

# Micro-mécanique des milieux granulaires triphasiques

J. DURIEZ<sup>a</sup>, R. WAN<sup>b</sup>

a. Irstea, Aix Marseille Univ, RECOVER, Aix-en-Provence (France); jerome.duriez@irstea.fr

b. Dept of Civil Engineering, University of Calgary, AB (Canada); wan@ucalgary.ca

## Résumé :

*Le comportement mécanique des milieux granulaires triphasiques, tels que les sols partiellement saturés en eau, est étudié en combinant deux approches micro-mécaniques : une homogénéisation analytique avec des simulations numériques aux Éléments Discrets. Par homogénéisation, on exprime les contraintes macroscopiques de ces matériaux à partir des forces de contact inter-grains, des deux pressions différentes des fluides, et des efforts de tension superficielle, tous présents à l'échelle microscopique. L'expression  $\mu$ UNSAT ainsi obtenue associe de manière générale un caractère tensoriel (non-sphérique) aux différentes contributions, en accord avec la microstructure du matériau. Un modèle numérique aux Éléments Discrets permet ensuite de mesurer ces différentes contributions dans le cas d'un milieu granulaire idéal en conditions humides. Les résultats numériques démontrent l'anisotropie des contraintes capillaires dues aux phases fluides, et, dans une certaine mesure, le caractère effectif des contraintes dues aux forces de contact.*

## Abstract :

*The mechanical behavior of triphasic granular media, such as unsaturated soils, is studied through a multi-scale approach combining analytical homogenization with Discrete Element Method simulations. Homogenization first expresses the macroscopic stress state of such a material starting from micro-scale inter-grains contact forces, the different fluid pressures, and surface tension. The resulting  $\mu$ UNSAT expression describes all these stress contributions through generic tensorial terms, according to the material's microstructure. A Discrete Element Method numerical model then enables one to access these stress quantities for ideal wet granular materials. The simulations demonstrate the tensorial, anisotropic, character of fluid-induced capillary stress, and the somewhat effective nature of the contact stress stemming from contact forces.*

**Mots clefs : Méthode aux Éléments Discrets (DEM); contrainte effective; régime pendulaire**

## 1 Introduction

Du génie civil à l'agro-alimentaire, en passant par les industries pharmaceutiques, un grand nombre de procédés industriels mettent en oeuvre des milieux granulaires dont la rhéologie est affectée par la

présence quasi-inévitable d'un mélange de deux fluides au sein de leur espace poral. En géotechnique par exemple, les sols granulaires qui servent souvent de matériau de fondation, voire de construction dans le cas de remblais, voient leur déformabilité et leur stabilité modifiées en cas de saturation partielle en eau, comme le montre l'exemple classique du château de sable. Alors qu'une interprétation du comportement partiellement saturé à partir d'une "contrainte effective" et des mêmes lois de comportement et critères de rupture déterminés en conditions sèches (ou saturées) serait d'un intérêt majeur, cet objectif n'a toujours pas été complètement atteint. Plusieurs travaux expérimentaux ou numériques [1, 2, 3, 4, 5, 6] ont d'un côté démontré la possibilité d'interpréter les états limites de contrainte des sols partiellement saturés à partir d'un critère de rupture déterminé en conditions sèches, et de l'estimation des contraintes dites capillaires, correspondant à la différence entre les contraintes macroscopiques, ou "totales", et les contraintes effectives propres au squelette solide, et auxquelles le critère de rupture des conditions sèches s'applique. D'un autre côté, l'application des lois de comportement des conditions sèches à la contrainte effective d'échantillons partiellement saturés ne permet toujours pas de rendre compte fidèlement des déformations observées dans de telles conditions [3], hormis peut être dans un domaine réduit de comportement élastique des sols [7, 8, 9].

On présente alors ici une synthèse des approches micro-mécaniques suivies précédemment dans [5, 6, 10, 11, 8, 9] sur cette question du comportement des milieux granulaires triphasiques, et des résultats obtenus au sujet des contraintes capillaires et effectives pour de tels matériaux. Du fait de l'importance de la microstructure sur le comportement mécanique des matériaux granulaires, de telles approches multi-échelles semblent particulièrement adaptées et on considère ici, premièrement, une démarche analytique d'homogénéisation des contraintes; ainsi que des simulations numériques selon la Méthode aux Éléments Discrets (DEM) de matériaux granulaires idéaux dans un état pendulaire de (faible) saturation.

