HAL
open science

États de compacité maximale pour les mélanges binaires de grains sphériques : étude par simulation numérique

Jean-Noël Roux, François Chevoir, Fabrice Toussaint

To cite this version:

Jean-Noël Roux, François Chevoir, Fabrice Toussaint. États de compacité maximale pour les mélanges binaires de grains sphériques : étude par simulation numérique. Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées, 2007, 268-269, pp. 141-152. hal-00355271

HAL Id: hal-00355271

https://hal.science/hal-00355271

Submitted on 22 Jan 2009

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.

ÉTATS DE COMPACITÉ MAXIMALE POUR LES MÉLANGES BINAIRES DE GRAINS SPHÉRIQUES : ÉTUDE PAR SIMULATION NUMÉRIQUE

Jean-Noël Roux[(a)], **François Chevoir**[(a)] **et Fabrice Toussaint**[(b)]

(a) Laboratoire des Matériaux et des Structures du Génie Civil[1], Institut Navier
2 Allée Kepler, 77420 Champs-sur-Marne

(b) Lafarge, Centre de Recherches
95 rue du Montmurier BP 15
38291 Saint-Quentin Fallavier

RÉSUMÉ : Nous appliquons la simulation numérique (par la méthode des éléments discrets, également appelée dynamique moléculaire) à l'étude des assemblages désordonnés de compacité maximale de particules sphériques, monodispersées ou bien en mélanges binaires, le rapport des diamètres étant fixé à trois. La simulation conduit à une définition pratique de la compacité maximale des systèmes désordonnés, comme celle des configurations mécaniques d'équilibre sous chargement isotrope de particules rigides non frottantes. Une étude statistique des effets de taille d'échantillons permet d'évaluer, dans la limite des grands systèmes, les compacités maximales des assemblages monodispersés, pour lesquels on retrouve la valeur classique 0.639, et bidispersés, pour deux valeurs distinctes de la fraction volumique de grosses particules. Les calculs mettent en évidence l'influence sur l'état final et sa compacité de la durée de l'étape initiale de l'assemblage, dans laquelle les grains sont agités et interagissent par collisions. L'allongement de cette phase d'agitation entraîne une évolution graduelle de l'état du système dans laquelle l'augmentation de la compacité s'accompagne de la nucléation d'un ordre cristallin dans le cas des billes de même taille et d'une ségrégation progressive selon la taille dans le cas des mélanges binaires. Même si cette évolution est lente et son effet probablement peu sensible dans nombre de situations pratiques, il convient de définir la compacité maximale des états désordonnés comme celle que l'on obtient dans la limite des assemblages rapides. Nous indiquons pour finir quelques prolongements possibles de cette étude préliminaire de la compacité des mélanges.

1 Introduction

De nombreux matériaux du génie civil sont composés d'un assemblage de grains solides, seuls (sols pulvérulents, graves non traitées, granulats, ballasts), en présence d'un fluide (sols saturés, ciments frais, matériaux de chaussées lors de leur mise en place), ou inclus dans une matrice solide (bétons, enrobés bitumineux en service). La compacité – c'est-à-dire la fraction Φ du volume de matériau occupée par les particules solides – est toujours au nombre des grandeurs utilisées pour caractériser l'état de ces matériaux, pour tenter de prédire leur comportement ou aider à leur formulation. Souvent on se réfère à une *compacité maximale* Φ^*, implicitement supposée liée à la seule géométrie des grains. Ainsi, pour la formulation des ciments [1], on corrèle la viscosité d'une suspension à la compacité maximale des grains solides. En mécanique des sols, où on utilise souvent l'indice des vides $e = \frac{1-\Phi}{\Phi}$ au lieu de la compacité, des procédures

[1]Laboratoire mixte, rattaché au LCPC, à l'ENPC et au CNRS.

normalisées en donnent des valeurs maximales et minimales, tandis que l'étude du comportement mécanique des matériaux granulaires souligne l'intérêt de la notion de compacité (ou d'indice des vides) *critique*, qui est approchée dans les états d'écoulement plastique en grandes déformations [2].

Les méthodes de simulation discrète [3], qui connaissent actuellement un grand essor, donnent accès à l'ensemble des degrés de liberté d'un assemblage de grains solides. Le présent article a pour but de montrer qu'elles permettent de préciser la notion d'état de compacité maximale, en dégageant les influences de la géométrie et de la micromécanique, et de déterminer Φ^* pour des systèmes simples dont la granulométrie n'est pas trop étalée.

Pour un rapport des diamètres établi à trois, on a choisi d'étudier des mélanges avec deux proportions différentes p de volume solide correspondant aux grosses particules : $p = 0.5$ et $p = 0.7$, et de limiter le nombre total N de particules à quelques milliers dans les échantillons simulés.

Le bilan de cette étude préliminaire, avec les résultats obtenus, l'influence de N et les fluctuations statistiques entre échantillons différents, est présenté et brièvement discuté dans le §4. Auparavant, le §2 donne quelques définitions utiles et présente rapidement les méthodes numériques employées, tandis que des résultats connus dans le cas du système monodispersé sont rappelées au §3. Nous terminons en suggérant (§5) quelques perspectives quant à la poursuite de l'application de la simulation numérique discrète aux assemblages granulaires polydispersés.

2 Définitions, méthodes numériques.

2.1 Qu'est-ce qu'un état de compacité maximale ?

Avec des billes de la même taille, la compacité maximale de l'assemblage aléatoire est classiquement estimée à une valeur légèrement inférieure à 0.64 [4, 5].

La notion d'état désordonné de compacité maximale est *a priori* un peu floue. Il s'agit en principe d'un maximum géométrique, concernant des particules rigides et impénétrables, mais qui exclut certaines configurations considérées comme trop ordonnées (en particulier celles dans lesquelles on peut clairement déceler un arrangement cristallin, au moins localement).

Une remarque permet de préciser cette définition : si l'on se donne une définition de la compacité Φ adaptée aux conditions aux limites choisies, les configurations qui réalisent un maximum local de Φ, sous les contraintes d'impénétrabilité, coïncident exactement avec les configurations d'équilibre stable de grains rigides non frottants soumis à une pression isotrope [6]. ¡¡Maximum local ¿¿ signifie qu'il n'existe pas de mouvement augmentant Φ qui ne viole pas les contraintes stériques. Le problème posé en termes géométriques a donc naturellement un sens mécanique : partout où les contraintes d'impénétrabilité sont actives, apparaît une force normale entre les deux grains en contact, qui est un multiplicateur de Lagrange associé à cette contrainte.

