Étude par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires humides faiblement contraints

Vincent Richefeu

Laboratoire de Mécanique et Génie Civil, UMR CNRS 5508 – Cc. 048 – Université Montpellier 2 – Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier Cedex 5

RESUME. L'étude porte sur la modélisation du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs sous faibles niveaux de chargement. Le sujet est abordé par des approches numérique (méthode en éléments discrets), expérimentale et théorique. Un code de calcul tridimensionnel (nommé tapio-K) a été mis au point avec comme spécificité d'intégrer plusieurs lois de cohésion. La comparaison d'essais expérimentaux et numériques de cisaillement direct d'échantillons de billes de verre a permis la validation du code de calcul. La réalisation d'essais faiblement contraints permet de juger de l'influence de la cohésion capillaire. Un dispositif mettant en œuvre des faibles niveaux de contraintes a été réalisé. Les mesures obtenues à l'aide de ce dispositif, les simulations numériques ainsi qu'une analyse théorique ont permis de mettre en évidence l'importance de la distribution du liquide au sein d'un matériau granulaire humide (phase liquide discontinue) sur la résistance au cisaillement. Enfin, une autre application portant sur la vidange d'un matériau granulaire humide est présentée pour montrer la capacité du code de calcul à gérer des situations qui relèvent d'un régime dynamique.

MOTS-CLÉS : Simulations 3D-DEM, cohésion capillaire, cisaillement faiblement contraint.

ABSTRACT. This work concerns the modelling of the mechanical behavior of granular materials at low loading levels. Numerical (Discrete Element Method), experimental and theoretical approaches are used. A three-dimensional numerical code (called tapio-K) able to integrate capillary cohesion law, was developped. This code was validated by comparison between experimental and numerical shear tests. Weakly confined shear tests make it possible to assess the influence of capillary cohesion. An experimental setup implementing low stresses was conceived. The measurements obtained from this setup, the simulation results and a theoretical analysis show the crucial role of liquid distribution in the bulk (discontineous liquid phase) on the shear stress. Finally, another application concerning the discharge of a wet granular material is presented in order to demonstrate the ability of the code to manage dynamic situations.

KEYWORDS : 3D-DEM simulations, capillary cohesion, weakly confined shear test.

1. INTRODUCTION

Les matériaux granulaires correspondent à toute une classe de matériaux qui présentent un caractère divisé. Ce caractère permet d'afficher une identité propre à chaque « grain » ou « particule », et par conséquent une cinématique et un comportement mécanique spécifiques à cette échelle. L'étude de ces milieux peut donc intégrer cette identité propre à chaque grain à travers ses propriétés de composition, de forme, de taille ou encore d'état de surface. Par ailleurs, une telle étude nécessite une définition rigoureuse des interactions de chaque grain avec ses voisins proches à travers le contact, le frottement ou encore la cohésion. Des actions extérieures comme l'humidité, la température et la pression peuvent également agir sur l'évolution de ces interactions. Toutes ces spécificités des matériaux granulaires incitent à développer des approches et des techniques adéquates afin d'appréhender toute leur complexité ainsi que leurs propriétés souvent surprenantes (Radjaï *et al.*, 2005 ; Duran, 2003). L'intérêt des scientifiques pour les matériaux granulaires est

justifié par la place très importante qu'ils occupent dans notre environnement naturel à travers des exemples comme les sols, les roches, les céréales etc. Par ailleurs, de multiples procédés industriels de transformations mettent en oeuvre des matériaux granulaires comme des comprimés pharmaceutiques, des produits agro-alimentaires, des matériaux de construction (Cleary & Sawley, 2002 ; Bika *et al.*, 2001 ; Iveson *et al.*, 2002).

L'approche en éléments discrets, en configuration tridimensionnelle, a été choisie pour aborder la problématique du comportement mécanique de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints. Un code de calcul (nommé tapio-K) a été mis au point ainsi que plusieurs modules de pré-traitement, de post-traitement et de visualisation des résultats dans le cadre adapté (Richefeu, 2004).

