatéraux de sorte que le mobile est susceptible de se déplacer plus rapidement que le piston lorsqu'il glisse dans une cuvette. Enfin, une force visqueuse s'oppose au déplacement tangentiel du mobile sur la surface et, lorsque F = 0, l'objet non frottant s'arrête donc au fond d'une cuvette. Ce modèle présente des points communs avec celui proposé dans [140] afin d'étudier les avalanches granulaires. Pour simplifier le problème, les auteurs de [140] considèrent un grain susceptible de rouler sur un substrat granulaire modélisé comme une surface accidentée, tandis que notre modèle jouet cherche à rendre compte du comportement d'un matériau granulaire constitué de billes rigides et non frottantes modélisé comme un unique objet non frottant. Pour simplifier les choses, nous considérons une situation bidimensionnelle. La direction horizontale est paramétrée par la coordonnée  $x_1$ , la direction verticale par la coordonnée  $x_2$  et la surface bosselée est un profil périodique  $h(x_1)$  de longueur d'onde  $\lambda$  où minima et maxima alternent (voir la figure 3.18). La force F correspond à la contrainte de cisaillement  $\sigma_{12}$  tandis que W correspond à  $\sigma_{22}$ . Un déplacement horizontal de l'objet mobile correspond à une déformation de cisaillement et un déplacement vertical à une déformation verticale, c'est-à-dire à une variation de volume. Les extréma d'énergie potentielle (comme le point O de la figure 3.18) représentent des états d'équilibre sous une contrainte isotrope.

Commençons par considérer un essai de cisaillement statique. Le mobile, initialement situé au point O, est progressivement soumis à une force horizontale F croissante. Il atteint un état d'équilibre mécanique lorsque la direction tangente à la courbe  $h(x_1), \frac{dh}{dx} = F/W$ , est perpendiculaire à la résultante de la force appliquée sur le mobile. Si F > 0, le mobile se déplace vers le haut, d'où l'apparition de dilatance. La quantité F/W est le coefficient de frottement effectif  $\mu^{\rm S} = \tan \varphi$ . La valeur maximale de F/W correspond à la pente maximale du profil  $h(x_1)$ , atteinte un en point S représenté sur la figure 3.18. L'angle de frottement effectif statique  $\varphi$  est l'angle maximal entre la réaction **R** du substrat sur lequel se meut le mobile et la direction verticale. Le mouvement quasi-statique de l'objet entre O et S suit la surface. Ainsi, la dilatance tan  $\psi$  (qui est égale à  $\dot{\varepsilon}_{22}/\dot{\gamma}$  pour un matériau granulaire cisaillé), définie comme le rapport entre les coordonnées verticales et horizontales de la vitesse du mobile, correspond également à la pente maximale du profil. Dans le cadre de ce modèle, les angles de dilatance et de frottement interne sont donc égaux :  $\psi = \varphi$ . Si on introduit un coefficient de frottement non nul  $\mu_0 = \tan \varphi_0$  entre l'objet mobile et le substrat, la réaction **R** au point S peut alors former un angle  $\varphi_0$  avec la direction normale (Sn), de sorte que l'angle de frottement effectif statique vaut  $\varphi = \varphi_0 + \psi$ . Cette relation est en accord avec des relations classiques entre angles de frottement effectif, de frottement intergranulaire, et de dilatance [40, 50]. Ce n'est pas très surprenant puisque les relations entre contrainte de cisaillement et dilatance ont souvent été



Figure 3.18 : Modèle jouet utilisé pour expliquer certaines propriétés des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants. L'objet mobile représente le système et évolue sur une surface rugueuse. (a) Cas du profil sinusoïdal. (b) Profil pour lequel les coefficients de frottement effectif statique et dynamique coïncident.

obtenues à l'aide de modèle ressemblant au nôtre : le frottement de deux surfaces rugueuses représentant des plans granulaires appartenant à des assemblages réguliers peut en effet être modélisé par un système du type de celui que nous avons choisi d'étudier [49].

Nous allons dorénavant supposer que le mobile est poussé par un piston et calculer la dissipation d'énergie du système afin d'en déduire la coefficient de frottement effectif dynamique. Dans la limite des faibles vitesses, la vitesse de l'objet mobile dépasse celle du piston à chaque maximum de  $h(x_1)$ . Le mouvement de l'objet est alors accéléré par son poids et freiné par la force visqueuse qui l'empêche d'atteindre et de franchir le maximum suivant. L'objet s'arrête donc au fond de la cuvette. Lorsque le piston le rejoint, celui-ci pousse l'objet jusqu'au maximum suivant. L'énergie dissipée par unité de longueur d'onde  $\lambda$  est l'énergie potentielle HW d'une chute de hauteur H. Le coefficient de frottement effectif dynamique vaut donc  $\mu^{\rm D} = H/\lambda$ . Il ne dépend pas du coefficient d'amortissement visqueux, comme lorsqu'un assemblage granulaire constitué de grains non frottants est lentement cisaillé<sup>12</sup>. Le modèle ne faisant intervenir que des ingrédients géométriques et inertiels, la limite des faibles vitesses du piston correspond à la limite géométrique. Quant à la limite macroscopique, elle peut être définie comme  $\lambda/L \to 0$ , L étant l'échelle de longueur pertinente dans une description macroscopique du mouvement de l'objet sur la surface. Le mouvement de l'objet mobile suivant la direction verticale est sans importance dans cette limite puisqu'il est de l'ordre de grandeur de la taille des aspérités de la surface. Notre modèle jouet prédit donc que dans la limite géométrique macroscopique, le coefficient de frottement effectif est non nul et que le matériau n'est pas dilatant. Le coefficient de frottement dynamique est plus petit que le coefficient de frottement statique ( $\mu^{\rm D} < \mu^{\rm S}$ ) puisque  $\mu^{\rm D}$  est égal à la pente moyenne du profil dans ses parties ascendantes, multipliée par le pourcentage d'une période où la fonction h est croissante, tandis que  $\mu^{\rm S}$  est égal à la valeur maximale de

<sup>12.</sup> Dans les deux cas, il est indispendable d'introduire un amortissement visqueux mais la valeur du coefficient, voire la forme précise de la force visqueuse, n'a pas d'importance.

la pente. Si le profil est supposé sinusoïdal,  $h(x_1) = \frac{H}{2}\sin(2\pi x_1/\lambda)$ , comme représenté sur la figure 3.18, alors  $\mu^{\rm S} = \pi H/\lambda$  et  $\mu^{\rm D} = H/\lambda$ . La fonction h doit nécessairement avoir l'allure montrée sur la partie (b) de la figure 3.18 (c'est-à-dire en dents de scie asymétriques, avec des portions croissantes linéaires reliées par des contre-marches verticales) pour que les deux coefficients de frottement effectif coïncident. Même si une telle forme de profil n'est certainement pas en mesure de représenter une véritable surface physique, elle permet de faire le lien avec le comportement des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants. Tant que le mobile reste en contact avec le substrat, il existe une valeur de F pour laquelle sa position est une position d'équilibre. Du point de vue d'un assemblage granulaire, cela correspond à l'existence d'un réseau de contacts capable d'équilibrer un chargement mécanique donné. La chute libre de l'objet mobile est quant à elle analogue à un réarrangement du réseau des contacts lorsqu'il n'est plus à même de supporter le chargement imposé. Des simulations numériques bidimensionnelles de disques rigides et non frottants montrent que le matériau se déforme suivant une succession de réarrangements soudains et que la fréquence de ces événements diverge dans la limite des grands systèmes [141]. Le modèle jouet présente des caractéristiques analogues, dans la limite  $\lambda \to 0$  d'une part, et également parce qu'un profil en dents de scies asymétriques (avec donc une pente constante dans les parties ascendantes) rend compte du fait que l'intervalle de contrainte supporté par un réseau de contacts donné est nul dans la limite thermodynamique.

Le profil (b) de la figure 3.18 fournit enfin une interprétation du nombre inertiel I et des fluctuations d'énergie cinétique. Deux temps caractéristiques interviennent lorsque le mobile est poussé par un piston. Le premier est la durée de la phase ascendante, durant laquelle le mobile est en contact avec le piston et se déplace à la vitesse horizontale  $V : \tau_1 = \lambda/V$ . Le second temps caractéristique est la durée de la chute libre :  $\tau_2 \propto \sqrt{MH/W}$ . Le rapport  $\tau_2/\tau_1 \propto (V/\lambda)\sqrt{MH/W}$  correspond au nombre inertiel I. En poursuivant l'analogie, H correspond à la longueur a (a fixe les épaisseurs typiques des interstices entre deux grains qui ne se touchent pas),  $V/\lambda$  à  $\dot{\gamma}$ , tandis que le poids W correspond à  $a^2P$ , qui est la valeur de la force de contact typique au sein d'un assemblage granulaire. L'existence de phases de chute libre explique pourquoi les fluctuations d'énergie cinétique sont beaucoup plus grandes que l'échelle d'énergie  $MV^2$  associée au mouvement macroscopique. De manière plus précise, la moyenne temporelle  $\delta e_c$  de l'énergie cinétique associée aux fluctuations de vitesse est est de l'ordre de  $HW\tau_2/\tau_1$  (pour  $\tau_2 \ll \tau_1$ ) d'où :

$$\frac{\delta e_c}{MV^2} \propto \frac{1}{I} \frac{H^2}{\lambda^2} \tag{3.40}$$

Ce comportement est conforme à celui observé sur la figure 3.4 puisque  $\lambda/H$  est un simple facteur géométrique (une explication similaire du comportement de  $\delta e_c/(MV^2)$  est avancée dans la référence [78]). En conclusion, le modèle jouet rend bien compte d'un certain nombre de propriétés des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants. Dans les deux cas, le système évolue via une succession d'étapes dynamiques entrecoupées par des phases temporaires d'équilibre.

# 3.4 Aspects microstructurels et micromécaniques

L'étude de la limite géométrique macroscopique menée jusqu'à présent appelle naturellement une analyse microstructurale des assemblages obtenus, notamment afin d'élucider l'origine microscopique du frottement effectif des assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants. Nous nous restreignons ici à l'examen de certaines grandeurs élémentaires, scalaires (connectivité, distribution de l'intensité des forces...) ou tensorielles (texture géométrique, anisotropie de la distribution des forces de contact...), en laissant de côté les aspects non locaux,

I	к	$n_0$	$n_1$	na	no	204	n=	ne	27	no	no	<i>n</i> <sub>10</sub>
1	70	P0	$P_1$	$P_2$	<i>P</i> 3	P4	$P_{\mathcal{D}}$	$P_0$	Pi	P8	<i>P</i> 9	P10
$3.2 \times 10^{-1}$	$\kappa_1$	30.0	21.8	21.8	17.9	7.40	1.1	0	0	0	0	0
$3.2 \times 10^{-2}$	$\kappa_1$	4.0	5.3	9.3	19.1	30.0	21.3	8.6	2.1	0.3	0	0
$3.2 \times 10^{-3}$	$\kappa_1$	1.6	1.4	2.2	6.7	22.1	28.4	22.3	11.2	3.4	0.5	0
$3.2 \times 10^{-4}$	$\kappa_1$	1.2	0.6	0.6	2.1	15.7	26.2	27.0	17.9	7.2	1.5	0.1
$3.2 \times 10^{-5}$	$\kappa_1$	1.2	0.2	0.2	0.6	12.6	24.1	28.3	21.1	9.4	2.2	0.2
Essais S	$\kappa_1$	$1.3\pm0.2$	0	0	0	$10.8\pm0.4$	$22.7\pm0.5$	$29.1\pm0.8$	$23.1\pm0.5$	$10.2\pm0.5$	$2.5 \pm 0.1$	$0.3\pm0.1$
Essais S	$\kappa_2$	$1.2\pm0.2$	0	0	0	$9.3\pm0.4$	$21.6\pm0.8$	$29.4\pm0.7$	$23.7\pm0.4$	$11.4\pm0.3$	$3.0 \pm 0.2$	$0.3\pm0.1$

Tableau 3.14 : Connectivités mesurées lors d'expériences de cisaillement maintenu et pour des essais de type S (cisaillement quasi-statique). Le pourcentage de grains en contact avec n voisins est noté  $p_n$ . Cinq premières lignes : données provenant des simulations du régime liquide (N = 1372,  $\zeta = 0.98$ ). Deux dernières lignes : résultats issus des essais de type S effectués sur cinq configurations initiales différentes (N = 4000,  $\zeta = 0.98$ ).

commes les mécanismes de la déformation, les corrélations de vitesse, la diffusion des particules, etc., dont l'analyse, pour intéressante qu'elle soit, est nettement plus complexe. L'analyse microstructurale des configurations obtenues lorsque la sollicitation est quasi-statique va également nous permettre de comparer les configurations obtenues avec un assemblage RCP, dont les caractéristiques sont bien connues.

### 3.4.1 Quantités scalaires

**Connectivité :** En régime liquide, la valeur moyenne temporelle en régime stationnaire  $p_n =$  $\langle p_n(t) \rangle_t$  de la proportion de billes ayant exactement n contacts avec des particules voisines dépend fortement du nombre inertiel I (voir le tableau 3.14). La fraction  $p_n$  ne dépend pas de de la taille N de l'échantillon et de la configuration initiale. Elle est en revanche sensible à la valeur de  $\kappa$ : la proportion de grains en contact avec un grand nombre de billes voisines augmente avec  $\kappa$ . Les incertitudes sur les valeurs de  $p_n$  sont faibles (entre 0.01% et 0.05%). La distribution  $(p_n)$  a également été mesurée sur des configurations équilibrées, obtenues à l'aide d'essais quasistatiques, à proximité de la limite de rupture. Les valeurs mesurées pour des essais de type S sont écrites dans la partie basse du tableau 3.14. Les valeurs mesurées en régime liquide tendent vers celles trouvées en cisaillement quasi-statique lorsque l'on s'approche de la limite quasi-statique. D'autre part, à l'équilibre, quel que soit le déviateur des contraintes appliqué à l'échantillon, la distribution  $(p_n)$  est identique à celle mesurée sur des assemblages isotropes [13]. On remarque que pour les assemblages équilibrés,  $p_1 = p_2 = p_3 = 0$ : en effet, les forces de contact étant répulsives et purement normales, la résultante des forces de contact appliquées à une bille ne peut être nulle si celle-ci touche strictement moins de quatre autres sphères <sup>13</sup>. Comme pour les assemblages isotropes, certains grains, que l'on qualifie de flottants, n'appartiennent pas au réseau des contacts. Les essais quasi-statiques montrent qu'une proportion  $p_0 = 1.3\%$  des grains sont dans ce cas, un pourcentage identique à celui obtenu sur des assemblages isotropes [13].

**Coordinence :** Le nombre de coordination z est le nombre moyen de contacts par grain. Si l'on note  $N_c$  le nombre total de contacts entre deux grains dans l'échantillon qui compte N billes, alors  $z = 2N_c/N$ . Le nombre de coordination se déduit également de la connectivité :  $z = \sum_n np_n$ . Les simulations dynamiques du régime liquide montrent que z dépend très fortement de I (voir la figure 3.19) et qu'il est aussi affecté par la valeur de  $\kappa$ . Quant à l'influence de

<sup>13.</sup> Par exemple, une bille en contact avec trois autres sphères s'éloignera du plan défini par les centres de celles-ci.



Figure 3.19 : Nombre de coordination z en fonction du nombre inertiel I avec  $\kappa = \kappa_1$  (carrés rouges reliés en pointillés) et  $\kappa = \kappa_2$  (croix bleues reliées par des tirets).

 $\zeta$  sur z, si elle est notable pour les plus grandes valeurs de I étudiées (un coefficient d'amortissement visqueux plus grand provoque une augmentation de la durée de vie moyenne d'un contact et donc du nombre moyen de contacts), elle diminue à mesure que l'on s'approche de la limite quasi-statique. D'après nos simulations, l'influence de  $\zeta$  sur z est négligeable pour  $I < 10^{-4}$ . En régime solide, on sait que le squelette (ensemble des particules exerçant au moins une force de contact non nulle) des assemblages granulaires formés de billes non frottantes parfaitement rigides est isostatique [51]. Cette propriété a déjà été discutée à plusieurs reprises [101, 142, 13]. La propriété d'isostaticité désigne la correspondance bijective existant entre les forces extérieures appliquées et les forces de contact permettant d'équilibrer le chargement imposé ou bien, par dualité, la correspondance biunivoque entre les vitesses des particules et les vitesses relatives normales au niveau des contacts. Ces bijections impliquent que si un assemblage est rigoureusement isostatique, alors le nombre de degrés de liberté du squelette, à savoir  $3N(1-p_0)$  est égal au nombre de contacts, et donc que la coordinence du squelette granulaire  $z^* = z/(1-p_0)$ est égale à 6. Pour les trois types d'essais quasi-statique effectués avec  $\kappa = \kappa_1$ , on constate que  $z^* = 6.08 \pm 0.03$  pour tous les états d'équilibre intermédiaires entre l'état isotrope initial et la rupture du matériau. Le léger défaut d'isostaticité observé est imputable à la rigidité finie des billes.

Considérons maintenant non plus le réseau des contacts, mais le réseau  $C_h$  défini comme l'ensemble des liens joignant toutes les paires de grains séparées d'une distance inférieure à h ( $C_{h=0}$ s'identifie bien entendu au réseau des vrais contacts). L'analyse des propriétés de  $C_h$  est intéressante à plusieurs titres : pour le calcul de la fonction de corrélation de paires d'une part et à des fins de comparaison avec des observations expérimentales d'empilements de sphères d'autre part <sup>14</sup>. On note z(h) le nombre de coordination de  $C_h$ . z(h) part de z pour h = 0 et est égal à l'intégrale de la fonction de corrélation de paires (de centres des sphères) jusqu'à une distance a+h. La figure 3.20 montre que les courbes obtenues avec différents essais quasi-statiques coïncident et que celles obtenues en cisaillement maintenu tendent vers ces dernières lorsque  $I \to 0$ . Les assemblages équilibrés vérifient  $z(h) - z(0) \propto (h/a)^{0.6}$  pour  $h/a \ll 1$ , un comportement

<sup>14.</sup> La résolution actuelle de la tomographie X [143] ne permet par exemple d'avoir accès à  $C_h$  que lorsque la valeur de h est supérieure à 4% du diamètre des grains.



Figure 3.20 : Nombre de coordination z(h) du réseau  $C_h$  en fonction de h/a. À gauche : résultats pour  $I = 3.2 \times 10^{-3}$  (croix rouges),  $I = 3.2 \times 10^{-5}$  (carrés bleus) et pour une configuration d'équilibre juste avant la limite de rupture obtenue par cisaillement statique (cercles noirs); la différence entre  $I = 3.2 \times 10^{-5}$  et les résultats statiques apparaît en médaillon, lorsque l'on trace les résultats en échelle log-log. À droite : résultats pour des configurations équilibrées avec un déviateur de contraintes maximal pour des essais de type TC, TE et S; toutes les données sont regroupées sur une même courbe, y compris au voisinage de l'origine.

déjà observé par le passé sur des assemblages isotropes [142, 13]. Cette loi de puissance reste à ce jour inexpliquée; de plus, le préfacteur et l'exposant dépendent quelque peu de l'intervallle de valeurs de h/a considéré et du traitement des grains flottants [144, 13].

**Distribution de l'intensité des forces :** La figure 3.21 montre la densité de probabilité p(f) de la force intergranulaire normalisée par la force moyenne f, pour différentes valeurs du nombre inertiel I. La distribution dépend fortement de I : lorsque  $I > 3.2 \times 10^{-2}$ , p(f) est décroissante, tandis que pour de plus petites valeurs, p(f) atteint son maximum autour de f = 0.5 et décroît à peu près exponentiellement pour de plus grandes valeurs de f. Cette forme de p(f)n'est pas sans rappeler celle observée sur des assemblages granulaires isotropes à l'équilibre mécanique [145, 3, 146, 147, 148, 142, 13]. La densité p(f) est essentiellement contrôlée par la géométrie puisque le squelette granulaire est quasiment isostatique. Des tests de vraisemblance de Kolmogorov-Smirnov [94] montrent que les densités de probabilité des configurations d'équilibre sont toutes statistiquement indiscernables. Elles ne dépendent ni du nombre de grains, ni du type de chargement mécanique, ni de la distance à la limite de rupture. Aux incertitudes statistiques près, p(f) coïncide donc avec l'expression donnée dans la référence [142], et ce quelle que soit l'anisotropie de la configuration équilibrée. En régime liquide, les distributions obtenues tendent vers la distribution statique à mesure que l'on s'approche de la limite quasi-statique : le test de Kolmogorov-Smirnov montre que la distribution mesurée coïncide avec la distribution statique pour  $I \le 5 \times 10^{-3}$ . Enfin, la distribution de f n'est pas affectée par le niveau de raideur  $\kappa$  et l'influence de  $\zeta$  n'est visible que lorsque I est supérieur à 0.1.

Une loi de probabilté peut en particulier être caractérisée par la donnée de ses moments. On pose, pout tout réel x > 0:

$$Z(x) = \langle f^x \rangle = \frac{\langle F^x \rangle}{\langle F \rangle^x}$$

$$-97 -$$
(3.41)


Figure 3.21 : Densité de probabilité de  $f = F_N^e/\langle F_N^e \rangle$  pour  $I = 3.2 \times 10^{-1}$  (triangles rouges),  $I = 3.2 \times 10^{-3}$  (disques bleus) et  $I = 3.2 \times 10^{-5}$  (carrés noirs).

Nous avons en particulier mesuré Z(2) et Z(5/3) (la connaissance de ces valeurs nous sera en effet utile dans la section 3.4.3); on trouve :

$$Z(2) = 1.53 \pm 0.02 \tag{3.42}$$

$$Z(5/3) = 1.29 \pm 0.01 \tag{3.43}$$

#### 3.4.2 Anisotropie

Des travaux menés ces dernières années ont montré que la résistance des matériaux granulaires vis-à-vis de l'application d'une contrainte déviatorique est due à l'anisotropie des contacts et des forces induites par le chargement mécanique [9, 149]. Mathématiquement, l'anisotropie est caractérisée par la densité de probabilité  $P(\vec{n}, F)$  de trouver un contact orienté selon le vecteur unitaire  $\vec{n}$  portant une force d'intensité F. Les systèmes considérés étant proches de la limite rigide ( $\kappa \gg 1$ ), le tenseur des contraintes de Cauchy  $\underline{\sigma}$  d'un assemblage équilibré peut s'écrire :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \frac{N_c a}{V} \langle \vec{F} \otimes \vec{n} \rangle$$

$$= \frac{N_c a}{V} \int d\Omega \, dF \, P(\vec{n}, F) F \vec{n} \otimes \vec{n}$$

$$= \frac{N_c a}{V} \int d\Omega \, E(\vec{n}) \langle F \rangle_{\vec{n}} \, \vec{n} \otimes \vec{n} \qquad (3.44)$$

où  $\langle F \rangle_{\vec{n}}$  est la densité angulaire de force (égale à  $\langle F \rangle / (4\pi)$  pour un empilement isotrope) et  $E(\vec{n})$  la densité de probabilité de trouver un contact orienté selon  $\vec{n}$ . Le vecteur  $\vec{n}$  étant unitaire, il peut être paramétré par le couple d'angle  $(\theta, \psi)$ .  $\theta$  est la colatitude et l'axe de coordonnée  $x_3$ , colinéaire à la vorticité dans les simulations de cisaillement maintenu, correspond à  $\theta = 0$  ou à  $\theta = \pi$ .  $\psi$  est la longitude des coordonnées sphériques et  $\psi = 0$  correspond à l'axe de coordonnée  $x_1$ , qui est parallèle au champ de vitesses macroscopique en régime liquide.

#### Anisotropie géométrique

 $E(\theta,\psi)$  est définie sur la sphère unité  $\mathbb{S}^2$ ; à ce titre, cette fonction peut être décomposée en harmoniques sphériques  $Y_l^m$ :

$$E(\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{l,m} Y_l^m(\theta,\psi), \qquad (3.45)$$

avec

$$c_{l,m} = \iint_{\mathbb{S}^2} \overline{Y_l^m(\theta, \psi)} E(\theta, \psi) \, d\Omega.$$
(3.46)

( désigne la conjugaison complexe.) Les contacts intergranulaires n'étant pas orientés, E vérifie  $E(\theta, \psi) = E(\pi - \theta, \psi + \pi)$  (symétrie de parité), ce qui entraîne que  $c_{l,m} = 0$  lorsque l est impair. L'ordre 2 est donc l'ordre le plus bas du développement qui est sensible à l'anisotropie. De manière générale, les coefficients  $c_{l,m}$  peuvent être déduits des tenseurs de texture géométrique d'ordre pair, définis comme  $\langle \bigotimes_{i=1}^{2k} \vec{n} \rangle \equiv \frac{1}{N_c} \sum_{c \in C_0} \bigotimes_{i=1}^{2k} \vec{n}_c$  (et réciproquement). En particulier, les coefficients  $c_{2,m}$  sont fonction des éléments du tenseur de texture d'ordre 2,  $\underline{\mathbf{F}} = \langle \vec{n} \otimes \vec{n} \rangle$ . Les harmoniques sphériques d'ordre 2 s'écrivent, en coordonnées cartésiennes :

$$Y_2^{\pm 2}(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{x_1^2 - x_2^2 \pm 2ix_1x_2}{r^2}$$
(3.47)

$$Y_2^{\pm 1}(x_1, x_2, x_3) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi} \frac{x_1 x_3 \pm i x_2 x_3}{r^2}}$$
(3.48)

$$Y_2^0(x_1, x_2, x_3) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3x_3^2 - r^2}{r^2}$$
(3.49)

En utilisant l'équation 3.46, il vient :

$$c_{2,-2} + c_{2,2} = 2\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(F_{11} - F_{22})$$
 (3.50)

$$c_{2,-2} - c_{2,2} = 2\sqrt{\frac{15}{32\pi}} 2iF_{12}$$
(3.51)

$$c_{2,-1} + c_{2,1} = 2\sqrt{\frac{15}{8\pi}}iF_{23} \tag{3.52}$$

$$c_{2,-1} - c_{2,1} = 2\sqrt{\frac{15}{8\pi}}F_{13}$$
(3.53)

$$c_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3F_{33} - 1) \tag{3.54}$$

À l'ordre 2,

$$E(\theta,\varphi) = \frac{1}{4\pi} + c_{2,0}Y_2^0(\theta,\psi) + c_{2,2}Y_2^2(\theta,\psi) + \overline{c_{2,-2}Y_2^{-2}(\theta,\psi)} + c_{2,1}Y_2^1(\theta,\psi) + \overline{c_{2,-1}Y_2^{-1}(\theta,\psi)}$$
(3.55)

Sachant que  $\overline{Y_l^m(\theta,\psi)} = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\psi)$ , on obtient :

$$E(\theta,\varphi) = \frac{1}{4\pi} + c_{2,0}Y_2^0(\theta,\psi) + 2\Re(c_{2,2}Y_2^2(\theta,\psi)) + 2\Re(c_{2,1}Y_2^1(\theta,\psi))$$
(3.56)

Posons

$$d_{xy}(\theta,\psi) = \frac{15}{8\pi} \sin^2 \theta \sin(2\psi)$$
(3.57)

$$d_{x^2 - y^2}(\theta, \psi) = \frac{15}{16\pi} \sin^2 \theta \cos(2\psi)$$
(3.58)

$$d_{z^2}(\theta, \psi) = \frac{15}{16\pi} (3\cos^2\theta - 1)$$
(3.59)

$$d_{xz}(\theta,\psi) = \frac{15}{4\pi} \sin\theta\cos\theta\cos\psi \qquad (3.60)$$

$$d_{yz}(\theta,\psi) = \frac{15}{4\pi}\sin\theta\cos\theta\sin\psi \qquad (3.61)$$

Alors :

$$E(\theta, \psi) = 1/(4\pi) + F_{12}d_{xy}(\theta, \psi) + (F_{11} - F_{22})d_{x^2 - y^2}(\theta, \psi) + (F_{33} - 1/3)d_{z^2}(\theta, \psi) + F_{13}d_{xz}(\theta, \psi) + F_{23}d_{yz}(\theta, \psi) + \text{terms d'ordre supérieur}$$
(3.62)

La constante  $1/(4\pi)$  correspond à une distribution isotrope tandis que les cinq termes suivants du développement caractérisent l'anisotropie géométrique du matériau à l'ordre le plus bas.

En régime liquide, on considère les valeurs moyennées dans le temps (en régime stationnaire) des éléments du tenseur de texture géométrique  $\underline{\mathbf{F}}$ . Les simulations indiquent que  $F_{13}$  et  $F_{23}$  sont toujours inférieures à leurs incertitudes respectives. On peut donc considérer ces coefficients commes nuls. De plus, on constate que le coefficient  $F_{12}$  est toujours plus grand (d'au moins un ordre de grandeur) que les deux autres coefficients anisotropes non nuls,  $F_{11} - F_{22}$  et  $F_{33} - 1/3$ . Comme en témoigne la figure 3.22, les deux derniers termes sont plus petits que  $2 \times 10^{-3}$  pour  $I < 10^{-3}$ . D'aussi petites valeurs sont comparables à celles que l'on mesure sur des échantillons isotropes équilibrés de même taille. En conséquence, l'anisotropie géométrique du matériau peut être caractérisée par la seule donnée de  $F_{12}$  à proximité de la limite quasi-statique :

$$E(\theta, \psi) = 1/(4\pi) + F_{12}d_{xy}(\theta, \psi)$$
(3.63)

Lorsque  $I \rightarrow 0$ , on trouve que  $F_{12}$  vaut  $F_{12}^0 = -0.0165 \pm 0.0007$  pour  $\kappa = \kappa_1$  et  $F_{12}^0 =$  $-0.0156 \pm 0.0007$  pour  $\kappa = \kappa_2$ . Tout comme le frottement effectif  $\mu^*$  et la densité  $\Phi$ ,  $F_{12}$  dépend de manière importante de I (voir la figure 3.22) et la variation de  $|F_{12} - F_{12}^0|$  avec I peut être par une loi de puissance d'exposant approximativement égal à 0.36. Enfin,  $F_{12}$  est une fonction légèrement croissante du niveau de raideur  $\kappa$ . Les variations de  $F_{12}$  avec I,  $\kappa$  et  $\zeta$  s'expliquent par l'influence qu'exerce le nombre de coordination sur l'anisotropie de l'assemblage. Considérons une bille entourée d'autres grains : pour des raisons d'encombrement stérique, plus le nombre de grains en contact avec la bille centrale est élevé, moins leur distribution spatiale peut être anisotrope [150]. Ainsi, un assemblage granulaire constitué de grains non frottants sera d'autant plus anisotrope que l'on s'éloigne de la limite rigide puisque z est une fonction décroissante de  $\kappa$ . De même, l'augmentation de l'anisotropie avec I s'explique par la décroissance concomitante de la coordinance. Enfin, l'augmentation de  $|F_{12}|$  avec I est également due à la corrélation entre l'orientation des contacts et l'intensité des forces qu'ils portent. Remarquons pour finir que l'anisotropie du réseau fort des contacts (ensemble des contacts portant des forces supérieures à la moyenne) est beaucoup plus marquée que celle du réseau faible (ensemble des contacts portant des forces inférieures à la moyenne).

