



HAL
open science

Etude de la compacité optimale des mélanges granulaires binaires : classe granulaire dominante, effet de paroi, effet de desserrement

Gérard Roquier

► **To cite this version:**

Gérard Roquier. Etude de la compacité optimale des mélanges granulaires binaires : classe granulaire dominante, effet de paroi, effet de desserrement. Matériaux. Université Paris-Est, 2016. Français. NNT : 2016PESC1001 . tel-01289611

HAL Id: tel-01289611

<https://pastel.hal.science/tel-01289611v1>

Submitted on 17 Mar 2016

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 de la compacité optimale des mélanges
granulaires binaires : classe granulaire
dominante, effet de paroi, effet de desserrement

Thèse présentée pour obtenir le grade de
Docteur de l'Université Paris-Est
Spécialité : **Structures et Matériaux**

par

Gérard ROQUIER

Soutenue le 15/02/2016 devant le jury composé de :

M. Gaël Combe	Président
M. François de Larrard	Rapporteur
M. André Lecomte	Rapporteur
M. Nicolas Roussel	Examineur
M. Jean-Noël Roux	Directeur de thèse

SOMMAIRE

RÉSUMÉ

ABSTRACT

REMERCIEMENTS

INTRODUCTION GÉNÉRALE

1

1. <u>PRISE EN COMPTE DES INTERACTIONS GRANULAIRES DANS LES MODÈLES D'EMPILEMENT ET DANS LA FORMULATION DES BÉTONS</u>	8
1.1. Définition des effets de paroi et de desserrement.	10
1.2. Conséquences sur les stratégies d'élaboration des modèles d'empilement et de formulation des bétons.	18
1.2.1. Les mélanges binaires sans interactions.	24
1.2.2. Les mélanges binaires avec interactions.	35
1.2.3. Les mélanges poly-disperses sans interactions.	61
1.2.4. Les mélanges poly-disperses avec interactions.	65
1.2.5. Survol de quelques théories liées aux mélanges aléatoires.	70
1.2.6. Les modèles continus.	74
1.2.7. Comparaison des différents modèles.	87
1.3. Synthèse concernant le modèle d'empilement compressible.	90
2. <u>MODÉLISATIONS ANTÉRIEURES DES COEFFICIENTS D'INTERACTION</u>	97
2.1. Domaine des petits dominants : effet de paroi.	103
2.1.1. Modèle de Caquot (1937)	103
2.1.2. Modèle de Ben-Aïm (1970)	104
2.1.3. Modèle de Dodds (1980)	108
2.1.4. Modèle de Suzuki et Oshima (1983/85)	110
2.1.5. Modèle de Yu et Standish (1987)	114
2.1.6. Modèles empiriques	115
2.1.7. Résumé et conclusions	119
2.2. Domaine des gros dominants : effet de desserrement.	126
2.2.1. Modèle « linéaire » de Stovall (1986)	126
2.2.2. Modèle de décompaction locale (1988)	130
2.2.3. Modèle de Yu et Standish (1987)	138
2.2.4. Modèle de Goltermann, Johansen, Palbol (1997)	140
2.2.5. Modèles empiriques	141
2.2.6. Résumé et conclusions	146

3. <u>PRÉSENTATION D'UNE MODÉLISATION DE L'EFFET DE PAROI DANS LE CAS DE SPHÈRES.</u>	153
3.1. Délimitation de la zone perturbée.	157
3.2. Nombre de petites sphères à considérer dans la zone perturbée.	160
3.2.1. Modèle du nombre de coordination de Suzuki et Oshima (1983/85)	161
3.2.2. Modèle du nombre de coordination de Bouvard et Lange (1991)	162
3.2.3. Modèle du nombre de coordination de Egami (1997)	165
3.2.4. Modèle du nombre de coordination de Miracle, Sanders et Senkov (2003)	165
3.2.5. Bilan des différents modèles présentés permettant le calcul du nombre de coordination	170
3.2.6. Modèle des carrés sphériques proposé pour calculer le nombre de coordination	172
3.3. Compacité β'_2 des petites sphères dans la zone perturbée.	180
3.4. Coefficient d'interaction caractérisant l'effet de paroi b_{ROAD} .	183
3.5. Coefficient de perturbation k_p .	185
3.6. Évolution du rapport $k_w = \beta'_2/\beta_2$ en fonction du rapport des diamètres x et de β_2 .	193
3.7. Représentation graphique de la fonction b_{ROAD} décrivant l'effet de paroi en fonction de x et de β_2 , compacité des petites sphères en pleine masse.	197
3.8. Résumé et conclusions.	200
4. <u>PRÉSENTATION D'UNE MODÉLISATION DE L'EFFET DE DESSERREMENT DANS LE CAS DE SPHÈRES.</u>	205
4.1. Délimitation de la cellule de référence sphérique.	209
4.2. Nombre de grosses sphères à considérer dans la cellule de référence.	212
4.2.1. Modèle du nombre de coordination de Suzuki et Oshima (1983/85)	212
4.2.2. Modèle du nombre de coordination de Egami (1997)	213
4.2.3. Modèle du nombre de coordination de Miracle, Sanders et Senkov (2003)	214
4.2.4. Bilan des différents modèles présentés permettant le calcul du nombre de coordination	217
4.2.5. Modèle des carrés sphériques proposé pour calculer le nombre de coordination	218
4.3. Compacité β''_1 des grosses sphères dans la cellule de référence et déduction de leur compacité β'_1 dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence.	226

4.4. Evolution du rapport $k_L = \beta'_1 / \beta_1$ en fonction de x , de la taille de la caverne, pour différentes valeurs de β_1 .	230
4.5. Coefficient d'interaction caractérisant l'effet de desserrement a_{ROAD} déduit du modèle de décompaction locale.	233
4.6. Représentation graphique de la fonction a_{ROAD} décrivant l'effet de desserrement en fonction de x , de la taille de la caverne, pour différentes valeurs de β_1 .	235
4.7. Résumé et conclusions.	241
5. <u>AJUSTEMENT DES FONCTIONS D'INTERACTION À DIFFERENTS TYPES DE MATÉRIAUX.</u>	247
5.1. Sélection des données expérimentales issues de la littérature.	253
5.1.1. Matériaux.	254
5.1.2. Protocole opératoire.	258
5.1.3. Compacité des classes mono-modulaires.	262
5.1.4. Obtention de points expérimentaux pour les coefficients d'interaction.	264
5.1.5. Données issues de la littérature.	267
5.1.6. Cas particulier des mélanges cimentaires. Le coefficient d'effet de paroi b_{21} peut-il être supérieur à 1 ?	292
5.2. Ajustement des modèles à différents types de matériaux.	302
5.2.1. Billes de verre.	302
5.2.2. Granulat roulé de la Loire.	304
5.2.3. Granulat concassé de Arnay-le-Duc.	305
5.2.4. Granulat concassé du Bajocien Lorrain.	307
5.2.5. Granulat concassé de Bendjerah.	308
5.2.6. Récapitulatif.	309
5.3. Conclusions. Limites du modèle.	310
6. <u>ÉTUDE DES COEFFICIENTS D'INTERACTION PAR SIMULATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE.</u>	313
6.1. L'état de compacité maximale.	315
6.1.1. Comment définir un système bloqué ?	316
6.1.2. Comment définir un état de compacité maximale ?	327
6.2. La modélisation numérique discrète d'un matériau granulaire.	329
6.3. La modélisation du contact entre grains.	330
6.4. Méthodes de simulation numérique discrète.	333
6.5. L'algorithme de Lubachevsky et Stillinger (LS).	336

6.6. L'algorithme de dynamique moléculaire (DM).	339
6.6.1. Paramètres décrivant le matériau.	339
6.6.2. Description de l'algorithme DM utilisé	340
6.7. Choix des paramètres.	350
6.7.1. Choix du nombre de particules N.	350
6.7.2. Choix du facteur de gonflement des particules lors de l'étape LS et du critère de basculement de l'étape LS vers l'étape DM.	351
6.7.3. Choix des caractéristiques des mélanges binaires à étudier : rapports de tailles de billes et proportions volumiques des constituants.	353
6.7.4. Choix du paramètre d'amortissement et du paramètre permettant de calculer le pas de temps lors de l'étape DM.	354
6.7.5. Choix de la pression à appliquer sur la boîte de simulation lors de l'étape DM.	355
6.7.6. Récapitulatif des paramètres utilisés lors de l'étape LS.	356
6.7.7. Récapitulatif des paramètres utilisés lors de l'étape DM.	356
6.8. Résultats obtenus par simulation numérique pour les mélanges binaires de rapports de tailles $x=1/5$ et $x=1/2,5$.	358
6.8.1. Compacité et indice des vides obtenus par simulation numérique.	358
6.8.2. Comparaison avec les résultats d'indices des vides obtenus expérimentalement sur des billes de verre sphériques.	365
6.8.3. Comparaison avec les résultats d'indices des vides fournis par la théorie des mélanges de particules (TPM) de Dewar.	369
6.8.4. Comparaison avec les résultats d'indices des vides fournis par le modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard.	376
6.8.5. Comparaison avec les résultats d'indices des vides fournis par le modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard.	378
6.8.6. Nombres de coordination.	390
6.8.7. Isostaticité.	418
6.8.8. Forces de contact.	422
6.8.9. Pressions partielles supportées par les particules : affinement de la notion de classe dominante.	427
6.9. L'eutectique.	433
6.10. Détermination du coefficient d'interaction lié à l'effet de paroi par simulation numérique discrète.	438
6.10.1. Coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique.	439
6.10.2. Comparaison avec les résultats obtenus expérimentalement sur des billes de verre sphériques.	441
6.10.3. Comparaison avec les modèles empiriques de de Larrard (1988 et 2000), Lecomte et Zennir (1997), Yu, Zou et Standish (1996).	443

6.10.4. Comparaison avec les résultats fournis par la théorie ROAD.	445
6.11. Détermination du coefficient d'interaction lié à l'effet de desserrement par simulation numérique discrète.	448
6.11.1. Coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique.	450
6.11.2. Comparaison avec les résultats obtenus expérimentalement sur des billes de verre sphériques.	452
6.11.3. Comparaison avec les modèles empiriques de de Larrard (1988 et 2000), Lecomte et Zennir (1997), Yu, Zou et Standish (1996).	454
6.11.4. Comparaison avec les résultats fournis par la théorie ROAD.	457
6.11.5. Comparaison des coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique.	458
7. <u>ÉVALUATION DU MODÈLE D'EMPILEMENT COMPRESSIBLE 4-PARAMÈTRES INCLUANT LES THÉORIES DE L'EFFET DE PAROI ET DE L'EFFET DE DESSERREMENT.</u>	460
7.1. Validation avec des données concernant des billes de verre.	470
7.2. Validation avec les résultats issus de la simulation numérique LS+DM.	506
7.3. Validation avec les données concernant des grains roulés arrondis : expériences de de Larrard, Sedran, Angot (1994) et de Joisel (1952).	511
7.4. Validation avec les données concernant des grains concassés : expériences de de Larrard, Sedran, Angot (1994), de Lecomte et Zennir (1997), de Hanini (2012) et de Kwan, Wong, Fung (2015).	529
8. <u>MODÈLE DE VISCOSITÉ ASSOCIÉ AU MODÈLE D'EMPILEMENT COMPRESSIBLE 4-PARAMÈTRES.</u>	563
8.1. Le concept de Farris.	565
8.2. Choix d'une approche par équation fonctionnelle.	566
8.3. Viscosité par association du concept de Farris et de la relation de type Krieger.	567
8.3.1. Mélange à une seule taille de particules.	568
8.3.2. Mélange binaire sans interactions.	568
8.3.3. Mélange binaire avec interactions.	569
8.3.4. Mélange quelconque.	573
8.4. Vérifications expérimentales du modèle de viscosité proposé obtenu par association avec le MEC 4-paramètres.	576
8.5. Mise en évidence d'optima dans les formulations de bétons par référence au modèle apollonien.	582
8.6. Conclusion.	589

<u>CONCLUSION GÉNÉRALE.</u>	590
<u>BIBLIOGRAPHIE.</u>	601
<u>LISTE DES SYMBOLES.</u>	608

RÉSUMÉ

La compacité des matériaux granulaires est une grandeur qui intéresse un grand nombre de secteurs, notamment les bétons hydrauliques. Dans ces derniers, l'incorporation d'éléments ultrafins a permis de les rendre plus performants et d'accroître leur durée de vie. Elle a également impliqué pour les chercheurs de revenir aux fondamentaux de la physique des milieux granulaires et de faire appel aux modèles d'empilement. Pour le cas binaire, nous postulons l'existence de deux domaines: « grains fins dominants » et « gros grains dominants », avec une zone intermédiaire supplémentaire où le mélange est optimum. Lorsque les fractions granulaires ne possèdent pas des rapports de tailles infinis, deux interactions géométriques se développent : l'effet de paroi et l'effet de desserrement. La première peut se décrire ainsi : une grosse particule isolée constitue un « intrus » contre lequel viennent se ranger les petites particules, créant un supplément de vides à l'interface. La seconde se produit lorsque les petits grains sont insuffisamment fins pour se glisser entre les gros.

Nous analysons comment elles sont prises en compte dans un certain nombre de modèles d'empilement en nous fixant finalement sur celui de de Larrard et al. : le modèle d'empilement compressible (MEC), l'un des plus efficaces.

Dans celui-ci, les effets de paroi et de desserrement sont quantifiés par l'intermédiaire de deux coefficients dont les expressions sont obtenues par lissage de données expérimentales en fonction du rapport des diamètres fins/gros. Cependant, il n'existe aucune théorie pleinement satisfaisante permettant de les obtenir. Cette thèse vise à combler ce chaînon manquant.

Nous avons conduit notre étude dans le cadre des empilements ordonnés et compacts de particules afin d'être en adéquation avec les hypothèses de constitution du MEC qui propose, comme préalable à l'obtention de la compacité réelle, la détermination d'une compacité virtuelle définie comme la compacité maximale susceptible d'être atteinte si l'on pouvait déposer, un à un, chaque grain à son emplacement idéal. Cette façon de procéder permet la création de cellules élémentaires juxtaposées. Dans ce cadre, l'interaction exercée par une espèce granulaire sur une autre de taille différente est menée à partir d'une étude localisée autour d'une particule « intruse » de la classe dominée. Celle-ci est entourée de particules de la classe dominante et suffisamment éloignée d'une congénère pour justifier la disjonction des zones perturbées par l'interaction granulaire et le principe d'additivité retenu.

Le modèle élaboré présente deux originalités.

D'une part, une cellule sphérique de référence valable pour les deux types d'interaction granulaire est utilisée pour déterminer la compacité des particules affectées par l'effet de desserrement ou par l'effet d'une paroi (éventuellement plane). Elle est concentrique à une particule sphérique « intruse » et possède un diamètre ajustable en fonction du rapport des diamètres fins/gros et de la compacité en pleine masse des grains de la classe dominante. Il s'agit de la théorie ROAD pour ROund ADjustable cell. Elle permet d'aboutir à la conclusion qu'il n'existe pas une courbe unique pour chacun des coefficients d'interaction.

D'autre part, il s'est avéré nécessaire de mettre au point une méthode permettant de déterminer le nombre de coordination qui représente le nombre de grains au contact d'un grain donné. Le modèle des carrés sphériques, qui a été conçu, permet de retrouver deux résultats remarquables dans le domaine des empilements de sphères ordonnés et compacts. Tout d'abord, 4 grosses sphères, dont les centres forment les sommets d'un tétraèdre, peuvent être en contact avec une petite sphère centrale pour un rapport de tailles de 0,222. Ensuite, 12 sphères peuvent se situer contre une sphère centrale de même diamètre. Il s'agit du fameux « kissing number problem » en dimension 3.

Le modèle développé pour les coefficients d'interaction géométrique s'avère fiable par rapport aux résultats expérimentaux recueillis.

La simulation numérique apporte une confirmation de sa validité. En plus de fournir des coefficients d'effets de paroi et de desserrement très proches de ceux prédits théoriquement, elle a permis l'étude d'empilements désordonnés de compacité maximale pour des billes monodispersées et bidispersées sans frottement dont les rapports de tailles valent 0,2 et 0,4. Chaque échantillon de 4000 particules est soumis à une étape consistant à le mélanger et à le compacter simultanément, avant de se voir appliquer une pression isotrope. Concernant les assemblées constituées d'une seule taille de billes, la compacité maximale obtenue par simulation numérique atteint la valeur classique de 0,641.

Concernant les mélanges binaires, le concept de « pressions partielles », qui tient compte à la fois des aspects géométrique et mécanique, a permis d'affiner la notion de classe dominante et de mieux appréhender la constitution du squelette porteur de l'édifice granulaire. En plus des zones constituées par les « fins dominants » et par les « gros dominants », il existe une zone mixte que nous avons dénommée « zone de synergie du squelette porteur » où les « pressions partielles » fines-grosses sont les plus importantes. Ce résultat ne nous étonne pas car notre théorie constitue une interpolation au domaine tout entier de calculs strictement valables pour les bords du diagramme « indice des vides » versus « titre volumique des fines particules ». Pour les deux mélanges binaires traités, la jonction de la zone des « gros dominants » et de la zone mixte coïncide approximativement avec le mélange à compacité maximale.

Pour le rapport de tailles 0,2 correspondant au rapport de tailles critique d'une cavité tétraédrique, le mécanisme d'insertion est assez nettement mis en évidence du côté des « gros dominants ». De l'autre côté, l'effet de paroi satisfait relativement bien au principe de superposition.

Pour le rapport de tailles 0,4, les effets de paroi et de desserrement peuvent encore être considérés linéaires, avec une erreur acceptable, aux deux extrémités du diagramme d'indice des vides. Du côté des « gros fortement dominants », la simulation numérique nous indique que les éléments fins ne sont pas en mesure de s'insérer dans les interstices disponibles sans écarter leurs voisins. Notre modélisation de l'effet de desserrement, basée sur l'existence d'une taille de cavité critique et sur la notion de décompaction locale autour d'une petite particule insuffisamment fine pour s'y glisser, s'en trouve confortée.

En tenant compte de la nouvelle théorie développée pour les interactions géométriques, le modèle d'empilement compressible (MEC) subit une évolution et devient le MEC 4-paramètres, qui sont : les coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement, le rapport de tailles de cavité critique et l'indice de compaction du mélange. Ce dernier ayant subi un nouvel étalonnage, le MEC 4-paramètres montre son efficacité quant à la prédiction de compacités sur mélanges binaires à partir de l'analyse de 780 résultats obtenus sur différents types de matériaux : billes de verre lisses, éléments sphériques simulés numériquement, granulats roulés et concassés. Pour ces derniers, le rapport de tailles de cavité critique à adopter dépend de la forme et de l'état de surface des matériaux.

Enfin, un modèle visant à prédire la viscosité d'une suspension concentrée de particules sphériques multidimensionnelles suspendues par un fluide visqueux est présenté. Il fait appel au concept de changement d'échelle de Farris et à une loi de puissance (de type Krieger-Dougherty) pour la viscosité relative, compatible avec la relation d'Einstein appropriée pour une suspension diluée. Lorsque la fraction volumique de solide atteint sa valeur critique, la suspension devient empilement et le mélange atteint la compacité du squelette solide déterminée par le MEC 4-paramètres. Les résultats sont encourageants car ils montrent une bonne adéquation avec les expériences de Stovall et al. sur des mélanges binaires composés de billes de verre suspendues par une huile de silicone.

Mots-clés : *modèle d'empilement compressible 4-paramètres, modélisation effet de paroi, modélisation effet de desserrement, théorie ROAD, modèle des carrés sphériques, compacité, viscosité, béton, serrage, simulation numérique.*

ABSTRACT

Packing density of a granular material is a quantity which interests many sectors, in particular hydraulic concrete. For the latter, the incorporation of ultrafines allowed to reach very high strength and to increase their useful life. That has meant for scientists to back to principles of physics and to call to packing models. For a binary case, we postulate the existence of two domains : « small grains packed » and « large grains packed », with a supplementary intermediate zone where the mixture is optimum. When the two monodimensional grain classes have no very different sizes, two geometrical interactions develop : the wall effect and the loosening effect. The first one express the perturbation of the packing of the small grains at the interface between large and small grains. The second one occurs when small grains are not enough fine to insert into small cavities created by the touching larger grains.

*We analyze how they are taken into account in existing packing models. We select finally the compressible packing model (CPM) of de Larrard *et al.*, one of the most effective.*

In this one, wall effect and loosening effect are quantified by two coefficients. They can, of course, be calculated from experimental results on binary mixtures, as a function of fine/coarse diameter ratios. However, there is no satisfactory theory allowing to calculate them. This doctoral thesis is done to fill this missing link.

Ordered and very packed piles of particles are used as a reference frame to be in adequation with the CPM assumptions which require, before the calculation of the real packing density, the determination of a virtual packing density. The latter is defined as the maximum packing density attainable if each particle could be positioned in its ideal location. This approach allows the creation of elementary juxtaposed cells. In that context, the effect of a smaller grain (loosening effect) or a larger grain (wall effect) on the packed class is based on the study of a foreign sphere surrounded by dominant class neighbours. This isolated particle is far away enough another particle of the same class to justify the theoretical separation of the disturbed areas by the geometrical interaction, assumed to be linear and additive of each foreign class.

Two innovations deserve attention for the model developed.

On one hand, a spherical reference cell, which can be used for both types of geometrical interactions, makes it possible to calculate packing density of particles affected by loosening effect and wall effect (potentially a flat surface). This cell is concentric with a foreign sphere lost in a monodimensional mixture. Its diameter is adjustable, depending on fine/coarse diameter ratio and on the virtual specific packing density of the elementary dominant class. It calls ROAD theory for ROund ADjustable cell. One simple conclusion that can be drawn from this study is the following : there is no a single curve existing for each geometrical interaction as a function of fine/coarse diameter ratios.

On the other hand, there was a need for the development of a new methodology allowing to determine the coordination number which represents the number of particles in contact with a particular particle. The purpose-built spherical squares model allows to reveal two remarkable achievements in the field of ordered and very packed piles of spherical particles. Firstly, 4 large particles, arranged to form a regular tetrahedron, can be in contact with a small central particle with a size ratio of 0,222. Secondly, 12 spheres can touch a central sphere with the same diameter. This is the famous « kissing number problem » in 3 dimensions.

The model developed for the geometrical interaction coefficients proves its worth when compared with experimental results.

The numerical simulation confirms its validity. In addition to predict wall effect and loosening effect coefficients close to those determined theoretically, the numerical simulation was used to predict the solid fraction of maximally dense disordered packings of monodisperse and bidisperse spherical frictionless particles with 0,2 and 0,4 size ratios. Firstly, each sample of 4000 beads is prepared by the Lubachevsky-Stillinger algorithm where sphere diameters are continuously growing and particles are mixed. Secondly, a traditional molecular dynamics method is implemented with an external isotropic pressure until the packing approaches an equilibrium state.

About monodisperse mixtures, the frictionless system assembles in the random close packing (RCP) state with the usual value of 0,641.

About binary mixtures, the « partial pressures » concept, that includes both geometrical and mechanical aspects, allows to complete and improve the notion of dominant class and to better understand the build-up of the granular skeleton. In addition with « small grains packed » and « large grains packed » zones, the numerical simulation has highlighted a joint zone, called « synergism zone of the granular skeleton » where « partial pressures » fine-large particles are the most important. This result does not surprise us because our theory represents an interpolation extended through the entire domain, of calculations strictly valid on the edges of the diagram « void ratio » versus « volume proportion of fine particles ». For the two studied binary mixtures, the junction between the « large grains packed » zone and the « synergism zone of the granular skeleton » approximately coincide with the maximum solid fraction of the mixture.

For the 0,2 size ratio corresponding to the critical size ratio for which a small bead can fit inside the cavity created by 4 touching larger beads whose centers match the apices of a tetrahedron (tetrahedral cavity), the insertion mechanism is clearly highlighted in the « large grains packed » side. On the other side, the principle of superposition is adequately verified for the wall effect.