Il est donc tout naturel de chercher à obtenir ces états en soumettant des grains non frottants à une pression isotrope. C'est un procédé fréquemment employé en simulation numérique pour obtenir des configurations denses [7, 8, 9, 10].

Un état de compacité maximale est un état d'équilibre d'en ensemble de grains rigides sans

frottement dans les contacts, soumis à une pression isotrope.

2.2 Qu'est-ce qu'un état *désordonné* de compacité maximale ?

On dispose de différents indicateurs (paramètres d'ordre) pour la cristallisation des systèmes de ¡¡ sphères dures ¿¿ [11, 12, 10]. Celle-ci se manifeste à partir d'une compacité d'environ 0.49 en présence d'une agitation thermique maintenue (dans le modèle de fluide pour lequel les collisions conservent l'énergie cinétique), mais elle est relativement facile à éviter dans la pratique des calculs si on se place à $\Phi \geq 0.55$ [11]. Avec des billes macroscopiques qui dissipent l'énergie dans leurs contacts et échappent à l'agitation thermique spontanée, on peut retrouver la tendance à la cristallisation lorsque l'assemblage est soumis à des vibrations ou à un cisaillement oscillant [13].

Le phénomène de cristallisation disparaît lorsque la largeur de la distribution des diamètres (écart-type d'une distribution gaussienne rapporté à la valeur moyenne) est de l'ordre de 6% du diamètre moyen [14].

Ce qu'il faut craindre alors, c'est la ségrégation des particules par taille, autre cause possible d'inhomogénéité. Les mélanges de sphères de différentes tailles, si on les considère comme des molécules d'un fluide ou des particules colloïdales soumises au mouvement brownien, peuvent exhiber un diagramme de phase assez complexe, qui dépend fortement du rapport des tailles, comporte éventuellement plusieurs phases fluides et plusieurs phases solides, etc... On pourra par exemple consulter la réf. [15], et la copieuse littérature à laquelle renvoie cette étude. À densité élevée, la structure la plus stable implique toujours une séparation de deux phases de compositions différentes. Comme dans le cas monodispersé, en revenant aux particules macroscopiques (c'est-à-dire sans agitation thermique ou mouvement brownien), on observe que la manipulation d'un mélange de particules de tailles différentes (qu'il s'agisse d'une vibration continue, de secousses répétées séparées par des temps de repos, etc...) tend à induire le même type d'organisation que l'agitation thermique spontanée des systèmes moléculaires ou colloïdaux : on assiste à une ségrégation progressive [16, 17, 18]. De même la mise en écoulement des matériaux granulaires conduit à la séparation des populations de grains selon leurs tailles [19].

Avec les sphères d'une seule taille on peut définir un état de compacité maximale aléatoire si on a un maximum local de Φ sous les contraintes d'impénétrabilité dans l'espace des configurations et si on ne décèle aucun germe de cristallisation locale.

Il est logique d'adopter une définition analogue pour les systèmes bidispersés, en remplaçant la cristallisation par la ségrégation.

On constate que, pour des échantillons assez grands, les états désordonnés de compacité maximale possèdent tous (*approximativement*, et non pas *exactement*, en raison des évolutions lentes vers la cristallisation ou la ségrégation) la même compacité Φ^*, qui est celle que nous étudions ici.

Les résultats rappelés ci-dessous dans le cas des billes d'une seule taille et présentés au §4 pour les mélanges binaires indiqueront dans quelle mesure, pour le procédé d'assemblage indiqué au §2.3 ci-dessous, la compacité peut dépendre de la durée de la phase initiale dans laquelle les grains sont agités.

Un état désordonné de compacité maximale peut être défini comme un état d'équilibre d'en ensemble de grains rigides sans frottement dans les contacts, soumis à une pression isotrope,

pour lequel les évolutions vers l'ordre cristallin ou vers la ségrégation des mélanges restent négligeables.

2.3 Procédure de simulation

Pour produire des états homogènes, commodes à caractériser et dépourvus d'effets de bord, on utilise des conditions aux limites périodiques.

La méthode de calcul utilisée est la dynamique moléculaire, appellation abrégée en DM ci-dessous, (que l'on désigne souvent comme ¡¡ méthode aux éléments discrets¿¿) avec des sphères assez rigides et des ingrédients d'inertie et de dissipation visqueuse appropriés – ces derniers garantissant une restitution nulle dans les collisions binaires. La raideur des contacts est telle que dans l'état final l'¡¡interpénétration ¿¿ typique des sphères en contact (c'est-à-dire, bien sûr, la déflexion normale du contact) soit de l'ordre de quelques $10^{-5}d$, d étant leur diamètre. On trouvera des explications et des références plus détaillées sur la méthode dans un article récent [3].

Au préalable, les particules sont disposées soit ¡¡ au hasard ¿¿ (un procédé qui impose de commencer les calculs dans une configuration de compacité assez faible), soit sur les sites d'un réseau régulier. Dans une seconde étape, la configuration de départ est mélangée : on donne aux grains une certaine énergie cinétique et on les laisse interagir par des collisions qui conservent cette énergie (chocs élastiques), à la manière des molécules d'un fluide (qui seraient toutefois dépourvues d'interaction à distance). Lorsque la position de départ était sur un réseau, on s'assure alors que cet ordre initial a bien disparu dans l'étape de mélange.

La durée de la phase de mélange et son influence possible se mesurent au nombre de collisions moyen par grain, à une compacité donnée.

Une possibilité intéressante, en particulier dans le cas de systèmes polydispersés, pour lesquels il peut être difficile de déterminer une configuration initiale au hasard avec une compacité qui ne soit pas trop faible, est l'utilisation d'un algorithme qui permette simultanément de mélanger et de compacter, pour que le recours à la DM puisse n'intervenir que dans une étape plus tardive. C'est ce que fait l'algorithme de Lubachevsky et Stillinger [20, 21] (abrégé en LS ci-dessous), qui consiste à calculer des collisions entre des objets qui se dilatent à vitesse constante, de sorte que la compacité augmente au cours du temps.

Les résultats présentés au §4 font tous appel à cette méthode dans une première étape, et ses effets sont testés ci-dessous dans le cas monodispersé.