Lorsque le matériau est soumis à des tests triaxiaux (d'axe  $x_3$  par convention), le développement 3.62 se réduit par raison de symétrie à :

$$E(\vec{n}) \simeq \frac{1}{4\pi} + \left(F_{33} - \frac{1}{3}\right) d_{z^2}(\theta, \psi)$$
(3.64)  
- 100 ---



Figure 3.22 :  $F_{12}$  (en rouge),  $F_{11}-F_{22}$  (en bleu) et  $F_{33}-1/3$  (en magenta) en fonction de I, avec  $\kappa = \kappa_1$ ,  $\zeta = 0.98$  et N = 4000. La courbe continue est un fit en loi de puissance de  $|F_{12}|$  à partir d'une valeur initiale  $F_{12}^0 \equiv \lim_{I \to 0} F_{12}$  (la valeur de  $F_{12}^0$  est symbolisée par la ligne horizontale tiretée).

La figure 3.23 montre la façon dont le coefficient caratérisant l'anisotropie du matériau au deuxième ordre,  $F_{33} - 1/3$ , évolue avec  $(\sigma_{33} - \sigma_{11})/(\sigma_{33} + \sigma_{11})$  ( $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{33}$  sont des contraintes principales dans le cas des essais triaxiaux)<sup>15</sup>, pour des systèmes de deux tailles différentes soumis à des essais quasi-statiques de type TC ou TE. Quel que soit le test réalisé, la valeur absolue de  $F_{33} - 1/3$  augmente avec l'intensité du déviateur appliqué. L'analyse de la régression des fluctuations des données ayant servi pour tracer la figure 3.23 laisse à penser que la courbe représentant l'évolution du terme anisotrope en fonction de l'intensité du déviateur devient parfaitement définie dans la limite macroscopique. La dépendance de  $F_{33} - 1/3$  en ( $\sigma_{33} - \sigma_{11}$ )/( $\sigma_{33} + \sigma_{11}$ ) est à peu près linéaire, même si on peut remarquer que la pente de la courbe semble changer aux environs de la limite du domaine solide macroscopique. Bien que la valeur maximale que peut atteindre le coefficient caractérisant l'anisotropie dépende de la taille du système, la pente  $S_{\rm fab}$  de la ligne droite interpolant les valeurs de  $F_{33} - 1/3$  en fonction de ( $\sigma_{33} - \sigma_{11}$ )/( $\sigma_{33} + \sigma_{11}$ ) dans le domaine solide macroscopique, ainsi que celle de la droite fittant l'évolution de  $F_{12}$  fonction de  $\sigma_{12}/\sigma_{22}$  obtenue grâce à des essais de cisaillement statique, ne dépend pas de N si le nombre N de grains est suffisamment grand. Pour N  $\geq 4000$ :

$$S_{\rm fab} = \begin{cases} 0.197 \pm 0.010 & \text{pour les tests TC} \\ 0.210 \pm 0.015 & \text{pour les tests TE} \\ 0.158 \pm 0.015 & \text{pour les tests S} \end{cases}$$
(3.65)

Nous nous sommes également intéressés aux corrélations spatiales d'anisotropie en étudiant le tenseur de texture géométrique du réseau  $C_h$  précédemment défini en fonction de h. Les paramètres d'anisotropie sont tracés en fonction de h sur la figure 3.24, pour des états équilibrés sous un déviateur de contrainte maximal (c'est-à-dire juste avant la rupture du matériau). Ils commencent par décroître en valeur absolue et s'annulent à proximité de h/a = 0.2. Les petites valeurs de signe opposé mesurées au-delà sont de l'ordre du bruit ( $\simeq 0.001$ ) affectant

<sup>15.</sup> D'autres expressions faisant intervenir un rapport de contraintes principales auraient tout aussi bien pu être utilisées.



Figure 3.23 : Variation du terme caractérisant l'anisotropie géométrique avec  $r = (\sigma_{33} - \sigma_{11})/(\sigma_{33} + \sigma_{11})$  pour des essais quasi-statiques de type TC (r > 0) et TE (r < 0). Les croix rouges correspondent à N = 1372 et les carrés bleus à N = 8788. Le domaine solide macroscopique (macroscopic solide range) est borné par les valeurs extrémales de  $(\sigma_{33} - \sigma_{11})/(\sigma_{33} + \sigma_{11})$  en régime solide.



Figure 3.24 : Terme caractérisant l'anisotropie du réseau des liens  $C_h$  juste avant la limite de rupture en fonction de h avec N = 8788 pour des essais quasi-statiques de type TC (cercles), TE (croix) et S (triangles).

les coefficients correspondants pour des configurations isotropes. La distribution spatiale des particules voisines (mais pas en contact) à un grain donné tend donc à annuler l'anisotropie du réseau des contacts. L'anisotropie du matériau est donc à courte portée : elle est quasiment negligeable si l'on moyenne sur l'épaisseur de la première couche de particules voisines (c'est-à-dire si l'on considère le réseau  $C_h$  pour la valeur de h correspondant au premier minimum de la fonction de corrélation de paires, en l'occurence  $h/a \simeq 0.35$  [142, 13]).

#### Anisotropie mécanique

L'anisotropie mécanique est encodée dans la dépendance angulaire de  $\langle F \rangle_{\vec{n}}$ . Tout comme  $E(\vec{n})$ , cette fonction peut s'écrire comme une série d'harmoniques sphériques d'ordre pair. Comme dans le cas de l'anisotropie géométrique, seul un terme du développement à l'ordre 2 domine. Pour les essais de type S

$$\langle F \rangle_{\vec{n}} \simeq \left( \frac{1}{4\pi} + H_{12} \, d_{xy}(\theta, \psi) \right) \langle F \rangle$$
 (3.66)

et pour les essais triaxiaux (TC et TE)

$$\langle F \rangle_{\vec{n}} \simeq \left( \frac{1}{4\pi} + H_{33} \, d_{z^2}(\theta, \psi) \right) \langle F \rangle$$

$$(3.67)$$

 $\langle F \rangle$  désigne l'intensité moyenne des forces de contact. Les paramètres caractérisant l'anisotropie mécanique au deuxième ordre,  $H_{12}$  et  $H_{33}$ , sont calculés en divisant la sphère unité  $\mathbb{S}^2$  en petits morceaux. Ce découpage permet de calculer une approximation des produits scalaires – défini comme  $\langle f, g \rangle = \int (d\Omega/(4\pi)) f(\theta, \psi) g(\theta, \psi)$ , avec f et g deux fonctions définies sur la sphère unité – de  $\langle F \rangle_{\vec{n}}$  avec  $d_{xy}$  (égal à  $H_{12}$ ) et  $d_{z^2}$  (égal à  $H_{33}$ ). L'évolution de  $H_{33}$  sous chargement triaxial fait l'objet de la figure 3.25. Les données recueillies montrent l'existence d'une correspondance bijective avec l'anisotropie de la contrainte appliquée approximativement linéaire lorsque le déviateur n'est pas trop grand. La pente  $S_{\text{for}}$  de la droite de régression de la figure 3.25 est indépendante de N pour N suffisamment grand. Posons :

$$H_{33} = S_{\text{for}} \frac{(\sigma_{33} - \sigma_{11})}{(\sigma_{33} + \sigma_{11})} \quad \text{pour les tests TC et TE}$$
(3.68)

$$H_{12} = S_{\text{for}} \frac{\sigma_{12}}{\sigma_{22}} \quad \text{pour les tests S}$$
(3.69)

Avec  $N \geq 4000$  :

$$S_{\rm for} = \begin{cases} 0.250 \pm 0.012 & \text{pour les tests TC} \\ 0.235 \pm 0.015 & \text{pour les tests TE} \\ 0.173 \pm 0.014 & \text{pour les tests S} \end{cases}$$
(3.70)

#### Relation contrainte/anisotropie

Les relations entre contrainte et anisotropie que nous avons mises en évidence permettent de rendre compte précisément de l'intensité du déviateur de contrainte à partir de la seule connaissance des paramètres d'anisotropie. Dans le cas des tests triaxiaux, la combinaison des équations 3.64 et 3.67 permet d'écrire, en ne gardant que les termes d'ordre au plus 2,

$$E(\vec{n}) \times \langle F \rangle_{\vec{n}} \simeq \left[ \frac{1}{16\pi^2} + \left( \frac{H_{33} + F_{33} - 1/3}{4\pi} \right) d_{z^2}(\theta, \psi) \right] \langle F \rangle$$

$$(3.71)$$

$$- 103 -$$



Figure 3.25 : Variation du terme caractérisant l'anisotropie mécanique avec  $r = (\sigma_{33} - \sigma_{11})/(\sigma_{33} + \sigma_{11})$  pour des essais quasi-statiques de type TC (r > 0) et TE (r < 0). Les croix rouges correspondent à N = 1372 et les carrés bleus à N = 8788.

En combinant cette relation avec l'équation 3.44, on obtient :

$$\sigma_{11} \simeq \frac{N_c a \langle F \rangle}{V} \left[ \frac{1}{12\pi} - \frac{1}{8\pi} (H_{33} + F_{33} - 1/3) \right]$$
(3.72)

$$\sigma_{33} \simeq \frac{N_c a \langle F \rangle}{V} \left[ \frac{1}{12\pi} + \frac{1}{4\pi} (H_{33} + F_{33} - 1/3) \right]$$
(3.73)

D'où :

$$\frac{\sigma_{33}}{\sigma_{11}} \simeq 2 \frac{H_{33} + F_{33}}{1 - H_{33} - F_{33}} \tag{3.74}$$

Dans le cas des essais de cisaillement quasi-statique, la combinaison des équations 3.63 et 3.66 fournit, en se limitant aux termes d'ordre inférieur ou égal à 2 :

$$E(\vec{n}) \times \langle F \rangle_{\vec{n}} \simeq \left[ \frac{1}{16\pi^2} + \left( \frac{F_{12} + H_{12}}{4\pi} \right) d_{xy}(\theta, \psi) \right] \langle F \rangle \tag{3.75}$$

En insérant cette relation dans l'expression 3.44, il vient :

$$\sigma_{12} \simeq \frac{F_{12} + H_{12}}{4\pi} \frac{N_c a \langle F \rangle}{V}$$
(3.76)

$$\sigma_{22} \simeq \frac{1}{12\pi} \frac{N_c a \langle F \rangle}{V} \tag{3.77}$$

D'où :

$$\frac{\sigma_{12}}{\sigma_{22}} \simeq 3(F_{12} + H_{12}). \tag{3.78}$$

Les relations 3.74 et 3.78 sont très bien vérifiées comme en témoigne la figure 3.26.

Nous avons précédemment mis en évidence des relations liant séparément les anisotropies géométrique et mécanique à l'intensité du déviateur de contrainte à l'aide d'interpolations linéaires de pentes notées  $S_{\text{fab}}$  et  $S_{\text{for}}$ . Nous souhaitons nous assurer de la cohérence des valeurs mesurées vis-à-vis des relations 3.74 et 3.78. Dans le cas des essais traxiaux, en développant l'équation 3.74



Figure 3.26 : Vérification numérique de la qualité des approximations 3.74 et 3.78 avec N = 8788 pour des essais de type TC (cercles), TE (croix) et S (triangles).

au premier ordre en les paramètres d'anisotropie  $H_{33}$  et  $F_{33} - 1/3$ , on obtient la condition de consistance suivante :

$$S_{\rm for} + S_{\rm fab} = \frac{4}{9} \tag{3.79}$$

De même, pour des essais de type S, on s'attend à :

$$S_{\rm for} + S_{\rm fab} = \frac{1}{3}$$
 (3.80)

Les valeurs de  $S_{\text{fab}}$  et de  $S_{\text{for}}$  précédemment obtenues vérifient en bonne appoximation les conditions 3.79 et 3.80.

Le lien relativement simple qui existe entre la contrainte et les paramètres d'anisotropie dont les relations 3.74 et 3.78 sont l'expression, met clairement en exergue l'origine microscopique d'une quantité macroscopique (un rapport de composantes du tenseurs des contraintes dans ce cas). Le fait que l'angle de frottement effectif du système dépende du type de test effectué n'est finalement guère surprenant compte tenu de la différence de symétrie de l'anisotropie du matériau induite par des essais triaxiaux et des essais de cisaillement.

Dans les matériaux granulaires constitués de grains présentant un frottement de Coulomb non nul, la forme des particules influe sur les proportions de chargement supporté imputables aux anisotropies géométrique et mécanique [9]. Nos simulations montrent que pour des assemblages monodisperses de billes non frottantes, les coefficients d'anisotropie géométrique et mécanique sont approximativement égaux. Enfin, malgré l'existence des relations simples 3.74 et 3.78, nous sommes encore très loin de pouvoir prédire théoriquement l'intensité du déviateur de contrainte à la rupture. Ces lois ont une portée générale puisqu'elles seraient également valables pour des

assemblages granulaires secs constitués de grains frottants. En revanche dans le cas non frottant (isostatique), il existe des relations biunivoques entre les termes de droite des expressions 3.74 et 3.78 et le terme de gauche correspondant, ce qui n'est pas le cas lorsque les grains présentent du frottement intergranulaire.

#### 3.4.3 Modules élastiques

L'étude des propriétés élastiques des assemblages granulaires présente un double intérêt. D'une part, il est beaucoup plus facile de mesurer des modules élastiques que des quantités géométriques telles que des nombres de coordination ou des corrélations entre proches voisins. D'autre part, on sait que les modules élastiques des assemblages granulaires secs non frottants équilibrés sous un chargement isotrope présentent des propriétés particulières [101, 15]. En effet, alors que le module de compressibilité *B* diffère peu de celui des assemblages granulaires secs frottants [15], le module de cisaillement *G* est quant à lui extrêmement faible. Le rapport *G/B* est proportionnel au degré d'indétermination des forces  $h \propto \kappa^{-1/2}$  [15, 151]. En outre, les fréquences propres des matrices de raideur des assemblages isotropes de billes non frottantes sont distribuées de façon anormale [101] en raison du caractère isostatique du réseau des contacts [152].

Nous allons chercher ici ce qu'il en est lorsque le chargement mécanique appliqué est anisotrope. Nous ne considérerons ici que des états d'équilibre obtenus suite à des essais de type TC ou TE. Les modules élastiques sont calculés en assemblant la matrice de raideur du réseau des contacts et en résolvant le système linéaire d'équations pour les déplacements engendrés par de petits incréments de chargement (la procédure employée est détaillée dans l'article [15]). Les résultats obtenus sont indépendants de la taille des échantillons et les incertitudes statistiques diminuent à mesure que le nombre de grains N croît. Les modules élastiques indépendants sont au nombre de cinq dans le cas des essais trixiaux (et au nombre de neuf pour les essais de cisaillement). Ces modules relient les incréments de contrainte  $\Delta \sigma_{ij}$  aux déformations  $\varepsilon_{ij}$  à partir d'un état de référence équilibré sous un chargement anisotrope. En utilisant les notations de Voigt, cette relation s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \Delta\sigma_{11} \\ \Delta\sigma_{22} \\ \Delta\sigma_{33} \\ \Delta\sigma_{23} \\ \Delta\sigma_{31} \\ \Delta\sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2C_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta\varepsilon_{11} \\ \Delta\varepsilon_{22} \\ \Delta\varepsilon_{33} \\ \Delta\varepsilon_{23} \\ \Delta\varepsilon_{31} \\ \Delta\varepsilon_{12} \end{pmatrix}$$
(3.81)

Les symétries du matériau (invariance par rotation autour de l'axe 3 et symétries orthogonales par rapport aux trois plans perpendiculaires aux axes) contraignent la structure de la matrice de l'équation 3.81 et imposent  $C_{11} - C_{12} = 2C_{55}$ . On constate numériquement que ces prédictions sont bien vérifiées (on mesure par exemple  $C_{13} = C_{23}$  avec une erreur relative inférieure à  $10^{-3}$  lorsque N = 8788). Lorsque le système se trouve dans son état initial isotrope, tous ces modules peuvent s'exprimer à l'aide des seuls modules de compressibilité et de cisaillement :  $C_{11} = B + 4G/3 = C_{33}$ ,  $C_{12} = B - 2G/3 = C_{13}$  et  $C_{44} = C_{55} = G$ . Les modules longitudinaux sont plus grands selon l'axe principal majeur de contrainte : lorsque l'on procède à un essai de compression triaxiale, le module longitudinal  $C_{33}$  est strictement supérieur au module longitudinal  $C_{11}$ ; en revanche, on a l'inégalité inverse en extension triaxiale. Ces deux modules longitudinaux sont liés à la vitesse  $\sqrt{C_{ii}/\rho_m}$  ( $\rho_m$  désignant la masse volumique du matériau) des ondes sonores se propageant selon la direction 3 ou dans le plan orthogonal à cette direction. De telles anisotropies affectant les modules élastiques ont déjà été observés sur



Figure 3.27 : Rapports  $C_{11}/C_{33}$  (en rouge),  $C_{13/C_{33}}$  (en rose) et  $C_{12}/C_{33}$  (en bleu), pour des tests de type TC et TE, en fonction du rapport des contraintes principales, pour des contacts hertzien (symboles carrés) et harmoniques (symboles circulaires), avec N = 8788. Les lignes continues (en noir) correspondent aux prédiction des équations 3.85.

des sables [153, 154, 155] et sur des assemblages de billes [156]. Ces sont les anisotropies géométriques et mécaniques mises précédemment en évidence qui expliquent l'anisotropie des modules. Le matériau est plus rigide suivant l'axe principal majeur de contrainte parce que les contacts tendent à s'aligner préférentiellement selon cet axe et que les contacts pratiquement parallèles à cet axe ont tendance à porter de grandes forces. D'après l'équation 3.2,  $K_N \propto (F_N^e)^{1/3}$ : les contacts sont donc d'autant plus raides qu'ils portent de grandes forces. Afin de faire la part de l'influence de l'anisotropie géométrique et de l'anisotropie mécanique sur la valeur des modules élastiques, nous les avons calculé à l'aide du modèle de contact hertzien mais aussi à l'aide d'un modèle de contact harmonique (dans ce cas, la raideur du contact est une constante qui ne dépend pas de la déflexion élastique)<sup>16</sup>. Nous allons maintenant concentrer notre attention sur le bloc  $3 \times 3$ , que nous noterons <u>c</u>, situé dans le coin supérieur gauche de la matrice de l'équation 3.81. Les éléments de  $\underline{\mathbf{c}}$  sont typiquement deux ordres de grandeur plus grands que les modules de cisaillement  $C_{44}$  et  $C_{55}$ , et ce quel que soit l'anisotropie du chargement. Le rapport de tous les éléments de la matrice <u>c</u> divisés par  $C_{33}$  est représenté sur la figure 3.27, pour des contacts hertziens et harmoniques. Les variations de  $C_{11}/C_{33}$  en fonction de  $\sigma_{33}/\sigma_{11}$  sont conformes à ce à quoi on s'attend qualitativement. Par contre, il est suprenant de constater que les modules calculés en postulant que les contacts se comportent de manière harmonique, et qui ne sont pas sensibles à l'anisotropie des forces évoluent de la même manière. En effet, la dépendance de  $C_{11}/C_{33}$  avec l'anisotropie de la contrainte est la même pour les deux lois de contact.

Ces résultats peuvent être expliqués en analysant plus avant la matrice  $\underline{\mathbf{c}}$ . Notons  $\hat{s}_1$ ,  $\hat{s}_2$ ,  $\hat{s}_3$  des vecteurs unitaires dans l'espace vectoriel des tenseurs de contrainte ou de déformation dont les directions principales sont parallèles aux axes de coordonnées.  $\hat{s}_1$ ,  $\hat{s}_2$  et  $\hat{s}_3$  constituent une base orthonormée dans laquelle les coordonnées sont les  $\Delta \sigma_{ii}$  ( $\varepsilon_{ii}$  respectivement) pour les

<sup>16.</sup> Étant donné que la géométrie de l'assemblage est très proche de celle des empilements de sphères parfaitement rigides, on aurait obtenu des configurations statistiquement similaires en utilisant un modèle de contact harmonique au lieu du modèle de contact hertzien.

incréments de contrainte (de déformation respectivement). La matrice  $\underline{\mathbf{c}}$  définit un opérateur linéaire dans cet espace. Lorsque le chargement est isotrope,  $\underline{\mathbf{c}}$  a pour valeurs propres  $C_I = 3B$  et  $C_{II} = C_{III} = 2G$ , et les vecteurs propres sont  $\hat{S}_1 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2 + \hat{s}_3)/\sqrt{3}$  et toute paire de vecteurs orthogonaux à  $\hat{S}_1$ . L'incrément de contrainte dans la direction définie par  $\hat{S}_1$  est proportionnel à l'état de contrainte préexistant, qui vaut  $\sqrt{3}P\hat{S}_1$ . Puisque  $C_I \gg C_{II}$  et  $C_I \gg C_{III}$ , on peut faire l'approximation suivante :

$$\underline{\mathbf{c}} \simeq C_I \hat{S}_1 \otimes \hat{S}_1 \tag{3.82}$$

Si l'équation 3.82 est parfaitement vérifiée, tous les modules seraient égaux au module de compressibilité B pour un assemblage isotrope et tous les rapports tracés sur la figure 3.27 serait égaux à 1 pour  $\sigma_{11} = \sigma_{33}$ . On constate que c'est effectivement presque le cas. Les auteurs de l'article [15] considèrent que B est très peu sensible à la fragilité du réseau des contacts (quasiment isotatique) puisqu'il est lié à la réponse du matériau lorsque celui-ci se voit appliqué un incrément de chargement proportionnel à la pré-contrainte. Nous allons maintenant procéder de manière similaire pour les états de contrainte anisotropes. Nous considérerons que  $\hat{S}_1$  est un vecteur unitaire proportionnel à l'état de contrainte duquel on part. Un chemin de contrainte imposé à l'aide d'un essai triaxial peut être paramétré à l'aide d'un seul scalaire, que nous noterons  $\alpha$ , en posant  $\sigma_{11} = \sigma_{22} = (1 - \alpha)P$  et  $\sigma_{33} = (1 + 2\alpha)P$ . Posons donc

$$\hat{S}_1 = \frac{1}{\sqrt{3+6\alpha^2}} \left[ (1-\alpha)(\hat{s}_1 + \hat{s}_2) + (1+2\alpha)\hat{s}_3 \right]$$
(3.83)

On constate numériquement qu'en très bonne approximation,  $\hat{S}_1$  est bien un vecteur propre de  $\underline{\mathbf{c}}$ , associé à une valeur propre  $C_I$  dont la valeur est très proche de celle mesurée sur un assemblage isotrope. Compte tenu des symétries du matériau quand on procède à des essais triaxiaux,  $\hat{S}_2 = (\hat{s}_1 - \hat{s}_2)/\sqrt{2}$  devrait être un deuxième vecteur propre (une propriété que nous avons effectivement pu vérifier numériquement), tandis qu'un troisième vecteur propre est nécessairement orthogonal à  $\hat{S}_1$  et  $\hat{S}_2$ . Les valeurs propres correspondantes,  $C_{II}$  et  $C_{III}$ sont systématiquement au moins cent fois plus petites que la valeur de  $C_I$  mesurée, quelles que soient l'anisotropie de la contrainte imposée et la loi de contact utilisée. Il est donc possible de considérer que la matrice  $\underline{\mathbf{c}}$  est approximativement égale au membre de droite de l'équation 3.82, en utilisant la définition de  $\hat{S}_1$  donnée par l'équation 3.83. On obtient ainsi l'expression théorique des rapports entre modules :

$$\frac{C_{11}}{C_{33}} \simeq \frac{(1-\alpha)^2}{(1+2\alpha)^2} \simeq \frac{C_{12}}{C_{33}}$$
(3.84)

$$\frac{C_{13}}{C_{33}} \simeq \frac{1-\alpha}{1+2\alpha} \tag{3.85}$$

La figure 3.27 montre que ces approximations sont bien vérifiées. L'effet des anisotropies de contrainte sur les propriétés élastiques du matériau est assez particulier du fait de la structure du tenseur des modules élastiques, qui est indépendante de la loi de contact. En bonne approximation, tous les modules élastiques sont proportionnels à  $C_I$  avec des coefficients de proportionnalité qui dépendent de l'état de contrainte, à l'exception des modules singuliers, qui sont quant à eux très petits.

Compte tenu du caractère presque isostatique du réseau des contacts,  $C_I$ , valeur propre majeure du tenseur  $\underline{\mathbf{c}}$ , peut s'écrire, avec une très bonne précision, comme une fonction de la compacité  $\Phi$ , du nombre de coordination z et de certains moments de la distribution des forces. Une telle relation a déjà été établie pour le module de compressibilité B dans le cas isotrope [15]. La valeur de B donnée par la relation établie dans l'article [15] constitue un minorant du module de compressibilité (borne de Reuss [157]). Cette relation est exacte lorsque les incréments de



Figure 3.28 : Valeur propre dominante  $C_I$  du tenseur des modules élastiques, pour des contacts hertziens et harmoniques, avec N = 8788, en fonction du rapport des contraintes principales, pour des chargements de type TE et TC, comparée avec les prédictions des équations 3.86 et 3.87 (ces prédictions sont entachées d'une petite incertitude statistique dont l'étendue est représentée par les lignes tiretées horizontales).

forces sont proportionnels aux forces pré-existantes. En généralisant l'approche employée dans la référence [15], on obtient, pour des contacts hertziens :

$$C_I = C_I^H = \frac{3^{1/3}}{2Z(5/3)} \left(\frac{z\Phi}{\pi}\right)^{2/3} \tilde{E}^{2/3} P^{1/3}$$
(3.86)

Pour des contacts harmoniques, l'équation donnant  $C_I$  s'écrit :

$$C_I = C_I^L = \frac{z\Phi K_N}{\pi a Z(2)} \tag{3.87}$$

Les expressions de Z(5/3) et de Z(2) sont données dans les équations 3.43 et 3.42. Les simulations numériques montrent que les différentes grandeurs apparaissant dans les deux précédentes formules restent constantes quel que soit l'état de contrainte imposé.  $C_I$  devrait dont être indépendant de  $\sigma_{33}/\sigma_{11}$ . La figure 3.28 montrent que la valeur propre majeure  $C_I$  calculée numériquement est très proche de celle prédite par les équations 3.86 et 3.87. Nous sommes donc en mesure de calculer tous les modules non singuliers Dans le cas des essais de cisaillement, on s'attend également à ce qu'existe une décomposition du tenseur des modules élastiques analogue à celle de l'équation 3.82, la direction du chargement appliqué étant prise en compte par un certain  $\hat{S}_1$ .

Étant donné que le domaine de stabilité d'un réseau de contacts donné tend vers 0 dans le double limite  $\kappa \to \infty$  et  $N \to \infty$  [141], on s'attend à ce ce que le domaine strictement élastique disparaisse aussi dans cette double limite. Pour pouvoir observer en pratique les propriétés élastiques particulières des assemblages de billes presque parfaitement rigides, il convient de bien choisir le niveau de raideur  $\kappa$  auquel on se place pour mener le calcul, de manière à ce qu'il soit suffisamment grand que l'on soit proche de la limite rigide, mais aussi suffisamment petit pour que la réponse élastique puisse être mesurée. Il est intéressant de constater que les assemblages de disques [158, 159] ou de sphères [15, 160] frottant(e)s assez peu coordonnés présentent

des anomalies élastiques proches de celles des assemblages granulaires non frottants, sous une forme toutefois un peu moins prononcée puisque ces systèmes ne forment pas spontanément de structures isostatiques dans la limite rigide [13]. Ainsi, même s'il est impossible de procéder à des expériences réelles sur des matériaux constituées de billes parfaitement non frottantes, les résultats que nous venons de présenter concernant les propriétés élastiques de ces matériaux ne sont pas dénués d'intérêt pour les matériaux granulaires dont le réseau des contacts présente un petit degré d'indétermination des forces.

## 3.5 Relations constitutives

Nous avons mis en évidence dans la section précédente l'existence d'une correspondance apparemment biunivoque (du moins dans la limite macroscopique) entre l'intensité du déviateur de contrainte et l'anisotropie géométrique, ainsi qu'entre l'intensité du déviateur et l'anisotropie mécanique. Cette observation n'est pas sans rappeler certaines des propriétés des assemblages de grains parfaitement rigides et non frottants [141, 161]. Dans le cas où les contacts sont rigoureusement rigides, la réponse du matériau à un petit incrément de contrainte proportionnel à la précontrainte est elle aussi parfaitement rigide (déformation nulle, invariance des forces de contact à un facteur scalaire multiplicatif près). En revanche, si l'incrément de contrainte n'est pas proportionnel à la précontrainte, on observera, dans la limite  $N \to +\infty$ , un réarrangement du réseau des contacts [141]. Quant à la déformation liée à ce réarrangement, elle est dictée par la seule géométrie de l'assemblage. Enfin, du fait de l'isostaticité du squelette de ce type de matériaux, la distribution des forces est complètement déterminée par la donnée du réseau des contacts et du chargement extérieur. À cet égard, les assemblages de grains non frottants diffèrent nettement de ceux constitués de particules présentant un frottement intergranulaire non nul, dont le réseau des contacts est susceptible de supporter un certain intervalle de contrainte pour des valeurs arbitrairement grandes du niveau de raideur  $\kappa$  et ce, même dans la limite macroscopique [161] (d'où l'existence de portions verticales sur la courbe contrainte-déformation comme le montrent les simulations présentées dans les références [149, 150, 126]). Cette propriété des assemblages granulaires frottants rend impossible l'existence d'une relation univoque entre contrainte et anisotropie.