For the 0,4 size ratio, wall effect and loosening effect can be considered linear with an allowable error at both ends of the void ratio diagram. At the « large grains packed » end, the numerical simulation tells us fine elements are not able to insert in available cavities while maintaining larger beads contacts. Our modelling analysis of the loosening effect, based on the existence of a critical cavity size ratio and on the concept of local decompaction around a small particle not sufficiently fine to insert in this cavity, has thus been reinforced.

With this new theory developed for geometrical interactions, the compressible packing model (CPM) is evolving to the new 4-parameter CPM which are : the wall effect coefficient, the loosening effect coefficient, the critical cavity size ratio and the compaction index of the mixing, which requires a new recalibration. The 4-parameter CPM demonstrates its efficiency to predict the packing density of binary mixtures from the analysis of 780 results obtained on different types of materials : frictionless glass beads, spherical particles numerically simulated, natural aggregates, crushed aggregates. For the latter, the critical cavity size ratio to be used depends on the shape and on the finish surface of materials.

ABSTRACT

*Finally, a model intended to predict the viscosity of a multimodal concentrated suspension with spherical particles suspended in a viscous fluid is presented. We resort to the iterative approach advocated by Farris and to a power-law relation (Krieger-Dougherty type) for the relative viscosity, compatible with the Einstein relation appropriate for a dilute suspension. When the solid volume fraction reaches its critical value, the suspension is jammed and the mixture reaches the packing density of the solid skeleton calculated with the 4-parameter CPM. One may confront predictions to experimental data. Our predicted viscosities are in good agreement with experimental data of relative viscosities obtained by Stovall *et al.* on binary mixtures composed of glass beads suspended in a silicon oil.*

Key words : *4-parameter compressible packing model, wall effect modelling, loosening effect modelling, ROAD theory, spherical squares model, packing density, viscosity, concrete, compaction, numerical simulation.*

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse, Jean-Noël ROUX, éminent spécialiste de simulation numérique et de dynamique moléculaire au Laboratoire Navier de Champs-sur-Marne. La qualité de son accueil, son écoute, sa patience, sa disponibilité, ses encouragements, sa rigueur, son extrême compétence m'ont été particulièrement précieux pour mener à bien ce travail. Il a su m'accompagner vers un nouveau champ d'investigation qui m'a permis d'explorer la matière granulaire à l'échelle de la particule. Je tiens également à saluer son ouverture d'esprit pour m'avoir laissé une marge de manœuvre importante dans la conduite de cette recherche.

Je suis très reconnaissant à Monsieur François de LARRARD, Directeur Scientifique, Construction durable et partenariats de Lafarge LCR, Directeur de Recherche, pour m'avoir encouragé à poursuivre le mémoire que je lui ai présenté en 2010 sur le même thème. C'est à la lecture de sa thèse que j'ai découvert ma passion pour la recherche appliquée aux matériaux granulaires. Il est en effet l'un des premiers en France à avoir compris que l'on pouvait aborder la formulation des bétons sous l'angle de la science. Grâce à lui, j'ai pu combiner mes passions pour le béton, les mathématiques et la physique.

Je remercie Monsieur le Professeur André LECOMTE pour l'attention qu'il a manifesté envers ce travail. Je suis honoré que l'un des meilleurs spécialistes français en valorisation des ressources locales comme granulats pour la formulation des bétons ait accepté la lourde tâche d'être rapporteur de ce travail en compagnie de Monsieur François de Larrard. Car composer un béton est devenu une opération tellement complexe qu'il faut être à la fois chimiste, physicien, mécanicien, géologue et Monsieur Lecomte est tout à la fois.

Je voudrais exprimer toute ma gratitude envers Nicolas ROUSSEL, Directeur de Recherche, éminent spécialiste en rhéologie du béton frais et en formulation des bétons "verts", pour avoir porté de l'intérêt à mon sujet de thèse qui combine également un volet rhéologie (viscosité) à un volet formulation.

Je souhaite remercier Gaël COMBE, Professeur des Universités HDR, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'être Président du Jury, en raison de son expertise en simulation numérique, appliquée certes à un type de matériau différent de celui ayant fait l'objet de ce mémoire, mais fondamental dans le domaine de la sécurité des ouvrages de génie civil: celui des géomatériaux.

Enfin, je tiens à associer Madame Cécile BLANCHEMANCHE, responsable administrative de l'école doctorale Sciences, Ingénierie, Environnement, de l'Université Paris-Est pour sa compétence et pour sa réactivité lors de nos échanges par mails.

Je souhaite également rendre hommage à mes grand-pères et à mon père, meunier et maçons. Levés bien avant l'aube, leurs gestes lourds et lents participèrent à l'édification de nos habitats et de nos routes. Ils travaillèrent, de leurs mains et sans aucun savoir, à mélanger du sable et du gravier pour bâtir des murs, élever des voûtes, ouvrir des passages. Privés de bases théoriques, ils apprirent durement le prix de la méconnaissance : pannes, casses, accidents ne les ont pas épargnés. Mon père peut en témoigner.

Une pensée particulière pour ma sœur jumelle avec laquelle j'ai dû fabriquer mes premiers éléments en béton vers l'âge de 6 ans et pour ma mère qui m'a donné le goût de l'effort, du travail bien fait et qui m'a appris à ne jamais abandonner : tu as toujours été un modèle à suivre pour moi.

Une tendre pensée pour mon épouse qui m'a encouragé à reprendre ce travail en 2007 et qui m'a supporté malgré toutes les heures passées devant mon ordinateur au détriment de certaines attentions qu'elle pouvait normalement attendre de son mari.

Un grand merci à toutes les personnes que je côtoie quotidiennement au lycée et qui m'ont accompagné tout au long de ces années : Dub, Mathilde, Caroline, Fred, Bret, Agnès, Gilles L, Gilles G, Michel B, Michel P, Didier, Olivier, Bernard, Patrick, Monique, Ghassan, Pierre et Jean-Luc bien sûr. Ils ont su, par des gestes, des mots, des sourires, m'encourager à poursuivre dans la voie que je m'étais fixée.

Une pensée particulière et amicale pour Alain Popinet, Directeur d'Agence AIA Ingénierie, membre associé du Groupement des Monuments Historiques, passionné d'histoire, de belles pierres et de voûtes, et Franck Morin, méticuleux et incollable dans le contrôle technique des bâtiments, pour toutes ces années d'échanges, d'écoute et de balades sur les beaux sentiers du Poitou ou de Bretagne.

Enfin, pour terminer, je voudrais associer mes filleuls et filleule : Thomas, brillant ingénieur, Martin et Lauriane, qui a toujours su manifester de l'intérêt pour la passion de son oncle pour la recherche.

INTRODUCTION GÉNÉRALE

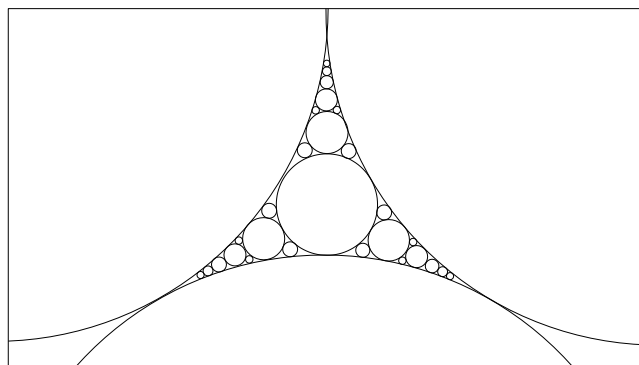
Dans l'acte de construire, le béton représente environ sept milliards de mètres cubes produits annuellement dans le monde. C'est le produit le plus consommé, après l'eau potable. Et pourtant, le manque de soin apporté à sa réalisation et son association à une image de lourdeur en ont trop longtemps fait le symbole d'un environnement et d'une nature dégradés, de grisaille urbaine.

Depuis une trentaine d'années cependant, l'incorporation dans sa formulation d'éléments ultrafins (fumée de silice) a permis d'une part de le rendre plus performant et donc de concevoir des structures plus légères et d'autre part d'augmenter sa durée de vie.

Des travaux menés en parallèle sur sa texture et sur sa couleur (le béton moderne peut être blanc) et l'exploitation de qualités qu'on lui connaissait déjà (le béton est façonnable à volonté, fiable, peu sensible au feu) ont finalement incité les architectes à imaginer des nouvelles formes d'ouvrages qui ont suscité admiration et respect.

En complétant la granulométrie à l'extrême inférieur du spectre granulaire, les particules ultrafines (défloculées par les adjuvants surfactants) permettent d'obtenir des bétons dont la structure s'approche de celle d'une roche massive.

La démarche adoptée par les spécialistes de l'optimisation granulaire se réfère à celle suivie par le géomètre de l'Antiquité grecque, Apollonius de Perga, qui s'était posé la question suivante : « Comment paver avec des disques de toutes tailles un espace plan, en s'assurant que les interstices occuperont une surface minimale ? ». Le génial savant proposa un motif de base constitué de trois éléments de forme circulaire entre lesquels vient s'inscrire un quatrième qui leur est tangent.



Ce processus est ensuite répété indéfiniment à différentes échelles au moyen de disques sélectionnés pour pouvoir s'insérer parfaitement dans la structure des générations précédentes, de façon récurrente.

Une organisation sans faille apparaît alors à des niveaux qui s'englobent les uns les autres : l'arrangement obtenu possède la propriété d'auto-similarité.

Le passage d'une configuration de 2 à 3 dimensions s'effectue en introduisant la notion de sphères apolloniennes.

La situation est cependant moins commode à représenter à moins d'utiliser des illustrations imagées comme le fait le proverbe arabe qui dit à peu près ceci : « Tu crois que ton panier est bien rempli car il est plein d'oranges. Pourtant, tu peux encore y ajouter des noix, des pois chiches et des grains de semoule ». La construction apollonienne consiste donc à placer, dans un conteneur, un volume maximum de grosses sphères. On y ajoute ensuite des billes assez petites pour s'ajuster dans les vides de la première fraction sans créer de perturbation dans l'arrangement de cette dernière. L'opération est répétée jusqu'à épuisement de toutes les classes granulaires disponibles.

Le choix d'éléments ainsi calibrés permet d'aboutir à un mélange idéal, dit apollonien. Il s'agit d'un mélange polydispersé de plusieurs fractions granulaires « sans interaction » : chacune d'entre elles vient combler exactement les interstices disponibles laissés par les autres grâce à un contraste en taille très important.

Seulement, dans la réalité, les tailles de grains sont en rapport fini : les dimensions des éléments fins ne sont pas toujours très petites devant celles des éléments plus grossiers.

À cela, existent plusieurs raisons d'ordre technique, économique et qualitatif.

Premièrement, il paraît difficile d'envisager, sur chantier, des opérations de criblage permettant la sélection des classes de grains ayant la capacité théorique de pouvoir s'imbriquer parfaitement les uns dans les autres, comme le suggère la distribution discontinue apollonienne.

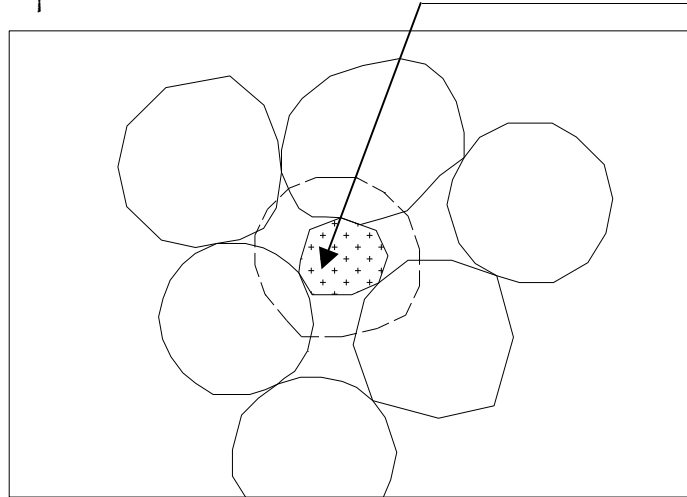
Deuxièmement, la question de l'utilisation des classes intermédiaires non retenues ne manquerait pas de se poser.

Troisièmement, dans un contexte de production, les ingénieurs privilégient l'emploi de grains continûment gradués car ils sont réputés donner des bétons plus réguliers en limitant les risques de ségrégation. Or, cette dernière nuit gravement aux fonctions finales du matériau car elle crée des variations spatiales de ses propriétés qui se traduisent par un affaiblissement des résistances et de la durabilité de la structure.

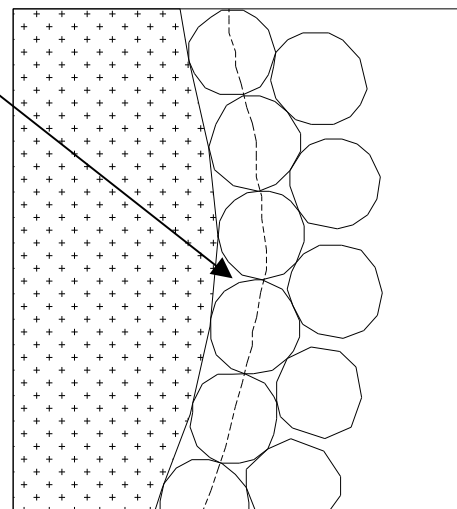
En raison de cette prédilection du milieu industriel pour les mélanges à distribution continue, les différents composants du béton vont présenter des étendues granulaires qui ne sont pas éloignées les unes des autres et qui vont donc se recouper partiellement. C'est généralement le cas entre les éléments les plus fins du gravier et du ciment avec, respectivement, les particules les plus grossières du sable et de la fumée de silice.

Des interactions granulaires vont se développer. Il en existe deux types.

D'une part, l'introduction de quelques petits grains, insuffisamment fins pour se glisser entre les gros, entraîne une désorganisation, au moins locale, de la structure de ces derniers lorsqu'ils sont dominants : c'est l'effet de desserrement.



D'autre part, quand les éléments fins sont en quantité prépondérante, leur arrangement se trouve relâché au voisinage de la surface des grosses particules ou de celle du récipient : c'est l'effet de paroi.



Concernant ce dernier, Caquot, qui s'évertuait en 1937 à trouver la granularité optimale pour laquelle la porosité d'un mélange serait minimale, effectue l'hypothèse fondamentale suivante : les interactions entre classes de grains se font deux à deux, sans perturbations dues à la présence d'une tierce classe.

Cette idée de base a été reprise par F. de Larrard qui s'est lancé avec son équipe, dans les années 1980, dans une vaste opération de mise au point d'un logiciel d'aide à la formulation des bétons.

Les trois générations de modèles qu'il a utilisés successivement pour déterminer la compacité d'un mélange à plusieurs classes granulaires considèrent en effet les interactions entre grains comme additives. Les coefficients permettant de les prendre en compte peuvent donc se déterminer à partir de l'étude des mélanges binaires.

L'approche adoptée a consisté à multiplier les expériences. L'un des objectifs visé consistait à savoir si la nature et la morphologie des grains jouaient un rôle prépondérant dans les interactions granulaires. Or il semblait, jusqu'à présent, que ces dernières étaient indépendantes du constituant car on n'avait pas pu différencier leur évolution entre granulats roulés et concassés. C'est pourquoi on s'est orienté vers un lissage unique pour chaque fonction. Il était donc inutile de les étalonner à chaque fois.

Le caractère supposé universel des interactions granulaires a relancé l'intérêt d'une modélisation puisqu'un seul paramètre était à prendre en compte : le rapport des tailles des grains.

Pourtant, à notre connaissance, personne n'a tenté une approche théorique au cours de ces dernières années.

Concernant l'effet de paroi, outre celui de Caquot en 1937, les derniers modèles recensés sont ceux de Ben-Aïm (1967), Dodds (1980), Suzuki et Oshima (1983/85), et Yu et Standish (1987) (modèle semi-empirique pour ces derniers).

Concernant l'effet de desserrement, outre le dernier qui vient d'être cité, les modèles référencés sont celui de Toufar et al. modifié par Goltermann et al. (1997) ainsi que deux modèles présentés dans la thèse de de Larrard [DELA88] sur la formulation des bétons à très hautes performances.

Or, on sait qu'une légère modification des lissages adoptés provoque des variations sensibles de compacité, ce qui impose de bien les définir.

Ces deux nouvelles modélisations de l'effet de paroi d'une part, de l'effet de desserrement d'autre part, visent à compléter les informations recueillies expérimentalement.

La première des deux études tire son originalité du fait que la courbure d'un gros grain est prise en compte dans l'étude de la décompaction des petits grains qui l'entourent.

La seconde considère une dilatation isotrope de la structure des grosses particules autour d'un grain insuffisamment petit pour s'immiscer dans un interstice de leur édifice, l'étude s'effectuant dans un volume sphérique défini de manière à assurer la continuité avec celui pris en compte pour l'effet de paroi lorsque le rapport des tailles vaut 1.

Après avoir abordé le problème de la prise en compte des interactions granulaires dans les modèles d'empilement et dans les méthodes de formulation des bétons dans la première partie, nous exposerons, dans la seconde, les principales études théoriques qui abordent ces thèmes. Nous verrons qu'elles fournissent des résultats tantôt pessimistes, tantôt optimistes selon les hypothèses adoptées. Nous nous apercevrons également qu'elles ne respectent pas toujours les conditions aux limites. Mais nous retiendrons surtout que ces différents raisonnements présentent pratiquement tous un intérêt que nous tenterons d'exploiter au mieux.

Les troisième et quatrième parties seront consacrées à la présentation des différentes étapes permettant d'aboutir à notre modélisation respective des effets de paroi et de desserrement dans le cas de sphères. Les hypothèses retenues seront examinées et discutées ainsi que leur adéquation avec les constatations effectuées sur les milieux granulaires. L'influence de la prise en compte de la courbure des grains sur les effets de paroi et de desserrement sera analysée.

Dans la cinquième partie, les modèles seront validés en comparant leurs prévisions à des ensembles de données expérimentales tirées de la littérature. Même si les formules déduites de l'analyse théorique sont plus complexes que les expressions empiriques utilisées jusqu'à présent, leur calcul possède le grand avantage de faire apparaître la dépendance des phénomènes aux différentes grandeurs prises en compte : nombre de grains de la classe dominante en contact avec un élément isolé de l'autre classe, évolution de leur compacité en fonction du rapport des diamètres dans

la zone perturbée, volume de cette dernière, compacité des grains en pleine masse, taille des cavernes.

Dans la sixième partie, les coefficients d'interaction seront déterminés grâce à la simulation numérique. Celle-ci aura permis, auparavant, d'étudier l'indice des vides de mélanges binaires pour deux rapports de tailles différents et de déterminer les nombres de coordination des particules afin de caractériser notamment la notion de blocage de l'assemblée granulaire. L'approche discrète constituera un excellent outil afin d'affiner la comparaison avec les modèles adoptés pour les coefficients d'interaction et de vérifier leur pertinence. Elle nous sera également d'un apport considérable afin de préciser la notion de classe dominante.

La septième partie sera consacrée à l'évaluation du Modèle d'Empilement Compressible (MEC) dernière génération, le MEC 4-paramètres. Les quatre paramètres sont le coefficient d'effet de paroi, le coefficient d'effet de desserrement, le rapport de tailles de caverne critique et l'indice de serrage. Les prévisions sont comparées à environ 780 résultats de compacité obtenus sur des billes de verre, sur des granulats roulés et concassés et sur ceux provenant de la simulation numérique sur des particules lisses.

Enfin, la huitième partie sera dédiée à la mise au point d'un modèle destiné à prédire la viscosité d'une suspension concentrée polydispense de particules sphériques, rigides et inertes. La mise en œuvre de nombreux matériaux hétérogènes, tels que les bétons, est en effet d'autant plus aisée que ceux-ci sont peu visqueux. Parallèlement, leurs performances sont d'autant meilleures que leur porosité est faible. L'idée de combiner un modèle d'empilement à une loi de viscosité est donc fortement attrayante.

CHAPITRE 1

PRISE EN COMPTE DES INTERACTIONS GRANULAIRES DANS LES MODÈLES D'EMPILEMENT ET DANS LA FORMULATION DES BÉTONS.

Estimer les effets de paroi et de desserrement implique, dans un premier temps, de préciser le sens scientifique que l'on attribue à la forme d'interaction correspondante et, dans un deuxième temps, de fixer le cadre théorique dans lequel cette quantification va être effectuée.

Le premier point va être abordé par l'intermédiaire des travaux de BEN-AÏM [BENA70], qui a abordé ces sujets lors de son étude des empilements désordonnés de sphères, et de BARON [BARO82] qui, pour synthétiser les différentes méthodes de composition de béton utilisées en France, s'est livré à une comparaison minutieuse des hypothèses ayant permis leur élaboration. Pour cela, il s'est attaché à dégager les règles qui conduisent aux mélanges binaires de granulats secs les plus compacts. L'utilisation de son écrit, pour étayer notre démarche, nous a paru judicieuse pour deux raisons :

- d'une part, il définit clairement et précisément les effets de paroi et d'interférence, plus global que l'effet de desserrement, et met l'accent sur leur rôle dans la détermination du volume des vides minimal ;
- d'autre part, il fait parfaitement ressortir leurs caractéristiques grâce à la mise en évidence de leurs différences et similitudes dans le but de rechercher le mélange idéal.

Le deuxième point, quant à lui, va nous conduire à effectuer une revue des principaux modèles d'empilement et des méthodes de formulation des bétons existants afin de mieux cerner comment sont pris en compte les effets de paroi et de desserrement. A l'issue de cette comparaison, nous effectuerons le choix du modèle qui servira de cadre théorique à notre modélisation des interactions granulaires.

Nous allons maintenant reprendre ces deux points en détail.

1.1. DÉFINITION DES EFFETS DE PAROI ET DE DESSERREMENT.

Reprenons tout d'abord la démarche utilisée par Apollonius de Perga pour paver le plan (2D).

La possibilité d'insérer un petit disque (diamètre d_2), tangent à trois plus grands de même diamètre d_1 , en contact les uns avec les autres, implique de respecter un

rapport de diamètre limite $\frac{d_2}{d_1}$:

$$\text{I-1} \quad x_{2D} = \frac{(2 - \sqrt{3})}{\sqrt{3}} \approx 0,154$$

Au-dessus de ce rapport, l'insertion ne peut plus avoir lieu sans « séparer » les trois grands disques.

Le même processus répété dans l'espace (3D) entre 4 sphères de diamètre d_1 conduit à ne pas dépasser un rapport limite :

$$\text{I-2} \quad x_{3D} = \frac{(\sqrt{3} - \sqrt{2})}{\sqrt{2}} \approx 0,224$$

Le processus décrit ici a été mis en évidence par Ben-Aïm [BENA70]. Il est appelé : **mécanisme d'insertion**. Lorsqu'il est étendu à un ensemble mono-modulaire de grosses sphères, l'ajout d'un petit nombre de billes de dimension inférieure à celle fournie par le rapport limite permet de combler progressivement le réseau des vides inter-particulaires. Pour ce faire, il convient de respecter une condition supplémentaire, en plus de celle concernant le rapport des diamètres, afin de poursuivre le processus enclenché pour diminuer la porosité du milieu : le volume des petits éléments doit rester plus faible que celui des vides initialement présents.

Au contraire, lorsque le rapport des diamètres est supérieur à la limite présentée ci-dessus, l'insertion ne peut plus avoir lieu : il se produit un **effet de desserrement**. Les petites particules créent une perturbation dans l'ordonnement des plus grandes qui ne peuvent plus former un réseau jointif entre elles.