La section 2 de cet article donne les éléments de modélisation qui ont été nécessaires à la mise au point du code de calcul. Dans la section 3, on présente des résultats expérimentaux et numériques de cisaillement faiblement contraint réalisés sur des matériaux granulaires humides. Une analyse théorique basée sur la micromécanique permet d'analyser l'ensemble des résultats et d'en proposer une interprétation. La section 4 aborde le cas de la vidange d'un matériau granulaire humide dans une configuration bidimensionnelle. Cette application permet notamment de montrer les potentialités du code de calcul tapio-K dans une situation dynamique.

2. METHODE DES ELEMENTS DISCRETS

Les méthodes en éléments discrets permettent l'étude de collections de grains en interaction. La méthode numérique utilisée est basée sur la méthode de Dynamique Moléculaire (Cundall, 1979 ; Allen & Tildesley, 1987 ; Poschel, 2005). Elle consiste à intégrer le mouvement de chacune des particules tout en tenant compte de leurs d'interactions qui peuvent être de différentes natures. La caractérisation et la modélisation de ces interactions constituent un point clé de ces méthodes car elles sont à la base d'une bonne prédiction du comportement macroscopique d'un matériau granulaire. On présente, dans cette section, les lois utilisées pour les interactions de contact, de cohésion, et de frottement pour des grains sphériques. On mettra l'accent sur la loi de cohésion capillaire qui présente un grand intérêt pour l'étude des milieux granulaires humides en général et pour les sols non saturés dans l'état pendulaire en particulier.

2.1. LOIS DE CONTACT ET DE FROTTEMENT

Dans ce travail, la loi normale de contact est modélisée par l'association en parallèle d'un ressort et d'un amortisseur. La force normale de contact s'écrit :

$$F_n^{ctc} = -K_n D_n + \nu \dot{D}_n \qquad \text{[Eq. 1]}$$

où D_n est la distance normale (négative ou nulle lorsque les grains sont en contact), K_n est la raideur normale et ν est le coefficient d'amortissement.

La loi de frottement utilisée relie la force tangentielle $\vec{F}_\pi$ de frottement à la vitesse de glissement $\vec{V}_g$. La force de frottement, contenue dans le plan tangent d'interaction, agit dans une

direction opposée à la vitesse de glissement lorsque les grains sont en contact conformément à l'expression suivante :

$$\vec{F}_\pi = -\min\left\{K_t\left\|\vec{V}_g\right\|,\ \mu F_n^{ctc}\right\}\frac{\vec{V}_g}{\left\|\vec{V}_g\right\|} \qquad \text{[Eq. 2]}$$

où K_t est le coefficient de régularisation tangentielle et μ est le coefficient de frottement entre grains.

2.2. LOI DE COHESION CAPILLAIRE

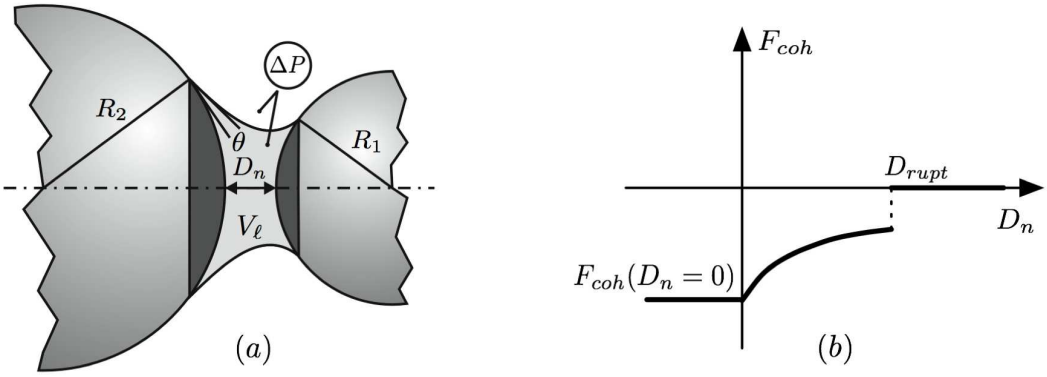

Figure 1 : Loi de cohésion capillaire ; a) Paramètres physiques et géométriques d'un pont capillaire, b) Comportement typique de la force capillaire en fonction de la distance normale.