Les assemblages granulaires parfaitement rigides et non frottants présentent une autre propriété tout à fait remarquable [141, 161] : la relation liant les incréments de déviateur aux incréments de déformation n'est pas déterministe, mais semble régie par une loi probabiliste de Lévy [162] dans la limite macroscopique. Le concept de module d'Young n'a donc aucun sens pour ce matériau. Ce comportement singulier est très éloigné de celui observé sur des systèmes de particules interagissant via des potentiels « mous », comme les verres de Lennard-Jones, pour lesquels les fluctuations autour de la courbe contrainte-déformation moyenne tendent vers zéro dans la limite thermodynamique [163]. Dans le cas présent, la réponse macroscopique du matériau est dominée par les réarrangements de l'assemblage (tout comme quand les grains sont rigoureusement rigides) : la déformation macroscopique est en effet beaucoup plus importante que la déflexion typique d'un contact (cette dernière est de l'ordre de  $\kappa^{-1}$ ). D'après la figure 3.29, la courbe contrainte—déformation semble déterministe dans la limite macroscopique : les résultats correspondant aux échantillons des deux plus grandes tailles semblent converger vers la même courbe moyenne. Néanmoins, la régression des fluctuations dans la limite macroscopique est beaucoup moins claire que sur la figure 3.23 par exemple : les barres d'erreur ne sont guère plus petites pour N = 8788 que pour N = 1372 et les erreurs relatives mesurées sont de l'ordre de 30% pour les plus grands systèmes simulés. Pour tenter de trancher clairement la question, nous avons effectué des essais triaxiaux sur des échantillons de N = 19652 grains. On constate



Figure 3.29 : Variation de la composante  $\varepsilon_{33}$  du tenseur des déformations avec  $\sigma_{33}/\sigma_{11}$  pour des essais triaxiaux, avec N = 1372 (croix rouges reliées par pointillés), N = 4000 (triangles marrons reliés en traits pointillés), N = 8788 (carrés bleus reliés par une ligne continue) et N = 19652 (carrés noirs reliés par une ligne continue). Les résultats sont moyennés sur tous les échantillons disponibles. L'intervalle représenté correspond au domaine solide macroscopique.

que l'accord entre les simulations comptant N = 19652 et N = 8788 billes est très bon lorsque le rapport  $\sigma_{33}/\sigma_{11}$  est inférieur à 1.1 et tout de même acceptable au-delà de cette valeur. Il est donc tentant de supposer que les systèmes suffisamment grands (à niveau de raideur  $\kappa$ fixé) possèdent une courbe contrainte-déformation bien déterminée, uniquement fonction du chargement mécanique appliqué, si tant est que leur taille dépasse une certaine longueur caractéristique  $\xi$  qui diverge dans la limite  $\kappa \to +\infty$ . Si c'est effectivement le cas, un échantillon dont la taille caractéristique est inférieure à  $\xi$  présenterait le comportement singulier observé dans la référence [141]. Seuls les échantillons de taille caractéristique plus grande que  $\xi$  (ce qui imposerait de considérer des systèmes d'autant plus grands que la valeur de  $\kappa$  est importante) présenteraient une relation contrainte—déformation bien définie sous un chargement donné.

## **3.6** Conclusion et perspectives

Ce chapitre, consacré aux assemblages granulaires secs faits d'un grand nombre de grains sphériques tous identiques très rigides et non frottants, nous a permis de mettre en évidence un certain nombre de propriétés intéressantes de ces systèmes. Dans la limite géométrique macroscopique, c'est à dire dans la triple limite où la nombre inertiel  $I \to 0$ , le paramètre de raideur  $\kappa \to +\infty$  et où le nombre de grains  $N \to +\infty$ , des essais de cisaillement simple montrent que les assemblages granulaires secs non frottants sont des matériaux qui présentent un frottement interne non nul et qui ne sont pas dilatants. Ces résultats surprenants — surtout en ce qui concerne l'absence de dilatance, dont nous avons rendu compte à l'aide d'un modèle jouet — sont liés au caractère non frottant des grains considérés ; ils restent notamment valables lorsque

le système est polydisperse. Les fluctuations des quantités mesurées tendent vers zéro dans la limite  $N \to +\infty$ . Ainsi la rhéologie du matériau n'est-elle pas affectée par la nature du contrôle exercé sur le système. Les simulations effectuées à contrainte contrôlée ou à volume fixé conduisent aux mêmes moyennes temporelles.

Des simulations statiques ont également été conduites afin de déterminer les propriétés de rupture des assemblages granulaires secs non frottants. Les résultats sont en accord avec ceux obtenus à l'aide des simulations de cisaillement maintenu dans la limite quasi-statique. Il s'avère que le critère de Mohr-Coulomb n'est pas capable de bien rendre compte de la limite de chargement au-delà de laquelle le matériau rompt. En revanche, cette limite est bien décrite par le critère à un paramètre (noté k) de Lade-Duncan. k dépend de N et vaut  $k_{\infty} = 27.22 \pm 0.02$ dans la limite macroscopique. Cette valeur est une quantité purement géométrique des assemblages désordonnés de sphères. En effet, le réseau des contacts d'un tel système reste en très bonne approximation isotatique lorsque le chargement est anisotrope tant que le matériau ne rompt pas, ce qui laisse d'ailleurs à penser que dans la limite macroscopique, l'état du système est gouverné par la seul valeur du tenseur des contraintes et ne dépend pas de l'histoire du chargement appliqué. D'autre part, la variation de la fraction volumique  $\Phi$  entre un état isotrope et un état proche du seuil de rupture est extrêmement faible. La fraction volumique d'un grand empilement reste donc égale à  $\Phi_{\rm RCP}$  lorsque le chargement est anisotrope, pourvu que le système soit à l'équilibre mécanique. Nous pensons donc que, de même que l'état RCP est statistiquement défini de manière unique, il existe des états RCP anisotropes dont la géométrie est uniquement fonction du tenseur des contraintes appliqué.

Nos résultats semblent indiquer qu'il existe une relation bien définie entre contrainte et déformation dans la limite macroscopique (comportement qui diffère de celui observé sur des systèmes bidimensionnels de disques non frottants et parfaitement rigides où la déformation résultant d'un incrément de contrainte suit une distribution de Lévy [141]). Dans la limite géométrique macroscopique, le comportement du système est gouverné par une succession d'instabilités avant pour origine des réarrangements du réseau des contacts. Il serait très intéressant d'étudier finement ces événements responsables de la déformation. Cela permettrait également de tester l'hypothèse avancée dans la section 3.5, à savoir qu'il existerait une longueur de corrélation  $\xi$  qui divergerait lorsque  $\kappa \to +\infty$ . Beaucoup d'efforts ont été consentis ces dernières années pour essayer de mieux comprendre les mécanismes responsables des déformations plastiques au sein des matériaux amorphes. En particulier, de nombreux travaux ont été consacrés à l'étude numérique du comportement des verres de Lennard-Jones [164, 165]. Dans ces systèmes, les particules sont considérées comme ponctuelles et les potentiels dont dérivent les forces entre paires sont mous. Il serait intéressant d'étudier, à l'aide du formalisme de la matrice de raideur, comment les résultats concernant ces systèmes sont altérés lorsque le potentiel est beaucoup plus dur, ainsi que les changements certainement importants induits par la présence de frottement intergranulaire.

Les systèmes considérés dans ce chapitre paraissent extrêmement modèles. Du point de vue numérique, l'absence de frottement rend l'écriture d'un code de dynamique moléculaire encore plus simple que dans le cas frottant. Néanmoins, l'absence de frottement rallonge assez considérablement les calculs. Il est en effet beaucoup plus difficile d'équilibrer un empilement granulaire constitué de grains non frottants que d'équilibrer un empilement fait de grains frottants. En effet, tout équilibre obtenu avec des grains non frottants est également un état d'équilibre lorsque les grains sont frottants, mais la réciproque n'est pas vraie. Et surtout, les systèmes non frottants avec lesquels nous avons travaillé sont quasiment isostatiques à l'équilibre, ce qui signifie que ce dernier est fragile. Enfin, même sous cisaillement simple, nous verrons au chapitre 4 qu'il est bien plus aisé d'étudier la limite quasi-statique avec des assemblages de grains frottants qu'avec des assemblages de grains non frottants.

Les résultats qui nous ont décidé à nous lancer dans l'étude du comportement des assemblages granulaires secs non frottants sont ceux de la section 2.3, dans laquelle nous avons montré qu'une pâte granulaire lubrifiée se comporte comme un assemblage granulaire sec constitué de grains non frottants dans la limite où le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a \rightarrow 0$ . Les résultats de ce chapitre montrent que cette modélisation est par trop idéale, du moins si l'on s'intéresse au compactage des pâtes granulaires. En effet, un assemblage granulaire sec non frottant atteint systématiquement une compacité égale à  $\Phi_{\rm RCP}$  à l'équilibre, et ce quel que soit le type de chargement appliqué (à condition que le matériau ne rompe pas bien sûr). Or,  $\Phi_{\rm RCP}$  est justement la densité maximale que peut atteindre un matériau granulaire sans qu'il y ait apparition de germes cristallins en son sein. Autrement dit, n'importe quel chargement statique permet de compacter de manière optimale un assemblage granulaire non frottant en un seul cycle. En particulier, l'application d'une simple pression isotrope suffit. Ce résultat va à l'encontre de ce que l'on sait sur le compactage; expérimentalement, on constate que des chemins de chargement plus complexes doivent être appliqués pour pouvoir correctement compacter un matériau.

Toutefois, même si ces assemblages granulaires modèles (qui ont bien évidemment, nous pensons l'avoir démontré, leur intérêt intrinsèque) ne peuvent pas nous apprendre grand-chose sur la physique du compactage de matériaux réels, il semble cependant qu'ils présentent un comportement analogue à celui des mousses humides. Des expériences rhéologiques menées sur ces systèmes au Laboratoire de Physique des Matériaux Divisés et des Interfaces, à l'Université de Marne-la-Vallée, montrent en effet que ce type de mousses se comporte d'une manière similaire à ce que l'on observe numériquement pour des assemblages granulaires secs non frottants [110]. En particulier, à proximité de la limite quasi-statique, ces systèmes semblent s'écouler sans se dilater (la mesure de la fraction volumique est cependant assez délicate) et l'angle de frottement interne mesuré est très proche de celui que nous avons trouvé en cisaillement simple. Ces ressemblances entre assemblages faits de grains secs très rigides non frottants et mousses humides constituées de bulles aisément déformables sont assez surprenantes mais naturellement très intéressantes.

Troisième partie

# Cisaillement maintenu et compactage de pâtes granulaires

# Chapitre 4

# Cisaillement de pâtes granulaires lubrifiées

Nous allons maintenant reprendre l'étude des pâtes granulaire lubrifiées en procédant à des essais de cisaillement simple. Nous comparerons les résultats obtenus avec ceux issus du cas sec. Nous allons à nouveau considérer des systèmes bidimensionnels afin de limiter autant que possible les temps de calcul.

## 4.1 Matériau considéré et méthode numérique employée

La matériau que nous allons étudier dans ce chapitre est exactement le même que celui de la section 2.3.1. On considère une pâte granulaire lubrifiée constituée de N grains circulaires dont les diamètres sont tirés aléatoirement et de façon indépendante et uniforme entre 0.7 a et a. On suppose que les grains sont élastiques et on note leur raideur  $k_N$ . Compte tenu de la pression que nous choisissons d'appliquer au système,  $P = 10^{-4}k_N$ , les grains peuvent être considérés comme parfaitement rigides.  $\mu$  désigne le coefficient de frottement intergranulaire et il est choisi égal à 0.3. Enfin, la présence de liquide — supposé newtonien et de viscosité  $\eta$  entre les grains induit des interactions de lubrification entre inclusions solides en contact ou en quasi-contact. L'expression des interactions au niveau des connexions mécaniques à d'ores et déjà été donnée dans la section 1.5 : la composante normale de l'interaction est la somme d'un terme de lubrification (1.28) et d'un éventuel (s'il y a contact) terme hertzien (1.22), tandis que la composante tangentielle est la somme d'un autre terme de lubrification (1.29) et d'un éventuel terme de frottement solide (1.25). Fort de l'expérience acquise lors de l'étude du compactage isotrope menée dans la section 2.3, nous avons fixé une fois pous toutes la valeur du paramètre  $h_{\rm max}/a \ge 0.5$  (on sait en effet que cette valeur n'a que très peu d'influence sur le comportement du système).

On cherche à appliquer à ce matériau un chargement mécanique scalaire, du type  $\underline{\Sigma} = P\underline{1}$ (*P* désigne donc la pression imposée), et à le soumettre à un taux de cisaillement constant, noté  $\dot{\gamma}$ . La méthode numérique que nous avons employée pour simuler le comportement de pâtes granulaires lubrifiées soumises à un cisaillement maintenu est en tout point similaire à celle de la section 2.2.1, que nous avons déjà utilisée pour étudier les états d'équilibre isotrope des pâtes granulaires, à ceci près qu'au lieu d'employer des conditions aux limites périodiques suivant les deux directions spatiales, on fait usage de conditions aux limites de Lees-Edwards afin de simuler l'application du taux de cisaillement (nous avons déjà explicité ces conditions aux limites dans la section 3.1.4).

Le mode de préparation du matériau est identique à celui décrit dans la section 2.3.1. Les particules sont placées aux nœuds d'un réseau triangulaire. On fait ensuite fondre la structure obtenue puis, on la compacte de manière isotrope en ne tenant pas compte des interactions de lubrification. Une fois l'équilibre atteint, on multiplie les coordonnées des grains par un facteur  $\Lambda = 1.1$ . L'état ainsi obtenu est un état initial dont on peut ensuite simuler le comportement.

Dans ce chapitre, nous allons examiner la façon dont le matériau se comporte lorsque l'on fait varier les paramètres adimensionnels gouvernant ce comportement. Dans cette étude, le paramère de raideur  $\kappa$  sera constamment pris égal à 10<sup>4</sup>, le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  à 0.3 et le rapport  $r_k$  entre les coefficients de raideur élastique tangentielle et normale à 0.5. Nous avons vu en effet dans la partie II que le paramètre de raideur n'a pas grande influence sur le comportement d'un matériau granulaire sec dès qu'il est supérieur à quelques milliers. Or, ce paramètre n'est susceptible d'influer le comportement des pâtes granulaires lubrifiées que lorsqu'un réseau des contacts fait son apparition. La valeur de  $\kappa$  aura donc sur le comportement des pâtes granulaires lubrifiées un impact semblable à celui observé pour des assemblages granulaires secs, donc négligeable pour des valeurs suffisamment élevées de  $\kappa$ . D'autre part, comme nous avons déjà eu l'occasion de le faire remarquer précédemment, on s'attend à ce que les valeurs exactes de  $\mu$  et de  $r_k$  n'aient que peu d'importance; en particulier, elle n'affectent vraisemblablement pas les comportements qualitatifs que nous allons observer et leur influence quantitative est assez faible. C'est en tout cas ce que l'on observe pour les écoulements denses de matériaux granulaires secs [166]. En revanche, nous allons étudier comment varient des grandeurs macroscopiques comme le frottement effectif  $\mu^*$  ou la compacité  $\Phi$  du matériau en fonction du nombre visqueux Vi et la manière dont la microstructure du matériau dépend de Vi. Nous discuterons également de l'influence du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  sur les comportements observés. Nous avons écrit dans la section 1.6.2 que le nombre sans dimension Vi était égal au rapport entre  $\eta/P$  et un temps caractéristique, que nous avions noté  $\tau_e$ , dépendant des sollicitations imposées à la pâte. Lorsqu'une pâte est soumise à un taux de cisaillement maintenu, on peut choisir comme temps  $\tau_e$  la quantité  $\dot{\gamma}^{-1}$ ; Vi est alors défini par :

$$Vi = \frac{\eta \dot{\gamma}}{P} \tag{4.1}$$

Les résultats bruts issus des simulations sont des séries temporelles qu'il faut ensuite traiter pour en extraire les valeurs moyennes des quantités recherchées ainsi que les incertitudes statistiques afférentes à ces moyennes. Cette tâche est menée à bien à l'aide de la méthode de regroupement par blocs [125] dont nous avons déjà parlé dans la section 3.2.2.

## 4.2 Grandeurs macroscopiques

#### 4.2.1 Frottement interne

Comme expliqué dans la section 3.2.3, le coefficient de frottement interne  $\mu^*$  d'un matériau, telle une pâte granulaire lubrifiée, est défini par analogie avec la loi de Coulomb. Lorsqu'une

pâte est cisaillée de manière stationnaire,  $\mu^*$  est défini comme la moyenne temporelle du rapport entre la valeur absolue de la contrainte de cisaillement mesurée  $\sigma_{12}$  et la pression P appliquée au système :

$$\mu^* = \langle \frac{|\sigma_{12}|}{P} \rangle_t \tag{4.2}$$

Cette définition diffère légèrement de celle que nous avions adoptée pour les assemblages granulaires secs (équation 3.14). Cette différence s'explique par le fait que la méthode quasi-statique que nous avons utilisée pour cisailler des pâtes granulaires lubrifiées permet d'imposer exactement la pression du système, tandis que la méthode dynamique employée dans la partie II ne permet que d'exercer un contrôle sur l'élément  $\sigma_{22}$ , contrôle qui lui-même n'est pas rigoureusement parfait (les valeurs instantanées de  $\sigma_{22}$  diffèrent légèrement de la valeur cible que l'on cherche à imposer en permanence).

Comme dans le cas des matériaux granulaires secs, une pâte granulaire lubrifiée cisaillée, lorsqu'elle est suffisamment déformée, finit par atteindre un état stationnaire. Nous avons pu vérifier que cet état ne dépend pas de l'état initial du matériau mais seulement de la façon dont il est cisaillé. On peut donc se contenter d'étudier le comportement sous cisaillement simple d'une seule configuration initiale.

La partie gauche de la figure 4.1 montre l'évolution du frottement interne  $\mu^*$  avec le nombre visqueux Vi, pour deux valeurs différentes du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  (10<sup>-2</sup> et 10<sup>-4</sup>, ce qui correspond à des valeurs physiquement raisonnables de ce paramètre [75]). Comme pour les matériaux granulaires secs, on constate que  $\mu^*$  est une fonction croissante de Vi. De plus, lorsque Vi  $\rightarrow 0, \mu^*$  tend vers une valeur finie que l'on note  $\mu_0^*, \mu_0^*$  est donc le coefficient de frottement effectif d'une pâte granulaire lubrifiée dans la limite quasi-statique. Les incertitudes statistiques obtenues à l'aide de la méthode de regroupement par blocs sont petites : elles n'excèdent pas 0.01, ce qui correspond à une erreur relative inférieure à 4% pour tous les points calculés lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ ; lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-4}$ , la méthode de regroupement par blocs semble moins bien fonctionner (les valeurs moyennes et les incertitudes statistiques calculées ne tendent pas clairement vers un point fixe). D'autre part, les calculs nécessaires commencent vraiment à être très longs pour cette valeur du paramètre de rugosité (plusieurs semaines). Nous avons néanmoins reporté les moyennes calculées et les incertitudes statistiques évaluées sur le graphe de gauche de la figure 4.1. On constate que les points obtenus semblent moins bien « agencés » que lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , certainement du fait du fonctionnement quelque peu insatisfaisant de la méthode de regroupement par blocs.

Des travaux récents [167, 168] ont été consacrés à la comparaison entre écoulements denses de matériaux granulaires secs et écoulements denses de matériaux granulaires plongés dans de l'eau. Les auteurs des études susmentionnées ont montré que le comportement des écoulements granulaires plongés dans de l'eau était dans une certaine mesure similaire à celui d'écoulements se déroulant à l'air libre (écoulements qualifiés de secs puisque le caractère visqueux de l'air n'est que de peu d'importance dans ce cas), même si ces systèmes sont différents. Dans tous les cas, lorsque ces matériaux sont cisaillés, le problème comporte un temps caractéristique égal à l'inverse du taux de cisaillement. Lorsque le système est sec, son comportement est régi par le nombre inertiel, rapport entre le temps que met une particule de rayon *a* pour parcourir une distance d'ordre *a* lorsqu'elle est soumise à une force d'odre  $a^2P$  (à trois dimensions) et le temps caractéristique lié au cisaillement  $\dot{\gamma}^{-1}$ . En revanche, dans le cas que Cyril Cassar et coll. qualifient de visqueux, lorsque le nombre de Stokes St et le nombre de Reynolds Re sont tous deux très petits,  $\dot{\gamma}^{-1}$  doit être comparé, non plus au temps typique de chute libre d'un grain sur une distance de l'ordre de sa taille, mais au temps que met un grain pour parcourir une distance approximativement égale à son diamètre, en étant soumis à la force de traînée que le



Figure 4.1 : À gauche : frottement effectif  $\mu^*$  en fonction de Vi d'une pâte granulaire lubrifiée comptant N = 896 grains pour  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  (en rouge) et  $h_{\min}/a = 10^{-4}$  (en bleu). L'équation des courbes est du type 4.5 avec les paramètres du tableau 4.2. À droite : frottement effectif  $\mu^*$  en fonction du nombre inertiel I d'un assemblage granulaire sec 2D comptant N = 896 grains ; la courbe du haut a été obtenue avec  $\mu = 0.3$  et celle du bas avec  $\mu = 0$ . L'équation des courbes est du type 4.4 avec les paramètres du tableau 4.1.

fluide oppose à son mouvement. En conséquence, ces auteurs considèrent que le nombre sans dimension pertinent pour étudier les écoulements sous-marins en régime visqueux n'est pas le nombre inertiel, mais un nombre qu'ils appellent  $I_v$  et qui vaut :

$$I_v = \frac{\eta \dot{\gamma}}{\varpi P} \tag{4.3}$$

La quantité  $\varpi a^2$  désigne la perméabilité de l'assemblage granulaire. Moins celui-ci est perméable, plus le temps caractéristique associé à la force de traînée qu'exerce le fluide sur une particule est important, d'où la présence de ce terme au dénominateur. On remarque bien entendu immédiatement que l'expression de  $I_v$  est très proche de celle de Vi pour une pâte granulaire lubrifiée cisaillée (cf. équation 4.1). La seule différence, c'est que dans notre cas, le facteur numérique  $\varpi$  lié à la perméabilité n'intervient pas. C'est tout simplement une conséquence de la nature du matériau modèle que nous avons choisi d'étudier. Comme expliqué dans la section 1.4.2, nous avons décidé de ne tenir compte que des interactions de lubrification entre grains suffisamment proches voisins et donc de négliger les interactions hydrodynamiques à longue portée induites par l'écoulement du fluide au sein de l'assemblage granulaire. Ces écoulements ne sont d'ailleurs pas pris en compte dans notre modèle, ce qui explique que la perméabilité du matériau ne joue aucun rôle sur son comportement. Partant, les nombres adimensionnels gouvernant ce comportement (Vi est un de ces nombres), ne peuvent dépendre de la perméabilité de l'assemblage granulaire. Les expériences sur plan incliné dont l'article [167] rend compte montrent que les données concernant le frottement effectif d'un écoulement sous-marin visqueux coïncident plutôt bien avec celles obtenues dans le cas sec, à condition de remplacer le nombre inertiel I par le nombre  $I_v$ . Ceci semble indiquer que la même loi  $\mu^*(.)$  est applicable aux écoulements secs et sous-marins<sup>1</sup>.

<sup>1.</sup> Cyril Cassar et coll. font néanmoins remarquer que cette ressemblance frappante a malgré tout ses limites : le rôle joué par le fluide est en effet extrêmement simplifié et ne rend pas compte des interactions complexes

$\mu$	$\mu_0^*$	$\alpha$	с
0.3	$0.208 \pm 0.002$	$0.81\pm0.03$	$0.79\pm0.10$
0	$0.094 \pm 0.002$	$0.52\pm0.01$	$0.54\pm0.01$

Tableau 4.1 : Meilleurs paramètres d'interpolation pour l'équation 4.4 à partir de données obtenues en cisaillant des assemblages granulaires secs 2D avec N = 896,  $\kappa = 10^4$ ,  $\zeta = 0.98$ .

À la lumière de ces travaux, il nous a paru souhaitable de comparer les résultats obtenus pour des pâtes granulaires lubrifiées à ceux issus de calculs portant sur des assemblages granulaires secs cisaillés. Nous avons déjà discuté du cisaillement d'assemblages granulaires secs dans la partie II, mais ces assemblages étaient tridimensionnels et non frottants. Nous avons donc effectué d'autres calculs de dynamique moléculaire sur des assemblages granulaires secs bidimensionnels. Les assemblages granulaires secs considérés sont faits de disques géométriquement identiques à ceux constituant les pâtes granulaires lubrifiées que nous avons considérées (leur rugosité ne joue néanmoins aucun rôle dans ce cas). Du point de vue mécanique, ils sont élastiques; de même, leur raideur  $k_N$  est telle que le paramètre de raideur  $\kappa$  est égal à 10<sup>4</sup>. Le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  vaut 0.3. Les connexions mécaniques se réduisent aux contacts entre paires de grains. La composante normale de la force au niveau d'un contact est somme d'une composante linéaire en l'interpénétration numérique  $h, F_N^e = k_N h$  et d'un composante visqueuse  $F_N^v = \zeta \sqrt{2mk_N} \delta V_N$  (formellement identique à la première égalité de l'équation 3.3;  $k_N$  est une constante dans le cas bidimensionnel). Le paramètre d'amortissement  $\zeta$  est pris égal à 0.98. La composante tangentielle est quant à elle calculée comme indiqué dans la section 1.5.1. Un état initial du matériau est préparé suivant la procédure décrite dans la section 3.1.2 et la technique de simulation adoptée est en tout point semblable à celle expliquée dans la section 3.1.4, adaptée au cas bidimensionnel naturellement. L'évolution du frottement effectif d'un assemblage granulaire sec en fonction du nombre inertiel I est représentée sur le graphe de droite de la figure 4.1, à la fois pour  $\mu = 0.3$  et pour  $\mu = 0$  (disques non frottants). On observe une fois encore que  $\mu^*$  est une fonction croissante de I. Comme dans la partie II, équation 3.16, nous avons cherché à interpoler la relation  $\mu^*(I)$  à l'aide d'une fonction de la forme :

$$\mu^* = \mu_0^* + c \, I^\alpha \tag{4.4}$$

Les valeurs des paramètres sont fournies dans le tableau 4.1. Ces résultats appellent au moins deux commentaires. D'une part, on voit clairement qu'il est nettement plus facile d'atteindre la limite quasi-statique d'un assemblage granulaire sec frottant que celle d'un assemblage granulaire sec non frottant. La valeur  $\mu_0^*$  du frottement effectif dans la limite quasi-statique lorsque  $\mu = 0.3$  est en effet égale à  $0.208 \pm 0.002$  et cette valeur est atteinte dès que le nombre inertiel est inférieur à  $10^{-3}$ . En revanche, dans le cas non frottant  $\mu_0^* = 0.094 \pm 0.002$ ; or la valeur du frottement effectif mesuré excède encore d'environ 5% cette valeur limite lorsque  $I = 10^{-4}$ . D'autre part, un peu plus anectodiquement, on peut constater que la valeur du frottement effectif d'un assemblage granulaire non frottant dans la limite quasi-statique est sensiblement la même quelle que soit la dimension de l'espace  $(0.094 \pm 0.002$  à deux dimensions et  $0.100 \pm 0.003$  à trois dimensions lorsque  $\kappa = \kappa_2 \equiv 8.4 \times 10^3$ ). La concordance des valeurs numériques obtenues pour le frottement effectif à deux ou trois dimensions a été soulignée dans [169].

Nous avons également cherché à interpoler les résultats obtenus dans le cas des pâtes granulaires lubrifiées à l'aide du type de fonction auquel nous avons fait appel pour interpoler les résultats

pouvant exister entre l'assemblage et le liquide en régime transitoire. L'apparition d'une pression interstitielle importante peut alors profondément altérer la structure de l'assemblage granulaire et modifier corrélativement l'écoulement de manière significative.

$h_{\min}/a$	$\mu_0^*$	α	с
$10^{-2}$	$0.213 \pm 0.007$	$0.22\pm0.02$	$0.285 \pm 0.005$
$10^{-4}$	$0.203 \pm 0.010$	$0.37\pm0.03$	$0.30\pm0.05$

Tableau 4.2 : Meilleurs paramètres d'interpolation pour l'équation 4.5 à partir de données obtenues en cisaillant des pâtes granulaires lubrifiées avec N = 896,  $\kappa = 10^4$ .

issus des calculs portant sur des assemblages granulaires secs (équation 4.4), en remplaçant le nombre inertiel I par le nombre visqueux Vi. Le fit proposé est donc de la forme :

$$\mu^* = \mu_0^* + c \operatorname{Vi}^{\alpha} \tag{4.5}$$

Les valeurs des paramètres sont données dans le tableau 4.2.