Le mécanisme connexe dénommé **mécanisme de substitution** s'observe lorsque quelques grosses particules sont ajoutées dans un océan de particules fines, le mélange des deux étant effectué de sorte que les gros éléments sont dispersés dans la matrice réceptrice. Dans cet état, la classe élémentaire la plus grossière ne présente pas une structure intrinsèque et chacun de ses grains est indépendant des autres. Ainsi donc, il est question de la substitution par une grosse particule d'éléments plus fins et des vides qui se situent entre eux. Deux effets inverses liés au phénomène de substitution se produisent alors. Le premier, facilement

compréhensible intuitivement, consiste en une augmentation de la compacité en raison de la présence des grosses particules qui occupent une partie de l'espace jusqu'alors dédié à un certain nombre de vides inter-particulaires. Le second, au contraire, se traduit par un supplément de porosité dans la zone de contact entre la grosse sphère et les petites qui sont plaquées contre sa paroi : c'est l'effet de paroi. Selon le rapport des diamètres, la conséquence de l'association de ces deux effets est soit une augmentation de compacité (faible rapport des diamètres), soit une diminution de compacité (rapport des diamètres se rapprochant de 1).

Mettons tout cela en évidence grâce à l'étude de l'évolution de l'indice des vides d'un mélange de deux tranches granulaires de diamètres d_1 et d_2 très différents ($d_1 \gg d_2$) en fonction du titre volumique de la classe la plus fine en utilisant le modèle de Furnas [FURN29].

Désignons par :

- α_1 et α_2 leur compacité réelle. L'hypothèse de base de notre étude consiste à les prendre égales : $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ (compacité d'un milieu monomodulaire).
- e_1 et e_2 leur indice des vides : $e_1 = \frac{1}{\alpha_1} - 1$ et $e_2 = \frac{1}{\alpha_2} - 1$.
- ϕ_1 et ϕ_2 les volumes occupés par chaque classe dans l'unité de volume du mélange granulaire.
- γ_1 et γ_2 leur titre volumique dans le mélange :

I-3

$$\gamma_1 = \frac{\phi_1}{\phi_1 + \phi_2} \text{ et } \gamma_2 = \frac{\phi_2}{\phi_1 + \phi_2}$$

Dans un premier temps, effectuons l'expérience consistant à insérer, dans une matrice constituée au départ de gros éléments uniquement, des petites quantités de composant suffisamment fin et mobile pour se glisser dans les interstices disponibles. L'indice des vides du mélange e diminue donc à proportion du titre volumique des petits grains ajoutés. Son évolution selon le mécanisme d'insertion est donc le suivant :

I-4

$$e = \frac{e_1 \phi_1 - \phi_2}{\phi_1 + \phi_2} = e_1 \gamma_1 - \gamma_2 = e_1 - (1 + e_1) \gamma_2$$

Dans un deuxième temps, effectuons l'expérience consistant à substituer un certain nombre d'éléments fins constituant une matrice par des gros éléments, en petite quantité, disséminés dans celle-ci. L'hypothèse de conservation, par l'assemblée

granulaire réceptrice, de sa structuration et donc de son indice des vides e_2 dans un volume apparent réduit du fait de la présence des grosses particules engendre, pour le mélange, l'obtention d'une valeur de e qui, selon le **mécanisme de substitution**, peut s'exprimer par :

$$I-5 \quad e = \frac{e_2 \phi_2}{\phi_1 + \phi_2} = e_2 \gamma_2$$

L'évolution de l'indice des vides selon ces deux mécanismes est représentée par la figure I-1. Elle ne possède une signification physique que pour des rapports de taille

$x = \frac{d_2}{d_1}$ infimes, idéalement tendant vers 0, et pour un titre volumique de petites particules faible pour l'équation I-4 et important pour l'équation I-5.

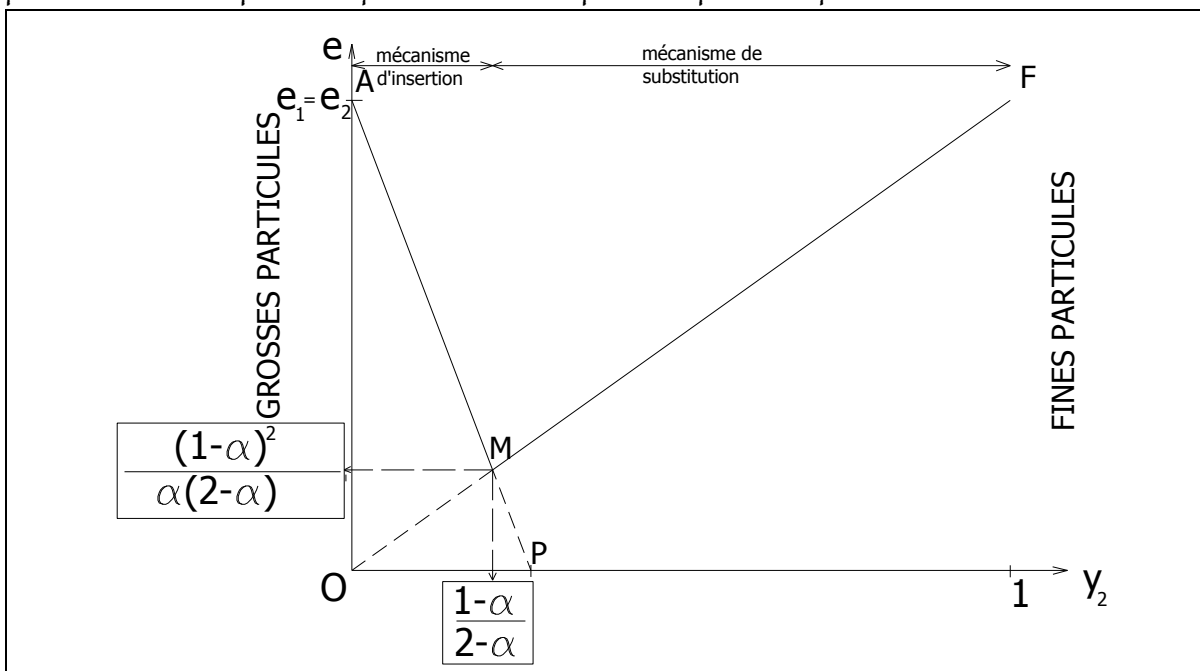


Figure I-1 : évolution idéalisée de l'indice des vides dans un milieu bi-disperse en fonction du titre volumique des petites particules.

Les droites AP et OF représentent l'évolution de l'indice des vides selon respectivement les mécanismes d'insertion et de substitution. Leur point de rencontre correspond au mélange le plus compact qui pourrait idéalement exister.

Sur MF, nous trouvons des grosses particules noyées dans la matrice constituée par la classe fine, sans que la structure de cette dernière ne soit modifiée. Sur MA, l'ajout de petits éléments ne vient pas desserrer les grains de plus grande taille.

En M, le mélange est constitué de petites billes (de compacité α) venant se nicher dans la structure des grosses billes (présentant également une compacité α) dont

tous les vides seraient remplis. L'indice des vides minimal vaut $\frac{(1-\alpha)^2}{\alpha(2-\alpha)}$, correspondant à une porosité égale à $(1-\alpha)^2$, le titre volumique des petites particules étant de $\frac{(1-\alpha)}{(2-\alpha)}$.

Dans la pratique, ces mélanges sont impossibles à réaliser, le seul composant susceptible de fournir de tels résultats ne pouvant être qu'un liquide.

Pour deux matériaux granulaires, nous n'obtenons pas le triangle FMA parce que leur mélange ne peut être effectué sans que l'arrangement de chacun ne s'en trouve altéré.

Revenons au cas des grains fins dominants.

Une grosse particule isolée constitue, en fait, un intrus autour duquel la structure régulière des petites particules est modifiée, celles-ci ne pouvant faire autrement que de venir se ranger contre la paroi rencontrée. Caquot, en 1937 [CAQU37], a illustré ce phénomène de la façon suivante : « ... une coupe suivant une surface quelconque en milieu indéfini rencontre les grains sur une proportion d'aire β , tandis qu'une autre coupe au voisinage immédiat de la paroi ne rencontre qu'une proportion nulle de grains ». La paroi évoquée ne concerne pas seulement celle des coffrages. Elle vaut aussi bien pour les parois constituées par la surface externe des particules de plus ou moins grande dimension.

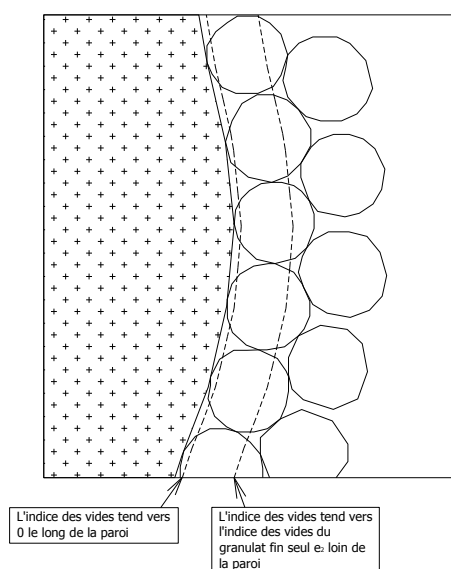


Figure I-2 : Mise en évidence de l'effet de paroi.

On obtient ainsi, sur le diagramme de l'indice des vides, la courbe FH qui se situe au-dessus de FO correspondant à l'hypothèse de non-interaction. Il est communément admis, par la communauté scientifique, que le tronçon FH peut être considéré

rectiligne lorsque la concentration en éléments fins est forte. La condition à respecter est la disjonction des zones perturbées existant autour des grosses particules intruses. En d'autres termes, cela revient à considérer que ces dernières sont suffisamment isolées les unes des autres pour qu'il n'existe aucun volume sécant, intersection entre les espaces subissant les effets de paroi.

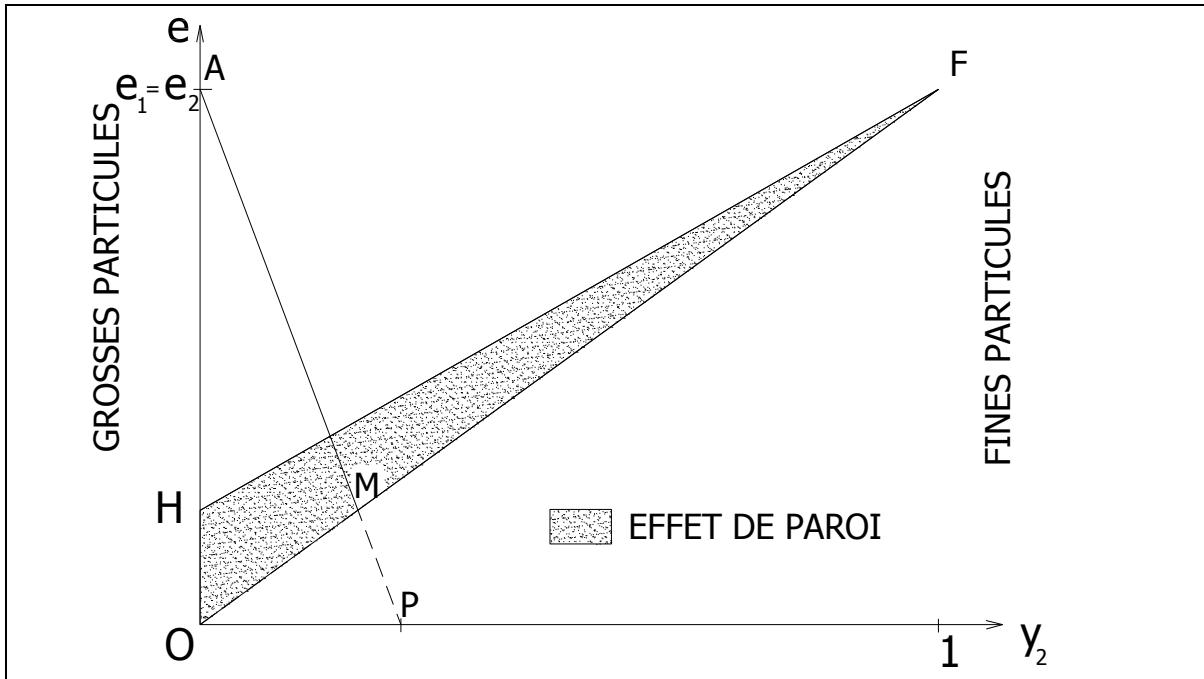


Figure I-3 : influence de l'effet de paroi sur l'indice des vides.

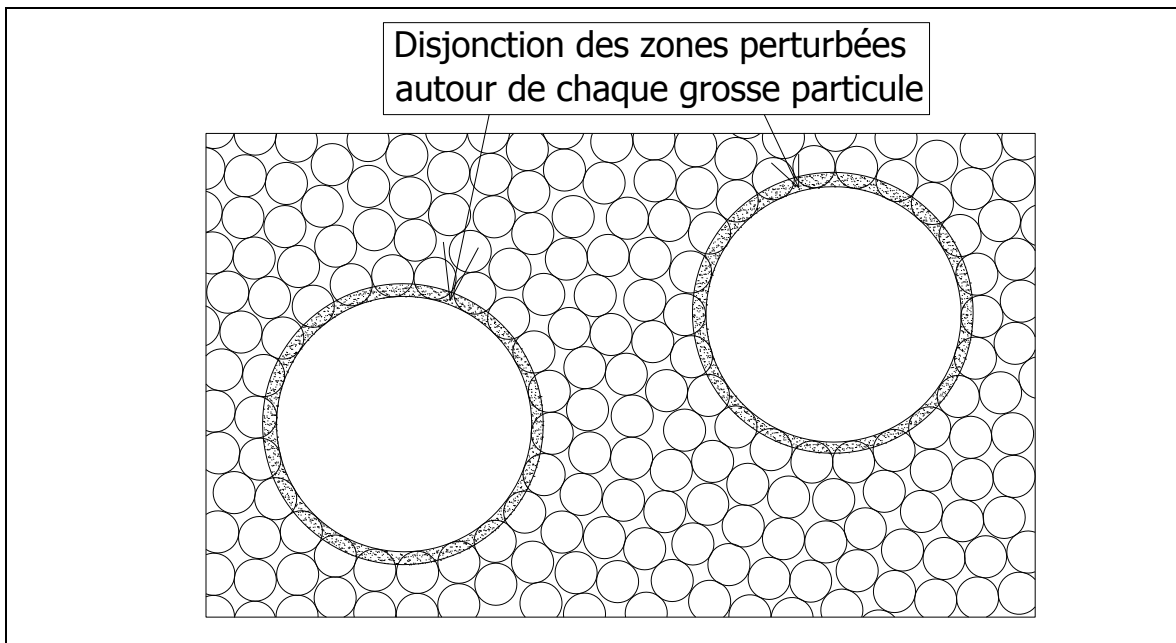


Figure I-4 : disjonction des zones perturbées autour de chaque grosse particule incluse.

De la même manière, reprenons le cas des « gros dominants » en supposant que les tailles de grains ne sont pas infiniment éloignées.

L'introduction, dans leur structure, de quelques grains insuffisamment fins pour se glisser dans les cavernes existantes, provoque leur désorganisation localement, c'est l'effet de desserrement, et plus globalement : c'est l'effet d'interférence (figure I-6).

Autour de chaque particule existe, en effet, une zone perturbée dans laquelle la proportion de vides est plus importante que dans l'empilement monodimensionnel.

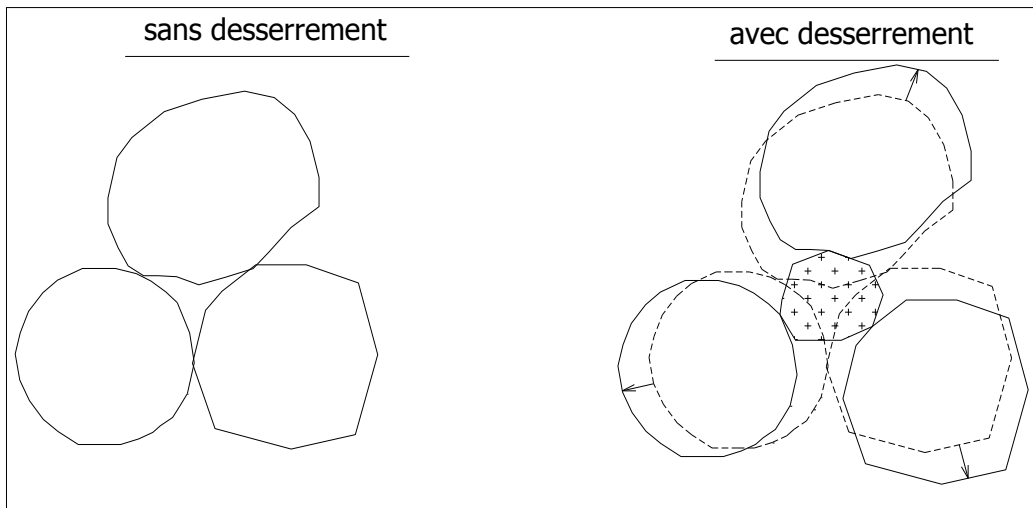


Figure I-5 : mise en évidence de l'effet de desserrement.

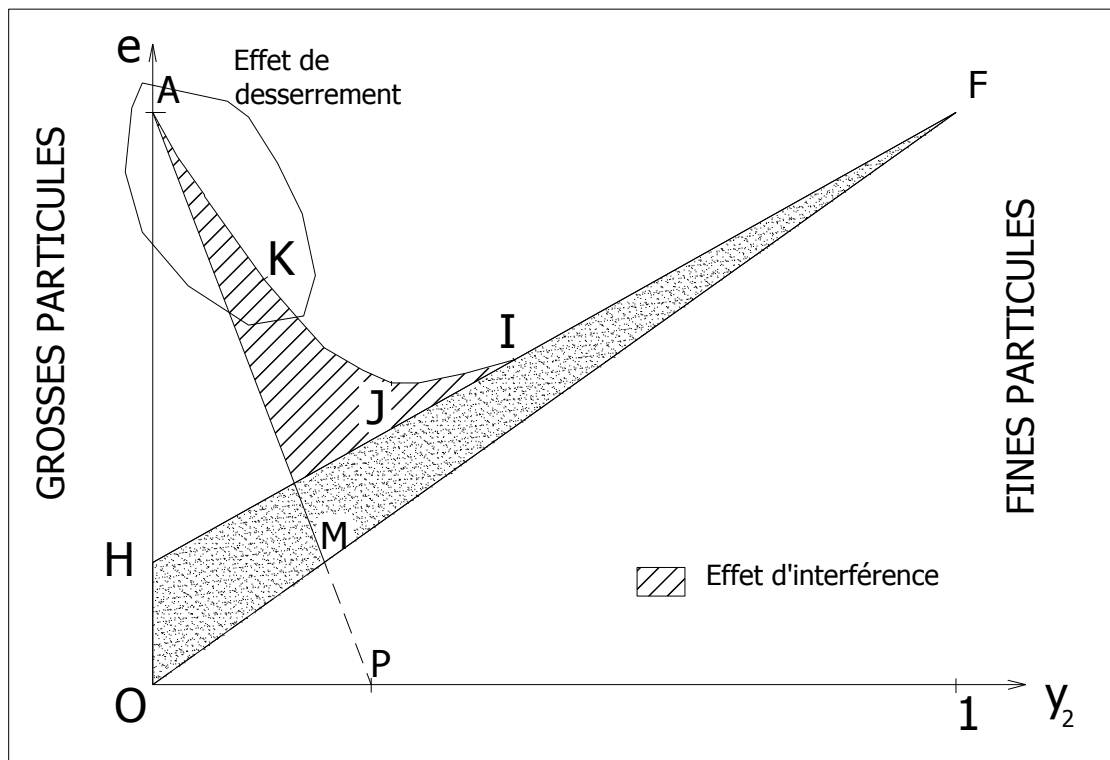


Figure I-6 : influence de l'effet de desserrement et de l'effet d'interférence sur l'indice des vides.

La courbe de variation de l'indice des vides du mélange e en fonction du titre volumique des petits grains γ_2 est confondue avec la droite FH à partir du point I.

A gauche de I, elle est située au-dessus de FH : l'effet d'interférence se fait sentir.

Dans cette zone, deux portions peuvent être mises en évidence :

- entre A et K, lorsque la concentration des particules les plus grosses est suffisamment forte, certains chercheurs ont voulu extrapoler la linéarité de l'effet de paroi à ce tronçon en le considérant rectiligne à l'instar de ce qui se passe entre I et F, sur l'autre bord du diagramme (e, γ_2) . Nous verrons ultérieurement qu'il existe des différences notables entre les deux formes d'interaction qui montrent que cette analogie n'a en définitive qu'un caractère simplificateur ;
- entre K et I se trouve une portion courbe où est situé l'indice des vides minimal du mélange binaire optimal repéré par le point J. Celui-ci est voisin de FH, droite où l'effet de paroi s'exerce seul. Des deux types d'interaction recensés, c'est ce dernier qui conditionne presque exclusivement l'ordonnée de J, correspondant au volume des vides le plus faible qu'il soit possible d'obtenir en combinant les dosages des deux tranches granulaires. En revanche, l'abscisse de J, proportion optimale d'éléments fins, est déterminée par celle de I, en deçà de laquelle l'effet de d'interférence se fait sentir.

Nous pouvons résumer la situation de la façon suivante :

Portion de courbe	Caractéristiques du mélange	Type d'interaction	Rôle du gros granulat
Segment FI	Riche en éléments fins	Effet de paroi	Il intervient par sa surface spécifique car c'est l'aire de ses parois qui conditionne l'arrangement des petits grains.
Tronçon AK	Pauvre en éléments fins	Effet d'interférence localement appelé effet de desserrement	Son influence est essentiellement liée à son indice des vides. En effet, le desserrement se produit lorsque les interstices sont trop étroits pour que les particules de petite dimension viennent s'y loger.
Tronçon IK	Mélange intermédiaire	Soit J le point où l'indice des vides est minimal : - c'est essentiellement l'apparition de l'effet d'interférence qui fixe la proportion optimale (abscisse de J) ; - c'est l'effet de paroi qui est prépondérant dans la détermination du volume des vides minimal (ordonnée de J). Caquot avait en effet vérifié que ce dernier augmentait avec la surface des grains les plus gros.	Son rôle dépend principalement de la granulométrie de ses interstices, donc, à la fois de sa surface spécifique et de son indice des vides.

Tableau I-1 : influence des interactions géométriques sur l'indice des vides en fonction de la richesse en éléments fins ou gros.

Il existe cependant une différence importante entre les deux formes d'interaction recensées. L'une est linéaire et satisfait au principe de superposition : l'effet de deux parois est la somme des influences exercées par chacune d'entre elles. L'autre, au contraire, apparaît à partir d'une proportion seuil : la variation de l'effet de desserrement ou de l'effet d'interférence par rapport au volume des éléments fins ne peut pas, en toute rigueur, être représentée par une droite, à l'intérieur du domaine où les grosses particules constituent la classe dominante.

Face à cette difficulté, les différents chercheurs qui se sont lancés dans des tentatives de mises au point de modèles d'empilement ou d'élaboration d'une théorie de la granulation optimale ont adopté des stratégies de formulation diversifiées.

1.2. CONSÉQUENCES SUR LES STRATÉGIES D'ÉLABORATION DES MODÈLES D'EMPILEMENT ET DE FORMULATION DES BÉTONS.

Avant d'aborder les problèmes spécifiques de prise en compte des effets de paroi et de desserrement/d'interférence dans les empilements granulaires et dans la formulation des bétons, il semble opportun de les resituer dans un petit contexte historique afin de bien comprendre la motivation des chercheurs et la finalité des démarches entreprises. Les références bibliographiques seront précisées dans les paragraphes suivants.

Dans la longue histoire du béton, les Romains furent les premiers à tenter une approche de composition il y a environ 2000 ans. Ils utilisaient simplement des pouzzolanes mélangées avec de la chaux. Le Panthéon de Rome constitue une parfaite illustration de la durabilité et de la résistance atteinte avec ce matériau. L'« art » des Romains semble avoir disparu en même temps que leur empire.