En présence d'eau, les grains peuvent être reliés par un pont liquide comme illustré sur la figure 1a. Ce pont liquide donne naissance à une force de nature attractive entre les grains appelée force de cohésion capillaire. Cette force résulte de l'action combinée de la différence de pression entre les phases liquide et gazeuse et de la tension de surface γ du liquide (Pierrat *et al.*, 1997 ; Mikami *et al.*, 1998 ; Willett *et al.*, 2000). On utilise l'expression explicite de la loi de cohésion capillaire proposée par Soulié *et al.* (2006) dans le cas polydisperse (figure 1b). Cette loi, exprimant la force capillaire en fonction de la distance normale D_n, est donnée par :

$$\begin{cases} F_{coh} = -\pi\gamma\sqrt{R_1R_2}\left\{\exp(B)+C\right\} & \text{si } D_n \le 0 \\ F_{coh} = -\pi\gamma\sqrt{R_1R_2}\left\{\exp(AD_n/R_2+B)+C\right\} & \text{si } 0 < D_n < D_{rupt} \\ F_{coh} = 0 & \text{si } D_n \ge D_{rupt} \end{cases} \qquad \text{[Eq. 3]}$$

où R_1 et R_2 sont les rayons des grains ($R_1 < R_2$) ; A, B et C sont des paramètres qui dépendent du volume V_ℓ du pont liquide et de l'angle de mouillage θ ; et D_{rupt} est la distance de rupture. Lian *et al.* (1993) ont proposé, à partir de l'étude théorique d'un pont liquide entre deux sphères, un critère de rupture en définissant la distance de rupture par la relation suivante :

$$D_{rupt} = (1+0{,}5\theta)V_\ell^{1/3} \qquad \text{[Eq. 4]}$$

Ce critère, validé sur des expérimentations locales (Soulié, 2005) a été adopté. Pour compléter la loi de cohésion capillaire, il est nécessaire de définir un critère pour la formation d'un pont liquide. On considère qu'un pont liquide peut se former (ou se reformer) lorsque les grains sont en contact ($D_n \le 0$). Sur le plan numérique, la difficulté principale vient de la gestion de la distribution du volume total d'eau de l'échantillon entre les grains, i.e. la détermination des volumes locaux des ponts capillaires. Dans les simulations numériques présentées dans ce papier, le volume total de d'eau est

distribué au niveau de tous les liens possibles de l'échantillon au prorata des rayons des grains concernés. On effectue ainsi une gestion globale et homogène de la distribution de l'eau, ce qui permet de relier aisément le volume V_ℓ à la teneur en eau macroscopique. Une gestion locale de la redistribution de l'eau peut être envisagée. De tels modèles ont été proposés par Richefeu (2005). Il est important de noter que cette distribution joue un rôle très important dans la résistance mécanique du matériau comme on le verra par la suite. Cependant, cette information reste difficilement accessible expérimentalement pour un matériau réel.

3. CISAILLEMENT DIRECT FAIBLEMENT CONTRAINT

Dans l'optique de comparer les résultats expérimentaux à des simulations numériques où les grains sont peu nombreux par rapport à la réalité, il est nécessaire de considérer des confinements très faibles (Richefeu *et al.*, 2005). Pour envisager une telle configuration, des modifications ont été apportées à l'essai de cisaillement à la boîte de Casagrande normalisé afin de mesurer la résistance au cisaillement de matériaux granulaires à des pressions de confinement très faibles (inférieures à 1 kPa). On présente dans cette section les principaux résultats expérimentaux et numériques obtenus. Ces résultats seront analysés à travers une expression théorique de la cohésion de Coulomb issue d'une analyse microscopique.