Comparons maintenant les résultats obtenus pour les pâtes granulaires lubrifiées et les assemblages granulaires secs frottants. Les données consignées sur la première ligne des tableaux 4.2 et 4.1 (les résultats obtenus sont en effet plus « propres » lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ ) montrent que la loi donnant l'évolution du frottement interne avec le nombre inertiel pour les assemblages granulaires secs n'est pas la même que celle donnant l'évolution du frottement interne avec le nombre visqueux pour les pâtes granulaires lubrifiées puisque les exposants  $\alpha$  diffèrent. Néanmoins, les frottements internes dans la limite  $I \rightarrow 0$  et dans la limite Vi  $\rightarrow 0$  sont égaux aux incertitudes statistiques près. Il ne nous semble donc pas que le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée soit identique à celui d'un assemblage granulaire sec à condition de remplacer I par Vi lorsque le nombre adimensionnel en question est inférieur à 0.1. En revanche, comme nous l'avons déjà mentionné, les frottements internes mesurés sont très voisins lorsque le paramètre adimensionnel pertinent tend vers zéro. Numériquement, les pâtes granulaires lubrifiées et les matériaux granulaires secs semblent donc se comporter de manière similaire à proximité de cete limite.

On pouvait s'attendre à ce que le frottement interne d'une pâte granulaire lubrifiée soit compris entre celui d'un assemblage granulaire sec frottant et celui d'un assemblage granulaire sec non frottant lorsque le paramètre adimensionnel pertinent tend vers zéro, du fait de la lubrification induite par la présence du liquide newtonien. Il s'avère que pour les pâtes granulaires lubrifiées dont le paramètre de rugosité vaut  $10^{-2}$  ou  $10^{-4}$ , le frottement interne de la pâte lorsqu'elle est très lentement cisaillée coïncide avec celui de l'assemblage granulaire que l'on obtient en enlevant le liquide, soumis aux mêmes sollicitations. Ce résultat est cohérent avec l'étude effectuée dans la section 2.3 sur le compactage isotrope de pâtes granulaires lubrifiées. Cette étude a en effet montré que du point de vue de l'assemblage résultant d'un compactage isotrope, une pâte granulaire lubrifiée se comporte de manière semblable à un assemblage granulaire sec obtenu en éliminant le liquide, à condition que le paramètre de rugosité ne soit pas trop petit (supérieur à 10^{-4} typiquement). En revanche, l'assemblage obtenu pour de très petites valeurs de  $h_{\min}/a$ (inférieures à  $10^{-8}$ ) ressemble beaucoup plus à celui que l'on obtiendrait en comprimant « à sec » et de manière isotrope les grains de la pâte à condition qu'ils soient non frottants. Ces résultats suggèrent que le frottement interne d'une pâte granulaire lubrifiée dans la limite où  $\mathrm{Vi} \to 0$  devrait s'approcher de celui des assemblages granulaires secs dans la limite où  $I \to 0$ lorsque le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  diminue :

$$\mu_{0,\text{ pâte}}^*(h_{\min}/a \to 0) \simeq \mu_{0,\text{sec non frottant}}^* \tag{4.6}$$

La comparaison des résultats recensés dans le tableau 4.2 montre effectivement une légère décroissance de  $\mu_0^*$  lorsque  $h_{\min}/a$  décroît. Cette décroissance n'est cependant pas très significative compte tenu du faible écart entre les deux valeurs reportées et de l'amplitude des incertitudes statistiques les affectant. Nous n'avons malheureusement pas pu effectuer des simulations de cisaillement maintenu pour des valeurs de  $h_{\min}/a$  strictement inférieures à  $10^{-4}$  et ne sommes donc pas en mesure d'étayer solidement l'hypothèse 4.6. Elle paraît néanmoins plausible. Toujours est-il que, comme nous l'avons déjà souligné, la taille typique des aspérités à la surface de billes communément utilisées pour effectuer des expériences rhéologiques est de l'ordre du centième ou du millième de diamètre des billes. Les calculs que nous avons réalisé ont été effectués pour des valeurs « physiques » du paramètre de rugosité et dans ce cas donc, le comportement de pâtes granulaires lubrifiées et de matériaux granulaires secs frottants coïncide lorsque le paramètre adimensionnel pertinent tend vers 0. Ceci explique peut-être en partie le bon accord observé dans [167] entre les écoulements secs et sous-marins. Il n'est pas dit que cet accord serait encore valable si l'on savait fabriquer des billes beaucoup plus lisses et qu'on réalisait les mêmes expériences avec ce type de billes.

### 4.2.2 Compacité

Outre le frottement interne du matériau, l'une des quantités les plus couramment étudiées lorsque l'on s'intéresse à des matériaux constitués de grains est naturellement la compacité  $\Phi$ . Cette dernière est fonction des sollicitations auxquelles le matériau est soumis. Comme le frottement interne, la compacité  $\Phi$  correspond à la valeur moyenne temporelle de la compacité, une fois que le matériau a atteint un état stationnaire. Une fois encore, les incertitudes statistiques grevant les valeurs moyennes sont évaluées à l'aide de la méthode de regroupement par blocs [125]. Enfin, de même que le frottement interne, la compacité moyenne est une propriété indépendante de la configuration initiale.

Les résultats concernant l'évolution de  $\Phi$  avec Vi font l'objet du graphe de gauche de la figure 4.2. Ce graphe montre que  $\Phi$  est une fonction décroissante de Vi, qui tend vers une valeur notée  $\Phi_0$ dans la limite Vi  $\rightarrow 0$ . On observe également que les valeurs calculées de la compacité sont très voisines pour  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  ou  $10^{-4}$ , en particulier losrque Vi < 0.01.

Nous avons également calculé l'évolution de  $\Phi$  en fonction du nombre inertiel I pour des assemblages granulaires secs frottants et non frottants. Le graphe de droite de la figure 4.2 montre les résultats que nous avons obtenus. Comme pour le frottement interne, il semble bien que la valeur limite de la compacité soit plus rapidement atteinte lorsque l'assemblage granulaire est frottant que lorsqu'il ne l'est pas. La compacité est une fonction décroissante du nombre inertiel, à l'image de ce que l'on peut observer dans le cas tridimensionel non frottant. Comme dans la partie II, équation 3.21, nous avons cherché à interpoler la relation  $\Phi(I)$  à l'aide d'une fonction de la forme :

$$\Phi^{-1} = \Phi_0^{-1} + e \, I^{\nu} \tag{4.7}$$

Les valeurs des paramètres sont regroupées dans le tableau 4.3. La compacité  $\Phi_0$  trouvée dans la limite  $I \to 0$  est égale à  $0.8416 \pm 0.0002$ . Or, lorsque l'on comprime de manière isotrope un assemblage granulaire sec non frottant comptant 896 particules, la compacité moyenne de l'assemblage résultant est égale à  $0.8392 \pm 0.0018$ , valeur très proche de celle que nous venons de mentionner. D'après les études que nous avons eu l'occasion de mener dans la partie II, on sait que la compacité  $\Phi_0$  mesurée en cisaillement maintenu ne dépend pas de la taille du système lorsqu'il est suffisamment grand; en revanche, un léger effet de taille finie est observable sur les assemblages équilibrés de manière isotrope (la compacité est alors une fonction légèrement croissante de N). Il paraît donc hautement probable que la compacité mesurée lorsque l'on applique un cisaillement maintenu très lent et celle d'un assemblage granulaire sec équilibré sous



Figure 4.2 : À gauche : compacité  $\Phi$  en fonction de Vi d'une pâte granulaire lubrifiée comptant N=896 grains pour  $h_{\rm min}/a=10^{-2}$  (en rouge) et  $h_{\rm min}/a=10^{-4}$  (en bleu). L'équation des courbes est du type 4.8 avec les paramètres du tableau 4.4. À droite : compacité  $\Phi$  en fonction du nombre inertiel I d'un assemblage granulaire sec comptant N=896 grains ; la courbe du bas a été obtenue avec  $\mu=0.3$  et celle du haut avec  $\mu=0.$  L'équation des courbes est du type 4.7 avec les paramètres du tableau 4.3.

$\mu$	$\Phi_0$	ν	e
0.3	$0.8228 \pm 0.0004$	$0.87\pm0.02$	$0.356 \pm 0.020$
0	$0.8416 \pm 0.0003$	$0.67\pm0.01$	$0.213 \pm 0.004$

Tableau 4.3 : Meilleurs paramètres d'interpolation pour l'équation 4.7 à partir de données obtenues en cisaillant des assemblages granulaires secs 2D avec N = 896,  $\kappa = 10^4$ ,  $\zeta = 0.98$ .

$h_{\min}/a$	$\Phi_0$	ν	e
$10^{-2}$	$0.817 \pm 0.002$	$0.49\pm0.01$	$0.530 \pm 0.011$
$10^{-4}$	$0.820 \pm 0.003$	$0.40\pm0.02$	$0.376 \pm 0.012$

Tableau 4.4 : Meilleurs paramètres d'interpolation pour l'équation 4.8 à partir de données obtenues en cisaillant des pâtes granulaires lubrifiées avec N = 896,  $\kappa = 10^4$ .

un chargement isotrope coïncident dans la limite macroscopique. Les assemblages granulaires bidimensionnels faits de disques rigides et non frottants ne sont donc pas dilatants dans la limite géométrique macroscopique, tout comme dans le cas tridimensionnel.

Nous avons également cherché à interpoler les résultats des simulations portant sur les pâtes granulaires lubrifiées, avec une fonction ayant la même forme que celle proposée dans l'équation 4.7, en remplaçant I par Vi :

$$\Phi^{-1} = \Phi_0^{-1} + e \operatorname{Vi}^{\nu} \tag{4.8}$$

Le tableau 4.4 regroupe les valeurs des paramètres pour  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  et  $h_{\min}/a = 10^{-4}$ . D'après ce tableau, la compacité  $\Phi_0$  semble peu sensible à la valeur du paramètre de rugosité. Encore une fois, ceci peut certainement s'expliquer par la sensibilité relativement faible du système vis-à-vis de ce paramètre lorsqu'il évolue dans une gamme de variation physique. On constate néanmoins qu'il semble décroître lorsque Vi augmente. Une telle évolution serait conforme à l'intuition que l'on peut avoir de ce système, à savoir qu'il se comporte comme un assemblage granulaire sec non frottant lorsque  $h_{\min}/a \to 0$ . On s'attend donc à ce que dans cette limite, la valeur de la compacité  $\Phi_0$  soit égale à celle mesurée lorsque l'on cisaille très lentement un matériau granulaire sec non frottant, aux alentours de 0.84 d'après le tableau 4.3. Nos calculs montrent qu'on en est loin lorsque  $h_{\min}/a \ge 10^{-4}$ . Dans ce cas, les compacités  $\Phi_0$ mesurées sont très proches de celle que l'on obtient en cisaillant très lentement un assemblage granulaire sec frottant constitué des mêmes grains que ceux de la pâte.

#### 4.2.3 Pression de contact

Compte tenu de la méthode de simulation employée, la pression P imposée est, par construction (voir les deux dernières lignes de l'équation 2.19), égale à tout instant à la pression transmise par le réseau des contacts  $P_{\text{cont}}$  plus la pression transmise par les forces de lubrification  $P_{\text{lub}}$ :

$$P = P_{\rm cont} + P_{\rm lub} \tag{4.9}$$

Cette décomposition est possible du fait que dans notre modèle, on additionne simplement forces de contact et de lubrification. Nous avons donc calculé la valeur de la pression de contact lorsque l'on cisaille une pâte granulaire lubrifiée. L'évolution du rapport entre la pression de contact  $P_{\rm cont}$  et la pression totale P en fonction du nombre visqueux Vi est représentée sur la figure 4.3. Encore une fois,  $P_{\rm cont}$  est calculée en prenant la valeur moyenne temporelle des pressions de contact instantanées mesurées et l'incertitude statistique associée est évaluée à l'aide de la méthode de regroupement par blocs. Les incertitudes statistiques affectant les résultats sont minimes puisque systématiquement inférieures à  $2 \times 10^{-3}$ . On constate que le rapport  $P_{\rm cont}/P$ , fonction croissante de Vi, est toujours strictement supérieur à 1 et qu'il est très proche de 1 lorsque Vi  $\leq 10^{-3}$ . En revanche, il peut atteindre des valeurs nettement supérieures à 1 pour de plus grandes valeurs du nombre visqueux. Lorsque Vi = 0.1, on trouve par exemple que  $P_{\rm cont}/P$  est environ égal à 2.3. Néanmoins, dans ce cas, les deux tiers de cette valeur sont imputables



Figure 4.3 : Rapport entre la pression de contact  $P_{\text{cont}}$  et la pression totale P en fonction du nombre visqueux Vi pour une pâte granulaire comptant 896 grains avec un paramètre de rugosité  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ .

à la composante visqueuse des interactions au niveau des contacts, tandis que le dernier tiers trouve son origine dans les forces élastiques et de frottement entre paires de grains en contact. En revanche, dès que Vi  $< 10^{-3}$ , la contribution visqueuse à la pression de contact devient négligeable par rapport à celle des interactions élastiques et de frottement.

La figure 4.3 montre que, pour de petites valeurs de Vi, les particules sont en contact et que c'est le réseau des contacts qui supporte intégralement le chargement isotrope appliqué. La nature granulaire du matériau que nous étudions joue donc un rôle très important et ce, d'autant plus que le nombre visqueux est faible, du moins lorsque le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  n'est pas trop petit, comme dans le cas discuté ici où il vaut  $10^{-2}$ . Cette importance du réseau des contacts pour de petites valeurs de Vi indique donc que le caractère granulaire de la pâte explique certainement en grande partie les comportement observés. En particulier, c'est probablement la raison pour laquelle le frottement interne  $\mu_0^*$  et la compacité  $\Phi_0$  que l'on extrapole dans la limite Vi  $\rightarrow 0$  sont si proches de ceux que l'on trouve dans le cas d'assemblages granulaires secs frottants lorsque  $I \rightarrow 0$  pour les valeurs de  $h_{\min}/a$  explorées.

#### 4.2.4 Viscosité effective

Nous nous sommes également intéressés à la façon dont varie la viscosité effective  $\eta_{\text{eff}}$  d'une pâte granulaire lubrifiée en fonction de sa fraction solide. Comme nous l'avons écrit dans la section 1.1, cette quantité est très fréquemment mesurée, calculée, *etc.* dès lors que l'on étudie le comportement d'une suspension. Classiquement, en géométrie Couette plan, la viscosité effective  $\eta_{\text{eff}}$  d'une suspension est définie comme le rapport entre la contrainte de cisaillement  $\sigma_{12}$ exercée sur le système et le taux de cisaillement appliqué :

$$\eta_{\rm eff} = \frac{\sigma_{12}}{\dot{\gamma}} \tag{4.10}$$

Dans nos simulations, le taux de cisaillement est fixé. La contrainte de cisaillement est en revanche mesurée et elle fluctue au cours du temps. Nous avons donc défini  $\eta_{\text{eff}}$  comme le rapport de la contrainte de cisaillement moyennée dans le temps par le taux de cisaillement.



Figure 4.4 : Viscosité effective  $\eta_{\text{eff}}$  d'une pâte granulaire lubrifiée divisée par la viscosité du liquide interstitiel  $\eta$  en fonction de la compacité  $\Phi$ . Les points rouges correspondent à des pâtes pour lesquelles  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  tandis que les points bleus correspondent à des pâtes pour lesquelles  $h_{\min}/a = 10^{-4}$ .

L'équation 4.10 pouvant être réécrite de la manière suivante

$$\eta_{\rm eff} = \frac{\sigma_{12}}{P} \frac{P}{\eta \dot{\gamma}} \eta, \tag{4.11}$$

on peut calculer, en prenant la moyenne temporelle de l'équation précédente, le rapport entre  $\eta_{\text{eff}}$  et la viscosité  $\eta$  du liquide interstitiel comme suit :

$$\frac{\eta_{\rm eff}}{\eta} = \frac{\mu^*}{\rm Vi} \tag{4.12}$$

Dans les simulations que nous avons effectuées, le volume de la boîte de simulation, et par conséquent la fraction solide (ou compacité) ne sont pas fixés mais mesurés. Pour pouvoir tracer la variation de la viscosité avec  $\Phi$ , nous avons donc mesuré le coefficient de frottement interne  $\mu^*$  et la compacité moyenne  $\Phi$  pour différentes valeurs de Vi. En effet, comme en témoigne la figure 4.2,  $\Phi$  varie très sensiblement avec Vi.  $\Phi$  est une fonction décroissante de Vi; la compacité maximale que peut atteindre une pâte lorsqu'elle est cisaillée en régime stationnaire est égale à  $\Phi_0$ , valeur atteinte lorsque le nombre visqueux est nul. Puisque  $\mu^*$  atteint une valeur limite strictement positive lorsque Vi  $\rightarrow 0$ , le rapport  $\eta_{\rm eff}/\eta$  tend vers l'infini lorsque la compacité de la pâte est proche de  $\Phi_0$ , c'est-à-dire lorsque Vi  $\rightarrow 0$ . Cette divergence de la viscosité effective pour une fraction solide maximale  $\Phi_m$ , égale à la quantité  $\Phi_0$  dans le cas présent, est caractéristique du comportement des suspensions très concentrées. Étant donné la sensibilité des résultats que l'on obtient lorsque  $\Phi \to \Phi_0^2$ , nous nous sommes volontairement limités à exploiter les résultats que nous avons obtenus pour des valeurs du nombre visqueux supérieures ou égales à  $10^{-4}$ . En deçà de  $10^{-4}$ , les variations de  $\Phi$  que l'on mesure lorsque la valeur de Vi diminue d'un ordre de grandeur sont en effet du même ordre que les incertitudes statistiques entachant les moyennes temporelles mesurées.

La figure 4.4 montre l'évolution de la viscosité effective relative  $\eta_{\text{eff}}/\eta$  en fonction de la fraction volumique solide  $\Phi$  d'une pâte granulaire lubrifiée. L'incertitude statistique affectant les points

<sup>2.</sup> La viscosité effective normalisée  $\eta_{\text{eff}}/\eta = \mu^*/\text{Vi}$  fluctue alors énormément pour de toutes petites variations de compacité puisque la courbe représentant la compacité moyenne en fonction de Vi est quasiment plate lorsque Vi  $\leq 10^{-5}$ .

représentés est liée à celle correspondant à la valeur du frottement interne : en valeur relative, elle est inférieure à 4%. On observe une bonne correspondance entre la viscosité effective d'une pâte granulaire lubrifiée pour laquelle  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  et celle d'une pâte granulaire lubrifiée pour laquelle  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  et celle d'une pâte granulaire lubrifiée pour laquelle  $h_{\min}/a = 10^{-4}$ .

Comme on pouvait s'y attendre, on constate que  $\eta_{\text{eff}}/\eta$  est une fonction croissante et convexe de  $\Phi$ , en accord avec les observations expérimentales. De plus, comme de bien entendu, les formules applicables dans le cas dilué (1.16 voire 1.17) ne sont absolument pas en mesure de rendre compte des viscosités effectives que nous mesurons compte tenu de la valeur élevée des fractions volumiques solides étudiées. D'autres modèles sont couramment employés, avec plus ou moins de succès, lorsque l'on cherche à modéliser le comportement de la viscosité effective d'une suspension concentrée. Parmi les plus fréquemment rencontrés, on peut citer le modèle de Krieger-Dougherty [65] :

$$\frac{\eta_{\text{eff}}^{\text{KD}}}{\eta} = \left(1 - \frac{\Phi}{\Phi_m}\right)^{-2.5\Phi_m} \tag{4.13}$$

ou encore celui de Eilers [170]:

$$\frac{\eta_{\text{eff}}^{\text{L}}}{\eta} = \left(1 + \frac{1.5\Phi}{1 - \Phi/\Phi_m}\right)^2 \tag{4.14}$$

(L'exposant  $2.5\Phi_m$  du modèle de Krieger-Dougherty est choisi de manière à ce que l'expression de  $\eta_{\text{eff}}^{\text{KD}}$  coïncide avec celle d'Einstein (1.16) dans la limite des petites fractions solides. Néanmoins, des auteurs (comme ceux de l'article [17]) considèrent parfois un modèle de Krieger-Dougherty que l'on pourrait qualifier de généralisé dans lequel cet exposant est un autre paramètre indépendant, n'entretenant *a priori* aucun lien particulier avec  $\Phi_m$ .)

Nous ne sommes parvenus à rendre compte de manière satisfaisante des valeurs calculées de la viscosité effective avec aucun des modèles précédents. Il est possible que ce soit dû au fait qu'aucune de ces formules n'est en mesure de bien rendre compte de la viscosité effective d'une suspension dans la limite concentrée. Or, c'est bien de cela qu'il s'agit ici puisque notre modèle de pâte granulaire ne tient compte que des forces de lubrification et est donc d'autant plus pertinent que  $\Phi$  est proche de  $\Phi_m$ . Frankel et Acrivos [63] ont bien proposé un modèle dans lequel la viscosité effective de la suspension, supposée extrêmement concentrée et de structure cristalline, est due à la dissipation d'énergie intervenant au niveau des films de lubrification entre grains proches voisins, mais le résultat obtenu dépend fortement de la configuration instantanée pour laquelle on effectue le calcul [171]. Il paraît donc très probable que la viscosité d'une suspension n'est pas une quantité dépendant d'un nombre restreint de paramètres dans la limite hautement concentrée. Par exemple, l'état de surface des billes, ou encore de petites interactions physicochimiques, sont susceptibles de modifier la structure de la suspension et donc sa viscosité. Le bon accord entre les valeurs de viscosité effective obtenues pour  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  et  $h_{\min}/a = 10^{-4}$ ne serait donc vraisemblablement plus de mise pour des valeurs nettement plus petites du paramètre de rugosité. Nous rappelons d'ailleurs que nous nous attendons à ce que la compacité  $\Phi_0$  à laquelle s'écoule une pâte granulaire lubrifiée lorqu'elle est soumise à un cisaillement simple très lent soit fonction du paramère de rugosité. Si c'est effectivement le cas, la compacité pour laquelle la viscosité diverge dépendra de la valeur de  $h_{\min}/a$ .

# 4.3 Aspects microstructurels

Nous allons maintenant aborder quelques points concernant la microstructure d'une pâte granulaire lubrifiée lorsqu'elle est soumise à un cisaillement maintenu. Nous nous sommes intéressés



Figure 4.5 : Coordinence  $z^*$  du squelette granulaire d'une pâte granulaire lubrifiée comptant 896 grains, pour  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , en fonction du nombre visqueux Vi.



Figure 4.6 : Composante  $F_{12}$  du tenseur de texture du squelette granulaire d'une pâte granulaire lubrifiée comptant 896 grains, pour  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , en fonction du nombre visqueux Vi.

à deux grandeurs que nous avons déjà eu l'occasion de présenter dans la partie II et qui sont très souvent étudiées lorsque l'on simule le comportement d'assemblages granulaires secs : la coordinence  $z^*$  et la texture  $\underline{\mathbf{F}} = \langle \vec{n} \otimes \vec{n} \rangle$  du squelette granulaire (c'est-à-dire du réseau des contacts existants au sein de la pâte). Ces quantités sont calculées pour des pâtes granulaires lubrifiées pour lesquelles N = 896,  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , en moyennant le nombre de coordination et le tenseur de texture mesuré sur cinq configurations différentes enregistrées une fois le régime stationnaire établi, pour différentes valeurs de Vi.

La figure 4.5 montre l'évolution du nombre de coordination  $z^*$  du squelette granulaire en fonction du nombre visqueux Vi. On constate que cette grandeur est une fonction décroissante de Vi.  $z^*$  est inférieur à 2 lorsque Vi = 0.1 et est compris entre 3.3 et 3.4 pour Vi <  $10^{-5}$ .  $z^*$ semble de stabiliser en deçà de cette valeur du nombre visqueux. La structure du matériau est donc assez éloignées d'une structure isostatique (pour laquelle  $z^*$  devrait être exactement égal à 4) à cause de la mobilisation du frottement intergranulaire au niveau des contacts entre grains. On s'attend néanmoins à ce que ma valeur de  $z^*$  s'approche de 4 pour de petites valeurs de Vi dans la limite où  $h_{\min}/a \to 0$ .

La figure 4.6 montre quant à elle l'évolution de la composante  $F_{12}$  du tenseur de texture en fonction du nombre visqueux Vi. En valeur absolue, c'est une fonction croissante de Vi et on constate que même dans la limite où Vi  $\rightarrow 0$ , une anisotropie résiduelle semble perdurer. Quant aux composantes diagonales du tenseur de texture,  $F_{11}$  et  $F_{22}$ , elles restent égale à 0.5 à  $5 \times 10^{-3}$  près (on rappelle qu'à deux dimensions, le tenseur de texture d'une structure rigoureusement isotrope vaut  $\frac{1}{2}$ ), pour toutes les valeurs de Vi explorées.

# 4.4 Conclusion et perspectives

Nous avons étudié dans ce chapitre le comportement de pâtes granulaires lubrifiées soumises à des essais de cisaillement simple et nous avons confronté ces résultats à ceux obtenus sur des assemblages granulaires secs constitués de grains frottants ou non frottants, à deux dimensions, simulés par dynamique moléculaire. Pour de petites valeurs de Vi, la pression imposée à une pâte est supportée par le réseau des contacts qui se développe en son sein. Nous avons montré que dans la limite où Vi  $\rightarrow 0$ , le frottement interne d'un pâte granulaire lubrifiée est compris entre les valeurs du frottement interne d'un assemblage sec de grains non frottants et celui d'un assemblage de grains frottants dans la limite où le nombre inertiel  $I \to 0$ . Pour une valeur physique du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , on trouve que le frottement interne d'une pâte granulaire lubrifiée dans la limte  $I \to 0$  est très proche de celui d'un assemblage granulaire sec frottant. Nous avons aussi expliqué la raison pour laquelle nous pensons que le frottement interne des pâtes doit s'approcher de celui des assemblages granulaires secs non frottants lorsque le paramètre de rugosité tend vers 0. On observe également que lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , la compacité moyenne d'une pâte granulaire lubrifiée cisaillée très lentement de manière stationnaire est très proche celle que l'on peut mesurer en procédant au même type d'essais sur un assemblage granulaire constitué de grains frottants.

La similitude des valeurs obtenues dans la limite Vi  $\rightarrow 0$  et dans la limite  $I \rightarrow 0$  pour des pâtes granulaires lubrifiées et des assemblages granulaires secs suggère qu'il est possible d'employer un seul formalisme pour décrire l'écoulement de ces deux types de matériaux. Néanmoins, nous avons indiqué qu'un unique formalisme ne semble pas en mesure de précisément rendre compte du comportement des deux types de systèmes.

Nous avons également calculé la viscosité effective d'une pâte granulaire en fonction de sa compacité  $\Phi$ . Nous ne sommes pas parvenus à interpoler les résultats obtenus à l'aide d'une formule classique. Néanmoins, compte tenu de l'expression de la viscosité effective,  $\eta_{\text{eff}}/\eta = \mu^*/\text{Vi}$ , il est clair que dans la limite macroscopique, la viscosité effective doit diverger pour une fraction volumique solide  $\Phi_m$  égale à la fraction volumique solide moyenne  $\Phi_0$  à laquelle s'écoule une pâte granulaire lubrifiée lorsqu'elle est très lentement cisaillée. Cette compacité  $\Phi_0$ correspond à la compacité critique de la mécanique des sols, notée  $\Phi_c$ . On devrait donc avoir  $\Phi_m = \Phi_0 = \Phi_c$ . De plus, dans la limite où le paramètre de rugosité est très petit, nous pensons que  $\Phi_0$  tend vers  $\Phi_{\text{RCP}}$ . Si c'est effectivement le cas, cela signifie que toutes ces différentes valeurs de compacité (compacité pour laquelle la viscosité d'une suspension diverge, compacité critique, compacité RCP), introduites dans des contextes très différents, coïncident lorsque le matériau considéré est une pâte granulaire non brownienne et non colloïdale constituée de grains élastiques sphériques extrêmement lisses baignant dans un liquide newtonien. Prouver cette assertion par le biais du calcul numérique semble néanmoins très difficile [74].

# Chapitre 5

# Compactage de pâtes granulaires lubrifiées

# 5.1 Compactage et génie civil

Le compactage d'un matériau constitue souvent une étape à la fois indispensable et cruciale pour de nombreux travaux relevant du génie civil [172]. Compacter consiste essentiellement à faire bouger les grains les uns par rapport aux autres de manière à obtenir un arrangement plus dense que celui adopté initialement par le matériau<sup>1</sup>. Voyons maintenant en quoi cette opération est avantageuse. La réduction du volume du matériau sous l'effet du compactage permet de prévenir dans une large mesure toute densification ultérieure non sollicitée résultant de l'utilisation normale de l'ouvrage. De plus, lorsque les grains sont plus resserrés, les caractéristiques mécaniques du matériau (angle de frottement interne, modules de déformation...) s'en trouvent améliorées. L'amélioration des caractéristiques mécaniques du matériau est notamment l'objectif premier que l'on cherche à atteindre lorsque l'on construit une route puisque ce sont ces caractéristiques qui vont, dans une large mesure, assurer la pérénnité de l'ouvrage. D'autre part, plus les grains sont proches les uns des autres, moins ils vont avoir tendance à s'user par frottement ou encore à se casser puisque tout mouvement relatif des grains sera rendu difficile par la densité du matériau. Les caractéristiques mécaniques du matériau auront donc d'autant plus de chances de perdurer que celui-ci est dense. Finalement, le compactage, en réduisant le volume occupé par les interstices entre les grains, diminue corrélativement la perméabilité du matériau. Cette conséquence est bien sûr plus ou moins souhaitable selon les cas : les noyaux de barrages en terre se doivent d'être aussi étanches que possible, alors que dans le cas des assises de chaussées, c'est le liant utilisé qui est pour une large part responsable de l'imperméabilité.

Les enjeux économiques du compactage étant importants, les ingénieurs ont ressenti le besoin de concevoir des dispostifs de laboratoire permettant de l'étudier de façon bien contrôlée. Ces développements ont souvent été motivés par des problèmes pratiques rencontrés sur le terrain.

<sup>1.</sup> Le compactage peut également conduire à l'expulsion de liquide ou de gaz (de l'air en général) et aussi à la compression du gaz piégé dans le matériau. Même si ces effets peuvent parfois avoir des conséquences spectaculaires (comme le phénomène dit du « coussin de caoutchouc » [172]), leurs répercussions sont en général bien moins importantes que celles induites par la réorganisation des grains. L'influence potentielle de ces facteurs n'est donc pas abordée dans ce travail.