Ce n'est qu'au 18^{ème} siècle que le béton réapparut lorsque les ciments naturels ont été découverts. Dans les premières étapes de son développement, le béton était préparé dans un état non plastique puis tassé par couches successives à l'aide de dames. Au 20^{ème} siècle, avec l'avènement du béton armé, ce type de préparation a été abandonné.

C'est un peu avant, à la fin du 19^{ème} siècle, que le concept d'empilement fut introduit grâce à Féret qui entreprit des travaux d'une importance considérable. Leur ampleur fut telle que l'on peut considérer qu'ils sont à l'origine de la découverte des premières lois sur le béton.

En 1907, **Fuller et Thompson** sont arrivés, à partir d'expériences, à la conclusion qu'il existe certaines courbes granulométriques idéales représentatives de la distribution optimale de chaque taille de grains en vue d'aboutir au minimum de vides dans le mélange. Leurs travaux ont été à l'origine d'un nombre considérable de recherches sur ce « graal » des chercheurs en formulation des bétons. En 1929, **Andreasen et Andersen** proposent une équation plus générale que celle de leurs prédécesseurs. En 1994, **Dinger et Funk** apportent une amélioration supplémentaire en faisant intervenir la taille de grain minimale dans la fonction de distribution des tailles de grains.

En France, **Caquot** expose pour la première fois en 1937 une théorie générale de structuration granulaire des bétons de porosité minimale mettant en évidence la nécessité de renforcer le dosage des classes extrêmes lorsqu'on passe d'une distribution illimitée à une distribution bornée. Il fait apparaître l'influence considérable de l'effet de paroi sans pour autant faire intervenir l'effet de desserrement ou d'interférence.

Ce dernier a été décrit par **Weymouth** en 1933.

La théorie de **Caquot** a inspiré bon nombre de chercheurs français, notamment **Faury** (1958) et, indirectement, **Dreux** (1970), qui ont ainsi tiré profit de ses recherches sur l'effet de paroi.

Seulement, si les courbes granulométriques de référence permettent d'approcher les proportions idéales de chaque taille de grain vis-à-vis de la recherche de la compacité maximale, elles présentent trois inconvénients majeurs vis-à-vis de ce but à atteindre. Premièrement, les chercheurs qui les établissent le font en général avec plusieurs objectifs à la fois : ils souhaitent obtenir en même temps une bonne ouvrabilité, sans risque de ségrégation et une qualité de parement irréprochable. Tout dépend alors de la qualité que l'on souhaite privilégier. Par conséquent, une large variété de distributions sont possibles : il n'existe pas une courbe idéale qui conviendra dans toutes les circonstances. Deuxièmement, elles ne permettent pas de prédire avec précision la compacité du mélange obtenu.

Troisièmement enfin, leur mise au point nécessite souvent des expériences coûteuses s'échelonnant sur de nombreuses années. C'est ainsi qu'ont procédé bon nombre de précurseurs à une époque où une approche culinaire s'avérait encore possible du fait d'un nombre de constituants encore réduit. Dès lors que les particules ultrafines (fumée de silice) ont fait leur apparition, la plupart des données expérimentales recueillies sur les bétons ordinaires se sont révélées inutilisables.

C'est pourquoi certains chercheurs ont estimé qu'il était nécessaire de revenir aux fondamentaux de la physique des milieux granulaires, en commençant par les mélanges binaires ou ternaires, avant de pouvoir généraliser aux mélanges multi-composants et d'établir un lien avec les granulométries continues.

Les travaux de **Furnas**, déjà cité, furent alors remis à l'ordre du jour. Ingénieur travaillant dans une exploitation de charbon en 1928, il élaborait une des premières théories sur le remplissage des vides après avoir constaté que l'entassement des morceaux de minerai dans les conteneurs aboutissait à des disparités importantes en terme de volume. Mais il travailla sur des empilements idéaux et ses résultats furent pris à défaut par les expériences de **Andreasen et Andersen** en 1929 et de **Powers** en 1968.

Westman et Hugill, en 1930, fondent leurs travaux sur l'étude des volumes apparents occupés par des mélanges binaires constitués par des classes granulaires aux diamètres très différents. En 1936, ils font évoluer leur modèle pour le rendre plus réaliste grâce à l'introduction d'un coefficient dans une simple équation conique faisant intervenir des volumes apparents.

En 1950, **Mooney** élabore un modèle de viscosité des suspensions dans lequel figure un modèle d'empilement qui constituera une source d'inspiration précieuse pour **Stovall et de Larrard** notamment. Il fait appel à un facteur d'encombrement pour caractériser les interactions granulaires et propose une représentation sommaire de son évolution en fonction du rapport des diamètres des particules.

Ben-Aïm, entre 1967 et 1970, vient compléter les travaux précédents. Convaincu de l'importance de l'effet de paroi sur l'évolution de la porosité des mélanges réels, il met au point un excellent outil pour expliquer les mécanismes d'empilement de deux groupes de particules. Il définit une cellule sphérique, dans laquelle la structure des petits grains est relâchée autour de chaque grosse particule, qui sera reprise par **Suzuki et Oshima** (1983/85).

En 1977, **Toufar, Klose et Born** créent un modèle de compacité pour mélange binaire modifié en 1997 (**modèle Toufar modifié**) par **Goltermann, Johansen et Palbol** qui l'étendent ensuite à un mélange ternaire. Pour cela, ils utilisent un diamètre caractéristique pour chaque fraction. Lorsque celles-ci sont au nombre de trois, ils suggèrent de combiner les 2 fractions extrêmes et mélangent cette fraction mélangée avec la troisième. Un logiciel, **Europack**, permet de minimiser les vides à partir de cette théorie. Par ailleurs, **Andersen et Johansen** ont combiné les modèles de **Ben-Aïm** d'une part, et **Toufar, Klose et Born** d'autre part, pour développer des séries de tableaux permettant les combinaisons de granulats.

En 1980, **Dodds** propose une approche statistique et géométrique. S'engouffrant dans une voie ouverte par **Wise** en 1952, il découpe l'espace en tétraèdres dont les sommets sont les centres de 4 sphères en contact parfait distribuées de façon aléatoire. La connaissance de la distribution des fréquences des tétraèdres permet de déterminer la porosité ou la compacité d'un milieu poly-disperse. D'autres chercheurs emprunteront le même type de démarche mais les calculs deviennent rapidement très complexes.

En 1986, **Stovall** s'inspire du modèle d'empilement contenu dans le modèle de viscosité de **Mooney** et prend également comme point de départ un mélange binaire sans, puis avec interactions. Considérant à la fois les effets de paroi et de desserrement, **de Larrard** généralise la démarche à un mélange de classes granulaires multiples pour aboutir au **modèle linéaire de compacité (MLC)**. Il établit ensuite la jonction entre son modèle discontinu et une formulation continue avec recherche de la distribution optimale.

En 1987, **Yu et Standish** élaborent également un modèle linéaire de compacité, très semblable au précédent, mais tirant sa source dans les équations en volumes apparents sans interactions de **Westman et Hugill** qu'ils modifient et qu'ils expriment ensuite en terme de compacité. Ils prennent en compte les interactions granulaires par l'intermédiaire des expressions de **Ridgway et Tarbuck (1968)**. Les deux modèles linéaires de compacité de **Stovall** d'une part et **Yu et Standish** d'autre part peuvent facilement être reliés l'un à l'autre.

En 1999, grâce à l'insertion d'un indice de compaction supposé être représentatif de l'énergie fournie au béton lors de sa mise en œuvre, **de Larrard** conçoit le **modèle d'empilement compressible (MEC)** qui lui permet de confirmer la loi de **Caquot** pour la distribution illimitée mais uniquement en cas de serrage infini. Il la contredit toutefois pour des procédés de mise en place de type chantier. Pour ce faire, il fait appel à un véritable laboratoire informatique (baptisé **Bétonlab.Pro**) capable d'optimiser la formulation des bétons sur la base d'un cahier des charges performantiels.

A la même époque et parallèlement à **de Larrard** mais indépendamment de celui-ci, **Dewar** développe le même genre d'outil. L'ère de l'informatique permet des développements spectaculaires : le « système béton », selon l'expression de **de Larrard**, fait son apparition. Dans la continuité des travaux de **Weymouth** (1933), Dewar met au point une théorie des mélanges faisant intervenir l'effet d'interférence entre particules en prenant comme support le diagramme de l'indice des vides d'un mélange binaire. Il fait également intervenir l'effet de paroi pour aboutir à la **théorie des mélanges de particules (TPM)** qui sera intégrée dans le logiciel **MixSim**.

Depuis, l'usage de l'informatique et des codes de calcul s'est encore accentué. L'essor de la simulation numérique a contribué à affiner les approches. Des techniques de plus en plus sophistiquées permettent de créer des empilements séquentiels, particule par particule, prenant en compte une multitude de paramètres tels que l'impact, l'élasticité, le rebond pendant le placement, les mouvements durant la vibration, etc. Nous y reviendrons ultérieurement.

Globalement, les modèles d'empilement peuvent être regroupés dans les catégories suivantes :

- modèles d'empilement à deux composants. Ce sont des modèles analytiques basés sur la géométrie des différentes classes granulaires.
- modèles d'empilement multi-composants. Ils constituent une généralisation des précédents.
- modèles à distribution de tailles de particules continue. Ils permettent éventuellement d'aboutir à l'optimisation d'une courbe granulaire de référence.

La figure I-7 résume sommairement quelques-uns des principaux modèles en deux catégories principales : les modèles discrets et continus. Les noms de **de Larrard**, de **Zheng** et **Brouwers**, notamment, sont situés à l'articulation de ces deux catégories. Le premier a utilisé son modèle d'empilement pour justifier les courbes granulaires de référence utilisées dans certaines méthodes de composition de béton. Les seconds ont établi, respectivement en 1990 et en 2006, une sorte de grande théorie de l'unification.

Sur la figure I-7 sont également distingués les modèles prenant en compte l'effet de paroi et/ou l'effet de desserrement/d'interférence par rapport à ceux qui ne les considèrent pas.

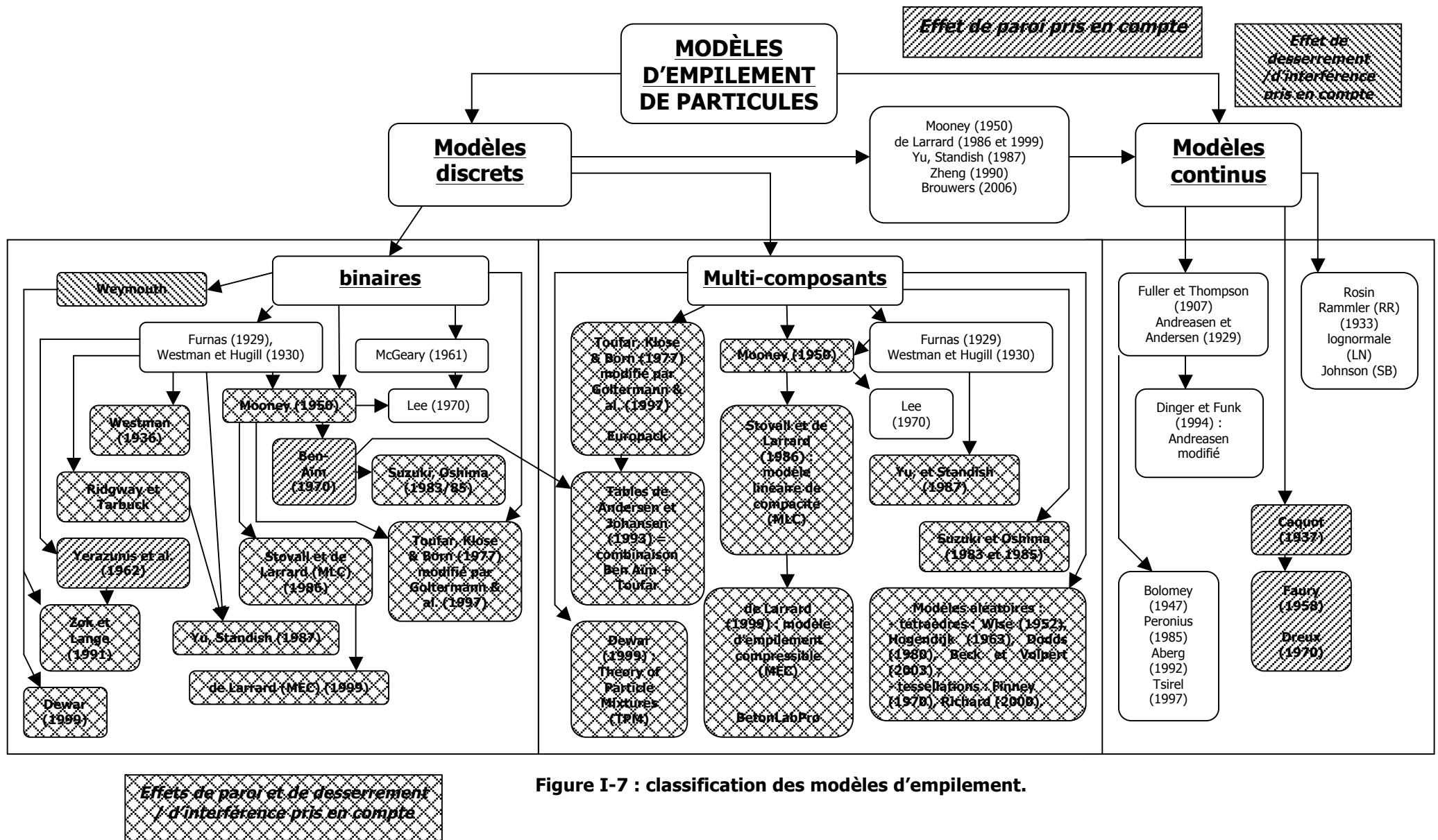


Figure I-7 : classification des modèles d'empilement.

Nous allons maintenant détailler les modèles discrets qui traitent :

- des mélanges binaires sans interactions ;
- des mélanges binaires avec interactions ;
- des mélanges poly-disperses sans interactions ;
- des mélanges poly-disperses avec interactions.

Puis, nous survolerons quelques théories liées aux mélanges aléatoires. Enfin, nous traiterons des modèles continus et des courbes granulaires de référence.

1.2.1. Les mélanges binaires sans interactions.

1.2.1.1. Modèle de Westman et Hugill (1930).

En 1930, Westman et Hugill [WEST30] ont publié un algorithme, basé sur un modèle discret, pour calculer la compacité d'un empilement multi-composants. Ils ont démontré leur procédure sur des mélanges binaires et ternaires avant de l'étendre à des mélanges avec 4 tailles de grains ou plus. Leur calcul est basé sur un volume apparent V_a qui représente le volume nécessaire pour loger un volume absolu de particules égal à une unité. Il constitue l'inverse de la compacité c ou l'indice des vides e auquel on ajoute 1 : $V_a = \frac{1}{c} = e + 1$.

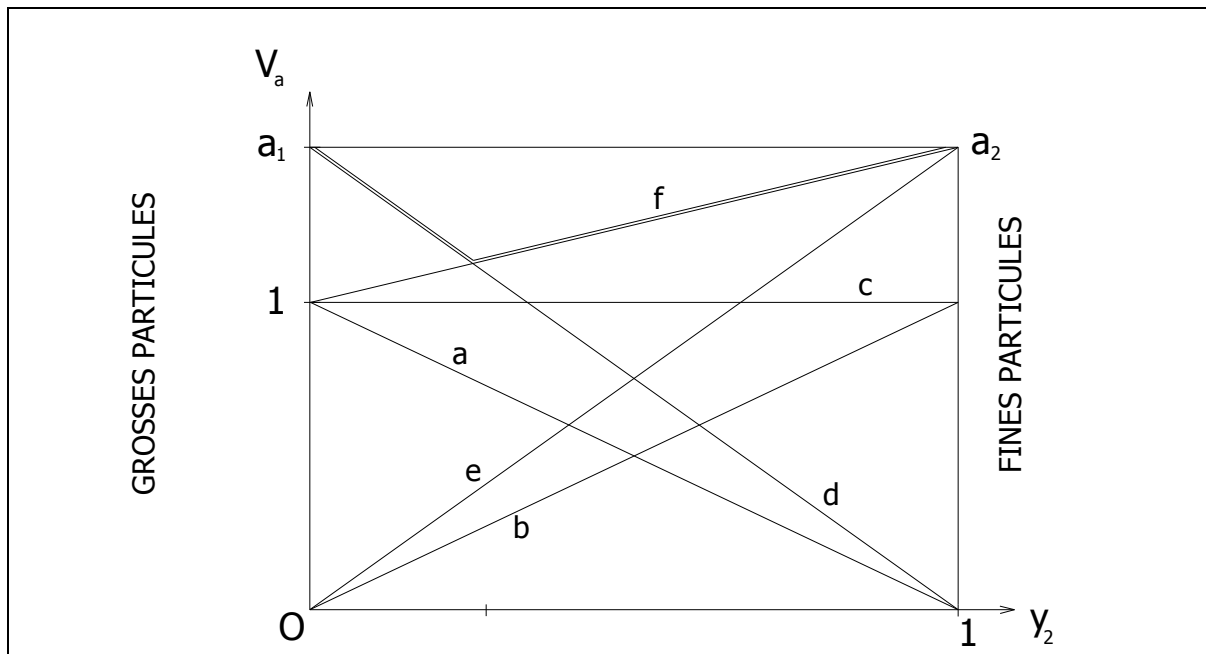


Figure I-8 : évolution du volume apparent d'un mélange binaire en fonction du titre volumique des petits grains selon la théorie de Westman et Hugill et d'après les explications de Dinger et Funk [DING94].

a_1 et a_2 sont les volumes apparents des grosses (petites) particules dans un empilement de poudre mono-modulaire.

La ligne **a** correspond au volume absolu des grosses particules.

La ligne **b** correspond au volume absolu des petites particules.

La ligne **c** correspond à la somme des volumes absolus de toutes les particules (fines et grosses) qui vaut **1** d'après la définition du volume apparent.

La ligne **d** correspond au volume apparent des grosses particules, c'est-à-dire au volume nécessaire pour les loger.

La ligne **e** correspond au volume apparent des petites particules.

La ligne **f** correspond à la somme du volume apparent des fines et du volume absolu des grosses particules.

Le **V** en gras sur la figure correspond au volume apparent minimum du mélange binaire. Il est constitué de la ligne **d** d'un côté et de la ligne **f** de l'autre.

Lorsque les grosses particules sont largement prédominantes, le volume apparent du mélange est conditionné par le volume qu'elles occupent. Les éléments fins viennent se glisser dans les interstices en réduisant le volume des vides sans créer une augmentation du volume apparent du mélange.

Au fur et à mesure que l'on augmente le dosage des fines (ligne **d**, partie gauche du **V**), la quantité de grosses particules diminue réduisant le volume des vides à l'intérieur duquel peuvent se glisser les petits éléments. Lorsqu'on atteint le creux du **V**, le volume des interstices des grosses particules correspond exactement au volume apparent des fines et la porosité minimale du mélange est atteinte.

Lorsque le dosage des particules fines s'accroît encore, les gros éléments sont maintenant dispersés à l'intérieur de cette matrice réceptrice. Le volume apparent du mélange correspond alors à la somme du volume apparent des fines et du volume absolu des grosses particules (ligne **f** représentant « l'addition » des lignes **a** et **e**).

D'après Westman et Hugill, le volume apparent du mélange binaire s'exprime soit par l'équation de la ligne **d** si les grosses particules sont dominantes (équation V_{a1}), soit par l'équation de la ligne **f** si les fines sont dominantes (équation V_{a2}) :

$$\text{I-6} \quad V_{a1} = a_1 \gamma_1 = \frac{\gamma_1}{\alpha_1} = \gamma_1 (1 + e_1) = (1 - \gamma_2) (1 + e_1)$$

$$\text{I-7} \quad V_{a2} = \gamma_1 + a_2 \gamma_2 = \gamma_1 + \frac{\gamma_2}{\alpha_2} = 1 + e_2 \gamma_2$$

en considérant que les deux types de particules possèdent la même densité absolue.

Le meilleur mélange binaire prévisible correspond à la plus grande des deux valeurs : V_{a1} ou V_{a2} . En d'autres termes, le pire cas définit le mélange.

Il est aisé de montrer que les équations I-6 et I-7 correspondent respectivement aux équations I-4 et I-5 exprimées en fonction de l'indice des vides du mélange. Elles rendent compte, par conséquent, des mécanismes d'insertion et de substitution déjà évoqués précédemment.

Si on les exprime en termes de compacité et sachant, d'après la formule I-3, que

$$y_1 = \frac{\phi_1}{\phi_1 + \phi_2} = \frac{\phi_1}{c} \text{ et } y_2 = \frac{\phi_2}{\phi_1 + \phi_2} = \frac{\phi_2}{c}, \text{ elles deviennent :}$$

$$\text{I-8} \quad c_1 = \alpha_1 + \phi_2 = \frac{\alpha_1}{y_1} = \frac{\alpha_1}{1 - y_2}$$

$$\text{I-9} \quad c_2 = \alpha_2 + (1 - \alpha_2) \phi_1 = \frac{\alpha_2}{1 - (1 - \alpha_2) y_1}$$

La compacité du mélange binaire correspond à la plus petite de ces deux valeurs.

Le modèle de Westman et Hugill est donc un **modèle linéaire de volume apparent en fonction du titre volumique des particules**.

1.2.1.2. Modèle de Mooney sans interactions (1950).

Le modèle de Mooney [MOON50] est un des nombreux modèles de viscosité existants. La littérature les concernant est relativement abondante car ils touchent de nombreux domaines (notamment la biologie avec la fluidité du sang). Ils permettent de calculer la viscosité d'une suspension η à partir de la connaissance de la viscosité du fluide suspendant η_0 et de la fraction volumique de la phase solide ϕ . L'un des plus célèbres, notamment en raison de la renommée de son auteur, est celui d'Einstein qui permet d'estimer la viscosité d'une suspension peu concentrée de particules sphériques [EINS06] :

$$\text{I-10} \quad \eta = \eta_0 (1 + 2,5 \phi).$$

L'introduction des fluidifiants dans les bétons pour les rendre de moins en moins visqueux a remis à l'ordre du jour ces modèles de viscosité dans les années 1980 dans le domaine du génie civil. Ils ont pu alors servir de support à certains chercheurs qui ont voulu relier la maniabilité du béton à sa compacité, deux des principales caractéristiques prises en compte dans les formulations. Le béton est alors considéré comme une suspension à forte concentration dont on souhaite optimiser le squelette granulaire afin de diminuer la porosité pour une maniabilité donnée de mise en œuvre,

cette dernière étant reliée à la viscosité. Mais si les situations diluées sont parfaitement maîtrisées, l'existence d'une valeur limite de la fraction volumique solide au sein de la suspension pour laquelle la viscosité tend vers l'infini pose problème pour les fortes concentrations. Seuls les modèles du type auto-cohérents semblent convenir.

Le modèle de Mooney est l'un d'eux. Il est remarquable dans la mesure où il s'agit du premier modèle de viscosité dans lequel a été introduit un modèle d'empilement.

Dans ce paragraphe, nous allons le présenter dans le cadre d'un mélange binaire de 2 classes présentant des diamètres égaux puis très différents.

Mooney généralise tout d'abord la loi d'Einstein en écrivant :

$$\text{I-11} \quad \eta = \eta_0 H(\phi)$$

Son raisonnement est ensuite le suivant. Si des sphères toutes de même diamètre sont incorporées dans un fluide suspendant en deux fractions ϕ_a et ϕ_b , l'ajout de la première fraction engendre une augmentation de viscosité par un facteur $H(\phi_a)$.

L'addition de la seconde fraction dans la phase visqueuse préalablement constituée avec la première fraction provoque un accroissement de viscosité dans le volume inoccupé par ϕ_a . Dans ce dernier, la concentration ϕ_b y est égale à : $\phi_{ba} = \frac{\phi_b}{1 - \lambda \phi_a}$ où

λ représente ce que Mooney appelle le facteur d'encombrement (crowding factor).