L'ensemble de la communication adopte la convention de signe de la mécanique des sols, avec des contraintes et déformations positives en compression.

## 2 Homogénéisation $\mu$ UNSAT d'un milieu granulaire triphasique

On considère donc un Volume Élémentaire Représentatif (VER)  $V$  d'un matériau triphasique dont la phase solide  $s$ , de volume  $V_s$ , se compose d'un assemblage discret de particules de formes quelconques, et de taille caractéristique suffisamment faible pour que les effets capillaires et les conditions triphasiques aient une influence : par exemple, un sol de taille granulométrique de l'ordre du  $1/100^{\text{e}}$ , voire  $1/10^{\text{e}}$ , de mm. L'espace poral  $V_v = V \setminus V_s$  est lui constitué d'une juxtaposition de deux fluides immiscibles, l'un mouillant,  $w$  (par exemple de l'eau), et l'autre non-mouillant,  $n$  (par ex. de l'air), de volumes respectifs  $V_w$  et  $V_n$ . Les interfaces  $S_{\alpha\beta}$ ,  $\alpha$  et  $\beta \neq \alpha \in \{n; s; w\}$ , entre les différentes phases sont aussi prises directement en compte de même que les lignes triples  $\Gamma$ , point de rencontre des trois phases, afin de rendre compte des tensions superficielles  $\gamma$  existant, et qui constituent des efforts internes du matériau.

Les contraintes macroscopiques, ou totales, correspondant aux chargements imposés en frontière du VER ou à distance, correspondent alors à la moyenne des contraintes microscopiques existant au sein des différentes phases et interfaces :

$$\Sigma = \frac{1}{V} \left( \sum_{\alpha=n,s,w} \int_{V_\alpha} \sigma_\alpha dV + \sum_{\alpha,\beta=n,s,w} \int_{S_{\alpha\beta}} \pi_{\alpha\beta} dS \right) \quad (1)$$

Les états de contrainte des deux phases fluides  $\alpha \in \{n; w\}$  sont décrits par  $\sigma_\alpha = u_\alpha \delta$ , avec  $\delta$  le tenseur identité du second ordre, et  $u_\alpha$  les pressions de fluide, dont la différence définit la pression capillaire  $u_c = u_n - u_w$ , elle-même équivalente à la suction dans le cas présent de sols granulaires.

La contrainte de la phase solide est, elle, définie à partir des contraintes existant au sein de chaque grain, fonction des efforts s'exerçant à la surface de ceux-ci :

- des forces de contact  $\vec{f}^c$ , où on associe à chaque paire de grains en contact un vecteur  $\vec{l}$  reliant leurs deux centres (Fig. 1)
- des pressions de fluide  $-u_\alpha \vec{n}$  le long de  $S_{s\alpha}$ ,  $\alpha \in \{n; w\}$ , avec  $\vec{n}$  la normale sortante à  $S_{s\alpha}$
- des efforts (linéiques) de tension superficielle  $\gamma_{nw} \vec{\nu}$ , avec  $\vec{\nu}$  la conormale à  $S_{nw}$  (voir Fig. 1).

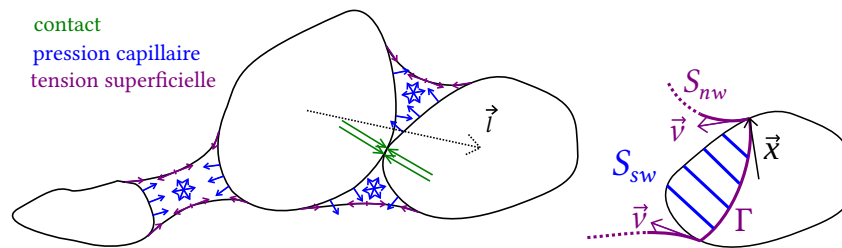


FIGURE 1 – Matériau granulaire triphasique vu à la petite échelle

Finalement, les interfaces sont le siège d'efforts internes de tension superficielle décrits tensoriellement par  $\pi_{\alpha\beta} = \gamma_{\alpha\beta} (\vec{n} \otimes \vec{n} - \delta)$ , et par ailleurs associés à des discontinuités des contraintes normales de part et d'autre de  $S_{\alpha\beta}$  [12, 10, 11].