Figure 5.1 : À gauche : presse à cisaillement giratoire installée sur le site nantais du Laboratoire Central des Ponts et Chaussées.

Ainsi, le souhait de parvenir à lutter contre l'orniérage par fluage des enrobés bitumineux a conduit la France à développer des moyens et des méthodes d'essais spécifiques dans les années 60. La presse à cisaillement giratoire (voir la figure 5.1) a notamment été conçue à cette époque pour étudier la « compactibilité » de mélanges bitumineux. Le principe de l'essai est le suivant : on place le matériau dans un moule avant la forme d'un cylindre incliné (c'est-à-dire un cylindre dont l'axe est légèrement incliné par rapport à la direction verticale et limité en bas et en haut par deux plans horizontaux) et on applique une force F dirigée verticalement sur le matériau, au niveau du plan supérieur, tout en faisant tourner le dispositif à vitesse constante autour d'un axe vertical. Le matériau est ainsi cisaillé du fait de l'inclinaison de l'axe du cylindre par rapport à la verticale. La presse est conçue de manière à permettre la mesure de la hauteur de l'échantillon. La compacité moyenne du matériau peut ensuite être déduite de cette donnée. On s'intéresse généralement à l'évolution de la compacité moyenne avec le nombre de cycles (ou nombre de « passes » pour reprendre un vocable plus proche de celui du génie civil). Le nombre total de cycles est généralement égal à quelques centaines. Expérimentalement on constate que dans cette gamme de valeurs du nombre total de cycles, la compacité moyenne du matériau varie à peu près linéairement avec le logarithme du nombre n de cycles effectués :

$$\Phi_n = \Phi_0 + K \ln n \tag{5.1}$$

Cette représentation, bien qu'elle semble être considérée comme satisfaisante par les praticiens lorsque le nombre total de cycles et de l'ordre de quelques centaines, ne saurait cependant convenir pour des valeurs arbitrairement grandes du nombre de passes puisqu'il est évident que, si le logarithme du nombre de passes tend vers l'infini lorsque ce nombre tend lui aussi vers l'infini, ce ne sera pas le cas de la compacité qui est nécessairement inférieure ou égale à 1, quelle que soit la granularité et la rigidité des particules formant le matériau considéré. Diverses modélisations possibles, valables pour toute valeur du nombre de cycles, ont été proposées [172].

De manière plus générale, les mécaniciens des sols s'intéressent aussi depuis longtemps au comportement de nombreux géomatériaux (comme les sables) sous chargement cyclique ou, plus généralement, soumis à des sollicitations cycliques [40, 173]. Ces dernières peuvent être d'origines fort diverses : compactage bien entendu, mais aussi sollicitations sismiques, trafic routier, forçage exercé par un fluide (vent, houle)... L'étude des effets de ces sollicitations est donc naturellement un sujet dont l'importance pratique est majeure. L'un des dispositifs les plus fréquemment utilisés pour ces études est l'appareil triaxial. De nombreuses expériences dans lesquelles un matériau est soumis à des sollicitations cycliques ont ainsi été conduites, que ce soit en condition drainée ou non drainée. Le comportement d'un matériau élastique ne dépend que d'un nombre restreint de paramètres (deux par exemple, lorsque le matériau est linéaire et isotrope : le module d'Young et le coefficient de Poisson); une fois la valeur de ces paramètres connue, grâce à une poignée d'essais bien choisis, on peut précisément prédire – au moins numériquement – la réponse du matériau à tout type de sollicitation extérieure. Toutefois, la situation est toute autre dans le cas des matériaux réels (sols, chaussées, etc.). Même s'il existe des modèles permettant de correctement décrire le comportement de certaines classes de matériaux, ce bon accord est toujours limité à certaines plages de sollicitations, typiquement voisines de celles ayant été utilisées pour obtenir les données expérimentales employées pour concevoir le modèle. Tant que les sollicitations subies par le matériau lorsqu'il est utilisé en conditions réelles ne diffèrent pas trop de celles pour lesquelles son comportement a été testé, les prédictions des modèles ont toutes les chances d'être satisfaisantes. Cependant, le type de sollicitations pouvant être exercées sur un échantillon à l'aide de dispositifs expérimentaux comme l'appareil triaxial (ou la presse à cisaillement giratoire) est toujours limité. Ce manque de souplesse peut parfois être pallié par la construction d'un appareil dédié, mais c'est un travail de longue haleine et on doit donc le plus souvent se contenter des résultats obtenus par des essais classiques. Outre leur complexité intrinsèque, c'est certainement l'une des raisons pour lesquelles le comportement de matériaux d'usage fréquent en génie civil n'est pas encore très bien maîtrisé. L'exemple des chaussées, pour lesquelles certains phénomènes restent mal compris (comme l'orniérage), est probant à cet égard. La compréhension du comportement des matériaux du génie civil ferait certainement un grand bond en avant si l'on pouvait appliquer à un échantillon n'importe quel chemin de contrainte, obtenir des informations fines sur les événements se déroulant en son sein, analyser l'effet d'un unique cycle... et c'est la raison pour laquelle la simulation numérique peut permettre de faire progresser nos connaissances dans ce domaine.

Un certain nombre de travaux de modélisation [174, 175, 176, 177] ont d'ores et déjà été consacrés aux enrobés bitumineux. Ils portent essentiellement sur l'estimation de certaines de leurs propriétés mécaniques (propriétés élastiques notamment). Quelques travaux numériques se sont également penchés sur la détermination de propriétés élastiques d'enrobés bitumineux par élements finis ou par éléments discrets [178, 179, 180]. Cependant, à notre connaissance, le compactage par simulation numérique d'un enrobé bitumineux ou même d'une pâte granulaire newtonienne n'a jamais fait l'objet d'une quelconque publication  $^2$ .

La simulation numérique du compactage d'un enrobé bitumineux constitue évidemment un objectif stimulant. Néanmoins, on sait que le bitume est un matériau dont la structure et le comportement sont particulièrement complexes [182]. On ne sait même pas précisément quelle force s'exerce lorsque l'on rapproche ou que l'on éloigne deux grains enrobés de bitume. Dans ces conditions, il est difficile d'imaginer modéliser précisément et de simuler le comportement d'un enrobé bitumineux aussi proche de la réalité que possible compte tenu des incertitudes pesant sur la micromécanique des connexions entre grains. De plus, même si nous connaissions un modèle rendant précisément de nombreux paramètres dont il faudrait analyser l'impact. Cette étude, bien que nécessaire<sup>3</sup>, serait vraisemblablement fastidieuse et montrerait probablement que seule une poignée de paramètres jouent un rôle véritablement important. En somme,

<sup>2.</sup> Dans sa thèse [181], Sofiane Ouaguenouni s'est toutefois intéressé au compactage isotrope d'un matériau dont on peut considérer qu'il modélise un enrobé bitumineux de manière très idéale. Le système considéré est en effet constitué de grains circulaires indéformables non frottants présentant une légère polydispersité, placés aux nœuds d'un réseau triangulaire et interagissant uniquement par le truchement de forces de lubrification.

<sup>3.</sup> À ce propos, aucune étude de ce type n'est menée dans les travaux numériques mentionnés dans le précédent paragraphe, bien que les modèles utilisés fassent intervenir de nombreux paramètres.
il paraît plus judicieux de commencer par essayer de simuler le compactage d'un système dont la physique est plus simple que celle d'un véritable enrobé bitumineux (qui peut notamment être fait de matériaux hétérogènes, avec des grains de formes complexes et variées présentant une forte polydispersité, le tout baignant dans un liquide complexe), comme le modèle de pâte granulaire lubrifiée que nous avons introduit dans la partie I. Comprendre les propriétés de compactage d'un tel matériau constituerait un premier pas important pour mieux appréhender les mécanismes à l'œuvre dans le cas des enrobés bitumineux. Cette étape est d'autant plus nécessaire que les études expérimentales portant sur le compactage de pâtes granulaires « simples » (j'exclus de cette catégorie les matériaux réels auxquels s'intéresse la mécanique des sols) sont rares (on peut néanmoins mentionner la référence [183]); quant aux études numériques, il n'en existe pas à ma connaissance. En revanche, le compactage des empilements granulaires secs a fait l'objet de plus d'attention et c'est de ce sujet dont nous allons parler dans la prochaine section.

### 5.2 Compactage de matériaux granulaires secs

L'étude des matériaux granulaires secs soumis à des vibrations a fait l'objet d'une intense activité expérimentale [184, 185, 186, 187] et théorique [188, 189, 190, 191] de la part de nombreux physiciens dans les années 90<sup>4</sup>. Le dispositif expérimental couramment employé consiste en un tube rempli de billes, toutes de taille identique, soumis à une accélération verticale périodique. Les secousses subies par le système sont suffisamment espacées dans le temps pour pouvoir être considérées comme indépendantes. Le principal paramètre de contrôle de ce problème est l'accélération réduite  $\Gamma \equiv A\omega^2/g$ , A étant l'amplitude des secousses,  $\omega$  leur pulsation et gl'accélération de la pesanteur. Le compactage est d'autant plus efficace que la valeur de  $\Gamma$  est importante. Les billes ne commencent à décoller et donc à se réarranger que lorsque la valeur de  $\Gamma$  devient strictement supérieure à 1 (la valeur en question est environ égale à 1.2). À mesure que  $\Gamma$  devient plus grand, le procédé gagne en efficacité. Lorsque l'accélération réduite est supérieure ou égale à 2 et qu'il n'y a pas apparition de rouleaux de convection dans le tube contenant les billes [187], la compacité de l'empilement après n cycles, notée  $\Phi_n$ , est raisonnablement bien interpolée par le modèle à quatre paramètres suivant :

$$\Phi_{\infty} - \Phi_n = \frac{\Phi_{\infty} - \Phi_0}{1 + B \ln\left(1 + \frac{n}{\tau}\right)} \tag{5.2}$$

 $\Phi_0$  est la compacité initiale,  $\Phi_{\infty}$  la compacité limite lorsque le nombre de cycles tend vers l'infini, tandis que B et  $\tau$  sont des constantes. Ces paramètres sont tous fonction de l'accélération réduite  $\Gamma$ . Plusieurs modèles ont ensuite été proposés pour rendre compte de l'équation 5.2 : modèle de « parking » [189, 188], modèle de volume libre [191] ou encore modèle de spin [190].

L'équation 5.1 constitue une bonne approximation de l'équation 5.2 pour un nombre de cycles pas trop élevé à condition que le rapport  $B/\tau$  soit suffisamment petit (expérimentalement, il apparaît qu'il est effectivement toujours inférieur à 0.1 [184], ce qui explique les profils approximativement linéaires de  $\Phi$  en fonction du logarithme du nombre de *taps* que l'on observe dans l'article [184]). La validité de l'équation 5.2 semble toutefois limitée aux assemblages granulaires vibrés verticalement; il ne semble pas exister de loi générale donnant l'évolution de la compacité en fonction du nombre de cycles quel que soit le mode de compactage utilisé. Les

<sup>4.</sup> L'intérêt manifesté par les physiciens pour ce problème s'explique par le fait qu'il est lié à une problématique plus générale, la relaxation de systèmes athermiques désordonnés, et que les phénomènes mis en évidence rappellent par certains aspects des comportements typiques des verres.

résultats obtenus à l'aide du dispositif de cisaillement cyclique utilisé par Maxime Nicolas et coll. montrent en effet que la plupart des interpolations couramment employées (équation 5.2 ou encore fit de type « exponentielle étirée » [187]) pour rendre compte des observations expérimentales portant sur l'évolution de la compacité du matériau en fonction du nombre de passes ne s'appliquent pas dans leur cas [192]. Le processus de compactage semble néanmoins présenter un certain de nombre de caractéristiques indépendantes de la manière dont il est mis en œuvre : sa dynamique est lente et complexe et ralentit à mesure que le nombre de cycles augmente, un matériau se compacte d'autant plus rapidement que l'énergie de compactage est élevée, un système en train d'être compacté est sensible à l'histoire des sollicitations qu'il a subies [193] et la façon dont le matériau se compacte dépend fortement de son état initial. Notons qu'un matériau compacté dans le dispositif de cisaillement présenté dans [192] l'est de manière beaucoup plus douce que lorsqu'il est contenu dans un tube soumis à une accélération verticale périodique comme dans [184]. Il est donc probable que la dynamique des grains diffère entre ces deux types d'expériences, ce qui pourrait expliquer les divergences de comportement observées. Notons pour finir que des études portant sur un mode de compactage encore plus « doux », reposant sur l'application de cycles de température à des empilements granulaires secs ont également été menées récemment [194].

En sus des simulations portant sur des massifs de billes soumis à des vibrations verticales [195], des calculs numériques de compactage ont été réalisés ces dernières années sur des empilements bidimensionnels de polygones convexes ou de disques soumis à des essais biaxiaux [196, 197, 198]. Dans ces simulations, la contrainte verticale est maintenue égale à une valeur constante  $p_0$ tandis que la contrainte horizontale varie sinusoïdalement autour de  $p_0$ . Les calculs montrent que l'accumulation<sup>5</sup> de déformations plastiques au cours du compactage est due à l'existence de contacts glissants. Une étude publiée ultérieurement a néanmoins prouvé que ce comportement est dû à une propriété spécifique que partagent de nombreux modèles de force tangentielle utilisés en simulation de matériaux granulaires secs [199], à savoir que l'énergie stockée dans un contact dépend de l'histoire de ce contact. L'article [199] montre notamment que la présence d'un seul contact glissant suffit à induire du *ratcheting*, mais que cette condition, si elle est suffisante, n'est pas nécessaire. En particulier, lorsque le coefficient de frottement intergranulaire  $\mu$  est infini (ce qui permet de s'assurer qu'aucun contact ne sera glissant) et que les contraintes horizontale et verticale imposées sur la boîte de simulation sont toutes les deux sinusoïdales, on observe encore du *ratcheting*. En revanche, lorsque l'on utilise une méthode de simulation pour laquelle l'énergie stockée dans un contact dépend uniquement de la configuration actuelle des grains impliqués, ce phénomène disparaît. Ainsi, le ratcheting serait une conséquence du caractère hystérétique de l'énergie stockée dans un contact ou, plus généralement, dans une connexion mécanique.

### 5.3 Essais alternés de compactage d'une pâte granulaire lubrifiée

#### 5.3.1 Système considéré

On considère une pâte granulaire lubrifiée modèle du type de celles que nous avons introduites dans la partie I. La préparation de l'état initial suit les différentes étapes que nous avons déjà

<sup>5.</sup> Cette accumulation est qualifiée de ratcheting en anglais, terme que l'on pourrait traduire en français par « effet cliquet ».



Figure 5.2 : Principe d'un essai alterné. À gauche : chargement appliqué à la pâte granulaire. À droite : représentation du chargement appliqué dans le plan  $(\Sigma_{11} - P)/\delta P - (\Sigma_{22} - P)/\delta P$ .

eu l'occasion d'énoncer dans la section 2.3 : on commence par disposer les grains circulaires aux nœuds d'un cristal que l'on fait ensuite fondre, puis on compacte le système obtenu « à sec » avant de multiplier les distances entre les centres des particules par un facteur strictement supérieur à 1 (ici choisi égal à 1.1). Ce mode de préparation permet d'obtenir des échantillons initiaux dont la géométrie peut être considérée comme réaliste. On applique ensuite à ces états initiaux un chargement mécanique périodique (figure 5.2). Le chargement appliqué est purement diagonal et varie sinusoïdalement avec le temps (la pulsation est notée  $\omega$  et  $\delta P > 0$  est une surpression) :

$$\Sigma_{11} = P + \delta P \sin(\omega t) \tag{5.3}$$

$$\Sigma_{22} = P - \delta P \sin(\omega t) \tag{5.4}$$

La pression subie par le système, égale à  $(\Sigma_{11} + \Sigma_{22})/2 = P$ , est donc constante dans le temps et le déviateur des contraintes est au plus égal à  $2 \delta P$ . Compte tenu de la nature purement diagonale du chargement utilisé, les directions principales de  $\underline{\Sigma}$  sont les directions horizontale (direction 1) et verticale (direction 2) et les contraintes principales  $\Sigma_I$  et  $\Sigma_{II}$  ( $\Sigma_I$  étant supposé supérieur à  $\Sigma_{II}$ ) valent :

$$\Sigma_I = P + \delta P |\sin(\omega t)| \tag{5.5}$$

$$\Sigma_{II} = P - \delta P |\sin(\omega t)| \tag{5.6}$$

La direction principale majeure correspond à l'axe horizontal lorsque  $sin(\omega t)$  est positif et à l'axe vertical dans le cas contraire.

Ce choix de chargement appliqué (équations 5.3 et 5.4) est motivé par les considérations suivantes : la forme du chargement a le mérite d'être simple et elle a de plus de grandes chances d'être efficace. Les mécaniciens des sols savent en effet que le compactage est d'autant plus efficace que les directions principales du chargement tournent au cours du processus. Dans notre cas, les directions principales majeure et mineure sont permutées au bout d'un intervalle de temps égal à  $\pi/\omega$  (c'est d'ailleurs la raison pour laquelle nous qualifions ce type d'essais d'« alternés »). On s'attend donc à ce que le compactage soit particulièrement prononcé avec le chargement choisi. Le comportement du matériau va être contrôlé par un certain nombre de paramètres adimensionnels : tous ceux listés dans la section 1.6.2 bien entendu (paramètre de raideur  $\kappa$ , nombre de grains N, nombre visqueux Vi, paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ ). Dans le cas présent, on définit le nombre visqueux de la manière suivante :

$$Vi = \frac{\eta\omega}{P} \tag{5.7}$$

Il existe en outre un autre nombre sans dimension susceptible d'affecter le comportement du système dans le cas qui nous préoccupe, à savoir le rapport  $\delta P/P$ , qui caractérise l'intensité du compactage.

Comme dans le reste de ce mémoire, la valeur de  $\kappa$  que nous avons utilisé (10<sup>4</sup>) est suffisamment élevée pour pouvoir considérer que les grains se comportent quasiment comme s'ils étaient parfaitement indéformables. D'autre part, nous rappelons que si la valeur de  $h_{\min}/a$  peut avoir un impact important sur le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée lorsqu'elle est très petite comme en témoignent les résultats de la section 2.3, le paramètre de rugosité des billes classiquement utilisées pour effectuer des mesures rhéologiques est généralement compris entre  $10^{-2}$  et  $10^{-3}$  [75]. Nous n'étudierons donc l'influence de ce paramètre qu'après avoir analysé l'effet de N, de  $\delta P/P$  et de Vi sur le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée.

#### 5.3.2 Étude paramétrique

Avant d'aborder cette étude proprement dite, nous avons reporté sur la figure 5.3 des résultats typiques montrant comment la compacité varie en fonction du nombre n de cycles. Ces résultats appellent plusieurs remarques. Tout d'abord, on peut constater que le chargement cyclique imposé a bien pour effet de compacter le matériau puisque la compacité de chacun des échantillons après 100 cycles est supérieure à la compacité d'une pâte granulaire équilibrée sous un chargement isotrope avec le même paramètre de rugosité. La figure 5.3 montre aussi l'importance que revêt l'état initial du matériau. Entre deux échantillons initiaux différents soumis au même chargement, il semble que le plus dense des deux initialement ait de grandes chances de le rester tout au long du compactage. Cette constatation présente surtout un intérêt pour les systèmes dont la taille n'est pas trop grande. Les écarts de compacité initiale entre deux échantillons comptant le même nombre N de grains et préparés suivant le même mode opératoire seront en effet de moins en moins marqués à mesure que le nombre de grains augmente.

On peut également observer que l'évolution de la compacité est assez faible : l'écart entre la compacité mesurée au bout du centième cycle et celle mesurée lors du premier cycle n'excède pas 0.8%, d'après la figure 5.3. Cette gamme de variation semble modeste eu égard à notre intuition courante du compactage. Des études menées par M. Khay au Centre d'Expérimentations Routières de Rouen sur la compactibilité de matériaux utilisés en construction routière montrent qu'il est possible d'observer des écarts de 10% entre les compacités finale et initiale. Il convient néanmoins de remarquer que la plupart des matériaux qu'on souhaite compacter dans la vie de tous les jours sont assez dissemblables de celui dont il est question ici. D'une part, ces matériaux sont toujours humides, ce qui a vraisemblablement pour effet de diminuer leur compacité initiale et contribue certainement de ce fait à augmenter l'écart entre compacité finale et initiale. D'autre part, ils sont également anguleux; or, il est probable que l'angularité diminue significativement la fraction volumique maximale qu'un empilement de tels grains peut atteindre [10]. Les matériaux constitués de billes ou de disques non cohésifs sont donc vraisemblablement ceux pour lesquels l'efficacité « perçue » du compactage est la moindre. Il est



Figure 5.3 : Compacité  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles lors du compactage alterné de cinq configurations initiales différentes de pâtes granulaires lubrifiées comptant N=896 grains avec Vi = 0.1,  $\delta P/P=0.1$  et  $h_{\rm min}/a=0.01.$   $\Phi_{\rm iso}$  et les deux lignes horizontales associées représentent la compacité — et l'incertitude statistique associée — de l'état d'équilibre obtenu en appliquant un chargement statique isotrope à une pâte ayant les mêmes caractéristiques.

néanmoins possible d'observer des tassements plus importants lors du compactage de pâtes granulaires lubrifiées, en appliquant des cycles supplémentaires par exemple, ou encore en faisant varier les paramètres adimensionnels régissant le comportement du matériau modèle  $^{6}$ .

La figure 5.3 met également en évidence le nombre assez modeste de cycles appliqués. Cette valeur peu élevée s'explique par le temps important requis pour calculer le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée soumise à un chargement cyclique. Les résultats obtenus ici, qui portent sur des systèmes ne comptant que 896 grains et soumis à 100 cycles ont néanmoins demandé chacun plusieurs semaines de calcul. Il faut bien garder à l'esprit qu'à l'heure actuelle, les simulations de suspensions en général, et de pâtes granulaires en particulier, comptent toujours à notre connaissance moins d'environ 1000 grains, contrairement aux calculs numériques portant sur des matériaux granulaires secs où des études portant sur des systèmes comportant plusieurs dizaines de milliers de grains voire plusieurs centaines de milliers (à condition d'utiliser des codes parallélélisés) sont possibles.

Enfin, aucun phénomène de mise en ordre ou de ségrégation de la structure granulaire du matériau n'a été observée.

**Effet de** N : La figure 5.4 montre l'influence de la taille N (N = 224 et N = 896) du système sur

<sup>6.</sup> Pour être plus précis, le mode de préparation des échantillons nous permet bien sûr d'observer des différences de compacité de plusieurs dizaines de pourcents entre l'état initial et l'état final après cent cycles puisque la compacité de l'état initial est largement dépendante de la valeur du paramètre homothétique  $\Lambda$ , alors que celle de l'état final n'en dépend pas. Toutefois, ce type de résultat n'a pas d'intêrêt d'un point de vue physique : l'essentiel du tassement lié au choix de la valeur de  $\Lambda$  a lieu lors du premier cycle et c'est pourquoi nous ne considérons dans ce chapitre que ce qui se passe à partir de la fin du premier cycle.



Figure 5.4 : Effet de la taille N du système sur la compacité moyenne  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles et incertitudes statistiques associées. Les points bleus correspondent à une pâte comptant N = 224 grains et les points rouges à une pâte comptant N = 896 grains, avec Vi = 0.1,  $\delta P/P = 0.2$  et  $h_{\min}/a = 0.01$ .

le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée en cours de compactage. Plusieurs constatations s'imposent. Les incertitudes statistiques affectant les résultats obtenus sont d'autant moins marquées que N est grand. Ceci est certainement lié à la moindre variabilité de l'état initial lorsqu'une pâte granulaire lubrifiée compte un plus grand nombre de grains. La compacité initiale de la pâte granulaire lubrifiée est en effet égale (à un facteur  $\Lambda^{-2}$  près) à celle d'un assemblage granulaire sec frottant équilibré de manière isotrope : or, on sait que l'incertitude statistique sur cette compacité sèche est d'autant plus importante que le système est petit. D'autre part, le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée est d'autant plus erratique qu'elle est de petite taille. On distingue nettement sur la courbe bleue de la figure 5.4 (correspondant à N = 224) une augmentation assez conséquente et rapide de la compacité moyenne pour un nombre de cycles compris approximativement entre 40 et 50. En comparaison, la compacité moyenne d'une pâte granulaire de 896 grains évolue de manière beaucoup plus régulière avec le nombre n de cycles. Enfin, même s'il semble que la variation  $\Phi$  en fonction de  $\ln(n)$  tende à devenir un peu plus linéaire à mesure que N augmente, les résultats que nous obtenons ne vérifient pas de manière convaincante une équation de type 5.1 (pour des raisons de temps de calcul, nous n'avons malheureusement pas pu simuler des systèmes comptant plus de 896 grains). Expérimentalement, l'équation 5.1 semble correctement interpoler les résultats obtenus jusqu'à plusieurs centaines de cycles, alors que dans notre cas, cette expression ne pourrait correctement modéliser nos mesures que pour une dizaine de cycles tout au plus.

**Effet de Vi :** Nous avons également étudié l'influence du nombre visqueux Vi sur les résulats obtenus pour une pâte granulaire lubrifiée comptant 896 grains, avec une intensité de compactage  $\delta P/P = 0.2$  et un paramètre de rugosité  $h_{\min}/a = 0.01$  (voir figure 5.5). Il s'avère que le compactage est d'autant plus efficace que Vi est petit. En d'autres termes, plus la sollicitation mécanique appliquée varie lentement, plus le tassement de la pâte granulaire lubrifiée est important, toutes autres choses égales par ailleurs. Si le but à atteindre est de compacter une pâte



Figure 5.5 : Effet du nombre visqueux Vi sur la compacité moyenne  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles et incertitudes statistiques associées. Les points bleus correspondent à Vi = 1 et les points rouges à Vi = 0.1, avec N = 896,  $\delta P/P = 0.2$  et  $h_{\min}/a = 0.01$ .

granulaire donnée le mieux possible en un nombre de cycles fixé, le mieux est d'appliquer un chargement aussi lent que possible.

**Effet de**  $\delta P/P$ : Nous nous sommes également intéressés à l'influence de l'intensité du compactage  $\delta P/P$  sur le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée comptant 896 grains, avec Vi = 0.1 et  $h_{\min}/a = 0.01$ . Le graphe de gauche de la figure 5.6 montre que, conformément à l'intuition, le compactage est d'autant plus efficace que  $\delta P/P$  est grand. Dès lors, on pourrait être tenté de se dire que pour compacter efficacement une pâte granulaire, il suffit d'augmenter le plus possible l'intensité du compactage. C'est tout à fait possible numériquement. Les résultats obtenus sont représentés sur le graphe de droite de la figure 5.6; ils sont issus de calculs portant sur des pâtes granulaires lubrifiées comptant 224 grains. On constate d'une part, qu'à mesure que  $\delta P/P$  augmente,  $\Phi$  ne croît plus de manière monotone avec le nombre *n* de cycles, mais de manière saccadée :  $\Phi$  a tendance à augmenter, mais on observe des oscillations plus ou moins prononcées autour de cette tendance. Lorsque l'intensité du compactage dépasse une certaine valeur, comprise entre 0.4 et 0.5, la compacité  $\Phi$  se met à évoluer de manière erratique en fonction de *n*. Nous expliquerons l'origine de ce comportement dans la section 5.3.3.

Effet de  $h_{\min}/a$ : Enfin, nous n'avons étudié jusqu'à présent que des pâtes granulaires pour lesquelles la valeur du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  est physiquement raisonnable  $(10^{-2})$ . La figure 5.7 montre l'influence de ce paramètre sur le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée de 896 grains, avec Vi = 0.1 et  $\delta P/P = 0.1$ . On constate que le compactage est plus efficace lorsque  $h_{\min}/a$  passe de  $10^{-2}$  à  $10^{-4}$ . Cette évolution était prévisible : il est logique qu'une pâte puisse être d'autant mieux compactée que les connexions mécaniques entre grains sont bien lubrifiées. On s'attend donc à ce que l'efficacité du compactage aille croissante lorsque le paramètre de rugosité décroît. La figure 5.7 met néanmoins en évidence un phénomène qui peut sembler curieux de prime abord. Avec Vi = 0.1 et  $\delta P/P = 0.1$ , pour une valeur du paramètre de rugosité égale à  $10^{-6}$ , la compacité augmente rapidement au cours des premiers cycles de



Figure 5.6 : À gauche : effet de  $\delta P/P$  sur la compacité moyenne  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles et incertitudes statistiques associées. Les points bleus correspondent à  $\delta P/P = 0.1$  et les points rouges à  $\delta P/P = 0.2$ , avec N = 896, Vi = 0.1 et  $h_{\min}/a = 0.01$ . À droite : compacité  $\Phi$  d'un état initial donné en fonction du nombre n de cycles pour différentes valeurs de  $\delta P/P$ , calculée en compactant une configuration initiale avec N = 224, Vi = 0.1 et  $h_{\min}/a = 0.01$ .