La viscosité est alors multipliée par un facteur $H\left(\frac{\phi_b}{1 - \lambda \phi_a}\right)$. Seulement,

l'encombrement des fractions ϕ_a et ϕ_b devient mutuel. L'introduction de ϕ_b réduit le volume accessible à ϕ_a dont la concentration devient $\phi_{ab} = \frac{\phi_a}{1 - \lambda \phi_b}$. Pour tenir compte

de cet effet, on doit remplacer $H(\phi_a)$ par $H\left(\frac{\phi_a}{1 - \lambda \phi_b}\right)$. Finalement, la viscosité de la

suspension de concentration totale $\phi_a + \phi_b$ devient : $\eta = \eta_0 H\left(\frac{\phi_a}{1 - \lambda \phi_b}\right) H\left(\frac{\phi_b}{1 - \lambda \phi_a}\right)$.

Il est possible de démontrer que l'expression exponentielle :

$$\text{I-12} \quad H(\phi) = \exp\left(\mathbf{B} \frac{\phi}{1 - \lambda \phi}\right)$$

est la solution de l'équation fonctionnelle précédente.

La constante B est déterminée en effectuant un développement limité de l'expression ci-dessus au voisinage de $\phi = 0$, c'est-à-dire pour une suspension fortement diluée. On trouve $B = 2,5$ pour être en accord avec l'équation d'Einstein.

$$\text{I-13} \quad H(\phi) = \exp\left(2,5 \frac{\phi}{1 - \lambda\phi}\right)$$

λ est le facteur d'encombrement.

Pour un mélange binaire de sphères de diamètres égaux $d_1 = d_2$ et de volumes partiels ϕ_1 et ϕ_2 , Mooney aboutit donc au résultat suivant :

$$\text{I-14} \quad H(\phi) = \exp\left(2,5 \frac{(\phi_1 + \phi_2)}{1 - \lambda(\phi_1 + \phi_2)}\right)$$

$$H(\phi) = \exp\left(2,5 \frac{\phi_1}{1 - \lambda\phi_1 - \lambda\phi_2}\right) \exp\left(2,5 \frac{\phi_2}{1 - \lambda\phi_2 - \lambda\phi_1}\right)$$

Pour des sphères de diamètres différents, Mooney remplace le facteur d'encombrement constant λ par des facteurs d'encombrement variables :

$$\text{I-15} \quad H(\phi) = \exp\left(2,5 \frac{\phi_1}{1 - \lambda_{11}\phi_1 - \lambda_{12}\phi_2}\right) \exp\left(2,5 \frac{\phi_2}{1 - \lambda_{22}\phi_2 - \lambda_{21}\phi_1}\right)$$

λ_{11} et λ_{22} sont égaux à l'inverse de la compacité d'un empilement constitué uniquement de particules de même diamètre : $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \frac{1}{\alpha}$.

Pour des sphères de diamètres très différents $d_1 \gg d_2$, la suspension des petites sphères dans le liquide compris entre les grosses se comporte envers ces dernières comme un liquide homogène de viscosité croissante. Par conséquent, les gros éléments ne sont pas perturbés par les petits. Mooney écrit donc : $\lambda_{12} = 0$. Par ailleurs, le volume accessible à la fraction ϕ_2 est égal à : $1 - \phi_1$. Mooney en déduit : $\lambda_{21} = 1$. Dans ce cas, l'équation précédente devient :

$$\text{I-16} \quad H(\phi) = \exp\left(2,5 \frac{\phi_1}{1 - \frac{\phi_1}{\alpha}}\right) \exp\left(2,5 \frac{\phi_2}{1 - \frac{\phi_2}{\alpha} - \phi_1}\right)$$

$$H(\phi) = \exp\left(2,5\alpha \frac{\phi_1}{\alpha - \phi_1}\right) \exp\left(2,5\alpha \frac{\phi_2}{\alpha(1 - \phi_1) - \phi_2}\right)$$

De Larrard [DELA00] a montré qu'il est possible d'exprimer la viscosité d'une suspension de sphères bi-dispersées sous la forme :

$$\text{I-17} \quad H(\phi) = \exp\left(2,5\alpha \frac{\phi_1}{\phi_1^* - \phi_1}\right) \exp\left(2,5\alpha \frac{\phi_2}{\phi_2^* - \phi_2}\right)$$

avec ϕ_1^* la teneur volumique maximale du mélange en classe 1 pouvant être ajoutée dans la suspension avant de provoquer le blocage étant donnée la présence de la classe 2 (et réciproquement pour ϕ_2^*). Pour $\phi_i = \phi_i^*$, la suspension devient empilement et la viscosité tend vers l'infini.

On a par conséquent :

$$\text{I-18} \quad \phi_1^* = \alpha$$

$$\text{I-19} \quad \phi_2^* = \alpha(1 - \phi_1)$$

S'il s'agit de la classe 1 qui provoque le blocage :

$$\begin{aligned} \text{I-20} \quad c_1 &= \phi_1^* + \phi_2 = \alpha + \phi_2 = \alpha + c_1 \gamma_2 \\ \Rightarrow c_1 &= \frac{\alpha}{1 - \gamma_2} \end{aligned}$$

S'il s'agit de la classe 2 qui provoque le blocage :

$$\begin{aligned} \text{I-21} \quad c_2 &= \phi_1 + \phi_2^* = \phi_1 + \alpha(1 - \phi_1) = \alpha + (1 - \alpha)\phi_1 = \alpha + (1 - \alpha)c_2 \gamma_1 \\ c_2 &= \frac{\alpha}{1 - (1 - \alpha)\gamma_1} \end{aligned}$$

La compacité du mélange s'écrit :

$$c = \inf(c_1, c_2)$$

On retrouve les expressions I-8 et I-9 si $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$.

Pour des sphères de diamètres très différents $d_1 \gg d_2$, le modèle d'empilement de Mooney contenu dans son modèle de viscosité conduit donc au modèle de Westman et Hugill.

Comme il a été dit précédemment, le modèle de Mooney est novateur dans la mesure où l'auteur apporte des éléments de réponse sur la méthode de calcul de la fraction volumique occupée par la phase solide.

Seulement, il convient d'établir la remarque suivante. Reprenons l'exemple des sphères de même diamètre et de même compacité mono-modulaire incorporées en deux fractions ϕ_a et ϕ_b et calculons la fraction volumique totale dans la suspension

$\phi_{ba} + \phi_{ab}$:

$$\phi_{ba} + \phi_{ab} = \frac{\phi_b}{1 - \lambda \phi_a} + \frac{\phi_a}{1 - \lambda \phi_b} = \frac{\alpha \phi_b}{\alpha - \phi_a} + \frac{\alpha \phi_a}{\alpha - \phi_b} = \frac{\alpha^2 (\phi_a + \phi_b) - \alpha (\phi_a^2 + \phi_b^2)}{\alpha^2 - \alpha (\phi_a + \phi_b) + \phi_a \phi_b}$$

Si nous considérons la limite $\phi_a + \phi_b \rightarrow \alpha$, nous obtenons : $\phi_{ba} + \phi_{ab} \xrightarrow{\phi_a + \phi_b \rightarrow \alpha} 2\alpha$ soit 2 fois la compacité mono-modulaire.

Nous pouvons donc constater que la démarche de Mooney est basée sur une décomposition des fractions volumiques qui, pour les concentrations élevées, conduit à un résultat physiquement aberrant.

1.2.1.3. Modèle de Lee (1970).

En 1970, Lee [LEE70] considère un mélange de 2 tailles de particules sphériques. Sa procédure consiste à remplir un volume unité avec l'empilement aléatoire le plus dense de grosses particules. Celles-ci occupent un volume $\phi_1 = \alpha_1$. On « bourre » alors le volume disponible entre les gros éléments par les petites particules qui occupent à leur tour un volume $\phi_2 = \alpha_2(1 - \alpha_1)$. **On retrouve ainsi les résultats contenus dans le modèle binaire de Mooney sans interactions.**

Dans ces conditions, la compacité du mélange s'écrit :

$$I-22 \quad c_{\max} = \phi_1 + \phi_2 = \alpha_1 + (1 - \alpha_1)\alpha_2$$

Lee considère que les empilements mono-modulaires sont compactés avec la même efficacité et donc que $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$. Il leur affecte la valeur de **0,639**. Le titre volumique des petits grains est alors égal à $\gamma_{2\max} = \frac{\phi_2}{\phi_1 + \phi_2} = 0,265$. L'hypothèse sous-jacente à cette théorie est que les diamètres des petites et grosses particules sont suffisamment différents ($x \leq 0,01$) pour que les interstices compris entre les gros éléments puissent être considérés et traités comme des mini-récipients à l'intérieur desquels on viendrait compacter les éléments fins.

Lorsque le ratio des diamètres x est compris entre **0,05** et **1**, c_{\max} est déterminé grâce aux travaux expérimentaux de McGearry [MCGE61]. En 1961, ce dernier met en place des mélanges de particules sphériques dans des conteneurs. Sa procédure consiste à vibrer et empiler les plus grosses billes de façon à ce qu'elles occupent le volume minimal. Puis il introduit les particules de taille inférieure afin de leur permettre de s'infiltrer dans le lit des plus grosses grâce à une vibration efficace. McGearry considère que sa méthode est valide pour un ratio de diamètres $x < 0,14$ ce qui est en partie contradictoire avec la fourchette énoncée précédemment.

L'étape suivante de Lee consiste à calculer la compacité de mélanges binaires avec une composition bien spécifiée. Il propose une procédure analytique basée sur l'hypothèse que le titre volumique des petits grains à l'optimum, $\gamma_{2\max}$, est indépendant du ratio des diamètres x et conserve une valeur constante **0,265**.

Tout comme Westman et Hugill, il établit sa procédure à partir d'équations de droites mais pour calculer la compacité cette fois-ci. Sachant que celle-ci est l'inverse du volume apparent, ce sont des courbes qu'il aurait dû obtenir selon les auteurs précédents.

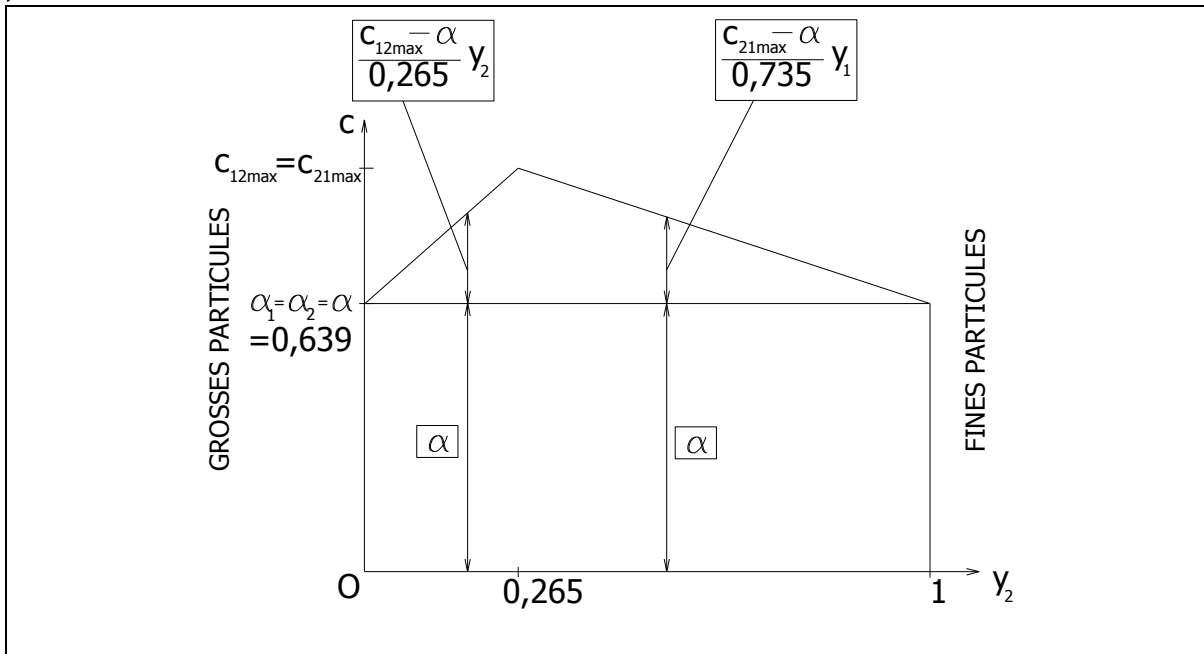


Figure I-9 : évolution de la compacité d'un mélange binaire en fonction du titre volumique des petits grains selon Lee.

Pour Lee :

I-23

$$c_1 = \alpha + \frac{c_{12\max} - \alpha}{0,265} y_2 \text{ si } y_2 \leq 0,265$$

$$c_1 = \alpha(y_1 + y_2) + \frac{c_{12\max} - \alpha}{0,265} y_2 = \alpha y_1 + \left(\frac{c_{12\max} - \alpha}{0,265} + \alpha \right) y_2$$

$$\text{soit : } c_1 = \alpha_{11} y_1 + \alpha_{12} y_2$$

$$\text{avec : } \alpha_{11} = \alpha \text{ et } \alpha_{12} = \frac{c_{12\max} - \alpha}{0,265} + \alpha$$

I-24

$$c_2 = \alpha + \frac{c_{21\max} - \alpha}{0,735} y_1 \text{ si } y_2 > 0,265$$

$$c_2 = \alpha(y_1 + y_2) + \frac{c_{21\max} - \alpha}{0,735} y_1 = \left(\frac{c_{21\max} - \alpha}{0,735} + \alpha \right) y_1 + \alpha y_2$$

$$\text{soit : } c_2 = \alpha_{21} y_1 + \alpha_{22} y_2$$

$$\text{avec : } \alpha_{21} = \frac{c_{21\max} - \alpha}{0,735} + \alpha \text{ et } \alpha_{22} = \alpha$$

$c_{12\max} = c_{21\max}$ est la compacité maximale qui peut être obtenue lorsque l'on mélange les particules de diamètre d_2 et d_1 . Elle est déterminée par l'équation I-22 si $x \leq 0,01$ ou expérimentalement par la procédure de McGearry si $0,05 \leq x \leq 1$.

Le meilleur mélange binaire prévisible correspond à la plus faible des deux valeurs : c_1 ou c_2 (le pire cas définit le mélange).

Exprimées sous forme matricielle, les équations de Lee deviennent :

$$I-25 \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \end{pmatrix}$$

$$\text{avec : } \alpha_{11} = \alpha_{22} = \alpha ; \alpha_{12} = \frac{c_{12\max} - \alpha}{0,265} + \alpha ; \alpha_{21} = \frac{c_{21\max} - \alpha}{0,735} + \alpha$$

La compacité du mélange s'écrit :

$$c = \inf(c_1, c_2)$$

Le modèle de Lee est donc un modèle linéaire de compacité en fonction du titre volumique des particules.

On peut comparer les approches de Lee et de Westman et Hugill en visualisant l'évolution de la compacité d'un mélange binaire sur la figure suivante :

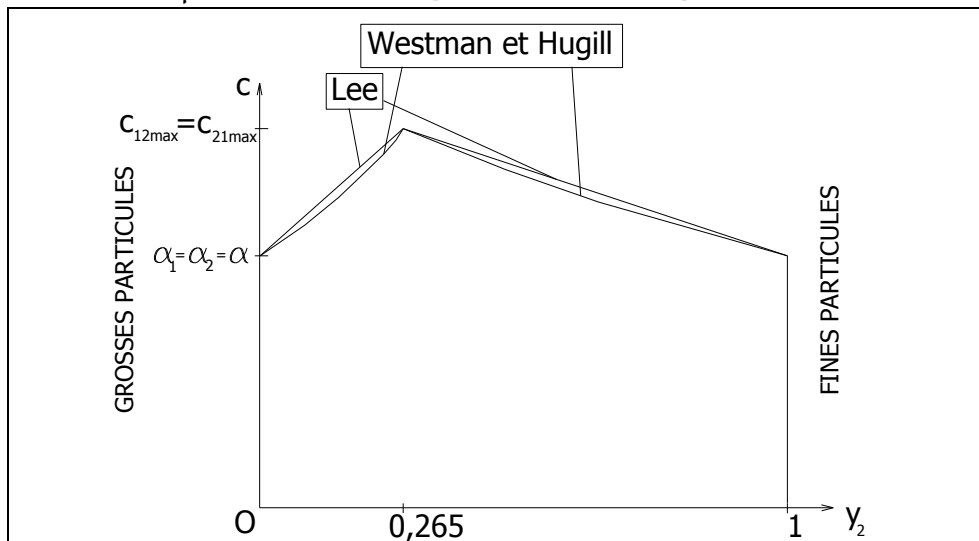


Figure I-10 : comparaison graphique des théories de Lee et de Westman et Hugill.

1.2.1.4. Modèle de Ben Aïm sans interactions (1970), modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard sans interactions (1986), modèle de Yu et Standish (1987).

Ces modèles seront présentés dans le paragraphe des mélanges binaires avec interactions. Néanmoins, lorsque les deux classes présentent des tailles très distinctes et que le mélange est sans interactions, les équations obtenues par ces modèles correspondent au modèle de Westman et Hugill. La compacité dans le cas des gros dominants et dans le cas des fins dominants se calcule respectivement à partir des équations I-8 et I-9.

1.2.1.5. Modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard sans interactions (1999).

Le modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard, qui sera décrit dans le cadre des mélanges binaires avec interactions, constitue le premier outil d'optimisation granulaire élaboré par les hommes du LCPC en France. Son accord avec l'expérience était globalement correct mais les prévisions de compacité étaient surestimées au voisinage de l'optimum. De plus, il ne décrivait pas l'influence de la mise en place.

La distinction entre compacité virtuelle et compacité réelle a donc été introduite dans un modèle de deuxième génération (modèle de suspension solide) puis de troisième génération : le modèle d'empilement compressible (MEC).

La compacité virtuelle ne peut être atteinte qu'avec un serrage maximum ou, en utilisant une image empruntée au génie civil, qu'en déposant les grains un à un à leur emplacement idéal tel un maçon qui viendrait déposer chaque pierre de son mur à l'endroit le plus approprié. On pourrait penser cette notion d'une utilité limitée pour le spécialiste des matériaux granulaires, plus souvent confronté à une matière désordonnée. La compacité obtenue par une mise en place aléatoire ne sera, en effet, jamais celle qui résulterait d'un ordonnancement impeccable d'éléments réalisés à la main. En réalité, la détermination de la compacité virtuelle constitue une première étape de calcul qui permet d'appréhender le mélange comme une entité nouvelle qui intègre précisément chaque particule qui le compose.

La seconde étape consiste à établir le lien entre la compacité virtuelle qui présente, dans la pratique, un intérêt limité, et la compacité réelle du composite une fois mis en place. Un empilement granulaire ne constitue pas, en effet, un édifice géométrique figé mais peut être considéré, au contraire, comme un objet compressible. Il est par conséquent indispensable de lier toute mesure à un protocole garantissant une compaction qui se réfère à des niveaux que l'on pense pouvoir atteindre. Dans ce but, un grand nombre d'expériences ont conduit à l'étalonnage d'un paramètre : l'indice de serrage. Il permet d'associer une grandeur scalaire unique à chaque moyen de mise en place habituellement adopté (simple déversement, piquage, vibration, vibration + pression). Il est d'autant plus élevé que l'on s'approche de l'empilement virtuel, quantifiant ainsi la qualité effective du composite. Nous n'aborderons pas ici le détail de cette étape de calcul.

Revenons donc à la première étape. Sans interactions, les équations utilisées par de Larrard correspondent à celles du modèle de Westman et Hugill de 1930 mais

les compacités en question sont des compacités virtuelles. Les équations I-8 et I-9 deviennent alors [DELA00] :

$$\text{I-26} \quad \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \gamma_2}$$

$$\text{I-27} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - (1 - \beta_2)\gamma_1}$$

On en déduit la compacité du mélange :

$$\gamma = \inf(\gamma_1, \gamma_2)$$

γ_1 et γ_2 : compacités virtuelles d'un mélange binaire respectivement lorsque les gros éléments sont dominants et lorsque les éléments fins sont dominants.

β_1 et β_2 : compacités résiduelles de chaque classe 1 et 2 prises séparément.

1.2.1.6. Théorie des mélanges de particules de Dewar (1983, 1986, 1999) sans interactions.

La théorie de Dewar [DEWA99] s'inscrit dans la lignée des travaux de Weymouth (1933) et Powers (1968). Par rapport aux méthodes déjà exposées, elle est novatrice dans la mesure où elle ne fait pas appel à des volumes apparents ou à des compacités mais à des indices des vides. Nous avons déjà montré l'intérêt d'une telle approche dans le paragraphe 1.1 : celle de travailler avec des droites (comme c'est le cas avec les volumes apparents) pour les mélanges sans interactions.

Reprenons la démarche déjà présentée :

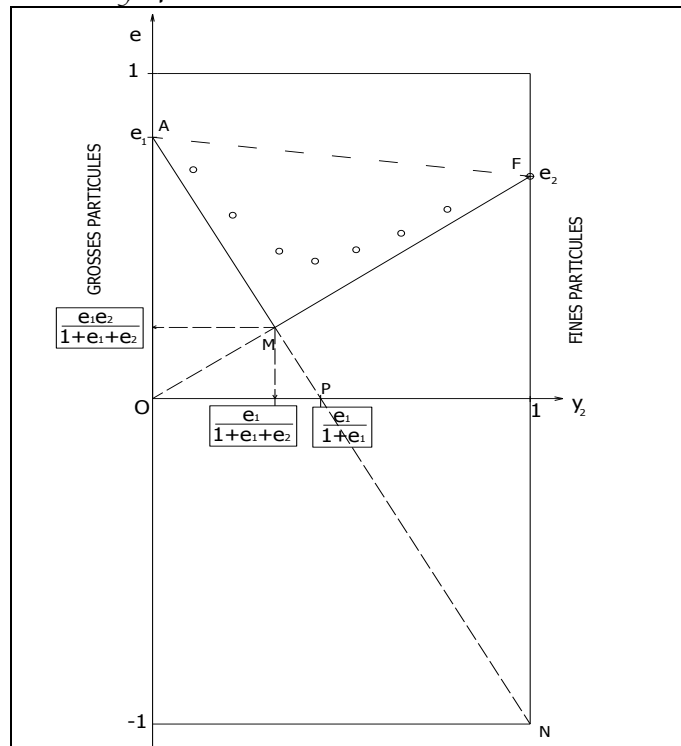


Figure I-11 : évolution de l'indice des vides d'un mélange binaire.

Selon le mécanisme d'insertion, l'équation de la droite AM est, comme nous l'avons déjà observé (équation I-4) :

$$e = e_1 - (1 + e_1)y_2$$

Lorsque cette droite est prolongée, elle a la particularité de passer par le point de coordonnées $(1, -1)$ qui ne possède pas de réalité physique mais qui va se révéler fort intéressant dans la suite de la démarche de Dewar.

Selon le mécanisme de substitution, l'équation de la droite OF est (équation I-5) :

$$e = e_2 y_2$$

Les coordonnées du point d'intersection sont :

$$\begin{aligned} \text{I-28} \quad y_M &= \frac{e_1}{1 + e_1 + e_2} \\ e_M &= \frac{e_1 e_2}{1 + e_1 + e_2} \end{aligned}$$

A partir de là, nous verrons dans le paragraphe « avec interactions » comment Dewar prend en compte les interférences entre particules.

1.2.2. Les mélanges binaires avec interactions.

1.2.2.1. Modèle de Weymouth (1933).

Le modèle d'arrangement de particules de Weymouth [WEYM33] est novateur dans la mesure où il s'agit de la première tentative de mise en évidence des interactions granulaires. Il peut être décrit de la façon suivante.

Si la proportion des gros grains dans le mélange est suffisamment faible, leur effet sur les petits grains est uniquement lié à leur paroi.