Tous calculs faits, l'équation (1) mène finalement à l'expression  $\mu$ UNSAT suivante des contraintes [12, 10, 11] :

$$\Sigma - u_n \delta = \sigma^{cont} + \sigma^{cap} \quad (2)$$

$$\sigma^{cont} = \frac{1}{V} \sum_{cont.} \vec{f}^c \otimes \vec{l} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \sigma^{cap} &= -\frac{1}{V} \left[ u_c \left( V_w \delta + \int_{S_{sw}} \vec{n} \otimes \vec{x} dS \right) + \gamma_{nw} \left( \int_{S_{nw}} (\delta - \vec{n} \otimes \vec{n}) dS + \int_{\Gamma} \vec{\nu} \otimes \vec{x} dl \right) \right] \\ &= -\frac{1}{V} \left[ u_c (\mu V_w + \mu S_{sw}) + \gamma_{nw} (\mu S_{nw} + \mu \Gamma) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

L'approche  $\mu$ UNSAT permet donc d'arriver à une décomposition des contraintes en (2), entre des contraintes dites de contact, exprimées en (3) à partir des forces de contact, et des contraintes dites capillaires, exprimées en (4). Les contraintes de contact décrivent la partie des contraintes de la phase solide causée uniquement par les interactions (de contact) à l'intérieur de celle-ci, et seraient égales aux contraintes totales (moins la pression d'air) en conditions sèches. Les contraintes capillaires, elles, rassemblent toutes les contributions dues à la présence des deux phases fluides, selon une expression fortement différente d'autres travaux, e.g. [1, 2, 7], selon deux aspects. Premièrement, ces contributions présentent ici un clair caractère tensoriel (non-sphérique) dans le cas général, ce qui correspond par exemple à l'action de la pression capillaire (en tant que différence de pression) uniquement suivant les normales des surfaces mouillées, plutôt que de manière isotrope. Deuxièmement, la tension superficielle fluide-fluide  $\gamma_{nw}$  intervient directement dans l'expression des contraintes, là encore de manière tensorielle en fonction des orientations des interfaces  $S_{nw}$ , et de celles des lignes triples  $\Gamma$ . L'ensemble des

caractères microstructuraux d'importance, et leurs orientations, définissent en fait les contraintes capillaires via les tenseurs  $\boldsymbol{\mu}_{Vw}$ ,  $\boldsymbol{\mu}_{Ssw}$ ,  $\boldsymbol{\mu}_{Snw}$  et  $\boldsymbol{\mu}_T$ . On peut finalement noter que les tensions superficielles solide-fluide  $\gamma_{s\alpha}$ ,  $\alpha \in \{n; w\}$ , ont une contribution nulle dans le cas de particules suffisamment rigides et de contacts ponctuels entre grains [11].

### 3 Modélisation DEM du régime pendulaire

Une connaissance exhaustive de la microstructure est donc nécessaire afin d'appliquer les équations (2) à (4) et d'analyser les différents termes de contrainte qui y apparaissent. Cet accès à la microstructure du matériau est obtenu ici par simulation numérique dans le cas idéal d'un matériau granulaire aux particules sphériques, et pour lequel la phase  $w$  se compose uniquement de ponts capillaires, ou ménisques, disjoints entre différentes paires de particules, correspondant au régime pendulaire (Fig. 2). Ce régime pendulaire est caractéristique des très faibles saturations, correspondant à des valeurs de  $S_r = V_w/V_v$  inférieures à 10%.

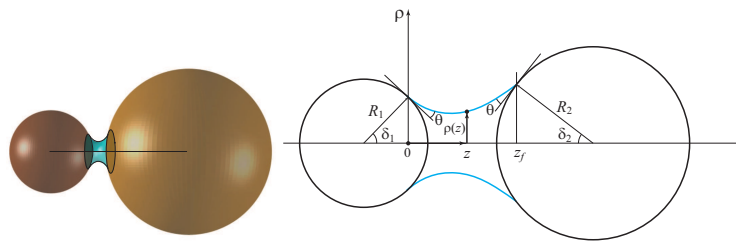


FIGURE 2 – Ponts capillaires du régime pendulaire et leur description géométrique