Figure 5.7 : Effet du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  sur la compacité moyenne  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles et incertitudes statistiques associées. Les points noirs correspondent à  $h_{\min}/a = 10^{-2}$ , les points bleus à  $h_{\min}/a = 10^{-4}$  et les points rouges à  $h_{\min}/a = 10^{-6}$ , avec N = 896, Vi = 0.1 et  $\delta P/P = 0.1$ . À droite : Évolution de la première composante diagonale du tenseur des contraintes de contact, notée  $\sigma_{11}^{\rm cont}$ , avec le nombre n de cycles, pour un état initial donné. Les couleurs employées correspondent à celles utilisées pour le graphe de gauche (les courbes bleue et noire sont quasiment confondues).

compactage et finit par se stabiliser au bout de quelques passes. L'augmentation de l'intensité du compactage  $\delta P/P$  permet cependant de densifier un peu plus le matériau, mais les valeurs des compacités obtenues restent éloignées de  $\Phi_{\rm RCP}$ . Par exemple, pour une configuration initiale avec N = 896 et Vi = 0.1, la compacité atteinte après 100 cycles vaut 0.8175 avec  $\delta P/P = 0.1$ , et 0.8247 avec  $\delta P/P = 0.5$ . D'autre part, la compacité stationnaire est moins rapidement atteinte lorsque l'intensité du compactage est plus importante. Enfin, le système ne se comporte pas de manière erratique pour de petites valeurs de  $h_{\rm min}/a$  (10<sup>-6</sup> par exemple), même pour des valeurs assez importantes de  $\delta P/P$  (comme 0.5); ceci peut être dû à la gamme nécessairement limitée de valeurs des paramètres adimensionnels contrôlant le problème que nous avons explorée.

Le graphe de droite de la figure 5.7 explique pourquoi la compacité atteint une valeur stationnaire au bout de quelques cycles seulement lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-6}$ . Ce graphe montre en effet comment évolue la première composante diagonale du tenseur des contraintes de contact, notée  $\sigma_{11}^{\text{cont}}$ , en fonction de *n*. On observe que lorsque  $h_{\min}/a = 10^{-2}$  ou  $10^{-4}$ ,  $\sigma_{11}^{\text{cont}}/P = \Sigma_{11}/P$  en très bonne approximation,  $\Sigma_{11}$  étant défini par l'équation 5.3. La pression imposée est donc intégralement portée par le réseau des contacts. En revanche, quand  $h_{\min}/a = 10^{-6}$ ,  $\sigma_{11}^{\text{cont}}/P$ n'augmente que beaucoup plus lentement et ne se met à osciller autour de 1 qu'après une vingtaine de cycles. En outre, l'amplitude de cette oscillation est nettement inférieure à  $\delta P/P$ (l'intensité du compactage est égale à 0.1 pour le cas représenté). Cela signifie que ce sont essentiellement les quasi-contacts qui encaissent les variations temporelles du chargement imposé  $\Sigma$ , la microstructure de la pâte restant quant à elle quasiment invariante. Cette observation est à mettre en regard avec les résultats ayant fait l'objet de la figure 2.8 qui montre que lorsqu'on applique brutalement un chargement statique, les contacts mettent d'autant plus de temps à se former et la structure granulaire de la pâte à se réorganiser que  $h_{\min}/a$  est petit.

Il est probable qu'à  $\delta P/P$  fixé, les courbes indiquant comment évolue  $\sigma_{11}^{\rm cont}/P$  pour différentes valeurs du paramètre de rugosité, supérieures à une certaine valeur seuil, se superposeraient si le nombre visqueux Vi était suffisamment petit; la microstructure aurait alors le temps de se réorganiser et de supporter la totalité du chargement appliqué par l'intermédiaire de son réseau des contacts. Le compacité atteinte au bout d'un nombre de cycles donné serait alors une fonction décroissante du paramètre de rugosité. Au vu des résultats de la section 2.3, on peut également inférer que dans la limite où  $h_{\min}/a \to 0$ , c'est-à-dire lorsque les disques sont parfaitement lisses,  $\Phi \to \Phi_{\rm RCP}$  au bout d'un nombre de cycles suffisamment grand, le nombre de cycles en question étant d'autant plus petit que Vi est petit. Dans la limite Vi  $\to 0$ , c'està-dire lorsque le chargement appliqué est extrêmement lent, la compacité peut atteindre  $\Phi_{\rm RCP}$ en moins d'un cycle.

Ces spéculations soulèvent d'ailleurs une question intéressante : lorsque la rugosité des billes est finie, quelle valeur maximale la compacité d'une pâte granulaire peut-elle atteindre pour une intensité de compactage  $\delta P/P$  pas trop élevée ? Faute de pouvoir calculer le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée pour un nombre de cycles tel que la compacité finit par se stabiliser — ou au moins par légèrement osciller autour d'une valeur stationnaire —, nous se sommes pas en mesure de répondre à cette question par un calcul direct de compactage d'une pâte. En revanche, il paraît légitime de postuler que cette valeur limite, que nous choisissons de noter  $\Phi_{pâte}^{\to +\infty}$ , a priori dépendante du paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$ , et qui correspond à la densité que peut atteindre une pâte granulaire lubrifiée sollicitée pendant un nombre arbitrairement grand de cycles, est supérieure à la compacité limite  $\Phi_{sec}^{\to +\infty}$  d'un assemblage granulaire sec après un très grand nombre de cycles de compactage et inférieure à  $\Phi_{RCP}$ . En effet, le liquide newtonien lubrifie les connexions mécaniques entre grains — le cas sec doit donc constituer une borne inférieure, ce que les expériences présentées dans [183] confirment d'ailleurs — et la densité RCP fournit une borne supérieure de la compacité que peut atteindre un matériau



Figure 5.8 : Compacité  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles pour un assemblage granulaire sec 2D comptant N = 224 grains, avec  $I = 10^{-2}$ ,  $\kappa = 10^4$  et  $\zeta = 0.98$ . La valeur estimée de la compacité RCP et l'incertitude statistique associée est aussi représentée.

constitué de grains complètement désordonnés (aucun ordre n'apparaît dans notre cas puisque les grains constitutifs du matériau sont de tailles différentes).

#### 5.3.3 Comparaison avec le cas sec

Des simulations complémentaires de compactage d'assemblages granulaires secs ont donc été effectuées pour tenter d'encadrer la compacité limite  $\Phi_{p\hat{a}te}^{\to +\infty}$  d'une pâte granulaire lubrifiée. Les caractéristiques géométriques et mécaniques des grains constitutifs de ces assemblages sont les mêmes que celles des grains appartenant aux pâtes considérées jusqu'ici ( $\kappa = 10^4$  et  $\mu = 0.3$ en particulier). Ces assemblages secs ont été soumis à des essais de compactage alternés (équations 5.3 et 5.4). Les paramètres sans dimension contrôlant le comportement de ces systèmes sont donc différents de ceux contrôlant le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée : en particulier, c'est le nombre inertiel  $I \equiv \omega \sqrt{m/P}$ , m étant la masse d'un grain de diamètre a, qui permet de juger de la rapidité des variations temporelles du chargement imposé — donc de l'écart à la limite quasi-statique — dans le cas sec, et non le nombre visqueux Vi. Ceci rend toute comparaison entre pâtes granulaires lubrifiées et assemblages granulaires secs un peu délicate, sauf lorsque I et Vi tendent vers zéro. Le comportement des assemblages granulaires secs soumis à des cycles de compactage est calculé par dynamique moléculaire. Cette méthode est suffisamment efficace pour nous permettre de simuler en l'espace de trois mois une cinquantaine de milliers de cycles de compactage d'un assemblage granulaire comportant 224 grains, pour  $I = 10^{-2}$ , comme en témoigne la figure 5.8. Cette figure, qui représente l'évolution de la compacité  $\Phi$  de l'assemblage en fonction du nombre n de cycles montre que  $\Phi$  est une fonction croissante de n, qu'elle passe par des phases de stabilisation et des phases d'accroissement plus rapide, et que la compacité mesurée finit par atteindre, au bout d'un nombre conséquent de cycles — une dizaine de milliers — la compacité RCP, aux incertitudes statistiques près. Nous avons évalué cette dernière en calculant la densité moyenne d'assemblages granulaires secs non



Figure 5.9 : Effet de  $\delta P/P$  sur la compacité  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles pour un assemblage granulaire sec 2D comptant N = 224 disques, avec  $I = 10^{-2}$ ,  $\kappa = 10^4$  et  $\zeta = 0.98$ .

frottants équilibrés de manière isotrope, en interpolant les résultats obtenus pour différentes tailles par une relation du type 3.38 (on trouve ainsi  $\Phi_{\rm RCP} = 0.8415 \pm 0.0035$ ). Un coup d'œil jeté aux configurations obtenues au bout de plusieurs dizaines de milliers de cycles ne révèle aucune mise en ordre ni aucune ségrégation du matériau. Le compactage observé est accompagné d'une baisse concomitante de la mobilisation M du frottement intergranulaire et d'une hausse du nombre de coordination  $z^*$  du squelette de l'assemblage. Ainsi, M vaut 0.134 dans l'état initial; en calculant la moyenne et l'écart-type de M après le 10000<sup>e</sup> cycle, on trouve  $M = 0.097 \pm 0.006$ . Quant à  $z^*$ , il vaut 3.35 dans la configuration initiale; en calculant la moyenne et l'écart-type de  $z^* = 3.78 \pm 0.05$ . Obtenir une densité aussi élevée au bout d'un grand nombre de cycles peut sembler étonnant au vu de la valeur de la coordinence du squelette granulaire (sensiblement inférieure à 4), mais ce serait oublier que compacité et coordinence ne sont pas nécessairement liées [13].

La compacité limite  $\Phi_{\text{sec}}^{\to +\infty}$  obtenue pour un assemblage granulaire sec frottant est donc égale à  $\Phi_{\text{RCP}}$ . D'autre part, compte tenu de le l'encadrement de  $\Phi_{\text{pâte}}^{\to +\infty}$  dont nous avons discuté à la fin de la section 5.3.2, à savoir  $\Phi_{\text{sec}}^{\to +\infty} \leq \Phi_{\text{pâte}}^{\to +\infty} \leq \Phi_{\text{RCP}}$ , il vient :

$$\Phi_{\text{pâte}}^{\to +\infty} \simeq \Phi_{\text{RCP}} \tag{5.8}$$

En d'autres termes, la compacité d'une pâte granulaire lubrifiée soumise à des cycles de compactage, dont l'intensité est suffisamment faible pour conduire à une densification monotone du matériau, tend vers  $\Phi_{\rm RCP}$  lorsque  $n \to +\infty$ .

Ces calculs de compactage de matériaux granulaires secs nous ont également permis de comprendre l'effet parfois contre-intuitif de l'intensité du compactage. En particulier, nous avons observé dans la section 5.3.2 que la compacité d'une pâte granulaire lubrifiée peut se mettre à évoluer de manière erratique lorsque  $\delta P/P$  dépasse une certaine valeur seuil. Ce type de comportement se retrouve également dans le cas des matériaux granulaires secs (*cf.* figure 5.9) et peut être facilement expliqué. Le matériau, soumis à un essai alterné de compactage, subit un déviateur de contrainte, noté q, qui vaut :

$$q \equiv \Sigma_{11} - \Sigma_{22} = 2\delta P \sin(\omega t) \tag{5.9}$$

q oscille donc entre  $-2\delta P$  et  $2\delta P$ . Si  $\delta P/P$  est suffisamment grand, les valeurs extrémales du déviateur seront supérieures au déviateur  $q_c$  du matériau lorsqu'il est soumis à un cisaillement simple et se déforme de manière stationnaire dans la limite quasi-statique (état critique). Le matériau va dont se mettre en d'écouler de façon stationnaire, et la densité moyenne de l'écoulement sera d'autant plus faible que l'écart entre  $\delta P$  et  $q_c/2$  sera grand. En toute rigueur, à proximité de la limite quasi-statique, cette transition de comportement attendue n'a pas nécessairement lieu exactement lorsque  $2\delta P = q_c$  puisque les essais de compactage alterné diffèrent des essais de cisaillement simple. Néanmoins,  $q_c/(2P)$  constitue certainement une bonne approximation de l'intensité de compactage au-delà de laquelle on peut observer des oscillations de la compacité en fonction du nombre de cycles.

Nous avons procédé à des essais biaxiaux et à des essais statiques de rupture d'échantillons granulaires secs en imposant des contraintes cohérentes avec celles qui sont appliquées lors d'essais alternés (équations 5.3 et 5.4) pour tester nos hypothèses de manière quantitative. Les essais biaxiaux ont été réalisés en contrôlant la contrainte latérale  $\Sigma_{11}$  imposée et en appliquant un taux de déformation axiale  $\dot{\varepsilon}_a$  selon la direction verticale. Ces simulations ont été effectuées avec  $I = 10^{-4}$ ,  $\kappa = 10^4$  et  $\zeta = 0.98$ . Nous avons évalué  $q_c$  à l'aide de calculs menés sur cinq configurations initiales distinctes; en écoulement stationnaire, on trouve :

$$\frac{\langle q_{\rm c} \rangle}{P} = 0.677 \pm 0.015$$
 (5.10)

Quant aux calculs de rupture statique, ils ont été conduits dans l'esprit de ceux effectués dans la section 3.3.1. Partant d'un état initial isotrope équilibré sous une pression P, nous avons augmenté à chaque pas la composante  $\Sigma_{11}$  et diminué de la même quantité la composante  $\Sigma_{22}$  du tenseur des contraintes imposées :

$$\Sigma_{11} \leftarrow \Sigma_{11} + \delta \Sigma \tag{5.11}$$

$$\Sigma_{22} \leftarrow \Sigma_{22} - \delta \Sigma \tag{5.12}$$

Le pas de contrainte a été choisi de sorte à ce que  $\delta\Sigma/P = 5 \times 10^{-3}$ . À chaque variation du chargement statique imposé, nous avons cherché à équilibrer le matériau. Lorsqu'un équilibre était atteint, le chargement était incrémenté. Nous avons également considéré que lorsque la déformation de cisaillement de l'échantillon, définie comme  $\varepsilon_{\text{dev}} \equiv \varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}$ ,  $\varepsilon_{ii} \equiv (L_i^0 - L_i)/L_i^0$  étant la déformation longitudinale de la boîte de simulation selon la direction *i* par rapport au dernier état d'équilibre obtenu, était supérieure à 0.25, alors le système ne pouvait plus être équilibré et que la limite de rupture avait été dépassée. Nos calculs montrent que le matériau rompt lorsque :

$$\frac{\Sigma_{11} - P}{P} = 0.313 \pm 0.005 \quad \text{lorsque } N = 896 \tag{5.13}$$

$$\frac{\Sigma_{11} - P}{P} = 0.365 \pm 0.018 \quad \text{lorsque } N = 224 \tag{5.14}$$

Comme dans la section 3.3.2, nous pouvons observer l'existence d'effets de taille finie. Toujours est-il que, d'après ces calculs, l'intensité de compactage seuil au-delà de laquelle un matériau granulaire sec comptant 224 grains (comme sur la figure 5.9) va voir sa compacité commencer à évoluer de manière erratique en fonction du nombre de cycles appliqués est égale à  $\delta P/P = 0.365$ . Cet ordre de grandeur paraît effectivement être le bon puisque l'on constate sur la figure 5.9 que, même si la croissance de la compacité n'est pas complètement monotone lorsque  $\delta P/P = 0.3$ , on observe tout de même une tendance croissante claire alors que ce n'est plus du tout le cas lorsque  $\delta P/P = 0.4$ . Enfin, on constate que  $\langle q_c \rangle/(2P)$  est effectivement une approximation convenable de l'intensité de compactage seuil à proximité de la limite quasi-statique.

Cette connexion entre intensité de compactage seuil et propriétés de rupture du matériau n'est évidemment valable que lorsque le comportement d'un assemblage en train d'être compacté n'est pas trop éloigné du régime quasi-statique. On observe d'ailleurs, en considérant un système granulaire sec composé de 224 grains que l'on compacte avec une intensité  $\delta P/P = 0.3$ , que si la compacité évolue de manière erratique lorsque  $I = 10^{-2}$ , c'est de moins en moins le cas à mesure que I augmente ; quand I = 1, on peut même observer que  $\Phi$  croît de manière monotone avec n.

Ces résultats concernant les assemblages granulaires secs éclairent le rôle joué par le paramètre  $\delta P/P$  sur la comportement de pâtes granulaires lubrifiées soumise à des essais alternés de compactage. Nous avons en effet observé dans la section 5.3.2 que la compacité ne croît plus de manière monotone pour des valeurs suffisamment élevées de  $\delta P/P$ ; la figure 5.6 montre en particulier que les courbes  $\Phi(n)$  sont « de moins en moins monotones » à mesure que  $\delta P/P$ augmente. Pour des valeurs encore plus élevées de  $\delta P/P$  que celles montrées sur cette figure, on observe même des variations aussi erratiques que celle de la figure 5.9 correspondant à  $\delta P/P = 0.4$ . En revanche, ces instabilités apparaissent dans le cas des pâtes granulaires lubrifiées pour des valeurs plus élevées de  $\delta P/P$  que celles relevées pour les assemblages granulaires secs. Pourtant, le calcul du tenseur des contraintes de contact au sein de la pâte pour les expériences de la figure 5.6 montre que le chargement extérieur imposé est entièrement supporté par le réseau des contacts. Nous pensons que la différence d'intensité de compactage seuil entre les deux types de système est due au fait que les expériences portant sur les pâtes granulaires lubrifiées ont été effectuées avec un nombre visqueux Vi = 0.1; le comportement de la pâte diffère donc certainement sensiblement de celui qu'on obtiendrait avec un chargement dont les variations temporelles seraient plus lentes. Or, nous avons vu dans le cas des matériaux granulaires secs que plus l'écart à la limite quasi-statique est important, plus l'intensité de compactage seuil au-delà de laquelle  $\Phi$  commence à évoluer de manière non monotone avec n est importante.

#### 5.3.4 Déformation de cisaillement

Nous nous sommes jusqu'ici essentiellement intéressés à l'évolution de la compacité en fonction du nombre n de cycles ou, dit autrement, à l'évolution de la déformation volumique en fonction de n. Nous allons maintenant nous préoccuper de la façon dont varie la déformation de cisaillement, notée  $\varepsilon_{dev} \equiv \varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}$ , avec  $\varepsilon_{ii} = (L_i^0 - L_i)/L_i^0$ , en fonction de n. Le graphe de gauche de la figure 5.10 montre l'évolution de  $\varepsilon_{dev}$  en fonction de n pour différentes configurations initiales de 896 grains, toutes compactées de manière alternée avec Vi = 0.1,  $\delta P/P = 0.1$  et  $h_{\min}/a = 0.01$ . On distingue des petites oscillations des courbes qui constituent une trace des cycles appliqués. On peut constater que l'évolution de  $\varepsilon_{dev}$  varie beaucoup d'un échantillon à l'autre. Les valeurs de déformation de cisaillement mesurées peuvent différer d'un ordre de grandeur.  $\varepsilon_{dev}$  est probablement très sensible à la taille finie des échantillons considérés. Ces valeurs de déformation de cisaillement restent très modestes par rapport à celles que l'on observe dans le cas de matériaux réels.

Le signe de la déformation de cisaillement semble être quelconque, même si la déformation finale de quatre configurations sur cinq est positive. Ce dernier résultat s'explique certainement par le



Figure 5.10 : À gauche : déformation de cisaillement  $\varepsilon_{dev} \equiv \varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}$  en fonction du nombre n de cycles lors du compactage alterné de cinq configurations initiales différentes de pâtes granulaires lubrifiées comptant N = 896 grains avec Vi = 0.1,  $\delta P/P = 0.1$  et  $h_{\min}/a = 0.01$ . À droite : tracé de la compacité  $\Phi$  en fonction de la déformation de cisaillement  $\varepsilon_{dev}$  pour l'une des configurations initiales.

fait qu'en moyenne, les composantes  $\Sigma_{11}$  et  $\Sigma_{22}$  du tenseur des contraintes imposé sont toutes deux égales à P: ainsi,  $\varepsilon_{dev}$  peut *a priori* être positif ou négatif. Néanmoins, la déformation de cisaillement augmente très rapidement, et ce dès le premier cycle; or, durant le premier demi-cycle,  $\Sigma_{11} > \Sigma_{12}$ , ce qui tend à rendre positive la différence  $\varepsilon_{11} - \varepsilon_{22}$ . Cette accumulation initiale de déformation de cisaillement positive est ensuite difficile à contrecarrer.

Nous avons également représenté sur le graphe de gauche de la figure 5.10 la relation entre compacité et déformation de cisaillement pour l'une des expériences numériques représentées sur le graphe de gauche. Ce graphe montre que  $\varepsilon_{dev}$  varie dans une sorte de tube, du fait des oscillations de la contrainte imposée, dont la section se rétrécit à mesure que la compacité augmente.

On peut également se poser la question de la nature des déformations lorsqu'une pâte granulaire est compactée. Dans le cas des matériaux granulaires secs sollicités de manière quasi-statique, on peut distinguer deux types de déformations, que nous appellerons déformations de type I et déformations de type II pour reprendre le vocable employé dans [200, 201]. Les déformations de type I sont les déformations du réseau des contacts tandis que les réarrangements du réseau des contacts sont responsables des déformations de type II. La réponse purement élastique d'un matériau granulaire est de type I; toutefois, dans la plupart des cas, la déformation observée est de type II : la structure du matériau se casse et se répare suite aux sollicitations dont il fait l'objet. L'analyse des listes de contacts correspondant à des configurations successives au cours du compactage d'un état initial donné montre que la densification est un mécanisme de déformation de type II : le réseau des contacts change de manière notable au cours du compactage. Néanmoins, ce n'est pas pour cela que la disposition relative des centres des grains au sein du matériau subit de profonds bouleversements. Pour s'en rendre compte, il suffit de regarder la figure 5.11 qui montre la partie non homogène <sup>7</sup> du mouvement typique du centre

<sup>7.</sup> Ce déplacement non homogène est calculé en supposant que les longueurs  $L_1$  et  $L_2$  de la boîte de simulation



Figure 5.11 : Partie non-affine du déplacement du centre d'une particule donnée en cours de compactage au sein d'une suspension de N=896 grains, avec Vi  $=0.1,\,\delta P/P=0.1$  et  $h_{\rm min}/a=0.01$ . La longueur a/100 représente le centième du diamètre maximal d'un grain. Le carré rouge représente la position initiale et le disque rouge la position finale du grain suivi.



Figure 5.12 : Évolution de la mobilisation du frottement intergranulaire moyenne M en fonction du nombre n de cycles et incertitudes statistiques associées pour une pâte granulaire lubrifiée comptant N = 896 grains avec Vi = 0.1,  $\delta P/P = 0.1$  et  $h_{\min}/a = 0.01$ .

d'un grain au cours d'une expérience numérique réalisée sur un état initial comptant 896 grains, de paramètre de rugosité  $h_{\min}/a = 0.01$ , compacté avec Vi = 0.1 et  $\delta P/P = 0.1$ . On constate que les extensions horizontale et verticale du déplacement non homogène du centre du grain sont de l'ordre de quelques centièmes de la valeur du diamètre *a* des plus gros disques de la pâte. Un grains se déplace donc très peu lorsqu'on ne tient pas compte de la déformation totale de la boîte de simulation qui intervient lors du compactage. Mais ces petits déplacements non homogènes suffisent cependant à altérer de manière notable le réseau des contacts. D'autre part, on peut également observer que le déplacement non homogène du centre du grain, tout comme le déplacement total, est beaucoup plus important au cours des premiers cycles que par la suite.

#### 5.3.5 Aspects microscopiques

Les résultats tangibles induits par le compactage, comme la densification du matériau ou encore la déformation de cisaillement observée, constituent la manifestation macroscopique de phénomènes se déroulant à l'échelle des grains. Cette section est néanmoins très loin de pouvoir prétendre proposer une théorie du compactage reposant sur des bases microscopiques puisque nous allons nous contenter de discuter rapidement de l'évolution de diverses grandeurs d'essence microscopique.

De manière générale, on constate que le nombre de coordination du squelette granulaire a tendance à augmenter au cours du compactage. Quant à la texture, elle reste très proche de celle d'un matériau dont la structure est isotrope. La quantité la plus intéressante à notre sens est la mobilisation M du frottement intergranulaire. En regardant la figure 5.12, on s'aperçoit qu'elle tend à décroître avec le nombre de cycles, même si cette tendance est partiellement masquée par les fluctuations assez importantes qu'enregistre la valeur de la mobilisation au

sont égales à 1 à tout instant t du calcul. Les coordonnées non homogènes d'un grain donné se calculent donc de la manière suivante :  $x^{nh}(t) = x(t)/L_1(t)$  et  $y^{nh}(t) = y(t)/L_2(t)$ .



Figure 5.13 : Principe d'un essai biaxial. À gauche : chargement appliqué à la pâte granulaire. À droite : représentation du chargement appliqué dans le plan  $(\Sigma_{11} - P) - (\Sigma_{22} - P)/\delta P$ .

cours d'un cycle. La densification du matériau s'accompagne néanmoins indéniablement d'une diminution de M. C'est un résultat intéressant, que l'on observe également dans le cas sec, sur lequel nous reviendrons à la fin de la section 5.4.

### 5.4 Essais biaxiaux de compactage d'une pâte granulaire lubrifiée

Cette section est consacrée à l'influence de la méthode de compactage sur le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée. Après avoir étudié le compactage d'une telle pâte lorsque l'on procède à des essais alternés, nous allons maintenant discuter de ce qui se passe lorsqu'on applique un chargement biaxial sinusoïdal sur ce type de matériau. Le chargement imposé, purement diagonal est le suivant :

$$\Sigma_{11} = P \tag{5.15}$$

$$\Sigma_{22} = P + \delta P \left( 1 - \cos(\omega t) \right) \tag{5.16}$$

Ce chargement est représenté sur la figure 5.13.

La pression subie par le système n'est pas constante dans ce cas. En particulier, la quantité P ne désigne pas la pression imposée. En revanche, tout comme pour les essais alternés, le déviateur des contraintes est au plus égal à  $2\delta P$ . De même, les directions principales de  $\underline{\Sigma}$  sont les directions horizontale et verticale, mais contrairement au cas des essais biaxiaux, la direction horizontale reste systématiquement la direction mineure et la direction verticale la direction majeure. La contrainte principale mineure est donc égale à  $\Sigma_{11}$  et la majeure à  $\Sigma_{22}$  et il n'y a pas de permutation ni même de rotation des directions principales de  $\underline{\Sigma}$  au cours du compactage.

Concernant les paramètres adimensionnels régissant le compactage, le nombre visqueux est toujours défini par Vi =  $\eta \omega / P$  et l'intensité du compactage est prise égale à  $\delta P / P$ , de sorte qu'un même matériau, soumis à des essais alternés et à des essais biaxiaux, subit le même



Figure 5.14 : Compacité moyenne  $\Phi$  en fonction du nombre n de cycles et incertitudes statistiques associées pour une pâte granulaire comptant N = 896 grains avec Vi = 0.1,  $\delta P/P = 0.1$  et  $h_{\min}/a = 0.01$ . Les points bleus correspondent aux essais biaxiaux et les points rouges aux essais alternés.

déviateur de contrainte maximal pourvu que l'intensité de compactage soit la même pour les deux types d'essais.

La figure 5.14 permet de comparer l'évolution de la compacité moyenne  $\Phi$  en fonction du nombre *n* de cycles pour des essais alternés et pour des essais biaxiaux. Le matériau considéré est une pâte comptant 896 grains, de paramètre de rugosité  $h_{\min}/a = 0.01$ , compactée avec Vi = 0.1 et  $\delta P/P = 0.1$  dans les deux cas. On voit clairement que la densité obtenue à l'aide des essais alternés de compactage (dessinée en rouge) est supérieure à celle que l'on trouve lorsque l'on effectue des essais biaxiaux de compactage. Ce résultat montre que la permutation des contraintes principales améliore sensiblement l'efficacité du compactage.

Nous nous sommes également penchés sur l'évolution de la déformation de cisaillement  $\varepsilon_{\text{dev}}$  en fonction de n d'une pâte granulaire lubrifiée soumise à des essais biaxiaux. Comme en témoigne la figure 5.15, on constate, comme dans le cas des essais alternés, de grands écarts de la déformation de cisaillement selon la configuration initiale employée. En revanche, et contrairement aux observations rapportées dans la section 5.3.4,  $\varepsilon_{\text{dev}}$  est ici toujours négatif au bout de cent cycles. Ceci est vraisemblablement dû à la nature du chargement employé; la composante  $\Sigma_{22}$  du tenseur de contraintes imposées est systématiquement supérieure ou égale à P, tandis que  $\Sigma_{11}$  reste constamment égale à cette valeur. Au cours du chargement, la pâte va donc plus se déformer suivant la direction 2 que suivant la direction 1, ce qui explique que  $\varepsilon_{\text{dev}}(n) < 0$ , au moins au bout de quelques cycles.

Compte tenu de ce que les essais alternés sont plus efficaces que les essais biaxiaux pour compacter une pâte granulaire lubrifiée, nous avons essayer de savoir si ces meilleures performances des essais alternés sont corrélées à la mobilisation du frottement intergranulaire au sein de la pâte. Il s'avère que c'est effectivement le cas, comme le montre la figure 5.16 qui propose une comparaison de l'évolution de la mobilisation moyenne M du frottement intergranulaire en



Figure 5.15 : Déformation de cisaillement  $\varepsilon_{\rm dev}$  en fonction du nombre n de cycles lors du compactage biaxial de cinq configurations initiales différentes de pâtes granulaires lubrifiées comptant N = 896 grains avec Vi = 0.1,  $\delta P/P = 0.1$  et  $h_{\rm min}/a = 0.01$ .



Figure 5.16 : Comparaison de l'évolution de la mobilisation moyenne M du frottement intergranulaire en fonction du nombre n de cycles entre des essais alternés (en rouge) et des essais biaxiaux (en bleu). Les pâtes considérées comptent N = 896 grains, le paramètre de rugosité vaut  $h_{\rm min}/a = 10^{-2}$  et le compactage est effectué avec Vi = 0.1 et  $\delta P/P = 0.1$ .

fonction du nombre n de cycles, à la fois pour des essais alternés et pour des essais biaxiaux. Met les incertitudes statistiques l'entachant sont calculés en compactant de la même manière cinq échantillons initiaux différents. On voit bien que le frottement intergranulaire est moins mobilisé dans le cas des essais alternés que lorsque l'on procède à des essais biaxiaux. Ce résultat peut être résumé par l'aphorisme suivant : *compacter, c'est vaincre le frottement intergranulaire*. Les stratégies de compactage sont en effet d'autant meilleures qu'elles parviennent à éviter la mobilisation du frottement intergranulaire. Cette assertion est parfaitement cohérente avec les résultats du chapitre 3. On constate en effet que le processus de compactage est trivial pour les assemblages granulaires secs non frottants : quel que soit le chargement statique imposé au matériau supposé constitué d'un très grand nombre de grains, pourvu que sa limite de rupture ne soit pas dépassée, la compacité mesurée à l'équilibre est égale à  $\Phi_{\rm RCP}$ . Or, pour ces matériaux, la mobilisation du frottement intergranulaire est nulle par définition. Cet aphorisme est également en accord avec les résultats de l'article [13] : des matériaux granulaires secs équilibrés sous une pression isotrope sont préparés de quatre façons différentes et les empilements les plus denses sont ceux pour desquels le frottement intergranulaire est le moins mobilisé.