Si leur proportion augmente, leur disposition dans le mélange va finir par avoir une influence : certains grains fins se retrouvent « piégés » dans les interstices disponibles qu'ils comblent plus ou moins bien en fonction de leurs dimensions respectives. La structure des éléments fins se trouve décompactée car ils peuvent se retrouver isolés les uns des autres. On dit alors qu'il y a interférence entre les parois des grosses particules si elles sont trop rapprochées.

Weymouth est le premier chercheur à établir un critère afin de vérifier qu'aucune interférence ne se produit : dans le cas où les grains possèdent à peu près tous la même forme, les gros éléments doivent être dispersés dans le mélange de telle

manière que la distance entre eux soit au moins du même ordre de grandeur que le diamètre des éléments fins.

Baron [BARO82] introduit la notion de « jeu » en français (au sens de jeu dans un assemblage) pour caractériser la distribution des gros grains dans le mélange.

Si la proportion des gros grains est inférieure à une proportion « seuil », le « jeu » j est supérieur au diamètre des grains fins d_2 : il est suffisant pour qu'il n'y ait pas d'interférence.

Si la proportion des gros grains est supérieure à cette proportion « seuil », le « jeu » j est insuffisant car inférieur au diamètre des grains fins d_2 . Ces derniers ne forment plus une structure à part entière : il y a interférence. Mais s'ils peuvent se glisser dans les interstices des gros éléments sans les écarter, le « jeu » devient nul.

1.2.2.2. Modèle de Westman (1936).

Même s'il conserve un raisonnement basé sur l'utilisation de volumes apparents, Westman [WEST36] adopte une approche différente de celle de 1930 : sa base de départ consiste à considérer les grains 1 d'un côté du récipient et les grains 2 de l'autre côté : une ségrégation totale se produit. Dans ce cas, la droite représentative du volume apparent du mélange a pour équation :

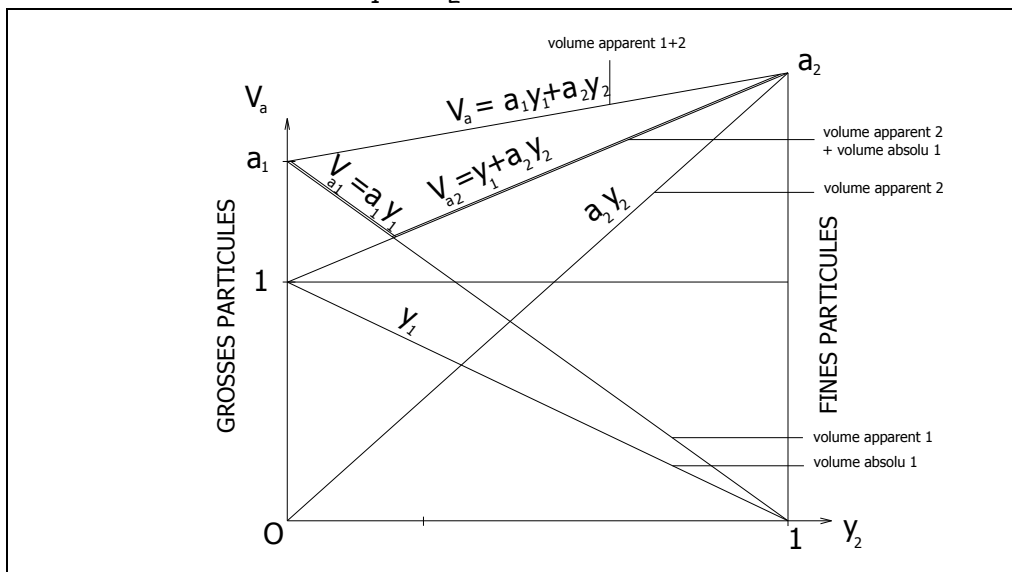
I-29

$$V_a = a_1 y_1 + a_2 y_2$$

ou, en d'autres termes :

$$\frac{1}{c} = \frac{y_1}{\alpha_1} + \frac{y_2}{\alpha_2}$$

soit encore :

$$1 = \frac{\phi_1}{\alpha_1} + \frac{\phi_2}{\alpha_2}$$


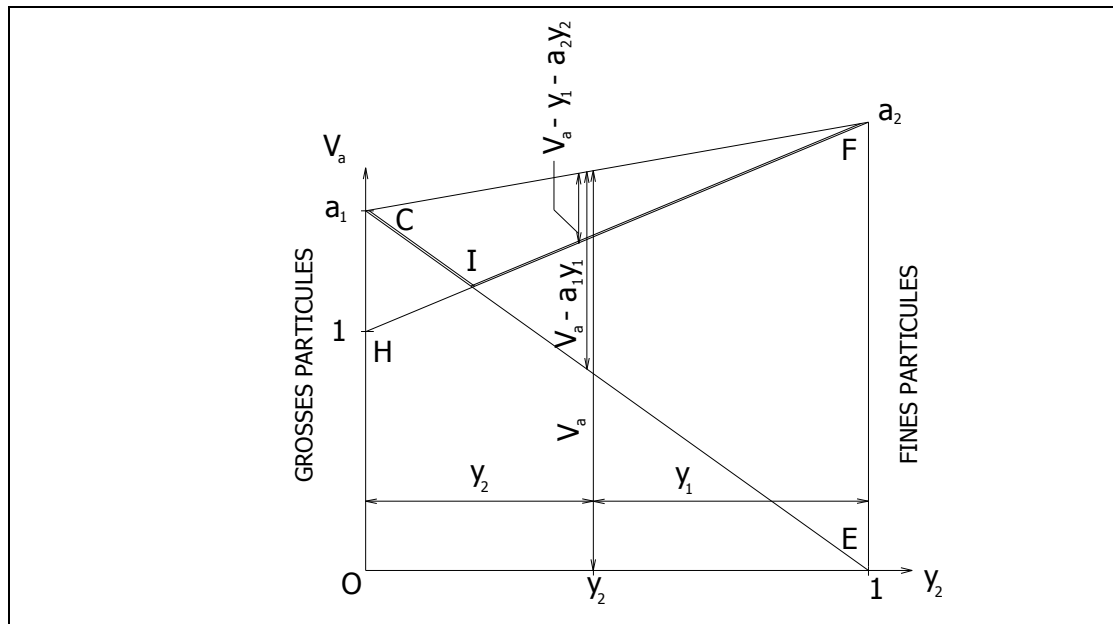


Figure I-12 : évolution du volume apparent d'un mélange binaire en fonction du titre volumique des petits grains selon la théorie de Westman (1936).

Dans le triangle FCE, le théorème de Thalès permet d'écrire :

$$\frac{V_a - a_1 Y_1}{a_2} = \frac{Y_2}{1}$$

Et dans le triangle FCH :

$$\frac{V_a - Y_1 - a_2 Y_2}{a_1 - 1} = \frac{Y_1}{1}$$

On en déduit :

$$\frac{V_a - Y_1 - a_2 Y_2}{a_1 - 1} + \frac{V_a - a_1 Y_1}{a_2} = 1$$

expression que l'on peut porter au carré :

$$\text{I-30} \quad \left(\frac{V_a - a_1 Y_1}{a_2} \right)^2 + 2 \left(\frac{V_a - a_1 Y_1}{a_2} \right) \left(\frac{V_a - Y_1 - a_2 Y_2}{a_1 - 1} \right) + \left(\frac{V_a - Y_1 - a_2 Y_2}{a_1 - 1} \right)^2 = 1$$

Il s'agit du volume apparent le plus défavorable puisque le mélange est entièrement ségrégué. En réalité, la courbe représentative du volume apparent du mélange binaire réel pour un rapport de tailles x quelconque est situé dans le triangle FCI.

Westman introduit alors un coefficient G et propose la simple équation conique suivante :

$$\text{I-31} \quad \left(\frac{V_a - a_1 Y_1}{a_2} \right)^2 + 2G \left(\frac{V_a - a_1 Y_1}{a_2} \right) \left(\frac{V_a - Y_1 - a_2 Y_2}{a_1 - 1} \right) + \left(\frac{V_a - Y_1 - a_2 Y_2}{a_1 - 1} \right)^2 = 1$$

G constitue le seul paramètre inconnu de cette équation. Il dépend du rapport de tailles des deux classes de grains et peut être déterminé expérimentalement. Yu, Standish et McLean [YUST93] proposent :

$$\text{I-32} \quad \frac{1}{G} = 1,355x^{1,566} \text{ si } x \leq 0,824 \text{ ou } \frac{1}{G} = 1 \text{ si } x > 0,824 .$$

Si $x > 0,824$, le mélange est considéré en ségrégation totale et le point représentatif se situe sur la droite CF. L'empilement binaire est alors traité comme un empilement de particules mono-modulaires.

Si x tend vers 0, $\frac{1}{G}$ tend vers 0, le volume apparent du mélange binaire atteint son minimum et le point représentatif se situe sur la droite CI ou IF.

Yu, Standish et McLean ont montré que les empilements de particules sphériques ou non sphériques étaient correctement décrits par l'équation de Westman.

1.2.2.3. Modèle de Mooney (1950).

Pour des sphères de diamètres différents de rapport $x = \frac{d_2}{d_1}$, Mooney [MOON50], comme nous l'avons déjà vu, aboutit à (équation I-15) :

$$H(\phi) = \exp\left(2,5 \frac{\phi_1}{1 - \lambda_{11}\phi_1 - \lambda_{12}\phi_2}\right) \exp\left(2,5 \frac{\phi_2}{1 - \lambda_{22}\phi_2 - \lambda_{21}\phi_1}\right)$$

avec $\lambda_{11} = \lambda_{22} = \frac{1}{\alpha}$.

$$H(\phi) = \exp\left(2,5\alpha \frac{\phi_1}{\alpha(1 - \lambda_{12}\phi_2) - \phi_1}\right) \exp\left(2,5\alpha \frac{\phi_2}{\alpha(1 - \lambda_{21}\phi_1) - \phi_2}\right)$$

On en déduit :

$$\text{I-33} \quad \begin{aligned} \phi_1^* &= \alpha(1 - \lambda_{12}\phi_2) \\ \phi_2^* &= \alpha(1 - \lambda_{21}\phi_1) \end{aligned}$$

S'il s'agit de la classe 1 qui provoque le blocage :

$$\text{I-34} \quad c_1 = \phi_1^* + \phi_2 = \alpha(1 - \lambda_{12}\phi_2) + \phi_2 = \alpha + (1 - \lambda_{12}\alpha)\phi_2 = \alpha + (1 - \lambda_{12}\alpha)c_1 \gamma_2$$

$$c_1 = \frac{\alpha}{1 - (1 - \lambda_{12}\alpha)\gamma_2}$$

S'il s'agit de la classe 2 qui provoque le blocage :

$$\text{I-35} \quad c_2 = \phi_1 + \phi_2^* = \phi_1 + \alpha (1 - \lambda_{21} \phi_1) = \alpha + (1 - \lambda_{21} \alpha) \phi_1 = \alpha + (1 - \lambda_{21} \alpha) c_2 \gamma_1$$

$$c_2 = \frac{\alpha}{1 - (1 - \lambda_{21} \alpha) \gamma_1}$$

La compacité du mélange binaire s'exprime par :

$$c = \inf(c_1, c_2)$$

Mooney n'effectue aucune tentative pour déterminer λ_{12} et λ_{21} théoriquement mais déduit certaines caractéristiques importantes de la fonction $\lambda(x)$.

Pour des sphères de diamètres très différents $d_1 \gg d_2$, Mooney a démontré, rappelons-le, que :

$$\lim_{x \rightarrow 0} \lambda_{12} = 0$$

$$\lim_{\frac{1}{x} \rightarrow \infty} \lambda_{21} = 1$$

Les propriétés de λ_{12} et λ_{21} sont représentées sur la figure suivante. Mooney présume que la fonction possède un maximum pour $x = 1$ ou proche de 1.

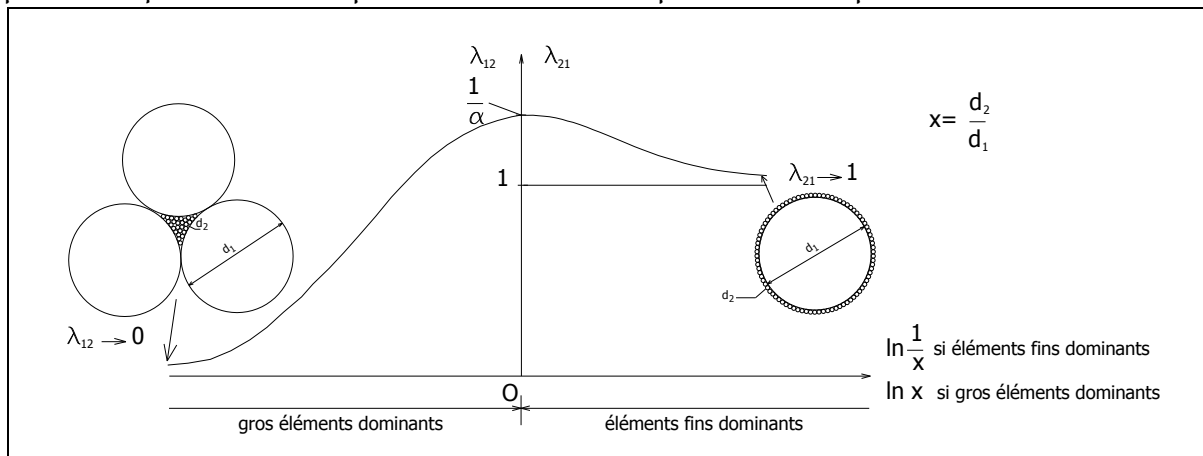


Figure I-13 : propriétés de $\lambda_{12}/\lambda_{21}$. λ_{21} (côté droit) représente la perturbation de l'empilement des sphères de diamètre d_2 par les sphères de diamètre d_1 . λ_{12} (côté gauche) représente la perturbation de l'empilement des sphères de diamètre d_1 par les sphères de diamètre d_2 .

1.2.2.4. Modèle de Yerazunis, Bartlett et Nissan (1962).

En 1962, Yerazunis, Bartlett et Nissan [YERA62] étudient des mélanges de billes de verre. Ils ont tenté de calculer la compacité de l'empilement en fonction du ratio des diamètres des grosses et fines particules. Bien qu'ils ne fassent pas référence à Westman et Hugill, leurs résultats en sont très proches. Leur contribution a été de formuler une équation lorsque le ratio des tailles se rapproche de 1. Ils ont proposé le concept de longueur caractéristique qui affecterait l'environnement local à

l'intérieur duquel les petites particules sont empilées. Il s'agit de la longueur de l'arête d'un cube représentant le volume libre associé à chaque grosse particule. Leur modèle est bien adapté aux compositions comprenant entre 0 et 40% de gros grains mais n'est pas efficace au-delà.

1.2.2.5. Modèle de Ridgway et Tarbuck (1968).

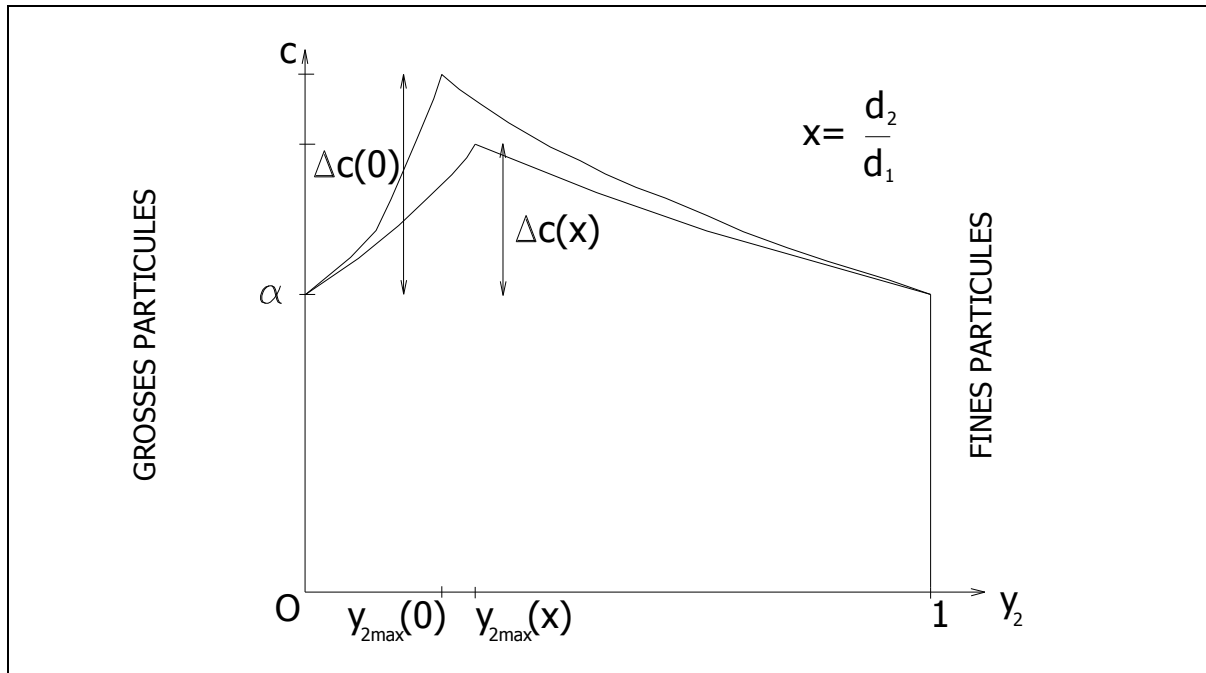


Figure I-14 : évolution de l'accroissement de compacité d'après le modèle de Ridgway et Tarbuck.

Sur la figure ci-dessus, Ridgway et Tarbuck [RIDG68] considèrent le cas d'un empilement constitué uniquement de petites particules ($y_2 = 1$). Au fur et à mesure que l'on introduit quelques gros éléments, un accroissement de compacité se produit. Au maximum, il atteint $\Delta c(x)$ lorsque le titre volumique des petits grains vaut $y_{2\max}(x)$ et le titre volumique des gros grains $y_{1\max}(x)$. $\Delta c(x)$, $y_{1\max}(x)$ et $y_{2\max}(x)$ dépendent de la compacité initiale α et du rapport de tailles x . Lorsque ce dernier tend vers 0 (absence d'interactions), le gain de compacité maximum $\Delta c(0)$, le titre volumique des petits grains $y_{2\max}(0)$ et le titre volumique des gros grains $y_{1\max}(0)$ valent, comme nous l'avons déjà indiqué :

$$\Delta c(0) = \alpha (1 - \alpha)$$

$$y_{2\max}(0) = \frac{1 - \alpha}{2 - \alpha} \text{ et } y_{1\max}(0) = \frac{1}{2 - \alpha}$$

Les auteurs introduisent ensuite la notion d'accroissement maximal de compacité relatif qui se définit comme le rapport entre l'accroissement de compacité maximal pour un rapport de tailles x et l'accroissement de compacité maximal pour un rapport de tailles tendant vers 0 : $\frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)}$. De façon similaire, nous avons les rapports de titres volumiques de petits grains et de gros grains correspondants :

$$\frac{Y_{2\max}(x)}{Y_{2\max}(0)} \text{ et } \frac{Y_{1\max}(x)}{Y_{1\max}(0)}.$$

Ridgway et Tarbuck suggèrent les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \text{I-36} \quad \frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)} &= 1 - 2,35x + 1,35x^2 \text{ si } x \leq 0,741 ; \\ \frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)} &= 0 \text{ si } x > 0,741 ; \\ \frac{Y_{1\max}(x)}{Y_{1\max}(0)} &= 1 - x^2 . \end{aligned}$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} \text{I-37} \quad \Delta c(x) &= \alpha (1 - \alpha) (1 - 2,35x + 1,35x^2) \text{ si } x \leq 0,741 ; \\ \Delta c(x) &= 0 \text{ si } x > 0,741 ; \\ c(x) &= \alpha + \Delta c(x); \\ Y_{2\max}(x) &= 1 - \frac{1 - x^2}{2 - \alpha} ; \\ Y_{1\max}(x) &= \frac{1 - x^2}{2 - \alpha} . \end{aligned}$$

1.2.2.6. Modèle de Ben Aïm (1970).

Ben Aïm [BENA70] calcule la porosité d'un mélange binaire en considérant l'effet de paroi qui se produit autour d'une grosse sphère. Il considère que la structure des petits grains est relâchée entre deux sphères concentriques de diamètres d_1 et $d_1\sqrt{1+2x}$.

Les travaux de Ben-Aïm, exprimés en terme de compacité, aboutissent aux résultats suivants :

$$\begin{aligned} \text{I-38} \quad Y_{2\max} &= \frac{p}{1+p} \\ p &= \frac{\alpha_2}{\alpha_1} - \alpha_2(1+0,9x) \\ c_1 &= \frac{\alpha_1}{1 - Y_2} \text{ si } Y_2 < Y_{2\max} \\ c_2 &= \frac{1}{\frac{Y_2}{\alpha_2} + (1 - Y_2) \left\{ 1 + \frac{5}{16} \left[(1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right] \right\}} \text{ si } Y_2 \geq Y_{2\max} \end{aligned}$$

La dernière expression peut s'écrire :

$$c_2 = \frac{\alpha_2}{1 - \left\{ 1 - \alpha_2 \left[1 + \frac{5}{16} \left[(1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right] \right] \right\}} \gamma_1 .$$

On en déduit que le coefficient λ_{21} de Mooney correspond ici au terme $1 + \frac{5}{16} \left[(1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]$ que l'on peut simplifier par $1 + 0,9x$ lorsque x est suffisamment faible.

1.2.2.7. Modèle de Suzuki et Oshima (1983/85).

Ce modèle ([SUZU83], [SUZU85]) permet de déterminer la porosité et le nombre de coordination du mélange (défini un peu plus loin) quel que soit le rapport de tailles. Une des cellules de base prise en compte correspond à celle de Ben-Aïm : elle est située entre deux sphères concentriques de diamètres d_1 et $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$, la sphère hypothétique extérieure passant par les points de contact entre les particules de diamètre d_2 .

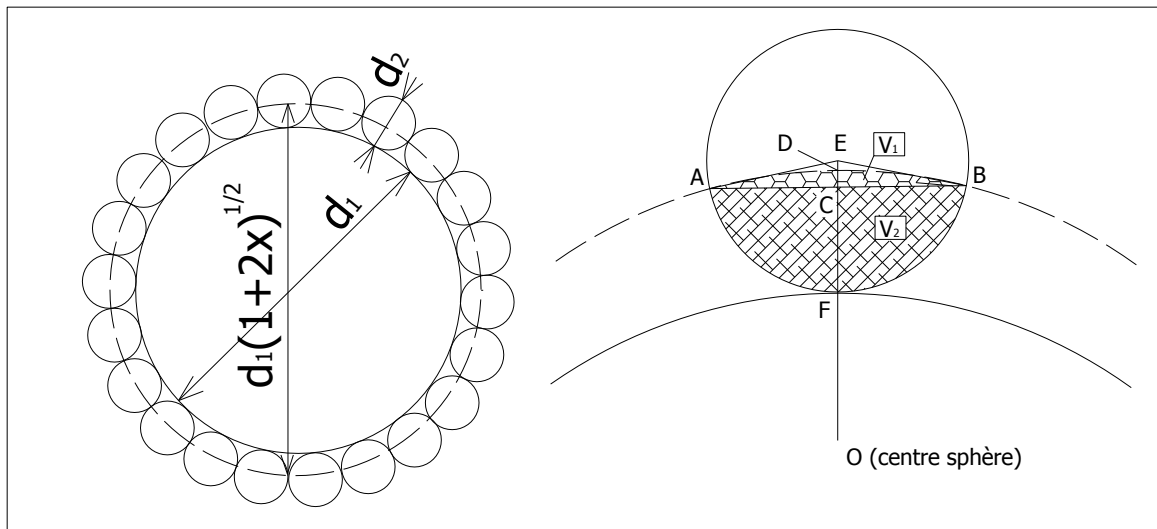


Figure I-15 : cellule de référence de Suzuki et Oshima lorsque des particules de diamètre d_1 sont entourées de particules de diamètre d_2 .