Le modèle numérique, proposé en [6] à la suite de [4], adopte la DEM et le code YADE [13] pour décrire les particules solides, leurs forces de contact et leurs déplacements relatifs. Les possibles ménisques entre particules sont décrits via des forces attractives d'interaction capillaire. L'existence des ménisques, leurs géométries, et les forces capillaires résultantes sont obtenues par résolution de l'équation de Laplace-Young avec des conditions aux limites de mouillage définies par l'angle de contact  $\theta$  (Fig. 2). Reliant la courbure  $\text{div } \vec{n}$  de l'interface  $S_{nw}$ , avec  $\vec{n}$  la normale à  $S_{nw}$  dirigée vers la phase  $w$ , à  $u_c$  et  $\gamma_{nw}$  selon (5) :

$$u_c = \gamma_{nw} \text{div } \vec{n} \quad , \quad (5)$$

l'équation de Laplace est ici résolue pour une valeur uniforme et constante de la pression capillaire au sein de l'échantillon, en accord avec la considération d'un équilibre thermodynamique. En fonction des valeurs d' $u_c$ , des rayons et de  $\theta$ , l'équation de Laplace n'admet plus aucune solution au-delà d'une certaine distance inter-particulaire, ce qui correspond par exemple à la rupture d'un pont capillaire pré-existant.

Du fait de l'interaction capillaire, la distribution des tailles de particules et l'angle  $\theta$ , pris ici uniforme et constant par simplification, constituent des paramètres du modèle ; auxquels s'ajoutent les paramètres classiques de la description du contact en DEM : deux paramètres de raideur et un angle de frottement local.

Outre les déformations des échantillons DEM, décrites par le cycle classique de la DEM, la description exhaustive des microstructures fluides et solide permet de mesurer les tenseurs  $\boldsymbol{\mu}_{Vw}$ ,  $\boldsymbol{\mu}_{Ssw}$ ,  $\boldsymbol{\mu}_{Snw}$  et  $\boldsymbol{\mu}_T$  au sein des échantillons, et d'isoler les contraintes capillaires, ou de contact, des contraintes totales. Concernant les contraintes capillaires, le régime pendulaire et ses interactions deux-à-deux entre

sphères, donne la possibilité d'utiliser indistinctement l'équation  $\mu$ UNSAT (4), ou l'équation (6) suivante, à partir des forces capillaires  $\vec{f}^{cap}$  de chaque ménisque :

$$\boldsymbol{\sigma}^{cap} = \frac{1}{V} \sum_{mén.} \vec{f}^{cap} \otimes \vec{l} \quad (6)$$

L'équation de Laplace-Young assure en fait l'équivalence, non-triviale, de (6) avec (4) [12, 10, 11, 14]. Concernant les contraintes de contact, la modélisation DEM permet aussi une mesure directe de  $\boldsymbol{\sigma}^{cont}$ . Dans les cas où la microstructure des phases fluides, et donc les contraintes capillaires, seraient plus faciles à mesurer que les forces de contact, les contraintes  $\boldsymbol{\sigma}^{cont}$  pourraient en fait également être exprimées par différence entre les contraintes totales et les contraintes capillaires.

## 4 Résultats et discussions

Une application des expressions  $\mu$ UNSAT et du modèle DEM est désormais proposée le long de chemins de sollicitations axisymétriques  $d\sigma_2 = d\sigma_3$  et  $d\varepsilon_2 = d\varepsilon_3$ , avec (1, 2, 3) les directions principales. On considère en particulier les compressions triaxiales de la mécanique des sols, définies par  $d\varepsilon_1 > 0$  et  $d\sigma_2 = d\sigma_3 = 0$  depuis un état isotrope  $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$ . Dans le cas de conditions triphasiques, celles-ci correspondent donc à l'imposition d'une pression capillaire uniforme à travers l'échantillon.

### 4.1 Quantification et anisotropie des contraintes capillaires

Mesurant les différents tenseurs microstructuraux  $\boldsymbol{\mu}_X$  le long de tels chemins triaxiaux, pour deux valeurs de pression capillaire imposée, on s'intéresse à leurs parties sphérique et déviatoire,  $m$  et  $t$  :

$$m = \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\mu}_X)}{3} \quad (7)$$

$$t = \sqrt{\frac{3}{2}} \|\boldsymbol{\mu}_X - m \boldsymbol{\delta}\| \quad , \quad (8)$$

et au rapport  $t/m$  choisi pour quantifier le caractère déviatoire de ces tenseurs, hormis pour  $\boldsymbol{\mu}_{V_w} = V_w \boldsymbol{\delta}$  qui est de nature purement sphérique par construction.