3.1. EXPERIENCES ET SIMULATIONS

La figure 2a montre le schéma de principe du dispositif réalisé, ses dimensions ainsi que certaines notations utilisées. Une contrainte normale $\sigma = g(m_N/S + \rho h_{sup})$ est appliquée à l'échantillon par l'intermédiaire d'un flasque dont la masse m_N peut être modifiée en y ajoutant du sable par exemple. Une contrainte de cisaillement $\tau = m_T g/S$ est appliquée par incréments en remplissant progressivement une coupelle reliée à la partie mobile de la boîte par un système de poulie. La contrainte atteinte lors de la rupture de l'échantillon est retenue comme contrainte de rupture au cisaillement. Comme pour l'essai de cisaillement à la boîte de Casagrande, Plusieurs essais réalisés à différentes contraintes normales permettent de définir une enveloppe de rupture dans le plan de Mohr-Coulomb.

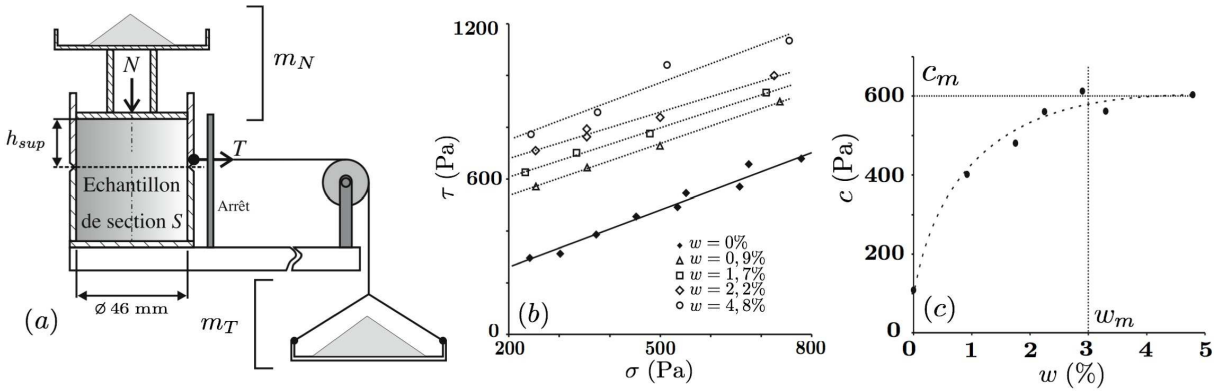

Figure 2 : Résultats expérimentaux ; a) Appareillage, b) enveloppes de rupture pour un sable, c) cohésion de Coulomb en fonction de la teneur en eau.

La figure 2b montre les enveloppes de rupture obtenues sur un sable constitué de grains anguleux de diamètres compris entre 0,1 mm et 0,4 mm à différentes teneurs en eau w (rapport de la masse

d'eau sur la masse sèche). On peut noter que les points expérimentaux sont bien approchés par des droites, en accord avec le modèle de Mohr-Coulomb $\tau = \tan\varphi\,\sigma + c$, ce qui permet de les caractériser par deux paramètres : la cohésion c et l'angle de frottement interne φ. Cette figure montre également une bonne reproductibilité des expériences. L'angle φ ne semble pas varier sensiblement en fonction de w contrairement au paramètre de cohésion c qui augmente de façon non linéaire en fonction de la teneur en eau et se stabilise à une valeur c_m à partir d'une teneur en eau w_m (figure 2c). Pour les teneurs en eau supérieures à 5%, l'état du matériau sort largement du domaine.