Le nombre de coordination N_{12} représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_1 avec des particules de diamètre d_2 est déterminé de la façon suivante.

Une partie de la surface de la sphère hypothétique de diamètre d_{hyp} est occupée par chaque sphère en contact **2**.

Notons A_c l'aire de la calotte sphérique de diamètre AB , de hauteur CD et de rayon de courbure OD :

$$A_c = 2\pi \times OD \times CD$$

Notons A_s l'aire de la surface de la sphère hypothétique de diamètre d_{hyp} :

$$A_s = 4\pi \times OD^2.$$

Suzuki et Oshima admettent que le nombre de coordination N_{12} est proportionnel au

ratio de A_s et A_c :

$$N_{12} = \omega \frac{A_s}{A_c}$$

pour obtenir finalement :

$$\text{I-39} \quad N_{12} = \frac{2 \omega (1 + x)}{1 + x - \sqrt{1 + 2x}}$$

ω est directement lié au nombre de coordination N_c d'un cas mono-modulaire $x = 1$:

$$\text{I-40} \quad \omega = \frac{N_c}{4} (2 - \sqrt{3}).$$

Dans le cas d'un empilement aléatoire, les auteurs obtiennent $N_c = 7,4$ et :

$$\text{I-41} \quad \omega = \frac{3,7}{2} (2 - \sqrt{3}).$$

Suzuki et Oshima calculent ensuite la fraction de vide n_{12} de la cellule d'encombrement :

$$\text{I-42} \quad n_{12} = 1 - \frac{\frac{\pi}{6} d_1^3 + N_{12} V_{21}}{\frac{\pi}{6} d_{hyp}^3}$$

où V_{21} représente le volume d'une sphère **2** compris dans la cellule d'encombrement : $V_{21} = V_1 + V_2$.

V_1 représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et OD .

V_2 représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et EF .

La fraction de vide n_{12} est ensuite utilisée pour calculer la porosité associée à la famille de particules **1** :

$$\text{I-43} \quad n_1 = \frac{n_{mono}}{n_{11}} (S_{a1} n_{11} + S_{a2} n_{12})$$

avec :

- n_{mono} la porosité du milieu mono-modulaire ;
- n_{11} la porosité de la cellule de référence lorsqu'une particule de diamètre d_1 est entourée par d'autres particules de diamètre d_1 ;
- n_{12} la porosité de la cellule de référence lorsqu'une particule de diamètre d_1 est entourée par des particules de diamètre d_2 ;

- s_{a1} le pourcentage surfacique de la famille 1 dans l'assemblage granulaire ;
- s_{a2} le pourcentage surfacique de la famille 2 dans l'assemblage granulaire .

On procède de la même façon pour n_{21} et on calcule la porosité associée à la famille de particules 2 :

$$n_2 = \frac{n_{\text{mono}}}{n_{22}} (s_{a1}n_{21} + s_{a2}n_{22})$$

avec :

- n_{21} la porosité de la cellule de référence lorsqu'une particule de diamètre d_2 est entourée par des particules de diamètre d_1 ;
- n_{22} la porosité de la cellule de référence lorsqu'une particule de diamètre d_2 est entourée par d'autres particules de diamètre d_2 .

La porosité d'un mélange binaire n peut s'exprimer comme la somme des produits de la porosité associée à chaque famille de particule n_1 ou n_2 par le pourcentage volumique de chacune d'entre elles s_{v1} ou s_{v2} :

I-44
$$n = s_{v1} n_1 + s_{v2} n_2$$

Le modèle de Suzuki et Oshima présente l'avantage de considérer n'importe quel rapport de taille dans la détermination de la porosité à l'intérieur de la cellule d'encombrement. En tenant compte des variables $\frac{n_{\text{mono}}}{n_{ii}}$ et ω , les auteurs disposent par ailleurs de deux leviers pour ajuster les résultats théoriques aux résultats expérimentaux.

1.2.2.8. Modèle de Toufar, Klose et Born (1977) modifié par Goltermann, Johansen, Palbol (1997).

Le modèle de Toufar, Klose et Born [TOUF77] utilise les équations suivantes :

I-45
$$c = \frac{1}{\frac{y_1}{\alpha_1} + \frac{y_2}{\alpha_2} - y_1 \left(\frac{1}{\alpha_1} - 1 \right) k_d k_s}$$

$$k_d = \frac{1-x}{1+x}$$

$$k_s = 1 - \frac{1+4z}{(1+z)^4}$$

$$z = \frac{\left(\frac{y_2}{y_1} \right) \left(\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \right)}{1 - \alpha_1}$$

En 1997, Goltermann, Johansen et Palbol [GOLT97] ont suggéré de modifier l'expression de k_s dans le cas où $z < 0,4753$ comme suit :

$$k_s = \frac{0,3881 z}{0,4753} \text{ pour } z < 0,4753$$

Dans ce cas :

$$c_1 = \frac{1}{\frac{y_1}{\alpha_1} + \frac{y_2}{\alpha_2} - y_1 \frac{(1-\alpha_1)(1-x)0,3881 y_2}{\alpha_1 (1+x)0,4753 y_1 \alpha_2 (1-\alpha_1)}}$$

Cette expression se simplifie de la façon suivante :

I-46

$$c_1 = \frac{\alpha_1}{1 - \left[1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \left(1 - \frac{(1-x)0,3881}{(1+x)0,4753} \right) \right] y_2}$$

On en déduit que le coefficient λ_{12} de Mooney correspond ici au terme $\frac{1}{\alpha_2} \left[1 - \frac{(1-x)0,3881}{(1+x)0,4753} \right]$.

1.2.2.9. Modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard avec interactions (1986).

Stovall et de Larrard ([STOV86], [DELA88]) considèrent que les tailles de grains du mélange binaire sont en rapport fini. Une interaction partielle se crée.

L'introduction de quelques éléments fins est à l'origine d'un desserrement lorsque l'espace laissé libre entre les grosses particules n'est pas suffisant. Une hypothèse forte du modèle consiste à supposer que les petites particules sont suffisamment éloignées les unes des autres pour que l'effet de desserrement puisse être considéré comme une fonction linéaire du volume partiel qu'elles occupent. Elle est déjà contenue dans le modèle de Mooney.

La fraction volumique des grosses particules constituant la classe dominante s'écrit, selon Stovall et de Larrard :

$$\text{I-47} \quad \phi_1^* = \alpha_1 \left(1 - \frac{1 - f_{12}}{\alpha_1} \phi_2 \right)$$

où f_{12} désigne la fonction d'interaction représentant le desserrement. On en déduit que le coefficient λ_{12} de Mooney correspond ici au terme $\frac{1 - f_{12}}{\alpha_1}$ du modèle linéaire de compacité (MLC) :

$$\text{I-48} \quad \lambda_{12\text{Mooney}} = \frac{1 - f_{12\text{MLC}}}{\alpha_1} \text{ ou } f_{12\text{MLC}} = 1 - \alpha_1 \lambda_{12\text{Mooney}}$$

La compacité du mélange binaire s'écrit alors :

$$c_1 = \phi_1^* + \phi_2 = \alpha_1 \left(1 - \frac{1 - f_{12}}{\alpha_1} \phi_2 \right) + \phi_2 = \alpha_1 + f_{12} \phi_2$$

On constate que la compacité est linéaire en fonction du volume partiel ϕ_2 .

$$\text{I-49} \quad c_1 = \alpha_1 + f_{12} c_1 \gamma_2 \Rightarrow c_1 = \frac{\alpha_1}{1 - f_{12} \gamma_2}$$

Par ailleurs, l'introduction de quelques gros éléments est à l'origine d'une diminution de la compacité des petites particules situées à leur périphérie. S'ils sont la aussi suffisamment éloignés les uns des autres, il est possible de considérer que l'effet de paroi est une fonction linéaire du volume qu'ils occupent. La fraction volumique de fines particules dominantes s'écrit, toujours d'après Stovall et de Larrard :

$$\text{I-50} \quad \phi_2^* = \alpha_2 \left(1 - \frac{1 - (1 - \alpha_2) g_{21}}{\alpha_2} \phi_1 \right)$$

où g_{21} désigne la fonction d'interaction représentant l'effet de paroi. On en déduit que le coefficient λ_{21} de Mooney correspond ici au terme $\frac{1 - (1 - \alpha_2) g_{21}}{\alpha_2}$ du modèle linéaire de compacité (MLC) :

$$\text{I-51} \quad \lambda_{21\text{Mooney}} = \frac{1 - (1 - \alpha_2) g_{21\text{MLC}}}{\alpha_2} \text{ ou } g_{21\text{MLC}} = \frac{1 - \alpha_2 \lambda_{21\text{Mooney}}}{1 - \alpha_2}$$

Le modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard est donc virtuellement contenu dans le modèle de viscosité de Mooney.

La compacité du mélange binaire s'écrit alors :

$$c_2 = \phi_1 + \phi_2^* = \phi_1 + \alpha_2 \left(1 - \frac{1 - (1 - \alpha_2) g_{21}}{\alpha_2} \phi_1 \right) = \alpha_2 + (1 - \alpha_2) g_{21} \phi_1$$

On constate que la **compacité est linéaire en fonction du volume partiel ϕ_1** .

$$I-52 \quad c_2 = \alpha_2 + (1 - \alpha_2) g_{21} c_2 y_1 \Rightarrow c_2 = \frac{\alpha_2}{1 - (1 - \alpha_2) g_{21} y_1}$$

La compacité du mélange binaire obtenue grâce au modèle linéaire de compacité (MLC) s'exprime par :

$$c = \inf \left(c_1 = \frac{\alpha_1}{1 - f_{12} y_2} ; c_2 = \frac{\alpha_2}{1 - (1 - \alpha_2) g_{21} y_1} \right)$$

Les conditions aux limites pour les fonctions d'interaction s'obtiennent facilement en considérant les résultats obtenus d'une part en l'absence d'interactions et d'autre part lorsque les 2 classes possèdent le même diamètre et la même compacité propre :

$$I-53 \quad f_{12} = g_{21} = 1 \text{ pour } x = \frac{d_2}{d_1} \ll 1 \text{ (absence d'interactions)}$$

$$f_{12} = g_{21} = 0 \text{ pour } x = \frac{d_2}{d_1} = 1 \text{ (interaction totale).}$$

Elles sont cohérentes avec les conditions aux limites de Mooney.

Dans le domaine des petits dominants, de Larrard [DELA88] prend en compte trois modèles théoriques (Caquot, Ben-Aïm, Dodds) et 27 points expérimentaux obtenus sur des sphères pour proposer la fonction d'interaction g_{21} avec l'allure suivante :

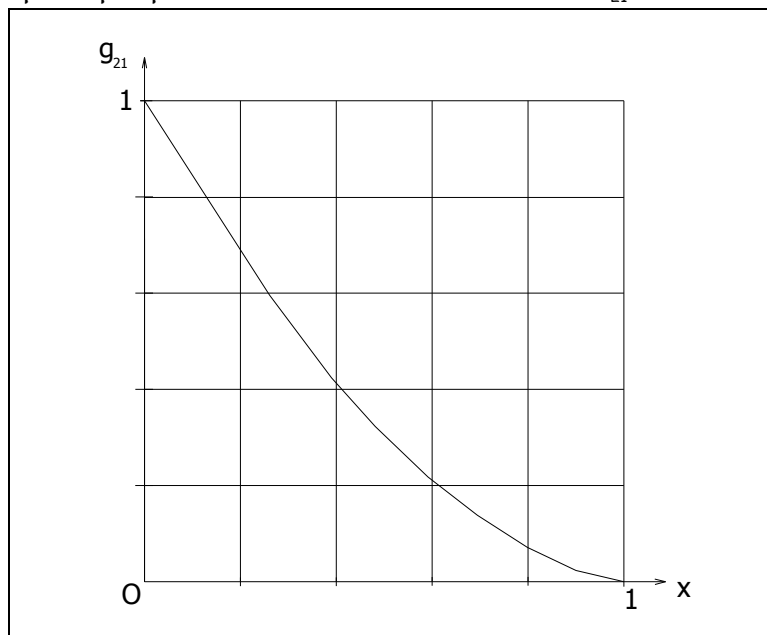


Figure I-16 : fonction d'interaction caractérisant l'effet de paroi en fonction du rapport des diamètres selon De Larrard dans le modèle MLC [DELA88].

Dans le domaine des gros dominants, de Larrard [DELA88] prend en compte deux modèles théoriques (modèle « linéaire » de Stovall, modèle de décompaction locale) et 14 points expérimentaux pour proposer la fonction d'interaction caractérisant l'effet de desserrement f_{12} avec l'allure suivante :

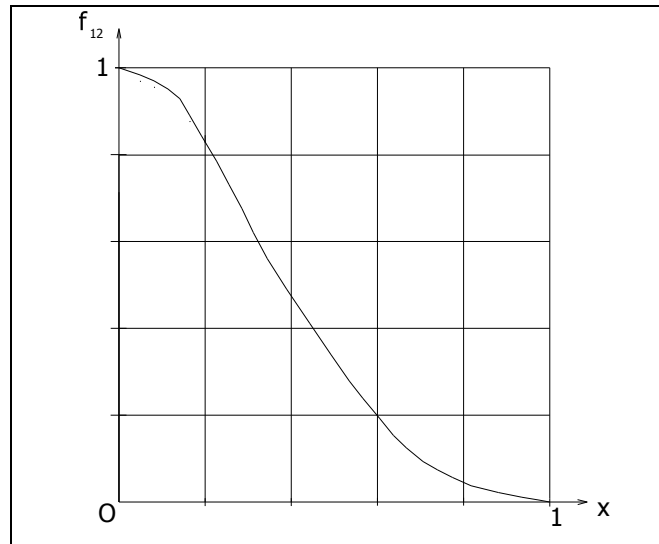


Figure I-17 : fonction d'interaction caractérisant l'effet de desserrement en fonction du rapport des diamètres selon De Larrard dans le modèle MLC [DELA88].

1.2.2.10. Modèle de Yu et Standish (1987).

Yu et Standish [YUST87] considèrent comme point de départ les équations de Westman et Hugill :

$$V_{a1} = a_1 y_1 = a_1 - a_1 y_2$$

$$V_{a2} = y_1 + a_2 y_2 = a_2 - (a_2 - 1) y_1$$

La conclusion principale qu'ils en tirent est que la relation entre le volume apparent et le titre volumique des grains d'un mélange binaire avec un faible rapport de tailles peut être correctement décrite par de simples équations linéaires. Ils étendent ensuite cette théorie à n'importe quel ratio de tailles de grains en précisant que cette approximation n'engendre pas de grossières erreurs. Partant de cette assertion, le développement d'équations est relativement simple.

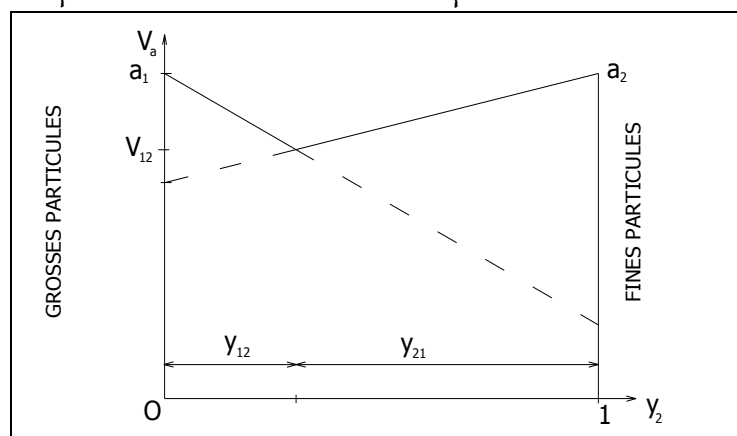


Figure I-18 : évolution du volume apparent d'un mélange binaire en fonction du titre volumique des petits grains selon la théorie de Yu et Standish.

Les volumes apparents du mélange binaire sont donnés par deux droites ayant les équations suivantes :

$$\text{I-54} \quad \begin{aligned} V_{a1} &= \alpha_1 - \frac{\alpha_1 - V_{12}}{\gamma_{12}} \gamma_2 \\ V_{a2} &= \alpha_2 - \frac{\alpha_2 - V_{21}}{\gamma_{21}} \gamma_1 \end{aligned}$$

où $V_{12} = V_{21}$ représente le volume apparent minimum du mélange binaire, γ_{12} le titre volumique des petites particules correspondant et γ_{21} le titre volumique des grosses particules correspondant.

Exprimées en terme de compacité, ces équations deviennent :

$$\text{I-55} \quad \begin{aligned} c_1 &= \alpha_1 + \left(1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{12}}\right) \frac{\phi_2}{\gamma_{12}} \\ c_2 &= \alpha_2 + \left(1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_{21}}\right) \frac{\phi_1}{\gamma_{21}} \end{aligned}$$

La compacité est linéaire en fonction des volumes partiels ϕ_1 et ϕ_2 .

Pour déterminer $\alpha_{12} = \alpha_{21}$, γ_{12} et γ_{21} , Yu et Standish utilisent les expressions de Ridgway et Tarbuck (équations I-37) :

$$\begin{aligned} \alpha_{12} &= \alpha_1 + \alpha_1 (1 - \alpha_1) (1 - 2,35x + 1,35x^2) \text{ si } x \leq 0,741; \\ \alpha_{12} &= \alpha_1 \text{ si } x > 0,741; \\ \gamma_{12} &= 1 - \frac{1 - x^2}{2 - \alpha_1}; \\ \gamma_{21} &= \frac{1 - x^2}{2 - \alpha_2}. \end{aligned}$$

On en déduit :

$$\text{I-56} \quad \begin{aligned} c_1 &= \frac{\alpha_1}{1 - \left(1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{12}}\right) \frac{\gamma_2}{\gamma_{12}}} \\ c_2 &= \frac{\alpha_2}{1 - \left(1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_{21}}\right) \frac{\gamma_1}{\gamma_{21}}} \\ c &= \inf \left(c_1 = \frac{\alpha_1}{1 - \left(1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{12}}\right) \frac{\gamma_2}{\gamma_{12}}}; c_2 = \frac{\alpha_2}{1 - \left(1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_{21}}\right) \frac{\gamma_1}{\gamma_{21}}} \right) \end{aligned}$$

Les expressions obtenues sont de la même forme que celles de Stovall et de Larrard :

$$I-57 \quad f_{12YS} = \left(1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_{12}}\right) \frac{1}{\gamma_{12}} \quad \text{et} \quad g_{21YS} = \frac{1}{1 - \alpha_2} \left(1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_{21}}\right) \frac{1}{\gamma_{21}}$$

Le modèle linéaire de compacité de Yu et Standish est donc de la même forme que celui de Stovall et de Larrard avec des fonctions d'interaction calculées à partir du modèle de Ridgway et Tarbuck.

La fonction d'interaction caractérisant l'effet de paroi g_{21YS} dans le modèle de Yu et Standish se représente avec l'allure suivante :

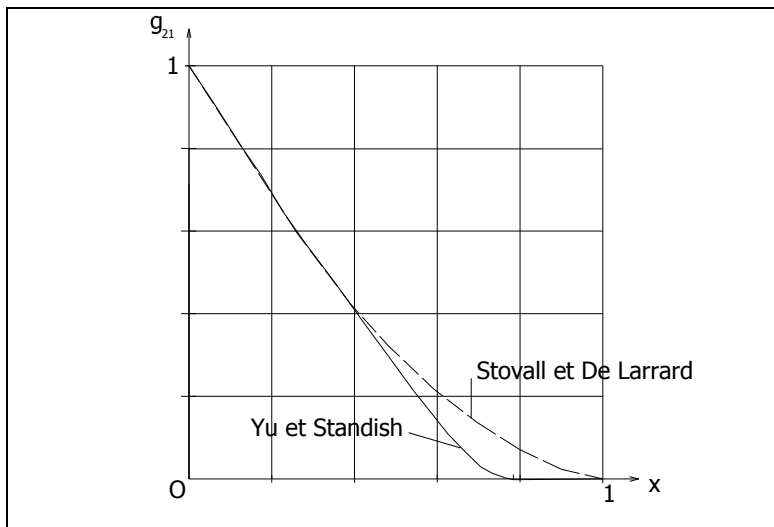


Figure I-19 : fonction d'interaction caractérisant l'effet de paroi en fonction du rapport des diamètres selon Yu et Standish.

La fonction d'interaction caractérisant l'effet de desserrement f_{12YS} dans le modèle de Yu et Standish se représente avec l'allure suivante :

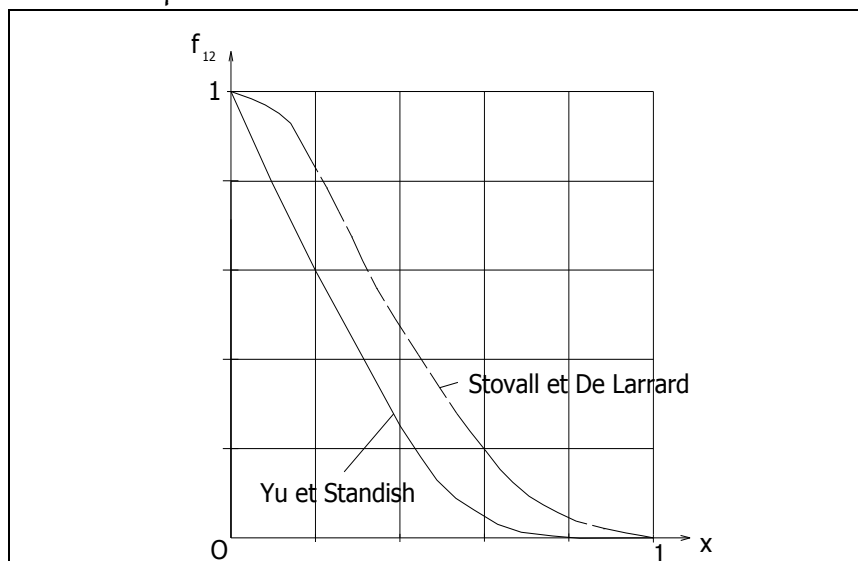


Figure I-20 : fonction d'interaction caractérisant l'effet de desserrement en fonction du rapport des diamètres selon Yu et Standish.

En termes de volumes apparents, les fonctions d'interaction s'expriment par :

$$\begin{aligned} \text{I-58} \quad f_{12VS} &= \frac{\alpha_1 - V_{12}}{\alpha_1 \gamma_{12}} \text{ avec : } \alpha_1 = \frac{1}{\alpha_1} \text{ et } V_{12} = \frac{1}{\alpha_{12}} ; \\ g_{21VS} &= \frac{1}{\alpha_2 - 1} \frac{\alpha_2 - V_{21}}{\gamma_{21}} \text{ avec : } \alpha_2 = \frac{1}{\alpha_2} \text{ et } V_{21} = V_{12} . \end{aligned}$$

Le volume apparent du mélange binaire devient :

$$\begin{aligned} \text{I-59} \quad V_{a1} &= \alpha_1 (1 - f_{12}) \gamma_2 \\ V_{a2} &= \alpha_2 - (\alpha_2 - 1) g_{21} \gamma_1 \\ V_a &= \sup(V_{a1}, V_{a2}) \end{aligned}$$

1.2.2.11. Modèle de Zok et Lange (1991).

En 1991, Zok et Lange [ZOK91] étudient les poudres composites constituées de larges sphères dispersées dans une matrice d'éléments fins. Leur référence est constituée par l'empilement idéal de Furnas. Les auteurs prennent en compte 2 effets : celui de la surface d'inclusion (assimilable à un effet de paroi) et celui des contacts d'inclusions (assimilable à un effet d'interférence selon Weymouth). Dans le 1^{er} cas, il existe une absence de petits grains dans le cube englobant une grosse sphère. Le volume de vide est proportionnel au vide associé à un site (constitué par une petite sphère), au nombre de sites par inclusion et à la quantité de ces dernières par unité de volume. Dans le 2^{ème} cas, les éléments fins ne peuvent pas se glisser dans une certaine zone située à la jonction entre deux inclusions. Le volume de vide est proportionnel au vide exclus par le point de contact, au nombre de ceux-ci par inclusion et à la quantité de ces dernières par unité de volume.