### 5.5 Conclusion

Ce chapitre, consacré au compactage des pâtes granulaires lubrifiées, nous a permis d'étudier l'effet des paramètres de contrôle adimensionnels sur le compactage du matériau et de mettre clairement en évidence le lien existant entre compactage et mobilisation du frottement intergranulaire.

Nous avons commencé par étudier l'effet des paramètres de contrôle adimensionnels sur le compactage. En procédant à des essais alternés de compactage contrôlés en contrainte, nous avons pu observer que le compactage est d'autant plus efficace que le nombre visqueux Vi est petit. D'autre part, plus l'intensité du compactage  $\delta P/P$  est importante, meilleure est la densification observée. Néanmoins, lorsque Vi est faible et que  $\delta P/P$  dépasse une certaine valeur (supérieure typiquement au déviateur de contrainte  $q_c/2$  mesuré dans l'état critique), la compacité se met à évoluer de manière erratique en fonction du nombre n de cycles. Cela est dû au fait que lorsque les variations temporelles du chargement appliqué sont suffisamment lentes et que  $\delta P/P$  est assez grand, le matériau va se mettre à s'écouler et que la densité de l'écoulement est fonction de la valeur moyennée sur une durée suffisamment longue du déviateur de contrainte subi par la pâte. Le compactage se trouve également amélioré lorsque le paramètre de rugosité  $h_{\min}/a$  diminue. Néanmoins, pour de petites valeurs de  $h_{\min}/a$  (10<sup>-6</sup> par exemple) et des valeurs modérées de Vi (comme Vi = 0.1), on observe que la compacité se stabilise après un petit nombre de cycles. Ceci est dû au fait que la plupart des variations de chargement imposé au matériau sont alors supportées par les quasi-contacts sans que la microstructure de la pâte en soit notablement affectée.

Pour des raisons de temps de calcul, les simulations numériques du compactage de pâtes granulaires lubrifiées que nous avons présentées sont limitées à une centaine de cycles. Or, on constate que ce nombre de cycles est loin d'être suffisant pour atteindre la compacité limite d'une pâte soumise à des cycles de chargement. Néanmoins, des résultats issus de simulations par dynamique moléculaire d'assemblages granulaires secs conduisent à penser que cette compacité limite est proche voire égale à la compacité  $\Phi_{\rm RCP}$ . Néanmoins, les configurations obtenues au bout d'un grand nombre de cycles ne sont pas des états RCP comme en témoigne l'analyse de la mobilisation du frottement intergranulaire et la coordinence du squelette granulaire de ces configurations. Enfin, nous avons testé l'effet du chargement imposé sur le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée. Expérimentalement, on sait en effet qu'un procédé de compactage est plus efficace lorsqu'il y a rotation des directions principales du tenseur des contraintes que lorsque ces directions restent fixes. Nous avons donc comparé ce qui se produit lorsqu'on soumet des échantillons de pâte à des essais alternés et à des essais biaxiaux de compactage. Dans le cas des essais alternés, les directions principales majeure et mineure du chargement permutent périodiquement alors qu'elles restent fixes lorsqu'on procède à des essais biaxiaux. Toutes choses étant égales par ailleurs, on observe que la densification de la pâte est plus prononcée dans le cas des essais alternés. D'autre part, dans les deux cas, l'augmentation de la densité s'accompagne d'une diminution de la mobilisation du frottement intergranulaire, mais cette décroissance est plus marquée lorsqu'on effectue des essais alternés. Les meilleures stratégies de compactage sont donc celles pour lesquelles le frottement intergranulaire est le moins mobilisé.

## Conclusion

Ce travail visait à mieux comprendre le comportement et le compactage de pâtes granulaires, c'est-à-dire de suspensions dont la concentration volumique en inclusions solides est très élevée. Nous nous sommes plus particulièrement intéressés aux pâtes granulaires non browniennes et non colloïdales, constituées de grains élastiques rugueux de forme circulaire, baignant dans un liquide newtonien très visqueux, à deux dimensions. Nous avons étudié ces matériaux, qui peuvent être considérés comme un modèle simplifié d'enrobé bitumineux, en procédant à de nombreuses expériences numériques à l'aide de différentes techniques de simulation.

Dans un premier temps, nous avons introduit un modèle de pâte granulaire — les pâtes granulaires lubrifiées — dans lequel le seul effet du liquide est d'induire des interactions de lubrification entre paires de grains proches. De plus, afin de modéliser la rugosité des grains, l'expression de la force de lubrification est modifiée lorsque la distance entre les surfaces de deux grains est inférieure à une certaine valeur, paramètre du problème considéré. Cette coupure rend possible le contact entre deux grains. Comme dans le cas des assemblages granulaires secs, le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée est régi par quelques nombres purs que nous avons recensés. Compte tenu de la viscosité élevée du liquide baignant les pâtes considérées, nous avons utilisé une méthode numérique permettant de simuler le comportement de pâtes granulaires lubrifiées qui néglige l'inertie des grains. Cette méthode, qui repose sur la résolution d'un système linéaire à chaque pas de temps, est présentée en détail, puis utilisée pour étudier l'état d'équilibre mécanique d'une pâte granulaire lubrifiée lorsqu'elle est soumise à un chargement isotrope statique. Nous avons ainsi pu montrer que dans la limite où la rugosité des grains est nulle, l'état d'équilibre isotrope d'une pâte granulaire lubrifiée est identique à celui d'un assemblage granulaire sec constitué de grains non frottants.

Ce constat nous a conduit à étudier de manière détaillée le comportement d'assemblages secs faits de grains non frottants, à trois dimensions, dans la triple limite où les grains sont très rigides, les sollicitations imposées au matériau très lentes et le nombre de grains très élevé. Cette triple limite est baptisée limite géométrique macroscopique : géométrique, parce qu'en régime quasi-statique, le comportement d'empilements de grains très rigides non frottants est dicté par la microstructure de l'assemblage et le chargement appliqué; macroscopique, parce que le nombre de grains considéré est important. Tous les calculs effectués sur les assemblages granulaires secs sont des calculs de dynamique moléculaire. En procédant à des essais de cisaillement simple et en extrapolant les résultats obtenus dans la limite géométrique macroscopique, nous avons pu montrer que les assemblages granulaires secs constitués de grains non frottants sont des matériaux présentant un frottement interne non nul, proche de 0.1, valeur qui dépend peu de la polydispersité du matériau, et qu'ils sont non dilatants. Nous avons proposé et analysé un modèle jouet qui permet de rendre compte de l'absence de dilatance. Des calculs statiques simulant différents essais mécaniques ont également été effectués afin de déterminer les propriétés de rupture des empilements de grains non frottants. Contrairement à ce qui est souvent admis, le critère de rupture de tels assemblages n'est pas de type Mohr-Coulomb, mais plutôt de type Lade-Duncan. Le critère de Lade-Duncan est un critère à un paramètre et nous avons montré que ce paramètre dépendait de la taille du système. Enfin, nous avons évalué sa valeur dans la limite macroscopique; cette valeur est en effet une quantité universelle d'origine purement géométrique des assemblages désordonnés de sphères puisqu'on constate que ceux-ci sont en très bonne approximation isostatiques tant que le matériau se trouve en decà de sa limite de rupture. Ces états d'équilibre obtenus sous un chargement non sphérique peuvent d'ailleurs être considérés comme des états RCP anisotropes. Ces états sont indiscernables des états RCP isotropes traditionnels tant qu'on ne considère que leurs caractéristiques microstructurelles et micromécaniques de nature scalaire; en revanche, les quantités tensorielles, comme le tenseur de texture par exemple, portent la trace de l'anisotropie du chargement imposé. Nous avons également étudié les modules élastiques de ces états d'équilibre anisotropes ainsi que la relation liant contrainte et déformation avant la rupture du matériau. Ce qui ressort de l'étude des assemblages secs de grains non frottants du point de vue de leurs propriétés de compactage, c'est que ces matériaux sont optimaux à cet égard puisque leur compacité est systématiquement égale à  $\Phi_{\rm RCP}$  (qui est la compacité maximale d'un assemblage désordonné de grains) lorsqu'ils sont équilibrés sous un chargement statique.

Nous avons ensuite cherché à confronter les résultats obtenus dans le cas sec à ceux issus de simulations de pâtes granulaires lubrifiées. En effectuant des simulations de cisaillement simple, nous avons pu montrer que dans la limite des taux de cisaillement nuls, le frottement interne d'une pâte granulaire lubrifiée est compris entre celui d'un assemblage granulaire sec fait de grains non frottants et celui d'un assemblage granulaire sec fait de grains frottants. Lorsque la taille des aspérités à la surface des disques est de l'ordre du centième de la taille caractéristique des grains considérés (ordre de grandeur typique pour de vraies billes), le frottement interne d'une pâte est très proche de celui d'un assemblage granulaire sec frottant dans la limite des sollicitations très lentes. On observe la même chose concernant la compacité. De plus, la pression extérieure imposée est entièrement supportée par le réseau des contacts lorsque le nombre visqueux Vi est suffisamment petit. Enfin, nous avons étudié la viscosité effective d'une pâte en cisaillement simple et avons mis en évidence sa divergence pour une fraction volumique solide qui dépend de la rugosité des particules.

Finalement, nous nous sommes intéressés au compactage de pâtes granulaires lubrifiées soumises à des cycles de chargement. Nous avons montré que, conformément à ce que l'on observe en pratique, l'application d'un chargement oscillant avant une composante déviatorique non nulle conduit à une densification plus importante du matériau que lorsque qu'on le soumet à un simple chargement isotrope statique. Cette densification s'accompagne d'une diminution de la mobilisation du frottement intergranulaire. Nous avons effectué une étude paramétrique qui a permis de mettre en évidence l'effet du nombre de grains, de la fréquence du chargement imposé, de l'intensité du compactage et de la rugosité des grains sur le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée. Nous avons ainsi montré qu'une pâte se compacte d'autant mieux que le chargement extérieur varie lentement et que l'intensité de compactage est grande, à condition toutefois de prendre garde à ne pas dépasser la limite de rupture du matériau. La comparaison avec des résultats obtenus dans le cas d'assemblages granulaires secs indique que la compacité d'une pâte granulaire lubrifiée tend vraisemblablement vers  $\Phi_{\rm RCP}$  dans la limite d'un nombre infini de cycles de compactage. Le compactage du matériau conduit à l'apparition d'une déformation de cisaillement, dont la valeur est très sensible à l'état initial du matériau. Enfin, nous avons mis en évidence le rôle de la rotation ou de la permutation des directions principales associées au tenseur des contraintes imposé au matériau. Une comparaison entre des essais alternés (pour lesquels il y a permutation périodique des directions principales majeure et mineure) et des essais biaxiaux (pour lesquels les directions principales majeure et mineure restent invariantes) de compactage montre que les essais alternés permettent de mieux compacter une pâte granulaire lubrifiée et que cette efficacité supérieure est associée à une moindre mobilisation du frottement intergranulaire en cours de compactage. Compacter, c'est donc parvenir à vaincre le frottement intergranulaire et c'est la raison pour laquelle les assemblages granulaires secs non frottants se comportent de manière optimale lorsqu'on les compacte.

\* \* \*

Ce travail ouvre bien entendu un certain nombre de perspectives, notamment en ce qui concerne l'étude des suspensions et celle des procédés impliquant des matériaux composés de grains (comme la plupart des matériaux du génie civil). Concernant les suspensions, il serait très intéressant d'étudier plus finement la rhéologie des pâtes granulaires lubrifiées et le couplage existant entre cette rhéologie et la microstructure de la pâte. Il faudrait également comparer les résultats obtenus à l'aide de notre méthode à ceux issus de techniques de simulation plus classiques, comme la dynamique stokésienne. Cela permettrait notamment d'évaluer l'effet des interactions hydrodynamiques multicorps à longue portée liées à l'existence d'écoulements rampants de filtration au sein de l'espace des pores de la pâte. Ayant cherché à calculer le comportement d'une pâte dans la limite hautement concentrée, nous n'avons pas tenu compte de ces écoulements et nous aimerions savoir au-delà de quelle fraction volumique en particules solides cette approximation est satisfaisante. Il serait également souhaitable d'étudier l'effet de la forme des particules et de la nature des interactions intergranulaires sur la mise en place et le comportement d'une pâte. Expérimentalement, on sait en effet que la forme des inclusions solides et les interactions entre grains (la cohésion capillaire par exemple) sont susceptibles de modifier très sensiblement le comportement d'une pâte granulaire. Enfin l'étude présentée demanderait naturellement à être étendue au cas tridimensionnel. Nous nous sommes en effet limités au cas bidimensionnel pour notre étude des pâtes granulaires lubrifiées, pour des raisons de temps de calcul. Néanmoins, nous ne pensons pas que le passage à la dimension trois modifie quantitativement les résultats présentés dans ce mémoire.

L'étude des procédés impliquant des pâtes granulaires constitue un second axe de recherche. Il serait intéressant d'étudier d'autres stratégies de compactage. Cette étude pourrait notamment être poursuivie en pilotant le compactage non plus en contrainte comme nous l'avons fait dans ce travail, mais plutôt en déformation, comme c'est le cas lorsque l'on procède à un essai sur un matériau à l'aide d'une presse à cisaillement giratoire par exemple. Outre le compactage, il existe bien entendu d'autres procédés intéressants, reposant la plupart du temps sur des bases essentiellement empiriques, qu'il serait intéressant de mieux comprendre compte tenu de leur impact économique, comme le malaxage du béton par exemple. Enfin, beaucoup de matériaux réels ne sont pas saturés : l'espace entre les grains n'est que partiellement rempli de liquide. Dans ce cas, outre les forces de lubrification, il convient de tenir compte des forces de cohésion capillaire entre grains, susceptibles de radicalement affecter le comportement du matériau.

# Annexe

## Annexe A

## Lubrification hydrodynamique

### A.1 Équations de lubrification

Considérons deux solides séparés par une mince couche de lubrifiant dont l'épaisseur est très petite devant la taille caractéristique des solides. Le solide 1 est supposé au repos et le solide 2 est supposé animé d'une vitesse  $\vec{V}$ . Les équations de Stokes et les conditions aux limites s'écrivent :

$$-\frac{\partial P}{\partial z} + \eta \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \Delta_2 v_z\right) = 0 \tag{A.1}$$

$$-\vec{\nabla}_2 P + \eta \left(\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial z^2} + \Delta_2 \vec{u}\right) = 0 \tag{A.2}$$

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} + \vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0 \tag{A.3}$$

$$\vec{u}(\vec{r}, -h_1(\vec{r})) = 0 \tag{A.4}$$

$$v_z(\vec{r}, -h_1(\vec{r})) = 0$$
 (A.5)

$$\vec{u}(\vec{r}, h_2(\vec{r})) = \vec{V}_2$$
 (A.6)

$$v_z(\vec{r}, h_2(\vec{r})) = V_z \tag{A.7}$$

avec des notations distinguant la coordonnée z:

$$\vec{\nabla}_2 = \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y, \quad \triangle_2 = \vec{\nabla}_2^2, \quad \vec{r} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y, \quad \vec{v} = v_z\vec{e}_z + \vec{u}, \quad \vec{V} = V_z\vec{e}_z + \vec{V}_2.$$

 $\boldsymbol{v}$ 

On s'intéresse à une situation dans laquelle  $z/|\vec{r}| = \mathcal{O}(\varepsilon)$ , avec  $\varepsilon$  un paramètre petit devant 1. Afin de mettre en évidence les effets induits par la géométrie particulière du problème, on pose  $z = \varepsilon Z$ ,  $h_1 = \varepsilon H_1$  et  $h_2 = \varepsilon H_2$ . Un raisonnement en loi d'échelle montre que la conservation du volume impose  $v_z/|\vec{u}| = \mathcal{O}(\varepsilon)$  et on pose donc  $\vec{u} = \vec{U}/\varepsilon$ . Avec ces changements de variable, les équations de Stokes se réécrivent :

$$-\varepsilon \frac{\partial P}{\partial Z} + \eta \varepsilon^2 \Delta_2 v_z + \eta \frac{\partial^2 v_z}{\partial Z^2} = 0$$
(A.8)

$$-\varepsilon^{3}\vec{\nabla}_{2}P + \eta\varepsilon^{2}\vec{\nabla}_{2}\vec{U} + \eta\frac{\partial^{2}\vec{U}}{\partial Z^{2}} = 0$$
(A.9)

$$-161 -$$

$$\vec{\nabla}_2 \vec{U} + \frac{\partial v_z}{\partial Z} = 0 \tag{A.10}$$

D'après l'équation A.9, l'échelle de P est  $P = \mathcal{P}/\varepsilon^3$  avec  $\mathcal{P} = \mathcal{O}(1)$  (en effet, si P n'était pas d'ordre  $1/\varepsilon^3$ ,  $\vec{U}$  serait linéaire en Z d'après l'équation A.9 et comme  $\vec{U}$  s'annule en  $H_1$ , on aurait  $\vec{U} = \mathcal{O}(\varepsilon)$  partout, ce qui contredirait l'hypothèse  $\vec{U} = \mathcal{O}(1)$ ). En utilisant la variable  $\mathcal{P} = \varepsilon^3 P$ , il vient :

$$-\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial z} + \left[\eta \varepsilon^4 \Delta_2 v_z + \eta \varepsilon^3 \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}\right] = 0 \tag{A.11}$$

$$-\vec{\nabla}_2 \mathcal{P} + \left[\eta \varepsilon^2 \vec{\nabla}_2 \vec{U}\right] + \eta \frac{\partial^2 \vec{U}}{\partial Z^2} = 0 \tag{A.12}$$

$$\vec{\nabla}_2 \cdot \vec{U} + \frac{\partial v_z}{\partial Z} = 0 \tag{A.13}$$

plus les conditions aux limites  $\vec{U} = 0$  et  $v_z = 0$  pour  $Z = -H_1$ , ainsi que  $\vec{U} = \varepsilon \vec{V_2}$  et  $v_z = V_z$ pour  $Z = H_2$ . Tant qu'on cherche à résoudre les équations précédentes à l'ordre au plus 1 en  $\varepsilon$ , il suffit de trouver une solution au système d'équations A.11, A.12 et A.13 sans les termes entre crochets. À ce niveau d'approximation, l'équation A.11 devient  $\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial Z} = 0$ , ce qui implique que  $\mathcal{P}$ est uniquement fonction de  $\vec{r}$ . Quant à l'équation A.12, elle montre que  $\vec{U}$  est un polynôme de degré 2 en Z, dont les coefficients sont des fonctions de  $\vec{r}$ :

$$\vec{U}(\vec{r},z) = \vec{\alpha}(\vec{r}) + \vec{\beta}(\vec{r})Z + \vec{\gamma}(\vec{r})Z^2$$
(A.14)

D'autre part, on définit le débit horizontal comme

$$\vec{Q}(\vec{r}) = \int_{-H_1(\vec{r})}^{H_2(\vec{r})} \vec{U}(\vec{r}, Z) \,\mathrm{d}Z \tag{A.15}$$

En utilisant l'équation A.13 de conservation de la matière, il vient :

$$\vec{\nabla}_2 \cdot \vec{Q} + V_z - \varepsilon \vec{V}_2 \cdot \vec{\nabla}_2 H_2 = 0 \tag{A.16}$$

Les équations A.14, A.15 et A.16, combinées avec l'équation

$$\vec{\nabla}_2 \mathcal{P} = 2\eta \vec{\gamma}(\vec{r}) \tag{A.17}$$

permettent, avec des conditions aux limites sur P ou  $\vec{Q} \cdot \vec{n}$ , de déterminer  $(P, \vec{Q})$  et, partant, tout l'écoulement. On peut ensuite calculer la force et le couple de lubrification subis par les solides en présence.

### A.2 Exemple de deux sphères identiques en mouvement relatif normal

On considère ici que les solides 1 et 2 sont deux sphères identiques de rayon R (voir figure 1.7). La vitesse de la sphère 2 est supposée égale à  $\vec{V} = V_z \vec{e_z}$ . On note h la distance minimale entre les deux sphères et on choisit l'origine de la coordonnée z de sorte qu'en première approximation  $H_1(\vec{r}) = H_2(\vec{r}) \equiv H(\vec{r}) = \frac{h}{2\varepsilon} + \frac{r^2}{2\varepsilon R}$  avec  $\varepsilon R = h$ . Par raison de symétrie,  $\vec{U}(\vec{r}, Z) = U(r, Z)\vec{e_r}$ et U(r, Z), polynôme de degré 2 en Z, peut se factoriser en

$$U(r, Z) = A(r)(Z + H(r))(H(r) - Z)$$
(A.18)

puisque  $\vec{U}(\vec{r}, \pm H(\vec{r})) = 0$ . D'autre part, la forme de  $\vec{U}$  impose  $\vec{Q}(\vec{r}) = Q(r)\vec{e}_r$  et l'équation A.16 donne  $Q(r) = -V_z r/2$ . En combinant A.18 et A.15, on obtient  $Q(r) = \frac{4}{3}A(r)H(r)^3$  d'où  $A(r) = -\frac{3}{8}V_z r/H(r)^3$ . Enfin, on peut calculer l'expression de la pression grâce à l'équation A.17 et au changement d'échelle  $P = \mathcal{P}/\varepsilon^3$ :

$$P(r) = -\frac{3}{2}\eta V_z \frac{R^3}{(hR+r^2)^2} + P_0$$
(A.19)

Toujours par raison de symétrie,  $\vec{F}_2^{\text{lub}} = F_2^{\text{lub}} \vec{e}_z$  avec  $F_2^{\text{lub}} = \int_0^R 2\pi r \, \mathrm{d}r (P - P_0)$ 

$$F_2^{\rm lub} = -\frac{3}{2}\pi\eta R^2 V_z/h$$
 (A.20)

Cette force s'oppose au mouvement de la sphère 2. Elle est proportionnelle à la viscosité du fluide interstitiel et inversement proportionnelle à la distance entre les deux sphères. Plus cette dernière est faible, plus le fluide s'opposera au mouvement de la sphère. Ce résultat est à la base des applications industrielles de la lubrification.

Le calcul précédent permet de se faire une idée de la façon dont on peut calculer une force de lubrification. Ce calcul pourrait également être mené à bien pour deux sphères de rayons  $R_1$  et  $R_2$  en mouvement relatif normal ou tangentiel mais nous nous contenterons d'utiliser les expressions correspondantes qui sont connues [30].

# Liste de publications

- P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Numerical Study of the Compaction of Granular Pastes », actes de Powders and Grains 2009 (13-17 juillet 2009, Golden CO, États-Unis).
- P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Comportement d'un assemblage de billes non frottantes dans la limite géométrique », *Rhéologie* 14, 18-26 (2008).
- P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Shear Flow of Sphere Packings in the Geometric Limit », actes du XVth International Congress on Rheology (4-8 août 2008, Monterey CA, États-Unis).
- P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Solid behavior and anisotropy in rigid frictionless bead assemblies », *Phys. Rev. E* 78, 041307 (2008).
- P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Frictionless bead packs have macroscopic friction, but no dilatancy », *Phys. Rev. E* 78, 011307 (2008).

## Références

- Pierre Dantu, « Étude expérimentale d'un milieu pulvérulent compris entre deux plans verticaux et parallèles », Annales des Ponts et Chaussées IV, 193–202 (1967).
- [2] J.-N. Roux et F. Chevoir, « Simulation numérique discrète et comportement mécanique des matériaux granulaires », Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées 254, 109–138 (2005).
- [3] F. Radjaï, M. Jean, J.-J Moreau et S. Roux, « Force Distribution in Dense Two-Dimensional Granular Systems », Phys. Rev. Lett. 77, 274–277 (1996).
- [4] C.S. Campbell, « Rapid granular flows », Annu. Rev. Fluid Mech. 22, 57–92 (1990).
- [5] I. Goldhirsch, « Rapid granular flows », Annu. Rev. Fluid Mech. 35, 267–293 (2003).
- [6] P.G. Rognon, J.-N. Roux, M. Naaïm et F. Chevoir, « Dense flows of cohesive granular materials », J. Fluid Mech. 596, 21–47 (2008).
- [7] V. Richefeu, M.S. El Youssoufi et F. Radjaï, « Shear strength properties of wet granular materials », *Phys. Rev. E* 73, 051304 (2006).
- [8] N. Estrada, A. Taboada et F. Radjaï, « Shear strength and force transmission in granular media with rolling resistance », *Phys. Rev. E* 78, 021301 (2008).
- [9] E. Azéma, F. Radjaï, R. Peyroux et G. Saussine, « Force transmission in a packing of pentagonal particles », *Phys. Rev. E* 76, 011301 (2007).
- [10] K. Szarf, G. Combe et P. Villard. « Influence of the grains shape on the mechanical behavior of granular materials ». Dans M. Nakagawa et S. Luding (éditeurs), *Powders and Grains 2009*, pages 357–360, AIP Conference Proceedings.
- [11] C. Voivret, F. Radjaï, J.-Y. Delenne et M.S. El Youssoufi, « Multiscale Force Networks in Highly Polydisperse Granular Media », *Phys. Rev. Lett.* 102, 178001 (2009).
- [12] S. Emam, J.-N. Roux, J. Canou, A. Corfdir et J.-C. Dupla. « Granular packings assembled by rain deposition: an experimental and numerical study ». Dans García Rojo et al. [39], pages 49–52.
- [13] Ivana Agnolin et Jean-Noël Roux, « Internal states of model isotropic granular packings. I. Assembling process, geometry, and contact networks », Phys. Rev. E 76 (6), 061302 (2007).
- [14] Ivana Agnolin et Jean-Noël Roux, « Internal states of model isotropic granular packings. II. Compression and pressure cycles », Phys. Rev. E 76 (6), 061303 (2007).
- [15] Ivana Agnolin et Jean-Noël Roux, « Internal states of model isotropic granular packings. III. Elastic properties », Phys. Rev. E 76 (6), 061304 (2007).
- [16] A. Einstein, Investigations on the Theory of the Brownian Movement, Dover (1956).
- [17] G. Ovarlez, F. Bertrand et S. Rodts, « Local determination of the constitutive law of a dense suspension of noncolloidal particles through magnetic resonance imaging », J. Rheol. 50, 259–292 (2006).
- [18] D.L. Koch et E.S.G. Shaqfeh, « The Instability of a Dispersion of Sedimenting Spheroids », J. Fluid Mech. 209, 521–542 (1989).
- [19] B. Herzhaft, E. Guazzelli, M.B. Mackaplow et E.S.G. Shaqfeh, « Experimental Investigation of the Sedimentation of a Dilute Fiber Suspension », *Phys. Rev. Lett.* 77, 290–293 (1996).
- [20] G.K. Batchelor, « Sedimentation in a dilute dispersion of spheres », J. Fluid Mech. 52, 245–268 (1972).

- [21] C.W.J. Beenakker et P. Mazur, « Many-sphere hydrodynamic interactions: IV. Wall-effects inside a spherical container », *Physica A* 131, 311–328 (1985).
- [22] A. Acrivos et E. Herbolzheimer, « Enhanced Sedimentation in Settling Tanks with Inclined Walls », J. Fluid Mech. 92, 435–457 (1979).
- [23] P. Mazur et W. van Saarlos, « Many Sphere Hydrodynamic Interactions and Mobilities in a Suspension », Physica 115A, 21–57 (1982).
- [24] J. F. Brady et G. Bossis, « Stokesian Dynamics », Annu. Rev. Fluid Mech. 20, 111 (1988).
- [25] J. Happel et H. Brenner, Low Reynolds Number Hydrodynamics, Martinus Nijhoff (1983).
- [26] P.M. Kulkarni et J.F. Morris, « Suspension properties at finite Reynolds number from simulated shear flow », *Phys. Fluids* 20, 040602 (2008).
- [27] L. Vanel, D. Howell, D. Clark, R. P. Behringer et E. Clément, « Memories in sand: Experimental tests of construction history on stress distributions under sandpiles », *Phys. Rev. E* 60 (5), R5040– R5043 Nov 1999.
- [28] A.P.F. Atman, P. Brunet, J. Geng, G. Reydellet, G. Combe, P. Claudin, R.P. Behringer et E. Clément, « Sensitivity of the stress response function to packing preparation », J. Phys.: Condens. Matter 17, S2391–S2403 (2005).
- [29] N. Benahmed, J. Canou et J.-C. Dupla, « Structure initiale et propriétés de liquéfaction statique d'un sable », Comptes Rendus Mécanique 332, 887–894 (2004).
- [30] P. Coussot et C. Ancey, Rhéophysique des pâtes et des suspensions, EDP Sciences (1999).
- [31] H.M. Laun, R. Bung, S. Hess, W. Loose, O. Hesse, K. Hahn, E. Hadicke, R. Hingmann, F. Schmidt et P. Lindner, « Rheological and small angle neutron scattering of shear-induced particle structures of concentrated polymer dispersions submitted to plane Poiseuille and Couette flow », J. Rheol. 36, 743 (1992).
- [32] Barnes H.A., « Shear-Thickening ("Dilatancy") in Suspensions of Nonaggregating Solid Particles Dispersed in Newtonian Liquids », J. Rheol. 33, 329–366 (1989).
- [33] G.K. Batchelor, "The stress system in a suspension of force free particles ", J. Fluid Mech. 41, 545–570 (1970).
- [34] J.M. Rallison et E.J. Hinch, "The effect of particle interactions on dynamic light scattering from a dilute suspension », J. Fluid Mech. 167, 131–168 (1986).
- [35] I. Vardoulakis et J. Sulem, Bifurcation Analysis in Geomechanics, Blackie Academic and Professional (1995).
- [36] G.K. Batchelor, « The stress generated in a non-dilute suspension of elongated particles by pure straining motion », J. Fluid Mech. 46, 813–829 (1971).
- [37] H. J. Herrmann, J.-P. Hovi et S. Luding (éditeurs), Physics of Dry Granular Media, Balkema (1998).
- [38] H. Hinrichsen et D. E. Wolf (éditeurs), The Physics of Granular Media, Wiley-VCH (2004).
- [39] R. García Rojo, H. J. Herrmann et S. McNamara (éditeurs), Powders and Grains 2005, Balkema (2005).
- [40] David Muir Wood, Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics, Cambridge University Press (1990).
- [41] J. K. Mitchell, Fundamentals of soil behavior, Wiley (1993).
- [42] P. A. Cundall et O. D. L. Strack, « A discrete numerical model for granular assemblies », Géotechnique 29 (1), 47–65 (1979).
- [43] M. Satake et J. T. Jenkins (éditeurs), Micromechanics of granular materials, Elsevier (1988).
- [44] P.-Y. Hicher et J.-F. Shao (éditeurs), Modélisation élastoplastique des sols, Lavoisier (2002).
- [45] P.-Y. Hicher, « Elastic Properties of Soils », ASCE Journal of Geotechnical Engineering 122, 641–648 (1996).
- [46] X. Jia, C. Caroli et B. Velický, « Ultrasound propagation in externally stressed granular media », Phys. Rev. Lett. 82, 1863–1866 (1999).
- [47] X. Jia et P. Mills. « Sound propagation in dense granular materials ». Dans Y. Kishino (éditeur), Powders and Grains 2001, pages 105–112, Swets & Zeitlinger (2001).