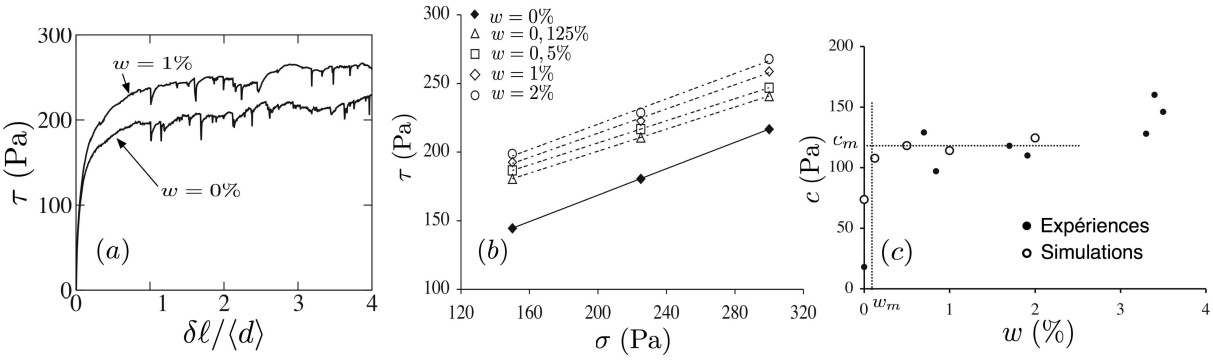

Figure 3 : Résultats issus des simulations numériques ; a) Relation contrainte-déformation pour w = 0% et w = 1% (σ = 300 Pa), b) Estimations des enveloppes de rupture, c) Evolution de la cohésion en fonction de la teneur en eau (expériences réalisées sur des billes de verre de 1 mm).

Les essais numériques sont, dans leur principe, similaires aux essais expérimentaux (même niveau de chargement, mêmes dimensions de la boîte…). Un échantillon numérique de 7307 grains sphériques a été réalisé à une compacité $\phi = 0{,}6$. À partir de cet échantillon, les différentes teneurs en eau ont été obtenues en distribuant, sur tous les contacts, le volume de liquide approprié avec un critère basé sur la taille des grains. Une série de 15 simulations (3 contraintes normales et 5 teneurs en eau) a été effectuée. La figure 3a présente les courbes contrainte-déformation obtenues pour w = 0% et w = 1%. La contrainte de rupture retenue a été choisie égale à la contrainte résiduelle de cisaillement car la résistance au cisaillement atteignait une valeur stabilisée sans passer par une valeur de pic. Comme pour les expériences, on peut analyser l'évolution de la cohésion macroscopique en fonction de la teneur en eau. La figure 3b montre les estimations des enveloppes de rupture obtenues numériquement. On peut constater que le modèle numérique reproduit bien les observations qualitatives expérimentales, à savoir que la teneur en eau n'a pas d'influence sur l'angle de frottement interne et que la cohésion augmente de façon non linéaire et se stabilise à partir d'une teneur en eau relativement faible.

3.2. *ANALYSE THEORIQUE MICROMECANIQUE*

À partir d'une analyse micromécanique, une expression théorique de la cohésion de Coulomb a été établie (Richefeu et al., 2006). Cette expression s'écrit :

$$c^{th} = \frac{3}{4\pi} s\,\kappa\,\phi\, z \frac{\tan\varphi}{\langle D\rangle} \quad \text{avec} \quad s = \frac{\langle D^{1/2}\rangle\langle D\rangle\langle D^{3/2}\rangle}{\langle D^{3}\rangle} \qquad \text{[Eq. 5]}$$

où κ est un paramètre qui dépend de la tension superficielle de l'eau et de l'angle de mouillage, s est un facteur lié à la polydispersité du matériau, z est le nombre moyen de ponts liquides par grain, et $\langle D\rangle$ est le diamètre moyen des grains. La validité de cette expression a été démontrée en comparant les

valeurs théoriques prédites de la cohésion aux mesures expérimentales (4 matériaux) et numériques (Tableau 1). En outre, cette comparaison montre que le modèle numérique donne des résultats en accord quantitatif avec les expériences.