3 Résultats pour les billes monodispersées

3.1 Procédure directe, temps caractéristiques

On a pu vérifier que l'on obtenait avec un seul diamètre de billes la valeur $\Phi^* = 0.637 \pm 0.001$ en effectuant l'étape de mélange à $\Phi = 0.45$, (il suffit alors d'une dizaine de collisions par grain pour faire disparaître toute mémoire de la configuration initiale) puis en achevant le compactage par DM avec des particules déformables et des chocs mous. Cette valeur résulte de moyennes sur une série de 5 échantillons de N=4000 sphères. Une autre série de configurations

de 1372 sphères donne 0.636 ± 0.001 [2]. L'erreur due à la légère déformabilité des contacts était avec le modèle retenu estimée à $\Delta\Phi = 1.2 \times 10^{-4}$ (donc négligeable, vu l'incertitude sur Φ).

Pour donner une idée approximative de la durée du processus de compaction (deuxième étape), qui est calculé à pression contrôlée P, on peut utiliser le temps caractéristique $\tau = \sqrt{\frac{m}{dP}}$ associé à l'inertie des grains de masse m et de diamètre d soumis à des forces d'ordre Pd^2. La compacité finale est approchée (à moins de 0.01 près) en quelques dizaines de τ. Ensuite, si on désire une configuration bien équilibrée (dans laquelle le réseau des contacts et les valeurs des forces sont déterminées avec une bonne précision), il faut poursuivre les calculs pendant un temps qui peut atteindre quelques centaines de τ (il faut noter qu'il est relativement difficile de stabiliser des grains non frottants dans une position d'équilibre). Pour avoir un point de comparaison avec une expérience de laboratoire, on peut considérer par exemple un processus de dépôt sous gravité. Une telle procédure est couramment employée dans les laboratoires de mécanique des sols, et en contrôlant débit et hauteur de chute libre – on parle alors de *pluviation contrôlée* [22, 23] – elle constitue un procédé de fabrication reproductible d'échantillons homogènes dont la compacité peut être variée à la demande. Par la simulation numérique [24, 25], on peut comparer les assemblages de billes assemblées par pluviation aux configurations obtenues par les processus de compactage isotrope idéaux, dépourvus d'effets de bord, tels que celui que nous employons dans la présente étude. On vérifie alors que les états que nous étudions ici sont bien similaires à ceux que l'on peut trouver dans des situations plus proches d'une expérience réelle.

Dans le procédé de dépôt gravitaire, la pression typique, celle qui règne dans la couche proche de la surface libre où les grains se réarrangent, correspond au poids d'une dizaine de couches granulaires. En prenant donc $P \sim 10\frac{mg}{d^2}$, on aura $\tau \simeq \sqrt{\frac{d}{10g}}$, ce qui donne environ 3×10^{-3}s avec des grains millimétriques. Les temps trouvés (de l'ordre du dizième de seconde pour l'assemblage par déposition d'une couche de 10 grains d'épaisseur, ou de la seconde pour remplir un récipient de 10cm de hauteur) semblent donc comparables entre le calcul numérique et la fabrication d'échantillons en laboratoire.

Cette compacité pour les assemblages de sphères d'une seule taille est en bon accord avec les résultats d'expériences en laboratoire [4, 5], et avec d'autres travaux numériques. Ainsi O'Hern *et al.* [26] par exemple, donnent $\Phi^* = 0.639 \pm 0.001$, résultat obtenu par extrapolation vers la limite $N \to \infty$. Ces auteurs ont mené à bien une étude systématique de l'influence de la taille du système sur la compacité maximale. Ils ont observé une légère influence du nombre N de sphères sur la valeur moyenne dans les échantillons de N sphères, $\langle\Phi\rangle(N)$ Celle-ci tend à augmenter vers sa valeur asymptotique Φ^* dans le limite $N \to \infty$ comme :

$$\langle\Phi\rangle(N) = \Phi^* - \delta_0 N^{-\alpha}, \tag{1}$$

avec $\delta_0 = 0.12 \pm 0.03$ et $\alpha = 0.47 \pm 0.05$. Ils ont également déterminé l'influence de N sur la largeur w (largeur à mi-hauteur d'une courbe en cloche) de la distribution des compacités dans les échantillons de taille N :

$$w = w_0 N^{-\Omega}, \tag{2}$$

[2] On convient ici, et dans toute la suite, d'indiquer comme intervalle d'incertitude un écart-type de part et d'autre de la moyenne

avec $w_0 = 0.16 \pm 0.04$ et $\Omega = 0.55 \pm 0.03$. Les équations 1 et 2 s'appliquent aux résultats de [26] pour $N \geq 64$.

3.2 Effet d'une agitation prolongée : algorithme LS

Dans un second temps nous avons testé l'usage de l'algorithme LS pour ne recourir à la DM qu'à une densité plus élevée.

Si l'on utilise l'algorithme LS jusqu'à obtenir $\Phi = 0.632$ (avec 6000 collisions par particule en moyenne pour arriver à cette compacité) on constate que l'achèvement ultérieur du compactage par DM produit des compacités plus élevées que la valeur trouvée précédemment : $\Phi = 0.6423 \pm 0.0004$. Il est difficile de repérer un ordre local dans ces nouvelles configurations, l'évolution vers l'arrangement cristallin restant très embryonnaire (ceci peut se contrôler quantitativement avec des ¡¡ paramètres d'ordre ¿¿ comme dans [11, 12]). Mais si on prolonge encore l'étape de calcul par la méthode LS (comme cela a été fait dans [27, 28]), on peut obtenir toutes les compacités intermédiaires entre celles que nous avons citées et la valeur $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \simeq 0.74$ du réseau cristallin parfait, correspondant à des systèmes partiellement ordonnés selon les motifs cubique à faces centrées ou hexagonal compact.

On voit donc qu'il n'est pas possible en principe de considérer la valeur de la compacité maximale Φ^* des systèmes désordonnés comme unique. Toutefois, si l'usage de l'algorithme LS est poussé jusqu'à $\Phi = 0.59$ avec seulement 100 collisions par bille, on obtient à nouveau la valeur précédente ($\Phi \simeq 0.637$ pour $N = 4000$, légèrement inférieure pour $N = 1372$).

On retiendra donc que la compacité maximale la plus usuelle correspond à un assemblage rapide, et qu'on la retrouve en limitant la durée des phases d'agitation.