Alors que tous les tenseurs sont logiquement sphériques dans la configuration isotrope initiale, les résultats (Fig. 3, [11]) démontrent que la plupart développent clairement une nature déviatoire lors de l'évolution de la microstructure associée au chargement mécanique.

C'est en premier lieu le cas de  $\boldsymbol{\mu}_{S_{sw}}$ , relatif aux surfaces solides mouillées, et dont les évolutions peuvent être rapprochées de celles des directions de contact, quantifiées par le tenseur  $\boldsymbol{F}$  :

$$\boldsymbol{F} = \frac{1}{n_c} \sum_{cont.} \vec{n} \otimes \vec{n} \quad (9)$$

L'anisotropie du réseau de contacts induite par le chargement mécanique se retrouve en effet au niveau des surfaces solides mouillées par les ménisques, et ce d'autant plus que la pression capillaire est élevée et que les ponts capillaires ne peuvent subsister qu'au niveau des contacts, et pas à distance. Le tenseur  $\boldsymbol{\mu}_T$  relatif aux lignes triples développe lui aussi un fort caractère déviatoire, qui est également à relier au faible angle de contact utilisé ici ( $\theta = 10^\circ$ ) : la partie sphérique de  $\boldsymbol{\mu}_T$  tend en effet vers zéro lorsque c'est le cas de  $\theta$  [11]. Finalement,  $\boldsymbol{\mu}_{S_{nw}}$ , relatif aux interfaces fluide-fluide peut ici être considéré comme

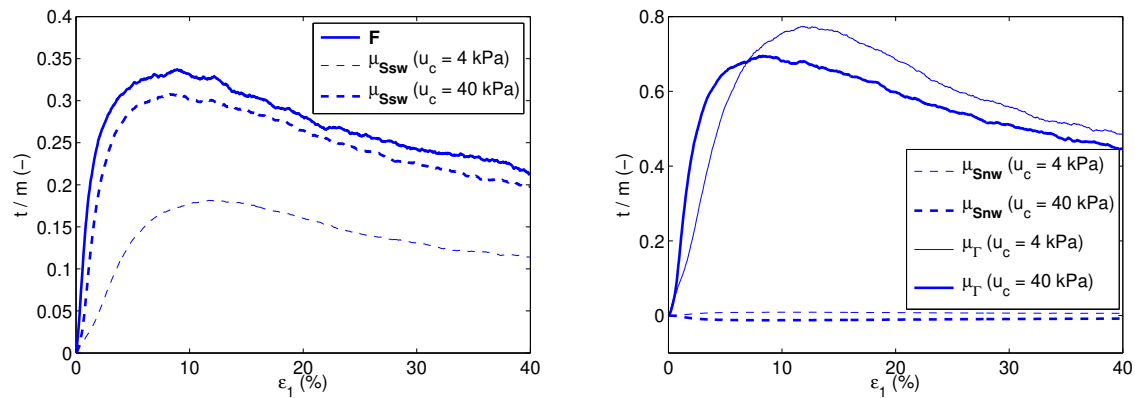


FIGURE 3 – Caractère déviatoire des différents tenseurs microstructuraux lors de compressions triaxiales en conditions triphasiques [11]

sphérique à l'échelle de l'échantillon bien que ce ne soit pas le cas à l'échelle d'un seul pont capillaire [10, 11].