	Sable	BV1[a]	BV2[b]	BV3[c]	Simulations
$\langle D \rangle$ (mm)	0,16	0,45	0,60	1,00	1,65
s	0,50	0,99	0,91	1,00	0,79
z	6	6	6	6	9
ϕ	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
tan φ	0,66	0,58	0,58	0,46	0,48
c_m (Pa)	600	350	300	150	120
c^{th} (Pa)	709	438	302	158	118

[a] Billes de verre de diamètres compris entre 0,4 et 0,5 mm
[b] Billes de verre de diamètres compris entre 0,4 et 0,8 mm
[c] Billes de verre de diamètre 1 mm

Tableau 1 : Paramètres mesurés et théoriques pour les échantillons expérimentaux et numériques.

4. ÉTUDE DE CAS : VIDANGE D'UN MATERIAU GRANULAIRE COHESIF

On étudie, dans cette section, l'influence de la cohésion capillaire sur l'écoulement d'un matériau granulaire ainsi que sur l'angle de repos. À cette fin, des simulations bidimensionnelles ont été réalisées à partir du code tapio-K qui intègre également les fonctionnalités 2D. Le principe de ces simulations est illustré sur la figure 4. Le matériau granulaire (disques de diamètres compris entre 0,6 et 1,4 mm) est disposé dans le compartiment supérieur d'une boîte à deux compartiments. La base de ce compartiment est munie d'une trappe qui permet de laisser s'écouler le matériau vers le compartiment inférieur. Le fond du compartiment supérieur est constitué d'une couche de grains dont la position est bloquée, ce qui lui procure une certaine rugosité. Pendant l'écoulement, le taux de passage des grains T_g est mesuré. Il correspond au rapport du nombre de grains dans le compartiment inférieur sur le nombre total de grains. À la fin de l'essai, on mesure l'angle de repos θ_R sur les tas de part et d'autre de la trappe.

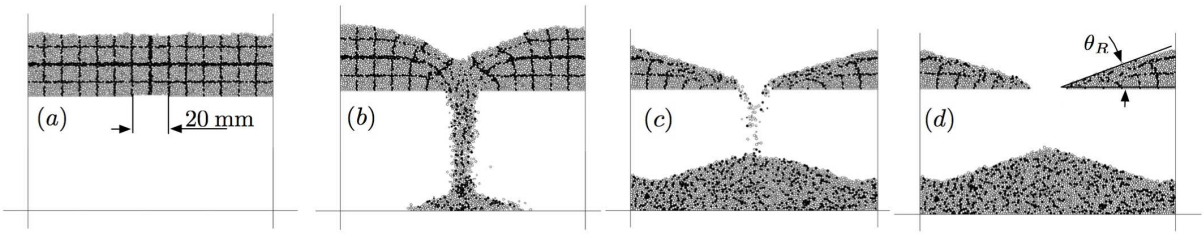

Figure 4 : Configuration du système à quatre instants d'une simulation réalisée sans cohésion ; a) Etat initial, b) Flux global, c) Flux de surface, d) Etat final.

4.1. REGIMES D'ECOULEMENT

L'aspect le plus frappant lorsque l'on visualise les simulations d'écoulement d'un matériau granulaire cohésif est la distinction entre différents « comportements » de l'écoulement. Dans le domaine pendulaire, on peut distinguer trois régimes d'écoulement liés à la cohésion de Coulomb. Notons que cette cohésion augmente lorsque, par exemple, le diamètre moyen des grains diminue, le facteur s de polydispersité augmente ou le nombre moyen z de pont liquide par grain augmente (voir Eq. 5). Par ordre croissant du niveau de cohésion, on atteint le régime d'écoulement : (i) *granulaire*

qui est similaire au cas sec (figure 5a) ; (ii) *aggloméré* où des agrégats de tailles variables constituent une surface libre rugueuse (figure 5b) ; (iii) *plastique* qui s'effectue avec un mouvement d'ensemble cohérent des grains (figure 5c).