Cette interprétation est confortée par l'absence ou la brièveté d'une telle phase de vibration dans les procédés pratiques d'assemblages tels que le dépôt sous gravité (pluviation) ou le damage par couches, ainsi que par les résultats déjà cités de [26], qui sont en très bon accord avec les valeurs de Φ^* que nous avons obtenues en limitant la durée de l'agitation. En effet, la méthode numérique employée par O'Hern *et al.* [26] est censée correspondre à la limite des compressions très rapides (l'énergie potentielle élastique, associée à la déformation des contacts intergranulaires dans une configuration à volume imposé, est directement minimisée par un algorithme de descente du gradient, et la limite où le volume choisi donne des déformations nulles fournit la valeur de la compacité cherchée).

3.3 Rôle du frottement

La procédure d'assemblage précédente, qui consiste à faire décroître le volume de la cellule (périodique) contenant les grains jusqu'à ce que le réseau des forces de contacts vienne équilibrer chaun des grains et contrebalancer la pression extérieurement appliquée, mise en œuvre en présence de frottement intergranulaire, conduit à des configurations mécaniquement équilibrées de compacité moindre [7, 8, 9]. De plus, en présence de frottement intergranulaire, on doit également noter que les grains peuvent être assemblés, pour les mêmes contraintes, dans des états assez différents, ce qui est bien sûr conforme à l'expérience, puisque l'on caractérise classiquement l'état d'un échantillon de sable par sa compacité.

La définition des états de compacité maximale que nous avons donnée plus haut, comme états d'équilibre sous chargement isotrope de grains non frottants, conduit donc à considérer les

procédés de compactage (vibration, cisaillement, lubrification) comme destinés à limiter ou à circonvenir les effets du frottement dans les contacts.

Pour des billes sphériques identiques, la compacité minimale que l'on peut atteindre dans une configuration d'équilibre dépend de la valeur du coefficient de frottement, et divers procédés peuvent conduire à des valeurs différentes, les plus basses étant de l'ordre de 0,56 à 0,58 avec des coefficients de frottement compris entre 0,2 et 0,5.

Signalons enfin que la simulation numérique a permis de constater que la compacité et le nombre de coordination d'un assemblage de billes frottantes pouvaient varier indépendamment [3, 10].

3.4 Effet d'un cisaillement

Jusqu'ici nous avons considéré exclusivement des configurations isotropes. Or, il est possible d'appliquer à des assemblages de sphères sans frottement une contrainte de cisaillement, la configuration restant en équilibre mécanique, avec des forces de contact normales qui équilibrent les forces extérieurement appliquées. Nous avons ainsi observé que l'on pouvait appliquer des contraintes principales $\sigma_1 > \sigma_2 = \sigma_3$ jusqu'à atteindre des rapports σ_1/σ_3 de 1.2 à 1.25, avec un modèle de sphères quasi-rigides. Lorsque le déviateur des contraintes est augmenté, par paliers, à partir d'une configuration assemblée de façon isotrope, on constate que le système se déforme, car le réseau des contacts se réajuste pour pouvoir supporter les nouvelles contraintes. À l'équilibre on obtient une distribution des orientations des contacts anisotrope, avec un plus grand nombre de vecteurs normaux aux contacts parallèles à la direction principale majeure des contraintes. Il est intéressant de constater que les réarrangements se produisent sans changement notable de la compacité. Cette remarque nous permet donc de *généraliser la définition que nous avons adoptée pour un état de compacité maximale, en abandonnant la condition de contraintes isotropes* : c'est simplement un état d'équilibre de grains rigides non frottants.

Dans le langage de la mécanique des matériaux granulaires (ou des sols [2]), les assemblages de sphères non frottantes possèdent un angle de frottement interne (faible, entre 5 et 6 degrés, mais non nul), mais sont dénués de dilatance. Pour un assemblage de grains *parfaitement lubrifiés*, et donc non frottant, la compacité Φ^* que l'on évalue en imposant une pression isotrope semble coïncider avec la ¡¡ compacité critique ¿¿, celle d'un échantillon continuellement cisaillé en régime quasi-statique. Cette valeur Φ^* pourrait donc en principe avoir une certaine pertinence pour l'étude de la rhéologie des pâtes, pour lesquelles on s'intéresse à la compacité associée à la divergence de la viscosité, en régime newtonien. Une étude expérimentale récente [29] par une équipe du LMSGC montre néanmoins que la viscosité diverge pour des compacités inférieures à Φ^*, et il semble que le comportement rhéologique des pâtes granulaires soit influencé par l'état de surface des particules solides, que l'on ne peut pas considérer comme parfaitement lubrifiées par le fluide.

Par ailleurs, nous ignorons si les assemblages de sphères *polydispersées* non frottantes sont également dépourvus de dilatance.

Enfin, il convient de rappeler que la compacité critique des grains secs dépend du coefficient de frottement et est inférieure à la compacité maximale (elle est d'environ 0,595 pour les billes identiques lorsque le coefficient de frottement de contact vaut 0,3 [3]).

4 Résultats pour les mélanges binaires.

Nous avons simulé la compaction isotrope d'échantillons de billes de diamètre d et $D = 3d$. Le tableau 1 donne la liste des différentes séries d'échantillons ainsi préparées (il rappelle aussi les résultats obtenus au laboratoire avec les billes d'une seule taille). La figure 1 représente la

Code	p	N	N_2	M	Φ_0	Φ_1	n_{coll}	$\langle\Phi^*\rangle$	$\Delta\Phi^*$
A00	0	4000	0	5	0.45	0.45	50	0.637	0.001
A01	0	4000	0	5	0.05	0.632	5000	0.6423	0.0004
C00	0	1372	0	10	0.45	0.45	50	0.636	0.0012
C01	0	1372	0	8	0.05	0.59	80	0.636	0.001
B10	0.5	2916	104	5	0.05	0.68	860	0.7041	3×10^{-4}
B11	0.5	2916	104	5	0.05	0.70	4400	0.7070	1.1×10^{-4}
C10	0.5	1372	49	10	0.05	0.68	850	0.7034	6.1×10^{-4}
C11	0.5	1372	49	10	0.05	0.67	2200	0.7061	7×10^{-4}
D10	0.5	700	25	20	0.05	0.68	850	0.7034	10^{-3}
B20	0.7	2916	232	5	0.05	0.69	120	0.7164	10^{-3}
B21	0.7	2916	232	3	0.05	0.69	1650	0.7207	4×10^{-4}
C20	0.7	1372	109	10	0.05	0.70	180	0.7165	9.6×10^{-4}
D20	0.7	704	56	20	0.05	0.69	270	0.7165	1.2×10^{-3}
D21	0.7	704	56	20	0.05	0.69	850	0.7185	1.05×10^{-3}
E20	0.7	352	28	40	0.05	0.69	100	0.7143	2×10^{-3}