Tel qu'illustré en Fig. 4, les contraintes capillaires elles-mêmes incluent donc une partie déviatoire  $q^{cap}$  non négligeable devant leur valeur moyenne  $p^{cap}$ , où  $q^{cap}$  et  $p^{cap}$  sont définis par :

$$p^{cap} = \frac{\text{tr}(\boldsymbol{\sigma}^{cap})}{3} \quad (10)$$

$$q^{cap} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \|\boldsymbol{\sigma}^{cap} - p^{cap} \boldsymbol{\delta}\| \quad (11)$$

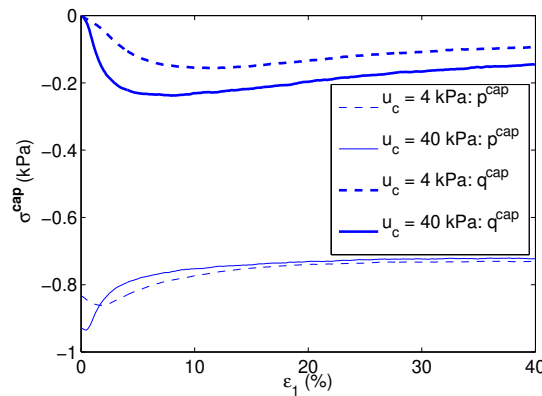


FIGURE 4 – Contraintes capillaires durant une compression triaxiale en conditions triphasiques

L'expression  $\mu$ UNSAT (4) des contraintes capillaires est donc très différente de l'expression classique  $\boldsymbol{\sigma}^{cap} = -u_c S_r \boldsymbol{\delta}$  inspirée par Bishop [15]. Une telle expression néglige en effet toute contrainte déviatoire capillaire, en contradiction avec la microstructure du matériau, et sous-estime de plus la pression capillaire moyenne dans le régime pendulaire. Le choix de  $\boldsymbol{\sigma}^{cap} = -u_c S_r \boldsymbol{\delta}$  reviendrait en effet ici à une valeur de  $|p^{cap}|$  de l'ordre de 0.1 kPa, bien moins que les 0.8 kPa mesurés (Fig. 4). Quantitativement, l'ordre de grandeur des contraintes capillaires est à relier avec un diamètre moyen relativement conséquent de 0.3 mm utilisé ici [11], et n'est pas négligeable dans les cas de faible confinement.

## 4.2 Caractère effectif des contraintes de contact

Considérant finalement les contraintes de contact, on s'intéresse à leur caractère effectif, c'est à dire à la possibilité d'appliquer les critères de rupture et lois de comportement d'un matériau granulaire sec à  $\sigma^{\text{cont}}$  pour interpréter les états limites de contrainte et déformations observées en conditions triphasiques.

Concernant la description de la rupture, les états limites en contraintes totales et en contraintes de contact ont été relevés lors de compressions triaxiales en conditions sèche et triphasique [9]. Alors que les conditions triphasiques induisent classiquement des états limites en contraintes totales avec une cohésion plus importante (non-nulle) qu'en conditions sèches, la considération des contraintes de contact permet bien d'obtenir une description unique de la rupture en conditions sèches et triphasiques, avec un critère de rupture de Mohr-Coulomb sans cohésion (Fig. 5).

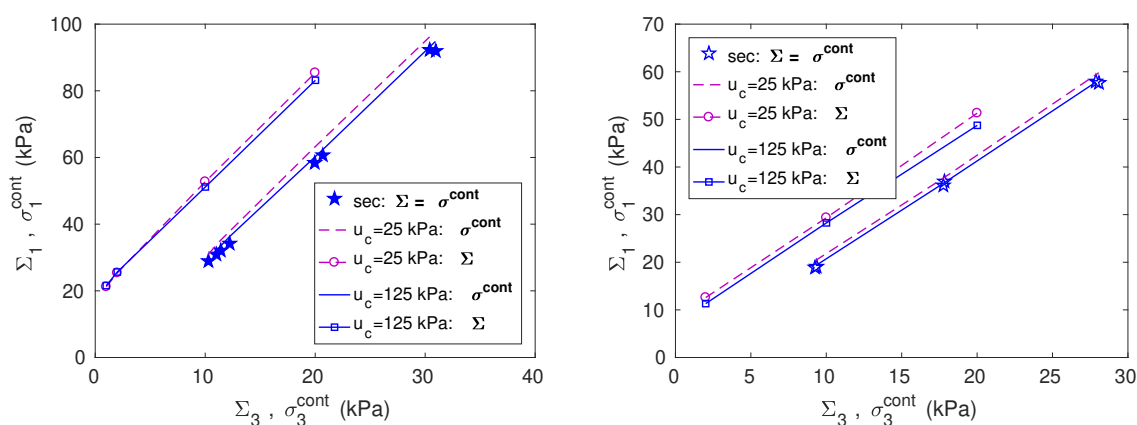


FIGURE 5 – États limites de contraintes en conditions sèches et triphasiques, pour des échantillons dense (gauche) ou lâche (droite)