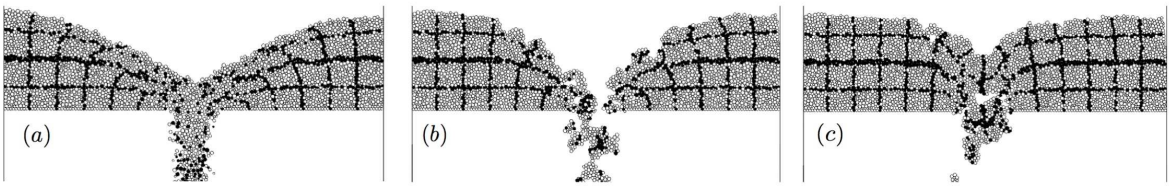

Figure 5 : Observation qualitative des trois régimes d'écoulement ; a) Régime d'écoulement granulaire, b) Régime d'écoulement aggloméré, c) Régime d'écoulement plastique.

La figure 6a montre l'évolution du taux de passage T_g des grains pour 3 teneurs en eau. On n'observe aucune distinction entre les deux cas humides bien que les teneurs en eau soient éloignées. On note cependant une différence nette entre le cas sec et les cas humides. Les régimes de la figure 5 ont été obtenus en augmentant « artificiellement » le niveau de la force cohésive entre les grains. Avec la cohésion capillaire, une augmentation de la teneur en eau n'induit pas d'augmentation des forces locales de cohésion. Cette remarque permet d'expliquer les observations précédentes.

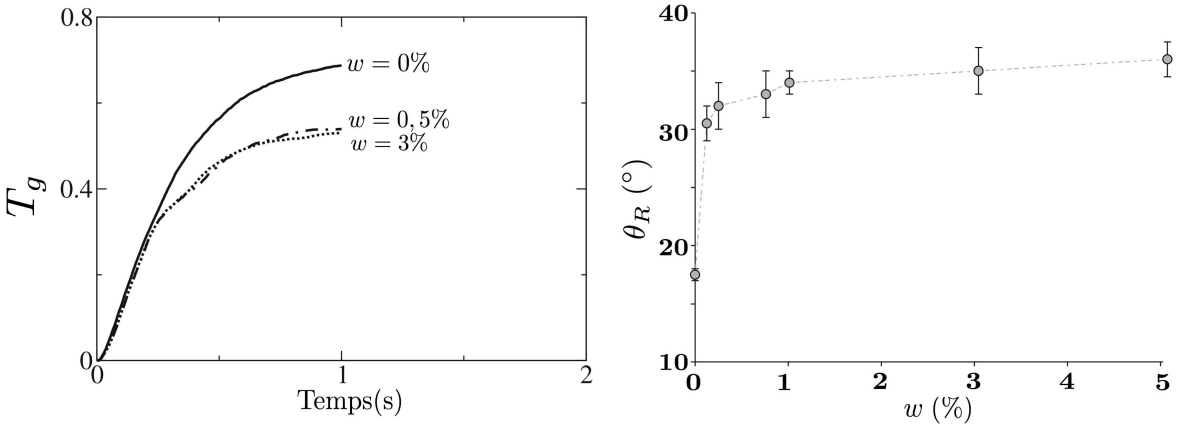

Figure 6 : Résultats avec la cohésion capillaire ; a) Taux de passage des grains, b) Angle de repos en fonction de la teneur en eau.

L'angle de repos θ_R est représenté sur la figure 6b en fonction de la teneur en eau. On observe une augmentation très rapide de θ_R de 18° ($w = 0\%$) à environ 35° dès les plus faibles teneurs en eau (< 1%). Cette situation est liée au fait que la force de cohésion capillaire dépend très faiblement du volume des ponts liquides (Eq. 3). Finalement, c'est l'augmentation du nombre moyen z de ponts liquides par grain et non l'augmentation du volume des ponts liquides qui influence la cohésion de Coulomb (Eq. 5) et donc l'angle de repos.