TAB. 1 – Différentes séries d'échantillons. N est le nombre total de billes, p la proportion en volume de grosses billes, N_2 leur nombre, M le nombre d'échantillons. L'étape LS donne lieu à n_{coll} collisions par particule pour compacter de Φ_0 à Φ_1, et la compacité finale obtenue, après l'étape de calcul par DM (à partir de Φ_1) est $\langle\Phi^*\rangle$ en moyenne, l'écart-type étant $\Delta\Phi^*$.

vue en coupe d'un échantillon de 2916 billes (dont 232 grosses) dans un état de maximum de la compacité, dont la figure 2 donne une vue en perspective. Les résultats de compacité sont présentés sur la figure 3, en fonction de $N^{-1/2}$ (qui donne des variations à peu près linéaires de la moyenne et de l'écart-type de Φ^* selon les relations 1 et 2). Les tailles d'échantillon étudiées sont tout aussi représentatives avec le mélange binaire que dans le cas monodispersé : on ne constate ni une dépendance en N, ni un niveau de fluctuations de Φ^* sensiblement plus élevé dans le mélange. Suite à un réglage progressif des paramètres de l'étape L-S, le nombre de collisions par particule lors de cette phase d'agitation et gonflement est variable entre les différentes séries d'échantillons (tableau 1). Toutefois, une tendance se dégage nettement : plus l'étape d'agitation se prolonge dans le processus d'assemblage, plus la compacité finale sera élevée – résultat encore analogue au cas monodispersé.

Au-delà de la seule valeur de la compacité, la simulation numérique – en particulier lorsque l'on poursuit les calculs, comme nous l'avons fait ici, jusqu'à obtenir de bons états d'équilibre mécanique – fournit bien d'autres informations. On a ainsi accès au réseau des contacts et aux forces qu'ils transmettent. Le tableau 2 donne les différents nombres de coordination z_{ij}, définis comme le nombre moyen de contacts d'une particule d'espèce i ($i = 1$ pour les petites, $i = 2$

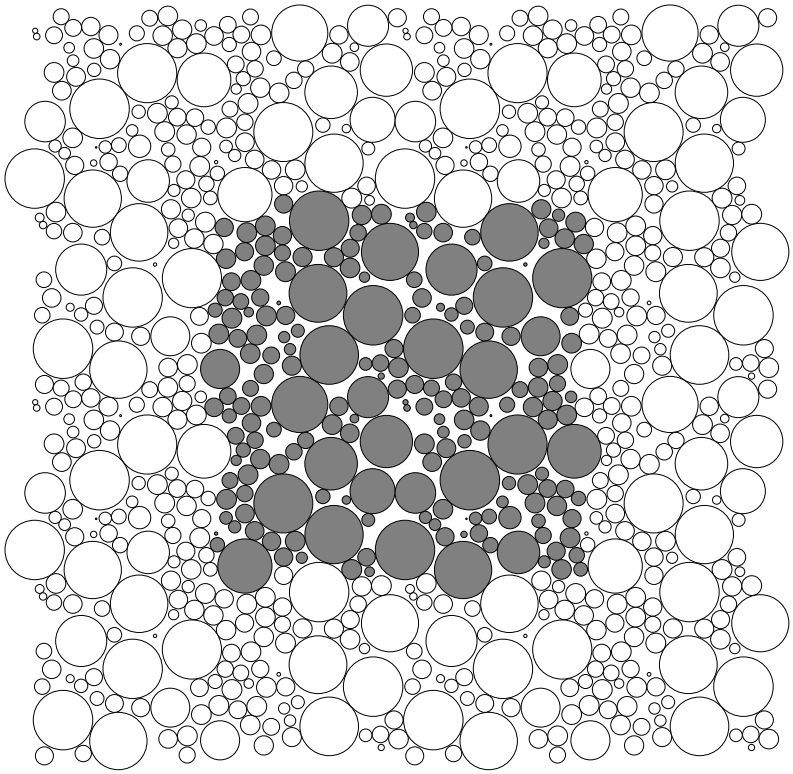

FIG. 1 – Vue en coupe d'un échantillon avec $N = 2916$ et $N_2 = 232$. Les particules figurées en gris appartiennent à la cellule de base dans laquelle sont conduits les calculs, et qui se répète périodiquement.

pour les grosses) avec des voisines d'espèce j[3]. Une certaine proportion x_0 des $N_1 = N - N_2$ petites billes ne transmet aucune force, alors que toutes les grosses sont sollicitées (c'est-à-dire que les contraintes d'exclusion stérique sont actives). D'autre part, le tableau 3 donne les valeurs en unités de Pd^2, P étant la pression appliquée, des moyennes des forces F_{ij} et des rapports $F_{ij}^{(2)}$ entre écarts-types et moyennes (caractéristiques de la largeur de la distribution, $\frac{\Delta F}{\langle F \rangle}$) pour les contacts entre une bille d'espèce i et une autre d'espèce j. Ces données concernant le réseau des contacts, conformément aux résultats pour la compacité, indiquent que les assemblages granulaires obtenus, hormis une légère influence de la durée de la phase d'agitation, peuvent