- [48] O. Reynolds, « On the Dilatancy of Media composed of Rigid Particles in Contact », Philosophical Magazine (5th series) 20, 469–481 (1885).
- [49] P. W. Rowe, "The stress-dilatancy relation for static equilibrium of an assembly of particles in contact », Proceedings of the Royal Society of London A269, 500–527 (1962).
- [50] A. Taboada, N. Estrada et F. Radjaï, « Additive decomposition of shear strength in cohesive granular media from grain scale interactions », *Phys. Rev. Lett.* 97, 098302 (2006).
- [51] J.-N. Roux, « Geometric origin of mechanical properties of granular materials », Phys. Rev. E 61, 6802–6836 (2000).
- [52] E. Guyon, J.-P. Hulin et Petit L., Hydrodynamique physique, CNRS Éditions, EDP Sciences (2001).
- [53] K. Kim et S.J. Karrila, Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications, Dover Publications (2005).
- [54] L.D. Laudau et E.M. Lifshitz, Physique théorique : Mécanique des fluides, Ellipse (1998).
- [55] G.K. Batchelor et J.T. Green, « The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field », J. Fluid Mech. 56, 375–400 (1972).
- [56] G.K. Batchelor et J.T. Green, « The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c<sup>2</sup> », J. Fluid Mech. 56 (2), 401–427 (1972).
- [57] B. Nœtinger, Sédimentation et transport de particules dans un fluide visqueux, thèse de doctorat de l'Université Paris VI (1989).
- [58] C.W.J. Beenakker et P. Mazur, « Diffusion of spheres in a concentrated suspension: three-body hydrodynamic interaction effects », *Phys. Lett. A* 91, 290–291 (1982).
- [59] C.W.J. Beenakker et P. Mazur, « Self-diffusion of spheres in a concentrated suspension », *Physica* 120A, 388–410 (1983).
- [60] C.W.J. Beenakker et P. Mazur, « Diffusion of spheres in a concentrated suspension II », *Physica* 126A, 349–370 (1984).
- [61] C.W.J. Beenakker, « The effective viscosity of a concentrated suspension of spheres (and its relation to diffusion) », *Physica* 128A, 48–81 (1984).
- [62] J.-P. Hansen et I. R. McDonald, Theory of Simple Liquids, Academic Press (1986).
- [63] N.A. Frankel et A. Acrivos, « On the Viscosity of a Concentrated Suspension of Solid Spheres », Chem. Eng. Sci. 22, 847–853 (1967).
- [64] K.C. Nunan et J.B. Keller, « Effective viscosity of a periodic suspension », J. Fluid Mech. 142, 269–287 (1984).
- [65] I.M. Krieger et T.J. Dougherty, « A mechanism for non-Newtonian flow in suspensions of rigid spheres », J. Rheol. 3, 137–152 (1959).
- [66] R.C. Ball et J.R. Melrose, « A simulation technique for many spheres in quasi-static motion under frame-invariant pair drag and Brownian forces », *Physica A* 247, 444–472 (1997).
- [67] O. Pitois, P. Moucheront et X. Château, « Liquid Bridge between Two Moving Spheres: An Experimental Study of Viscosity Effects », J. Coll. Interf. Sci. 231, 26–31 (2000).
- [68] L.D. Laudau et E.M. Lifshitz, Physique théorique : Théorie de l'élasticité, Éditions MIR (1990).
- [69] K. L. Johnson, Contact Mechanics, Cambridge University Press (1985).
- [70] M. Hillairet, Aspects interactifs de la mécanique des fluides, thèse de doctorat de l'École Normale Supérieure de Lyon (2005).
- [71] H. Lombois-Burger, P. Colombet, J.-L. Halary et H. Van Damme, « On the frictional contribution to the viscosity of cement and silica pastes in the presence of adsorbing and non adsorbing polymers », Cem. Concr. Res. 38, 1306–1314 (2008).
- [72] F. Chevoir, communication personnelle.
- [73] J.R. Melrose et R.C. Ball, "The pathological behaviour of sheared hard spheres with hydrodynamic interactions », 32, 535–540 (1995).
- [74] F. Lahmar, communication personnelle.
- [75] J.R. Smart et D.T Leighton Jr., « Measurement of the hydrodynamic surface roughness of noncolloidal spheres », Phys. Fluids A 1, 52–60 (1988).
- [76] J.T. Jenkins et M.A. Koenders, « Hydrodynamic interaction of rough spheres », Granular Matter 7, 13–18 (2005).
- [77] O.I. Vinogradova et G.E. Yakubov, « Surface roughness and hydrodynamic boundary conditions », Phys. Rev. E 73, 045302(R) (2006).
- [78] F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux et F. Chevoir, "Rheophysics of dense granular materials: discrete simulation of plane shear flows", *Phys. Rev. E* 72, 021309 (2005).
- [79] GDR MiDi, « On dense granular flows », European Physical Journal E 14, 341–365 (2004).
- [80] P. Jop, Y. Forterre et O. Pouliquen, « A constitutive law for dense granular flow », Nature 441, 727–730 (2006).
- [81] B. Maury et A. Lefebvre-Lepot. « Modélisation numérique des interactions fluide-grain ». Dans Radjaï et Dubois [202].
- [82] B. Maury et A. Lefebvre-Lepot. « Interaction rapprochée de grains immergés ». Dans Radjaï et Dubois [202].
- [83] B. Maury, « A time-stepping scheme for inelastic collisions », Numer. Math. 102, 649–679 (2006).
- [84] A. Lefebvre, *Modélisation numérique d'écoulements fluide/particules*, thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud (2007).
- [85] A.J.C Ladd, « Numerical Simulation of Particulate Suspensions via a Discretized Boltzmann Equation. Part I. Theoretical Foundation », J. Fluid Mech. 271, 285 (1994).
- [86] A.J.C Ladd, « Numerical Simulation of Particulate Suspensions via a Discretized Boltzmann Equation. Part I. Numerical Results », J. Fluid Mech. 271, 311 (1994).
- [87] A.J.C Ladd et R. Verberg, « Lattice-Boltzmann Simulations of Particle-Fluid Suspensions », J. Stat. Phys. 104, 1191 (2001).
- [88] S. Succi, E. Foti et F. Higuera, « Three-Dimensional Flows in Complex Geometries with the Lattice Boltzmann Method », *Europhys. Lett.* 10, 433–438 (1989).
- [89] B. Ferréol et D.H. Rothman, « Lattice-Boltzmann simulations of flow through Fontainebleau sandstone », *Transp. Porous Media* 20, 3–20 (1995).
- [90] R. Balian, From Microphysics to Macrophysics: Methods and Applications of Statistical Physics (Volume II), Springer (2006).
- [91] N.-Q. Nguyen et A.J.C. Ladd, « Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions », *Phys. Rev. E* 66, 046708 (2002).
- [92] A. Sierou et J.F. Brady, « Accelerated Stokesian Dynamics simulations », J. Fluid Mech. 448, 115–146 (2001).
- [93] D.J. Jeffrey et Y. Onishi, « Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow », J. Fluid Mech. 139, 261–290 (1984).
- [94] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et W. T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press (1988).
- [95] R.W. Hockney et J.W. Eastwood, Computer Simulations Using Particles, Taylor & Francis (1988).
- [96] G.H. Golub et C.F. van Loan, *Matrix Computations*, The John Hopkins University Press (1989).
- [97] V. Lefèvre et P. Zimmermann, « Arithmétique flottante », archive ouverte HAL-Inria (2004), http://hal.inria.fr/inria-00071477.
- [98] A. Ern et J.-L. Guermond, Éléments finis : théorie, applications, mise en œuvre, Springer (2002).
- [99] D.J. Cumberland et R.J. Crawford, The Packing of Particles, Elsevier (1987).
- [100] J. Scheibert, *Mécanique du contact aux échelles mésoscopiques*, thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (2007).
- [101] C. O'Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu et S. R. Nagel, « Jamming at zero temperature and zero applied stress: The epitome of disorder », *Phys. Rev. E* 68 (1), 011306 (2003).
- [102] http://www.csiro.au/news/PerfectKilogram.html.
- [103] Heinrich M. Jaeger, Sidney R. Nagel et Robert P. Behringer, « Granular solids, liquids, and gases », Rev. Mod. Phys. 68 (4), 1259–1273 (1996).

- [104] P. G. de Gennes, « Granular Matter: a tentative view », Rev. Mod. Phys. 71, 5374 (1999).
- [105] J. J. Stickel et R. L. Powell, "Fluid mechanics and rheology of dense suspensions", Annu. Rev. Fluid Mech. 37, 129–149 (2005).
- [106] P. G. Debenedetti, Metastable liquids, Princeton University Press (1996).
- [107] G.G. Szpiro, Kepler's Conjecture, Wiley (2003).
- [108] J. Oesterlé, « Densité maximale des empilements de sphères en dimension 3 », Séminaire N. Bourbaki (1998-1999).
- [109] J. Oesterlé, « Empilements de sphères », Séminaire N. Bourbaki (1989-1990).
- [110] R. Lespiat et R. Höhler, communication personnelle.
- [111] Y. Forterre et O. Pouliquen, « Flows of Dense Granular Media », Annu. Rev. Fluid Mech. 40, 1-24 (2008).
- [112] N Xu et C. S. O'Hern, « Measurements of the yield stress in frictionless granular systems », Phys. Rev. E 73, 061303 (2006).
- [113] T. Hatano, "Power-law friction in closely packed granular materials", Phys. Rev. E 75, 060301(R) (2007).
- [114] P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Frictionless bead packs have macroscopic friction, but no dilatancy. », Phys. Rev. E 78, 011307 (2008).
- [115] P.-E. Peyneau et J.-N. Roux, « Solidlike behavior and anisotropy in rigid frictionless bead assemblies », Phys. Rev. E 78, 041307 (2008).
- [116] N.V. Brilliantov et T. Pöschel. « Collision of adhesive viscoelastic particles ». Dans Hinrichsen et Wolf [38], pages 189–209.
- [117] M. Allen et D. Tildesley, Computer simulations of liquids, Oxford University Press (1987).
- [118] I. Volkov, M. Cieplak, J. Koplik et J. R. Banavar, "Molecular dynamics simulations of crystallization of hard spheres ", Phys. Rev. E 66 (6), 061401 (2002).
- [119] B. J. Alder et T. E. Wainwright, « Studies in molecular dynamics 1 General method », J. Chem. Phys. 31, 459–466 (1959).
- [120] M. Parrinello et A. Rahman, « Polymorphic transitions in single cystals: A new molecular dynamics method », Journal of Applied Physics 52, 7182–7190 (1981).
- [121] M. Parrinello et A. Rahman, « Strain fluctuations and elastic constants », Journal of Chemical Physics 76, 2662–2666 (1982).
- [122] C. Thornton, « Numerical simulations of deviatoric shear deformation of granular media », Géotechnique 50, 43–53 (2000).
- [123] A. S. J. Suiker et N. A. Fleck, « Frictional collapse of granular assemblies », ASME Journal of Applied Mechanics 71, 350–358 (2004).
- [124] Einat Aharonov et David Sparks, « Shear profiles and localization in simulations of granular materials », Phys. Rev. E 65 (5), 051302 (2002).
- [125] H. Flyvbjerg et H.G. Petersen, « Error estimates on averages of correlated data », Journal of Chemical Physics 91, 461–466 (1989).
- [126] F. Radjaï et S. Roux. « Contact dynamics study of 2d granular media : critical states and relevant internal variables ». Dans Hinrichsen et Wolf [38], pages 165–187.
- [127] L. Rothenburg et N. P. Kruyt, « Critical state and evolution of coordination number in simulated granular materials », *International Journal of Solids and Structures* 41 (2), 5763–5774 (2004).
- [128] N. P. Kruyt et L. Rothenburg, « Shear strength, dilatancy, energy and dissipation in quasistatic deformation of granular materials », *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* page P07021 (2006).
- [129] Jean Salençon, Applications of the Theory of Plasticity in Soil Mechanics, Wiley (1977).
- [130] R.M. Nedderman, Statics and Kinetics of Granular Materials, Cambridge University Press (1992).
- [131] J. D. Goddard et A. K. Didwania, « Computations of dilatancy and yield surfaces for assemblies of rigid frictional spheres », Quaterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics 51, 15–43 (1998).

- [132] P.V. Lade et J.M. Duncan, « Elastoplastic stress-strain theory for cohesionless soil », J. Geotech. Eng. Div. 101, 1037–1053 (1975).
- [133] S. Maïolino, Fonction de charge générale en géomécanique : application aux travaux souterrains, thèse de doctorat de l'École polytechnique (2006).
- [134] D. Drücker et W. Prager, « Soil mechanics and plastic analysis on limit design », Quart. Appl. Math. 10, 157–165 (1952).
- [135] H. Matsuoka et T. Nakai, « Relationship among Tresca, Mises, Mohr-Coulomb and Matsuoka-Nakai failure criteria », Soils and Foundations 25, 123–128 (1985).
- [136] F. Varnik, L. Bocquet, J.-L. Barrat et L. Berthier, "Shear localization in a model glass ", Phys. Rev. Lett. 90 (9) (2003).
- [137] F. Varnik, L. Bocquet et J.-L. Barrat, « A study of the static yield stress in a binary Lennard-Jones glass », J. Chem. Phys. 120 (2004).
- [138] O. Pouliquen, « Scaling laws in granular flows down a rough inclined plane », Phys. Fluids 11, 542–548 (1999).
- [139] A. Daerr et S. Douady, « Two types of avalanches behaviour in granular media », Nature 399, 241–243 (1999).
- [140] L. Quartier, B. Andreotti, S. Douady et A. Daerr, « Dynamics of a grain on a sandpile model », *Phys. Rev. E* 62, 8299–8307 (2000).
- [141] G. Combe et J.-N. Roux, « Strain versus stress in a model granular material: a devil's staircase », Phys. Rev. Lett. 85, 3628–3631 (2000).
- [142] A. Donev, S. Torquato et F. H. Stillinger, « Pair correlation function characteristics of nearly jammed disordered and ordered hard-sphere solids », Phys. Rev. E 71 (1), 011105 (2005).
- [143] T. Aste, M. Saadatfar et T. J. Senden, « Geometrical structure of disordered sphere packings », *Phys. Rev. E* 71 (2005).
- [144] L. E. Silbert, A. J. Liu et S. R. Nagel, « Structural signatures of the unjamming transition at zero temperature », Phys. Rev. E 73, 041304 (2006).
- [145] S. N. Coppersmith, C. H. Liu, S. Majumdar, O. Narayan et T. A. Witten, « Model for force fluctuations in bead packs », *Phys. Rev. E* 53, 4673–4685 (1996).
- [146] S. Ouaguenouni et J.-N. Roux, « Force Distribution in frictionless Granular Packings at Rigidity Threshold », *Europhysics Letters* 39, 117–122 (1997).
- [147] D. L. Blair, N. W. Mueggenburg, A. H. Marshall, H.M. Jaeger et S. R. Nagel, « Force distribution in three-dimensional granular assemblies: Effects of packing order and interparticle friction », *Phys. Rev. E* 63, 041304 (2001).
- [148] Leonardo E. Silbert, Gary S. Grest et James W. Landry, « Statistics of the contact network in frictionless and frictional granular packings », *Phys. Rev. E* 66 (36), 061303 (2002).
- [149] F. Radjaï, « Particle-scale origins of shear strength in granular media », archive ouverte arXiv (2008), http://arxiv.org/abs/0801.4722.
- [150] F. Radjaï, H. Troadec et S. Roux. « Basic features of granular plasticity ». Dans S. J. Antony, W. Hoyle et Y. Ding (éditeurs), *Granular Materials: Fundamentals and Applications*, pages 157– 183, Royal Society of Chemistry (2004).
- [151] M. Wyart, « On the rigidity of amorphous solids », Annales de Physique Fr. 30, 1–96 (2006).
- [152] M. Wyart, S. R. Nagel et T. A. Witten, "Geometric origin of excess low-frequency vibrational modes in weakly connected amorphous solids", *Europhysics Letters* 72, 486–492 (2005).
- [153] B. O. Hardin et G. E. Blandford, « Elasticity of particulate materials », ASCE Journal of Geotechnical Engineering 115 (6), 788–805 (1989).
- [154] E. Hoque et F. Tatsuoka, « Anisotropy in elastic deformation of granular materials », Soils and Foundations 38, 163–179 (1998).
- [155] A. Duttine, H. Di Benedetto, D. Pham Van Bang et A. Ezaoui, « Anisotropic small strain elastic properties of sands and mixture of sand-clay measured by dynamic and static methods », *Soils* and Foundations 47 (3), 457–472 (2007).
- [156] Y. Khidas et X. Jia. « Acoustic measurements of anisotropic elasticity in glass bead packings under uniaxial stress ». Dans García Rojo et al. [39], pages 309–312.

- [157] S. Nemat-Nasser et M. Hori, Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials, North-Holland (1993).
- [158] E. Somfai, J.-N. Roux, J. H. Snoeijer, M. van Hecke et W. van Saarloos, « Elastic wave propagation in confined granular systems », *Phys. Rev. E* 72, 021301 (2005).
- [159] Ellák Somfai, Martin van Hecke, Wouter G. Ellenbroek, Kostya Shundyak et Wim van Saarloos, « Critical and noncritical jamming of frictional grains », *Phys. Rev. E* 75 (2), 020301 (2007).
- [160] V. Magnanimo, L. La Ragione, J. T. Jenkins, P. Wang et H. A. Makse, « Characterizing the shear and bulk moduli of an idealized granular material », *Europhys. Lett.* 81, 34006 (2008).
- [161] J.-N. Roux et G. Combe, « Quasistatic rheology and the origins of strain », C. R. Physique 3, 131–140 (2002).
- [162] J.-P. Bouchaud et A. Georges, « Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications », *Physics Reports* 195, 127–293 (1990).
- [163] C. E. Maloney et A. Lemaître, « Amorphous systems in athermal, quasistatic shear », Phys. Rev. E 74, 016118 (2006).
- [164] A. Lemaître et C. Caroli, « Rate-Dependent Avalanche Size in Athermally Sheared Amorphous Solids », Phys. Rev. Lett. 103, 065501 (2009).
- [165] A. Tanguy, F. Leonforte et J.-L. Barrat, « Plastic response of a 2D Lennard-Jones amorphous solid : Detailed analysis of the local rearrangements at very slow strain rate », *Eur. Phys. J. E* 20, 355–364 (2006).
- [166] F. da Cruz, Écoulements de grains secs : frottement et blocage, thèse de doctorat de l'École Nationale des Ponts et Chaussées (2004).
- [167] C. Cassar, M. Nicolas et O. Pouliquen, « Submarine granular flows down inclined plane », Phys. Fluids 17 (2005).
- [168] O. Pouliquen, C. Cassar, Y. Forterre, P. Jop et M. Nicolas. « How grains flow: towards a simple rheology for dense granular materials ». Dans García Rojo et al. [39], pages 859–865.
- [169] A. Lemaître, J.-N. Roux et F. Chevoir, "What do dry granular flows tell us about dense non-Brownian suspension rheology?", *Rheol. Acta* 48 (8), 925–942 (2009).
- [170] D.T. Leighton, The shear induced migration of particulates in concentrated suspensions, thèse de doctorat de l'Université de Stanford (1985).
- [171] G. Marrucci et M.M. Denn, « On the viscosity of a concentrated suspension of solid spheres », *Rheol. Acta* 24, 317–320 (1985).
- [172] G. Arquié et G. Morel, *Le compactage*, Eyrolles (1988).
- [173] J.K. Mitchell et K. Soga, Fundamentals of Soil Behavior, Wiley (2005).
- [174] F. Hammoum, C. de la Roche et C. Boutin. « A self-consistent estimate of bituminous mix complex modulus ». Dans Eurobitume Workshop 99.
- [175] F. Hammoum. « Microécanique des enrobés bitumineux ». Dans Actes des journées scientifiques du LCPC : approches multi-échelles pour les matériaux et les structures du génie civil, pages 71–77.
- [176] J. Christoffersen, « Bonded granulates », J. Mech. Phys. Sol. 31, 55–83 (1983).
- [177] A. Lachihab, Un modèle numérique pour les composites biphasés matrice inclusions rigides : application à la détermination des propriétés élastiques et en fatigue des enrobés bitumineux, thèse de doctorat de l'École Nationale des Ponts et Chaussées (2004).
- [178] M.H Sadd, Q. Dai, V. Parameswaran et A. Shukla, "Microstructural Simulation of Asphalt Mixtures: Modeling and Experimental Studies", J. Mater. Civil Eng. 16, 107–115 (2004).
- [179] W.G. Buttlar et Z. You. « Discrete element modeling of asphalt concrete microfabric approach ». Dans Geomaterials 2001, pages 111–118.
- [180] Z. You et W.G. Buttlar, « Discrete Element Modeling to Predict the Modulus of Asphalt Concrete Mixtures », J. Mater. Civil Eng. 16, 140–146 (2004).
- [181] S. Ouaguenouni, Comportement mécanique d'un modèle de matériau granulaire sans frottement, thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (1997).
- [182] D. Lesueur, « La Rhéologie des Bitumes : Principes et Modification », Rhéologie 2, 1–30 (2002).

- [183] C. Lesaffre, V. Mineau, D. Picart et H. Van Damme, "Densification under vibration of a saturated granular packing", C. R. Acad. Sci. Paris, Série IV 1, 647–653 (2000).
- [184] J.B. Knight, C.G. Fandrich, Jaeger H.M. Lau, Chun Ning et S.R. Nagel, « Density relaxation in a vibrated granular material », *Phys. Rev. E* 51, 3957–3963 (1995).
- [185] E.R. Nowak, J.B. Knight, M.L. Povinelli, H.M. Jaeger et S.R. Nagel, « Reversibility and irreversibility in the packing of vibrated granular material », *Powder Technol.* 94, 79–83 (1997).
- [186] E. R. Nowak, J. B. Knight, E. Ben-Naim, H. M. Jaeger et S. R. Nagel, "Density fluctuations in vibrated granular materials", Phys. Rev. E 57 (2), 1971–21982 (1998).
- [187] P. Philippe et D. Bideau, « Compaction dynamics of a granular medium under vertical tapping », Europhys. Lett. 60, 677–683 (2002).
- [188] E. Ben-Naim, J.B. Knight, E.R. Nowak, H.M. Jaeger et S.R. Nagel, « Slow relaxation in granular compaction », *Physica D* 123, 380–385 (1998).
- [189] E. Caglioti, V. Loreto, H.J. Herrmann et M. Nicodemi, « A "Tetris-Like" Model for the Compaction of Dry Granular Media », Phys. Rev. Lett. 79, 1575–1578 (1997).
- [190] M. Nicodemi, A. Coniglio et H.J. Herrmann, « Frustration and slow dynamics of granular packings », Phys. Rev. E 55, 3962–3969 (1997).
- [191] T. Boutreux et P.-G. de Gennes, « Compaction of granular mixtures: a free volume model », *Physica A* 244, 59–67 (1997).
- [192] M. Nicolas, P. Duru et O. Pouliquen, « Compaction of a granular material under cyclic shear », European Physical Journal E 3, 309–314 (2000).
- [193] C. Josserand, A.V. Tkachenko, D.M. Mueth et H.M. Jaeger, « Memory effects in granular materials », Phys. Rev. Lett. 85, 3632–3635 (2000).
- [194] T. Divoux, Bruit et fluctuations dans les écoulements de fluides complexes, thèse de doctorat de l'École Normale Supérieure de Lyon (2009).
- [195] P. Philippe et D. Bideau, « Numerical model for granular compaction under vertical tapping », *Phys. Rev. E* 63, 051304 (2001).
- [196] F. Alonso-Marroquin et H.J. Herrmann, « Ratcheting of granular materials », Phys. Rev. Lett. 92, 054301 (2004).
- [197] R. García-Rojo, F. Alonso-Marroquin et H.J. Herrmann, « Characterization of the material response in granular ratcheting », *Phys. Rev. E* 72, 041302 (2005).
- [198] R. García-Rojo et H.J. Herrmann, « Shakedown of unbound granular material », Granular Matter 7, 109 (2005).
- [199] S. McNamara, R. García-Rojo et H.J. Herrmann, « Microscopic origin of granular ratcheting », Phys. Rev. E 77, 031304 (2008).
- [200] G. Combe et J.-N. Roux. « Discrete numerical simuations, quasistatic deformation and the origins of strain in granular materials ». Dans H. di Benedetto, T. Doanh, H. Geoffroy et C. Sauzéat (éditeurs), *Deformation characteristics of geomaterials*, pages 1071–1078, Swets and Zeitlinger (2003).
- [201] J.-N. Roux. « The nature of quasistatic deformation in granular materials ». Dans García Rojo et al. [39], pages 261–265.
- [202] F. Radjaï et F. Dubois (éditeurs), Modélisation numérique discrète des matériaux granulaires, Hermes (2009).

## Étude du comportement et du compactage de pâtes granulaires par simulation numérique discrète

De nombreux matériaux du génie civil, comme le béton ou les enrobés bitumineux, sont des pâtes granulaires, c'est-à-dire des suspensions dont la concentration volumique en inclusions solides est très élevée. Ce travail porte sur la modélisation et la simulation numérique discrète du comportement et du compactage de pâtes granulaires 2D non browniennes et non colloïdales constituées de grains élastiques rugueux de forme circulaire, baignant dans un liquide newtonien de très grande viscosité.

Après avoir introduit un modèle de pâte granulaire dans lequel le seul effet du liquide est d'induire des interactions de lubrification entre paires de grains proches, nous présentons une méthode numérique quasi-statique permettant de simuler le comportement de ces systèmes lorsqu'ils sont soumis à un état de contrainte donné. L'étude de l'état d'équilibre adopté par une pâte granulaire lubrifiée lorsqu'on lui applique une pression isotrope montre que, dans la limite où la rugosité des grains est nulle, un tel système se comporte comme un assemblage sec de grains non frottants.

C'est la raison pour laquelle nous étudions ensuite le comportement de ces assemblages en 3D lorsqu'on les soumet à des chargements statiques anisotropes ainsi qu'à des essais de cisaillement simple dans la limite quasi-statique. Nous montrons en particulier que les coefficients de frottement interne statique et dynamique sont non nuls et coïncident, que ces assemblages ne présentent aucune dilatance et qu'ils satisfont un critère de rupture de Lade-Duncan.

Le comportement d'une pâte granulaire lubrifiée 2D faite de grains de rugosité finie soumise à un cisaillement maintenu est ensuite analysé et nous comparons nos résultats avec ceux obtenus en cisaillant des assemblages granulaires secs 2D. Finalement, nous étudions de manière détaillée les paramètres influençant le compactage d'une pâte granulaire lubrifiée et mettons en évidence la réduction de la mobilisation du frottement intergranulaire accompagnant la densification du matériau.

## Behavior and Compaction of Highly Concentrated Suspensions: a Numerical Study

Highly concentrated suspensions are commonly encountered materials, e.g. in civil engineering. This work is devoted to the numerical simulation of the behavior and the compaction of 2D non-Brownian and noncolloidal very concentrated suspensions made of rough circular grains embedded in a highly viscous Newtonian liquid.

We use a model in which the sole effect of the liquid is to introduce lubrication interactions between neighbouring grains and we present a quasistatic simulation technique enabling to simulate the behavior of such a system when it is subjected to a given stress state. Thanks to this method, we show that when an isotropic pressure is applied on a material sample, it behaves, when the grain roughness vanishes, as a dry granular assembly made of frictionless grains.

The behavior of a 3D dry granular material made of frictionless grains is consequently investigated. This model granular material is submitted to static anisotropic loads and to simple shear tests in the quasistatic limit. In this limit, static and dynamic macroscopic friction coefficients are nonzero and coincide, dilatancy vanishes, and the material satisfies a Lade-Duncan failure criterion.

Then the behavior of a 2D highly concentrated lubricated suspension made of rough grains subjected to simple shear tests is studied. Results are compared with those obtained from similar tests performed on 2D dry granular assemblies. Eventually, a study of the compaction of a highly concentrated lubricated suspension is done and we show that compaction is related to the decrease of the mobilization of intergranular friction.