5. CONCLUSIONS

Des expériences et des simulations basées sur la Méthode des Elements Discrets ont été utilisées dans le but d'étudier et d'analyser le comportement de matériaux granulaires humides non-saturés (état pendulaire) sous faibles niveaux de chargement. Il a été montré que la cohésion de Coulomb augmente avec la teneur en eau et qu'elle se stabilise à une valeur maximale qui ne dépend que de la nature du matériau. Une analyse théorique basée sur la micromécanique a permis, d'une part, de

valider la modélisation numérique, et d'autre part, de souligner que l'augmentation de la résistance au cisaillement avec la teneur en eau était essentiellement due à une augmentation de la densité des ponts liquides, le volume de ceux-ci ne contribuant que très peu. L'étude du débit de matière et de l'angle de repos final sur un cas de vidange d'un matériau granulaire humide a été entreprise pour aborder le problème dans une situation dynamique.

6. BIBLIOGRAPHIE

Allen M.P., Tildesley D.J. (1987) « *Computer Simulation of Liquids* » Oxford Science Publications.

Bika D.G., Gentzler M., Michaels J.N. (2001) « Mechanical properties of agglomerates » *Powder Technology*, vol. 117, p. 98-112.

Cleary P.W., Sawley M.L. (2002) « DEM modelling of industrial granular flows : 3D case studies and effect of particle shape on hopper discharge » *Applied Mathematical Modelling*, vol. 26, p. 89-111.

Cundall P.A., Strack O.D.L. (1979) « A discrete numerical model for granular assemblies » *Géotechnique*, vol. 29, p. 47-65.

Duran J. (2003) « *Sables émouvants* », Belin, Paris, France.

Inveson S.M., Beathe J.A., Page N.W. (2002) « The dynamic strength of partially saturated powder compacts: the effect of liquid properties » *Powder Technology*, vol. 127, p. 149-161.

Lian G., Thornton C., Adams M.J. (1993) « A theoretical study of the liquid bridge forces between rigid spherical bodies » *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 161, p. 138-147.

Mikami T., Kamiya H., Horio M. (1998) « Numerical simulation of cohesive powder behavior in fluidized bed » *Chemical Engineering Science*, vol. 53(10), p. 1927-1940.

Poschel T., Schwager T. (2005) « Computational Granular Dynamics: Models and Algorithms » Springer, ISBN : 3540214852

Radjaï F., Richefeu V., Delenne J.Y., Soulié F., Taboada A., Nineb S. (2005) « *GranuloScience* », site internet dédié à la mécanique et la physique des matériaux granulaires. www.granulo-science.org

Richefeu V. (2004) « mgpost : logiciel de visualisation 3D et de post-traitement de calculs DEM », rapport interne LMGC, Montpellier. www.lmgc.univ-montp2.fr/~richefeu/

Richefeu V. (2005) « Approche par éléments discrets 3D du comportement de matériaux granulaires cohésifs faiblement contraints » Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2.

Richefeu V., El Youssoufi M.S., Peyroux R., Bohatier C. (2005) « Frictional contact and cohesion laws for Casagrande's shear test on granular materials by 3D-DEM – comparison with experiments » R. Garcia-Rojo, H.J. Herrmann & S. McNamara editors, *Powders and Grains 2005*, Stuttgart, 18-22 july, A.A. Balkema, p. 509-512.

Richefeu V., El Youssoufi M.S., Radjaï F. (2006) « Shear strength properties of wet granular materials » *Physical Review E*, à paraître.

Soulié F. (2005) « Cohésion par capillarité et comportement mécanique de milieux granulaires » Thèse de Doctorat, Université Montpellier 2.

Soulié F., Cherblanc F., El Youssoufi M.S., Saix C. (2006) « Influence of liquid bridges on the mechanical behavior of polydisperse granular materials » *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, vol. 30, p.213-228.

Willett C.D., Adans M.J, Johnson S.A., Seville J.P.K. (2000) « Capillary bridges between two spherical bodies » *Langmuir*, vol. 16, p.9396-9405.