[3]On a bien sûr

$$\frac{z_{21}}{z_{12}} = \frac{1-p}{p}\left(\frac{D}{d}\right)^3$$

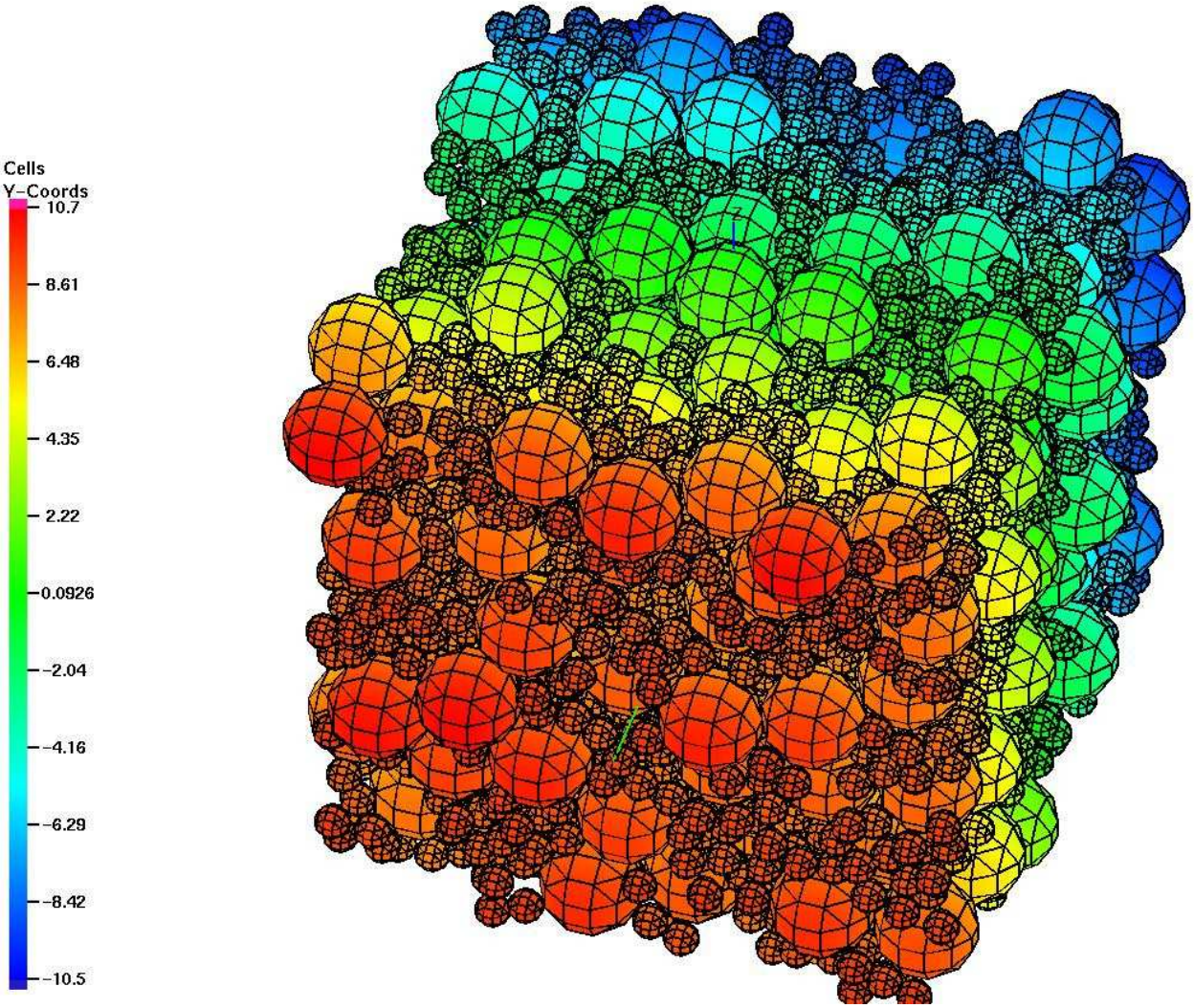

FIG. 2 – Vue en perspective d'un échantillon avec $N = 2916$ et $N_2 = 232$.

bien être considérés comme préparés dans le même état, dont l'échantillonnage statistique est satisfaisant, indépendamment de N dans l'intervalle étudié. Dans la limite des faibles pressions ou des billes rigides, on doit avoir [6] un nombre de coordination moyen z^*, évalué avec les seules sphères qui portent des forces, égal à 6 :

$$z^* = \frac{N_1}{N - x_0 N_1}(z_{11} + z_{12}) + \frac{N_2}{N - x_0 N_1}(z_{21} + z_{22}) = 6, \tag{3}$$

correspondant à un réseau de contacts isostatique. Les résultats du tableau 2 sont proches de satisfaire cette condition, ce qui montre que la géométrie d'un assemblage de grains très faiblement déformables en contact est décrite avec précision.

Le tableau 2 montre aussi que les échantillons préparés avec une plus longue étape d'agitation (ceux dont le code se termine par ¡¡ 1 ¿¿, voir le tableau 1), et qui possèdent une compacité plus élevée, présentent apparemment certaines prémices de ségrégation : le nombre de coordination z_{22} est plus grand, signe que les grosses particules se rassemblent. Il conviendrait bien