Concernant le comportement en contrainte-déformation, les mêmes chemins de déformation ont été imposés à des échantillons en conditions sèche ou triphasique, et les réponses en contrainte de contact ont été relevées. Dans le cas où une loi de comportement unique relierait les chemins de déformation aux chemins de contrainte, les réponses en contraintes de contact devraient être identiques quelques soient les conditions de saturation. Ce caractère effectif des contraintes de contact est en fait approximativement obtenu pour des échantillons denses et le long de chemins de déformation contractants [9, 8]. Pour des échantillons initialement lâches et/ou des chemins dilatants, une interprétation du comportement triphasique à partir des lois de comportement des conditions sèches et des contraintes de contact n'est possible que pour l'estimation des raideurs initiales.

## 5 Perspectives

L'application des expressions  $\mu\text{UNSAT}$ , ici menée à partir de simulations DEM, semble désormais envisageable sur des échantillons réels à partir de techniques d'imagerie telles que la tomographie à rayons X et/ou à neutrons. Combiner de telles mesures de microstructure avec les expressions  $\mu\text{UNSAT}$  constituerait certainement une avancée très importante dans l'étude du comportement des matériaux granulaires en conditions triphasiques.

## Remerciements

Un certain nombre des résultats résumés ici ont été obtenus en collaboration avec Félix Darve, de l'Université Grenoble Alpes, ainsi que Mahdad Eghbalian et Mehdi Pouragha, de l'University of Calgary.

## Références

- [1] N. Khalili et M. H. Khabbaz. A unique relationship for  $\chi$  for the determination of the shear strength of unsaturated soils. *Géotechnique*, 48(5):681–687, 1998.
- [2] N. Lu et W. Likos. Suction stress characteristic curve for unsaturated soil. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 132(2):131–142, 2006.
- [3] M. Nuth et L. Laloui. Effective stress concept in unsaturated soils : Clarification and validation of a unified framework. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 32(7):771–801, 2008.
- [4] L. Scholtès, B. Chareyre, F. Nicot, et F. Darve. Micromechanics of granular materials with capillary effects. *International Journal of Engineering Science*, 47(1):64 – 75, 2009.
- [5] R. Wan, J. Duriez, et F. Darve. A tensorial description of stresses in triphasic granular materials with interfaces. *Geomechanics for Energy and the Environment*, 4:73–87, 2015.
- [6] J. Duriez et R. Wan. Contact angle mechanical influence for wet granular soils. *Acta Geotechnica*, 12(1):67–83, 2017.
- [7] E.E. Alonso, J.-M. Pereira, J. Vaunat, et S. Olivella. A microstructurally based effective stress for unsaturated soils. *Géotechnique*, 60:913–925(12), 2010.
- [8] J. Duriez et R. Wan. A micromechanical  $\mu$ UNSAT effective stress expression for stress-strain behaviour of wet granular materials. *Geomechanics for Energy and the Environment*, 15:10–18, 2018.
- [9] J. Duriez, R. Wan, M. Pouragha, et F. Darve. Revisiting the existence of an effective stress for wet granular soils with micromechanics. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, 42(8):959–978, 2018.
- [10] J. Duriez et R. Wan. Stress in wet granular media with interfaces via homogenization and discrete element approaches. *Journal of Engineering Mechanics*, 142(12), 2016.
- [11] J. Duriez, M. Eghbalian, R. Wan, and F. Darve. The micromechanical nature of stresses in triphasic granular media with interfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 99:495–511, 2017.
- [12] X. Chateau et L. Dormieux. Homogénéisation d'un milieu poreux non saturé : lemme de Hill et applications. *C. R. Acad. Sci. Paris, Série II*, 320:627–634, 1995.
- [13] V. Šmilauer et al. *Yade Documentation 2<sup>nd</sup> ed.* The Yade Project (<http://yade-dem.org/doc/>), 2015.
- [14] J. Duriez et R. Wan. Subtleties in discrete-element modelling of wet granular soils. *Géotechnique*, 67(4):365–370, 2017.
- [15] A. W. Bishop et G. E. Blight. Some aspects of effective stress in saturated and partly saturated soils. *Géotechnique*, 13:177–197, 1963.