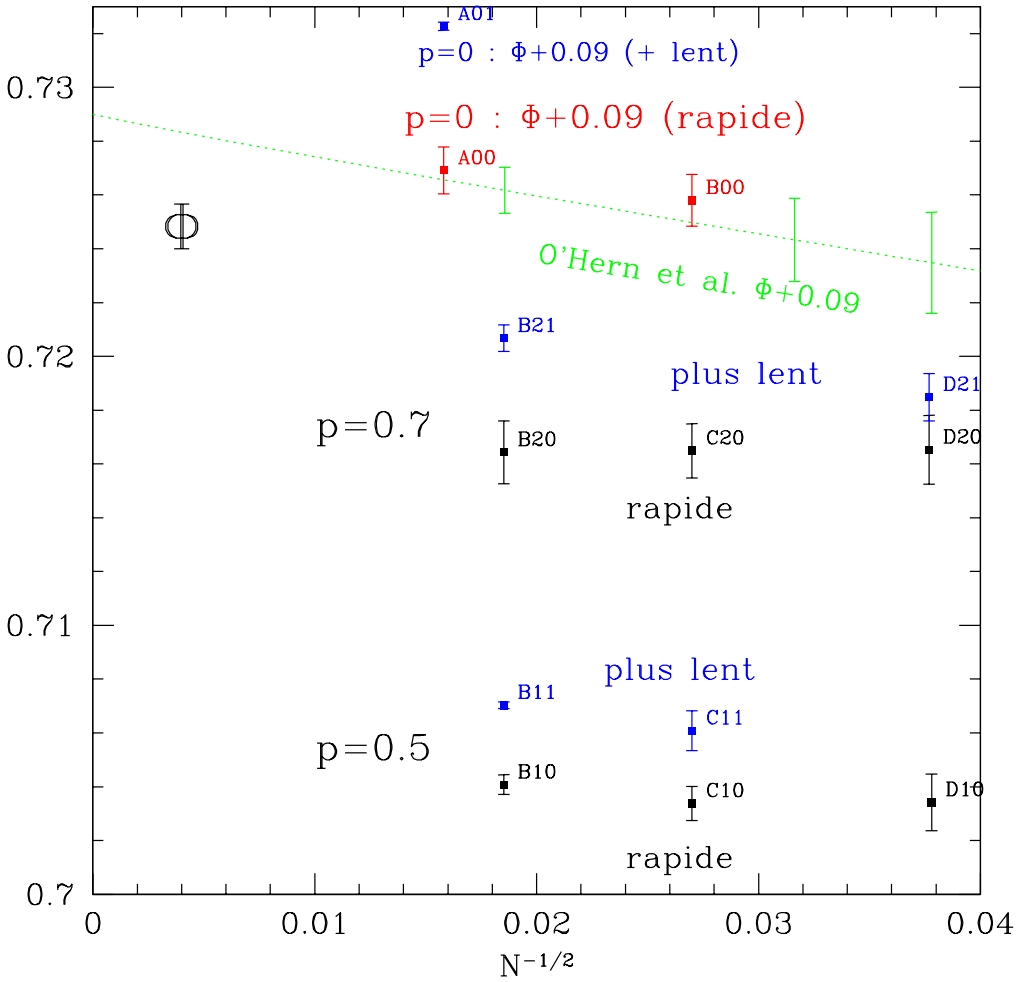

FIG. 3 – Compacité maximale Φ^* représentée fonction de $1/\sqrt{N}$ pour les valeurs $p = 0.5$ et $p = 0.7$ étudiées (les barres d'erreurs s'étendent ici sur un écart-type de part et d'autre de la moyenne). Les codes indiqués sont ceux du tableau 1, et on a distingué par la couleur bleue les calculs pour lesquels une phase d'agitation prolongée a augmenté la valeur de la compacité finale, par comparaison aux processus d'assemblages rapides. Pour faire figurer sur le même graphe les résultats sur les systèmes monodispersés, on a décalé les valeurs de Φ^* correspondantes de 0.09 vers le haut. Les résultats de [26], résumés par les relations (1) et (2), sont figurés en vert.

sûr, au-delà de cette étude préliminaire, d'étudier ce phénomène de plus près, et d'examiner si la tendance peut être poussée plus avant. Ces mêmes échantillons se distinguent également par un rôle accru des contacts entre gros grains dans la transmission des forces : la valeur de F_{22} (tableau 3) montre que ces contacts sont non seulement plus nombreux, mais aussi davantage sollicités.

La force normale de contact f_{kl} entre le grain k et son voisin l, dans la présente approche, sont des grandeurs *géométriques*, des multiplicateurs de Lagrange associés à la contrainte d'impénétrabilité.

Code	z_{11}	z_{12}	z_{21}	z_{22}	z^*	x_0
A00					6.074	1.3%
B10	4.11 ± 0.03	0.877 ± 0.003	23.7 ± 0.8	2.34 ± 0.05	6.068	5.6%
B11	4.08 ± 0.04	0.876 ± 0.014	23.7 ± 0.1	2.48 ± 0.1	6.064	6.1%
C10	4.08 ± 0.06	0.890 ± 0.018	24.0 ± 0.5	2.24 ± 0.19	6.061	5.7%
C11	4.12 ± 0.04	0.885 ± 0.023	23.9 ± 0.6	2.47 ± 0.12	6.089	5.4%
D10	4.09 ± 0.05	0.884 ± 0.026	23.9 ± 0.7	2.30 ± 0.3	6.058	5.5%
B20	2.76 ± 0.05	1.35 ± 0.015	15.6 ± 0.2	3.33 ± 0.05	6.055	13.6%
B21	2.65 ± 0.05	1.33 ± 0.02	15.3 ± 0.2	3.73 ± 0.13	6.053	15.7%
C20	2.74 ± 0.04	1.37 ± 0.02	15.9 ± 0.2	3.44 ± 0.10	6.079	13.6%
D20	2.62 ± 0.07	1.38 ± 0.04	15.9 ± 0.5	3.48 ± 0.25	6.045	14.7%
D21	2.66 ± 0.11	1.37 ± 0.04	15.9 ± 0.4	3.53 ± 0.23	6.049	14.4%
E20	2.70 ± 0.15	1.36 ± 0.06	16 ± 0.7	3.37 ± 0.32	6.043	14.0%

TAB. 2 – Nombres de coordinations, proportion x_0 de petites billes inactives. Notations définies dans le texte.

Code	F_{11}	F_{12}	F_{22}	$F_{11}^{(2)}$	$F_{12}^{(2)}$	$F_{22}^{(2)}$
B10	0.827	1.24	4.47	1.32	1.36	1.14
B11	0.780	1.24	4.88	1.36	1.41	1.15
C10	0.823	1.25	4.51	1.33	1.38	1.17
C11	0.796	1.21	4.80	1.34	1.40	1.15
D10	0.829	1.24	4.51	1.33	1.36	1.15
B20	0.960	1.43	4.93	1.45	1.51	1.18
B21	0.800	1.30	5.70	1.55	1.62	1.19
C20	0.951	1.41	4.81	1.44	1.49	1.19
D20	0.931	1.38	5.08	1.45	1.52	1.17
D21	0.901	1.36	5.18	1.45	1.52	1.18
E20	0.953	1.39	5.04	1.44	1.49	1.18

TAB. 3 – Forces moyennes, écart-type réduit des distributions de force, par familles de contacts. Notations définies dans le texte.

Si le rayon du grain k subit une petite variation δR, alors le volume du système tout entier, si la liste des contacts reste inchangée (ce qui est toujours possible dans un échantillon fini avec un δR assez petit), varie au premier ordre de

$$\delta V = \sum_l \frac{f_{kl}}{P} \delta R. \tag{4}$$

De plus, le rapport f_{kl}/P dépend dans la limite des grains rigides de la seule géométrie du paquet de billes en contact, du fait de l'isostaticité de cette structure [6]. On conçoit donc que ce type de résultats puisse fournir des indications pour la recherche de granulométries optimales, l'équation (4) pouvant donner une idée de l'effet d'une variation de la distribution des diamètres. En particulier, il est bien sûr possible d'augmenter la taille des billes (au nombre

de x_0N_1) qui ne portent aucune force. De telles approches discrètes permettraient d'explorer le sens précis de diverses notions (¡¡ classe granulaire dominante ¿¿, ¡¡ effet de paroi ¿¿, ¡¡ effet de desserrement ¿¿...) introduites dans le modèle de de Larrard [1], utilisé pour la formulation des ciments et des bétons.

5 Conclusion et perspectives

Nous avons établi que la méthode de simulation utilisée permet d'obtenir de bons échantillons représentatifs pour les mélanges binaires considérés. La détermination de la compacité est relativement aisée, même pour des échantillons de quelques centaines de grains, lorsque le nombre de gros est de l'ordre de la dizaine. La compacité, pour le mélange binaire comme dans le cas monodispersé, augmente lorsque le processus d'assemblage comporte une phase d'agitation prolongée. Cet effet, bien que relativement modéré, se dégage nettement des marges d'incertitude statistiques. La compacité maximale usuelle correspond alors à la limite des assemblages rapides.

L'étude des état de compacité maximale peut être poursuivie et généralisée à diverses granulométries, en particulier grâce aux performances croissantes des ordinateurs et au calcul parallèle (pour lequel le LMSGC s'est doté d'une machine spécifique). Il sera particulièrement intéressant de relier certaines valeurs caractéristiques de la compacité (valeur maximale, valeur critique...) à diverses propriétés rhéologiques (dilatance, viscosité, frottement interne), éventuellement couplées à la ségrégation, des assemblages de grains seuls ou en présence d'un fluide. La simulation numérique des suspensions et des pâtes granulaires (suspensions très concentrées) est l'objet de recherches en cours au LMSGC (A. Lemaître, A. Hammouti, J.-N. Roux, P.-E. Peyneau) et au LCPC-Nantes (N. Roquet).

Références

[1] F. de Larrard. *Concrete mixture proportioning, a scientific approach*. Routledge, London, 1999.

[2] David Muir Wood. *Soil Behaviour and Critical State Soil Mechanics*. Cambridge University Press, 1990.

[3] J.-N. Roux and F. Chevoir. Simulation numérique discrète et comportement mécanique des matériaux granulaires. *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées*, 254 :109–138, 2005.

[4] D.J. Cumberland and R.J. Crawford. *The Packing of Particles*. Elsevier, Amsterdam, 1987.

[5] D. Bideau and A. Hansen, editors. *Disorder and Granular Media*. Elsevier, 1993.

[6] J.-N. Roux. Geometric origin of mechanical properties of granular materials. *Physical Review E*, 61 :6802–6836, 2000.

[7] C. Thornton. Numerical simulations of deviatoric shear deformation of granular media. *Géotechnique*, 50 :43–53, 2000.

[8] H.A. Makse, D.L. Johnson, and L.M. Schwartz. Packing of compressible granular materials. *Physical Review Letters*, 84(18) :4160–4163, 2000.

[9] I. Agnolin and J.-N. Roux. Elasticity of sphere packings : pressure and initial state dependence. In García Rojo et al. [30], pages 87–91.

[10] I. Agnolin and J.-N. Roux. Isotropic granular packings : internal state and elastic properties. Article soumis pour publication à *Physical Review E*.

[11] I. Volkov, M. Cieplak, J. Koplik, and J. R. Banavar. Molecular dynamics simulations of crystallization of hard spheres. *Physical Review E*, 66(6) :061401, 2002.

[12] V. Luchnikov, A. Gervois, P. Richard, L. Oger, and J.-P. Troadec. Crystallization of dense hard sphere packings. *Journal of Molecular Liquids*, 96-97 :185–194, 2002.

[13] M. Nicolas, P. Duru, and O. Pouliquen. Compaction of a granular material under cyclic shear. *European Physical Journal E*, 3 :309–314, 2000.

[14] P. Bolhuis. *Liquid-like behavior in solids. Solid-like behavior in liquids.* PhD thesis, University of Utrecht, 1996.

[15] M. Dijkstra, R. van Roij, and R. Evans. Phase diagram of highly asymmetric binary hard-sphere mixtures. *Physical Review E*, 59 :5744–5771, 1999.

[16] P. M. Reis and T. Mullin. Granular Segregation as a Critical Phenomenon. *Physical Review Letters*, 89 :244301, 2002.

[17] S. Aumaître, T. Schnautz, C. A. Kruelle, and I. Rehberg. Granular pase transition as a precondition for segregation. *Pysical Review Letters*, 90 :114302, 2003.

[18] A. Kudrolli. Size separation in vibrated granular matter. *Reports on Progress in Physics*, 67 :209–247, 2004.

[19] P. Rognon, J.-N. Roux, M. Naaïm, and F. Chevoir. Écoulements granulaires bidispersés sur plan incliné. dans ce numéro du Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées.

[20] B. D. Lubachevsky and F. H. Stillinger. Geometric properties of random disk packings. *Journal of Statistical Physics*, 60 :561–583, 1990.

[21] B. D. Lubachevsky, F. H. Stillinger, and E. N. Pinson. Disks versus sheres : Contrasting properties of random packings. *Journal of Statistical Physics*, 64 :501–525, 1991.

[22] N. Benahmed. *Comportement mécanique d'un sable sous sollicitatins monotones et cycliques. Application aux phénomènes de liquéfaction et de mobilité cyclique.* PhD thesis, École Nationale des Ponts et Chaussées,, Champs-sur-Marne, 2001.

[23] N. S. Rad and M. T. Tumay. Factors affecting sand specimen preparation by raining. *ASTM Journal of Geotechnical Testing*, 10 :31–37, 1987.

[24] S. Emam, J.-N. Roux, J. Canou, A. Corfdir, and J.-C. Dupla. Granular packings assembled by rain deposition : an experimental and numerical study. In García Rojo et al. [30], pages 49–52.

[25] S. Emam, J. Canou, A. Corfdir, J.-C. Dupla, and J.-N. Roux. élaboration et comportement mécanique de matériaux granulaires solides modèles : expériences et simulations numériques. In B. Cazacliu and J.-N. Roux, editors, *Rhéologie des pâtes et des matériaux granulaires*, volume à paraître of *Études et Recherches des Laboratoires des Ponts et Chaussées*. Presses du LCPC, 2006.

[26] C. O'Hern, L. E. Silbert, A. J. Liu, and S. R. Nagel. Jamming at zero temperature and zero applied stress : The epitome of disorder. *Physical Review E*, 68(1) :011306, 2003.

[27] S. Torquato, T. M. Truskett, and P. G. Debenedetti. Is random close packing well defined ? *Physical Review Letters*, 84 :2064–2067, 2000.

[28] A. R. Kansal, S. Torquato, and F. H. Stillinger. Diversity of order and densities in jammed hard-particle packings. *Physical Review E*, 66(4) :041109, 2002.

[29] G. Ovarlez, F. Bertrand, and S. Rodts. Local determination of the constitutive law of a dense suspension of noncolloidal particles through magnetic resonance imaging. *Journal of Rheology*, 50 :259–292, 2006.

[30] R. García Rojo, H. J. Herrmann, and S. McNamara, editors. *Powders and Grains 2005*, Leiden, 2005. Balkema.