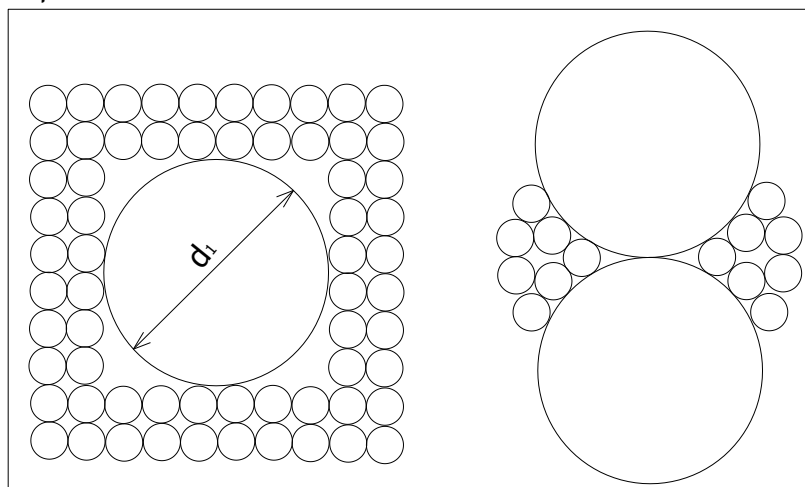


Figure I-21 : schémas de l'effet des surfaces d'inclusion et des contacts d'inclusions selon Zok et Lange.

Ce modèle est valable pour un ratio de diamètres supérieur à 10 et si la fraction d'inclusion est inférieure à 74%. Dans ces conditions, les valeurs théoriques concordent bien avec les résultats expérimentaux.

1.2.2.12. Modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard avec interaction totale (1999).

Un des défauts du modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard est qu'il ne traite pas le cas d'un mélange de matériaux de même taille $d_1 = d_2$ (on dit qu'il y a interaction totale) mais de compacités résiduelles différentes : $\beta_1 \neq \beta_2$. Dans ce cas, il est légitime de penser qu'il n'existe aucune « synergie de compactage » entre les deux populations : tout se passe comme si une partie du conteneur était remplie par les grains « 1 » et l'autre partie par les grains « 2 ». De Larrard [DELA00] vérifie alors :

$$\text{I-60} \quad \frac{\phi_1}{\beta_1} + \frac{\phi_2}{\beta_2} = 1$$

Dans ce cas, les compacités s'expriment par :

$$\text{I-61} \quad \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2}\right)\gamma_2} \quad \text{et} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \frac{\beta_2}{\beta_1}\right)\gamma_1}$$

On en déduit la compacité du mélange : $\gamma = \inf(\gamma_1, \gamma_2)$.

1.2.2.13. Modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard avec interaction partielle (1999).

Comme pour le modèle linéaire de compacité (MLC), les interactions granulaires sont prises en compte dans le cas des gros dominants et dans le cas des petits dominants.

Dans le cas des **gros dominants**, l'empilement des gros grains est perturbé par un desserrement dû aux petits. En gardant l'hypothèse que cet effet est une fonction linéaire de ϕ_2 sur la compacité des gros éléments, de Larrard [DELA00] considère cette fois-ci :

$$\text{I-62} \quad \phi_1^* = \beta_1 \left(1 - \frac{\alpha_{12}}{\beta_2} \phi_2\right)$$

où α_{12} désigne le coefficient de desserrement, β_1 et β_2 les compacités résiduelles de chaque classe 1 et 2 prises séparément.

On en déduit que le coefficient λ_{12} de Mooney correspond ici au terme $\frac{\alpha_{12}}{\beta_2}$ du modèle d'empilement compressible (MEC) :

$$\text{I-63} \quad \lambda_{12\text{Mooney}} = \frac{\alpha_{12\text{MEC}}}{\beta_2} \text{ ou } \alpha_{12\text{MEC}} = \beta_2 \lambda_{12\text{Mooney}}$$

De la même façon, il est possible de relier la fonction d'interaction de desserrement f_{12} du modèle linéaire de compacité (MLC) au coefficient de desserrement α_{12} du modèle d'empilement compressible (MEC) :

$$\text{I-64} \quad \alpha_{12\text{MEC}} = \frac{\beta_2}{\beta_1} (1 - f_{12\text{MLC}}) \text{ ou } f_{12\text{MLC}} = 1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \alpha_{12\text{MEC}} \text{ en compacités virtuelles ;}$$

$$\alpha_{12\text{MEC}} = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} (1 - f_{12\text{MLC}}) \text{ ou } f_{12\text{MLC}} = 1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} \alpha_{12\text{MEC}} \text{ en compacités réelles.}$$

La compacité du mélange binaire s'écrit alors :

$$\gamma_1 = \phi_1^* + \phi_2 = \beta_1 \left(1 - \frac{\alpha_{12}}{\beta_2} \phi_2 \right) + \phi_2 = \beta_1 + \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \alpha_{12} \right) \phi_2$$

Là aussi, la compacité est linéaire en fonction du volume partiel ϕ_2 .

$$\text{I-65} \quad \gamma_1 = \beta_1 + \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \alpha_{12} \right) \gamma_1 \gamma_2 \Rightarrow \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \alpha_{12} \right) \gamma_2}$$

Dans le cas des **petits dominants**, leur empilement est perturbé localement par la paroi des gros qui engendre un surcroît de vides à l'interface. Si les gros éléments sont suffisamment dispersés, cette diminution locale de matière est proportionnelle à $\frac{\phi_1}{1 - \phi_1}$ et de Larrard aboutit à :

$$\phi_2^* = \beta_2 \left(1 - b_{21} \left(\frac{1}{\beta_1} - 1 \right) \frac{\phi_1}{1 - \phi_1} \right) (1 - \phi_1)$$

où b_{21} désigne le coefficient d'effet de paroi (cette expression peut être comparée à $\phi_2^* = \beta_2 (1 - \phi_1)$ en l'absence d'interaction).

La compacité du mélange binaire s'écrit alors :

$$\gamma_2 = \phi_1 + \phi_2^* = \beta_2 + \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right) \phi_1$$

On constate que la compacité est linéaire en fonction du volume partiel ϕ_1 .

On en déduit :

$$\text{I-66} \quad \gamma_2 = \beta_2 + \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right) \gamma_2 \gamma_1 \Rightarrow \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right) \gamma_1}$$

Relions le coefficient λ_{21} de Mooney au coefficient d'effet de paroi b_{21} . On trouve:

$$\text{I-67} \quad \lambda_{21\text{Mooney}} = 1 + b_{21\text{MEC}} \left(\frac{1}{\beta_1} - 1 \right) \text{ ou } b_{21\text{MEC}} = \frac{\lambda_{21\text{Mooney}} - 1}{\frac{1}{\beta_1} - 1}$$

De la même façon, si nous relions la fonction d'interaction représentant l'effet de paroi g_{21} du modèle linéaire de compacité (MLC) au coefficient d'effet de paroi b_{21} du modèle d'empilement compressible (MEC), nous obtenons :

$$\text{I-68} \quad b_{21\text{MEC}} = \frac{\left(\frac{1}{\beta_2} - 1 \right)}{\left(\frac{1}{\beta_1} - 1 \right)} (1 - g_{21\text{MLC}}) \text{ ou } g_{21\text{MLC}} = 1 - \frac{\left(\frac{1}{\beta_1} - 1 \right)}{\left(\frac{1}{\beta_2} - 1 \right)} b_{21\text{MEC}} \text{ en compacités virtuelles ;}$$

$$\text{ou } b_{21\text{MEC}} = \frac{\left(\frac{1}{\alpha_2} - 1 \right)}{\left(\frac{1}{\alpha_1} - 1 \right)} (1 - g_{21\text{MLC}}) \text{ ou } g_{21\text{MLC}} = 1 - \frac{\left(\frac{1}{\alpha_1} - 1 \right)}{\left(\frac{1}{\alpha_2} - 1 \right)} b_{21\text{MEC}} \text{ en compacités réelles.}$$

Le modèle d'empilement compressible (MEC) constitue donc une évolution du modèle linéaire de compacité (MLC) qui prend en compte la possibilité d'étudier un mélange de constituants de même taille mais de compacités propres différentes. Il fait appel à des compacités virtuelles et non réelles, le passage du virtuel au réel s'effectuant ensuite grâce à un indice de serrage qui n'est pas présenté ici.

La compacité du mélange binaire obtenue grâce au modèle d'empilement compressible (MEC) s'exprime par :

$$\gamma = \inf \left(\gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \alpha_{12} \right) \gamma_2} ; \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right) \gamma_1} \right)$$

Les conditions aux limites pour les coefficients d'interaction s'obtiennent également facilement :

$$\text{I-69} \quad \alpha_{12} = b_{21} = 0 \text{ pour } x = \frac{d_2}{d_1} \ll 1 \text{ (absence d'interactions)}$$

$$\alpha_{12} = b_{21} = 1 \text{ pour } x = \frac{d_2}{d_1} = 1 \text{ (interaction totale).}$$

Cependant, de Larrard introduit une condition aux limites supplémentaire. Si l'on considère le cas d'un mélange binaire dans lequel γ_1 est petit et d_1 varie autour de d_2 , les fonctions dérivées de γ_1 et γ_2 doivent être continues en $d_1 = d_2 = d$ ce qui engendre :

I-70
$$\left. \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=1} = \left. \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=1} = \mathbf{0}$$

Le coefficient d'effet de paroi b_{21} dans le modèle de de Larrard se représente avec l'allure suivante :

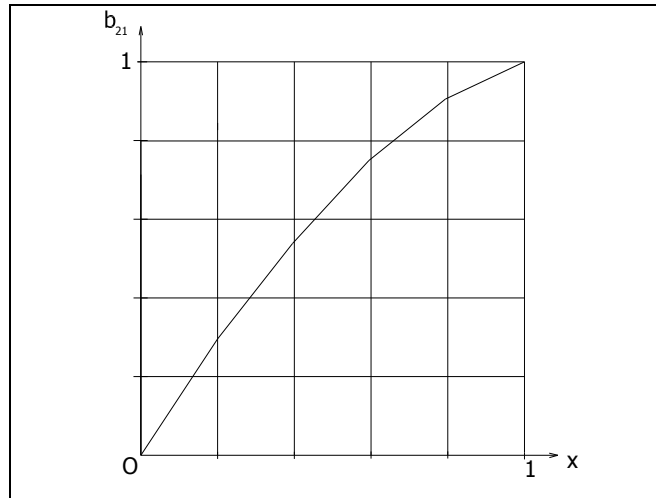


Figure I-22 : coefficient d'effet de paroi b_{21} en fonction du rapport des diamètres selon de Larrard dans le modèle MEC [DELA00].

Le coefficient d'effet de desserrement a_{12} dans le modèle de de Larrard se représente avec l'allure suivante :

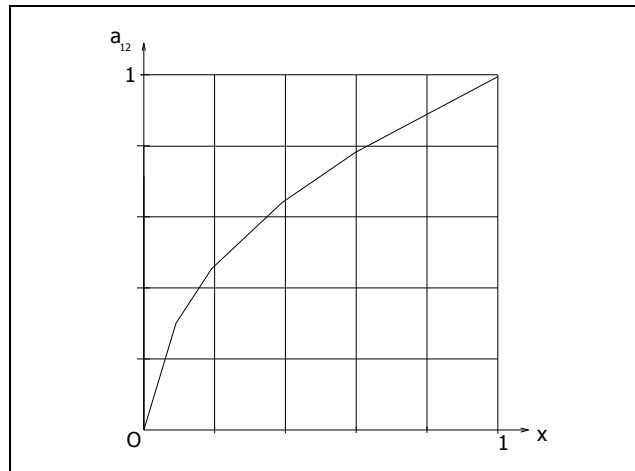


Figure I-23 : coefficient d'effet de desserrement a_{12} en fonction du rapport des diamètres selon De Larrard dans le modèle MEC [DELA00].

1.2.2.14. Théorie des mélanges de particules de Dewar (1983, 1986, 1999).

Comme nous l'avons déjà évoqué, Dewar [DEWA99] est le seul chercheur ayant élaboré un outil moderne de formulation des bétons à travailler avec l'indice des vides plutôt qu'avec la compacité. L'intérêt de cette option est, bien entendu, d'obtenir des droites lorsqu'on représente l'indice des vides du mélange en fonction du titre

volumique des petites ou grosses particules lorsque le ratio des tailles x est très faible. En réalité, lorsque x ne tend pas vers 0, la théorie présentée est inadéquate en raison de l'interférence des particules. Dès 1968, Powers soulignait l'importance de la dispersion des grosses particules par les petites. Les points correspondant au mélange binaire réel sont donc situés au-dessus des droites AM et MF (figure I-11). Ils se rapprochent de la droite AF au fur et à mesure que x tend vers 1 (interaction totale).

Dewar considère ensuite que si les points expérimentaux sont suffisamment rapprochés, les résultats peuvent être représentés par une série de lignes droites avec changements de pentes plutôt qu'avec des courbes.

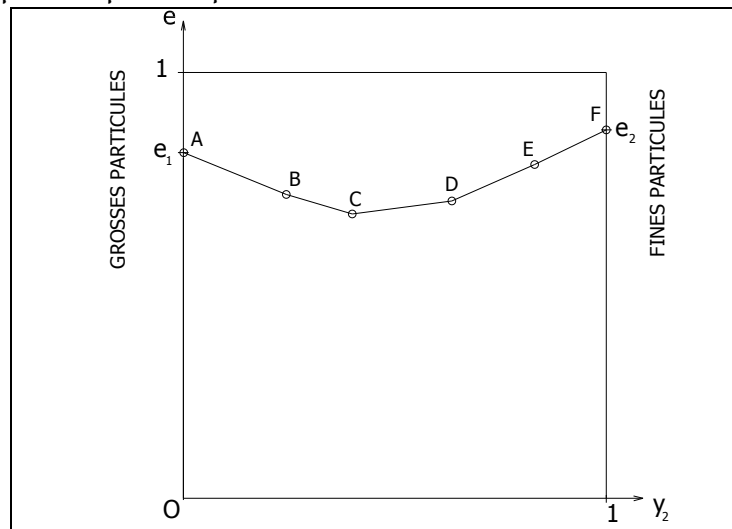


Figure I-24 : liaison des points expérimentaux par des droites.

Selon l'auteur, chaque point A, B, C, D, E, F peut être associé à un facteur d'espacement m qui, multiplié par le diamètre des petites particules, représente l'espacement entre les grosses :

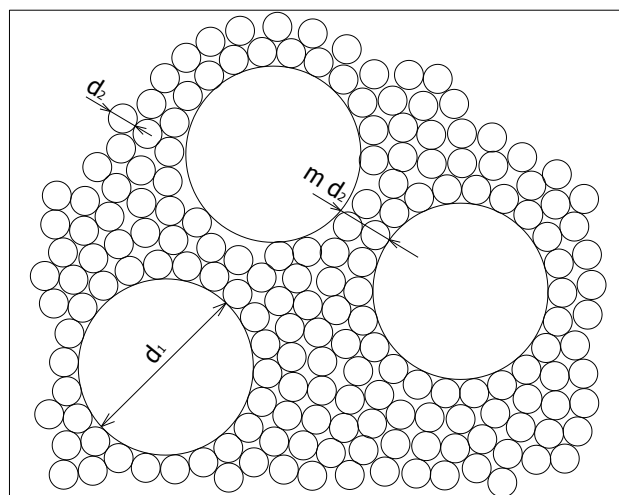


Figure I-25 : illustration du facteur d'espacement m .

Chaque grosse particule de diamètre d_1 est séparée de sa congénère d'une distance $m d_2$ en moyenne.

Selon Dewar, on peut admettre que x est indépendant de l'indice des vides propre à chaque constituant, du ratio des tailles et du niveau de l'énergie de compactage. Voici les valeurs qu'il propose.

Points sur le diagramme d'indice des vides	Facteur d'espacement m
A	0
B	0,3
C	0,75
D	3
E	7,5
F	∞

Tableau I-2 : valeurs du facteur d'espacement m .

Dans un double but de simplification analytique et de facilitation de la compréhension, chaque particule est modélisée par un cube de côté d à laquelle on associe un volume de vides modélisé par un cube de côté t .

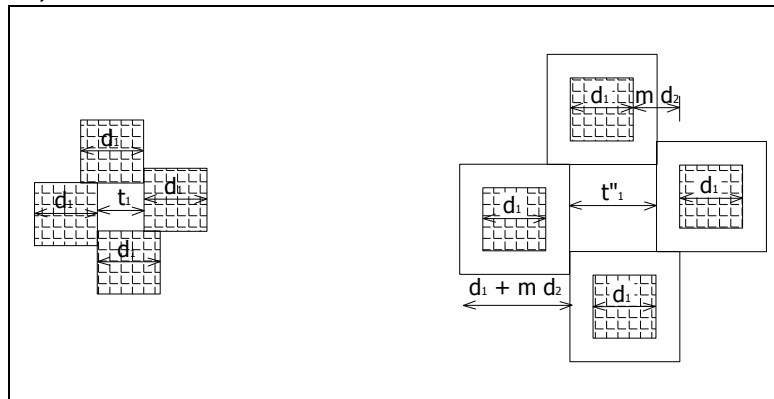


Figure I-26 : modélisation d'un mélange binaire selon Dewar.

L'indice des vides résultant pour les grosses particules est :

$$\text{I-71} \quad e_1 = \frac{t_1^3}{d_1^3}$$

Le mélange des petites et grosses particules dilate la structure de ces dernières. Dewar considère que l'indice des vides propre aux grosses particules avant et après dilatation reste le même :

$$\text{I-72} \quad e_1 = \frac{t_1^3}{d_1^3} = \frac{t_1''^3}{(d_1 + m d_2)^3} = \frac{t_1''^3}{d_1^3 (1 + m x)^3} \Rightarrow \left(\frac{t_1''}{d_1} \right)^3 = e_1 (1 + m x)^3$$

Considérons maintenant, par exemple, que cette dilatation s'effectue avec un facteur d'espacement $m = 0,75$. Dans ce cas et d'après le tableau précédent, le point M « se déplace » en C (se reporter à la figure suivante pour visualiser cet effet). La droite qui passe par N(1,-1) et par C coupe l'axe des ordonnées en e''_1 au lieu de e_1 . L'indice des vides effectif des grosses particules dilatées e''_1 s'exprime, d'après la modélisation graphique présentée, par :

$$\text{I-73} \quad e''_1 = \frac{(d_1 + md_2)^3 + t''_1^3 - d_1^3}{d_1^3} = (1 + mx)^3 + e_1(1 + mx)^3 - 1$$

$$e''_1 = (1 + e_1)(1 + mx)^3 - 1$$

Le déplacement de M en C a également pour conséquence l'augmentation de l'indice des vides effectif des petites particules de e_2 à e''_2 dans le mélange.

Ces dernières occupent alors l'espace disponible à l'intérieur de la structure dilatée des grosses particules mais sont gênées par les parois de ces dernières : Dewar propose de prendre en compte un espace additionnel modélisé par un cube dont le débord de chaque côté du cube de côté d_1 vaut : $0,5 z d_1$ (se reporter à la figure I-28).

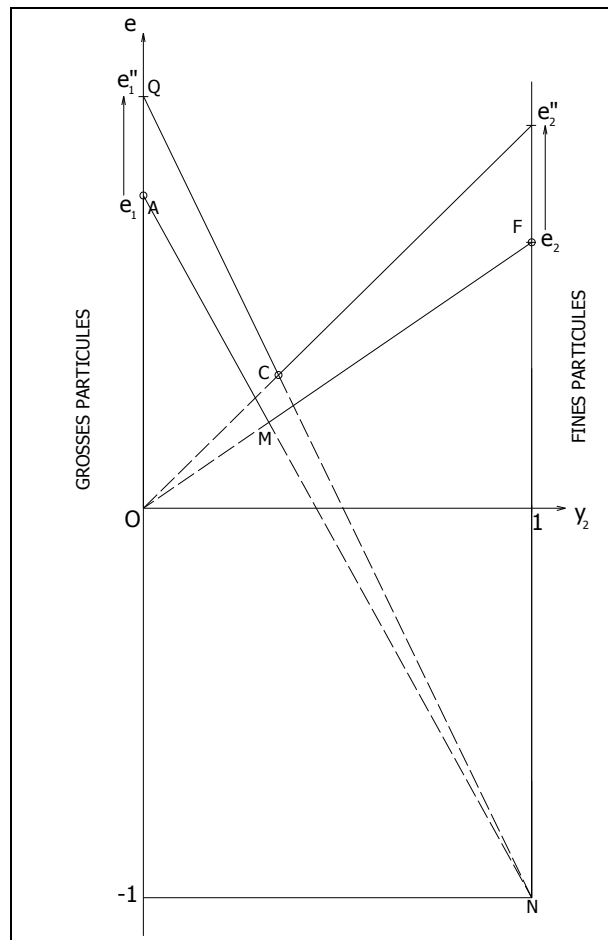


Figure I-27 : mise en évidence des indices des vides effectifs e''_1 et e''_2 .

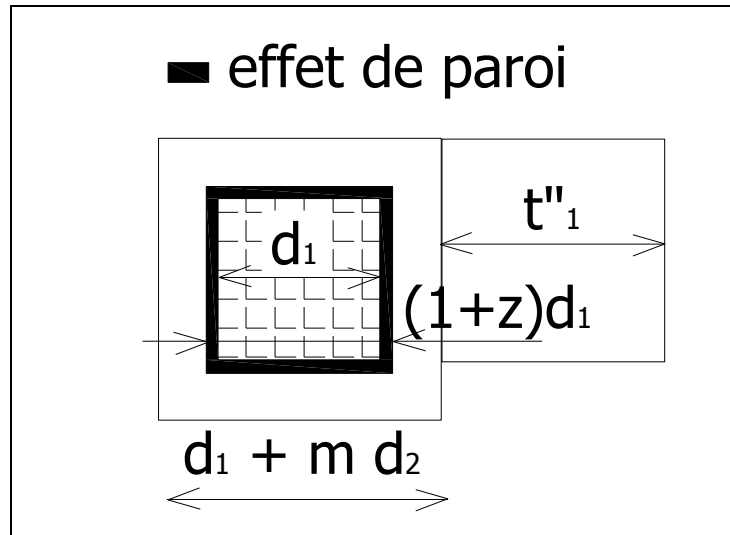


Figure I-28 : vides additionnels engendrés par la paroi des gros grains.

Le facteur de largeur des vides additionnels z peut s'exprimer, d'après Dewar, par :

$$I-74 \quad z = k_{int} + \left((1 + e_1)^{1/3} - 1 - k_{int} \right) x^{k_p}$$

où k_{int} et k_p sont des constantes empiriques, leur valeur dépendant des points considérés : B, C, D ou E.

Points sur le diagramme d'indice des vides	k_{int}	k_p
B	0,12	0,60
C	0,06	0,65
D	0,015	0,8
E	0	0,9

Tableau I-3 : valeurs des facteurs empiriques k_{int} et k_p .

On peut remarquer que lorsque le rapport de tailles x tend vers 0, le facteur z devrait également tendre vers 0 en raison de l'absence d'interférences entre particules. Or z se rapproche de k_{int} . Par exemple, au point B, pour $x = 0,006$, la largeur perturbée par l'effet de paroi vaut : $0,5 z d_1 = 0,5 \times 0,12 \times d_1 = 0,06 \times d_1 = 0,06 \times \frac{d_2}{0,006} = 10 d_2$, soit 10 fois le diamètre des petites particules ce qui est aberrant.

L'influence de z sur le diagramme d'indice des vides peut être visualisée sur la figure suivante.

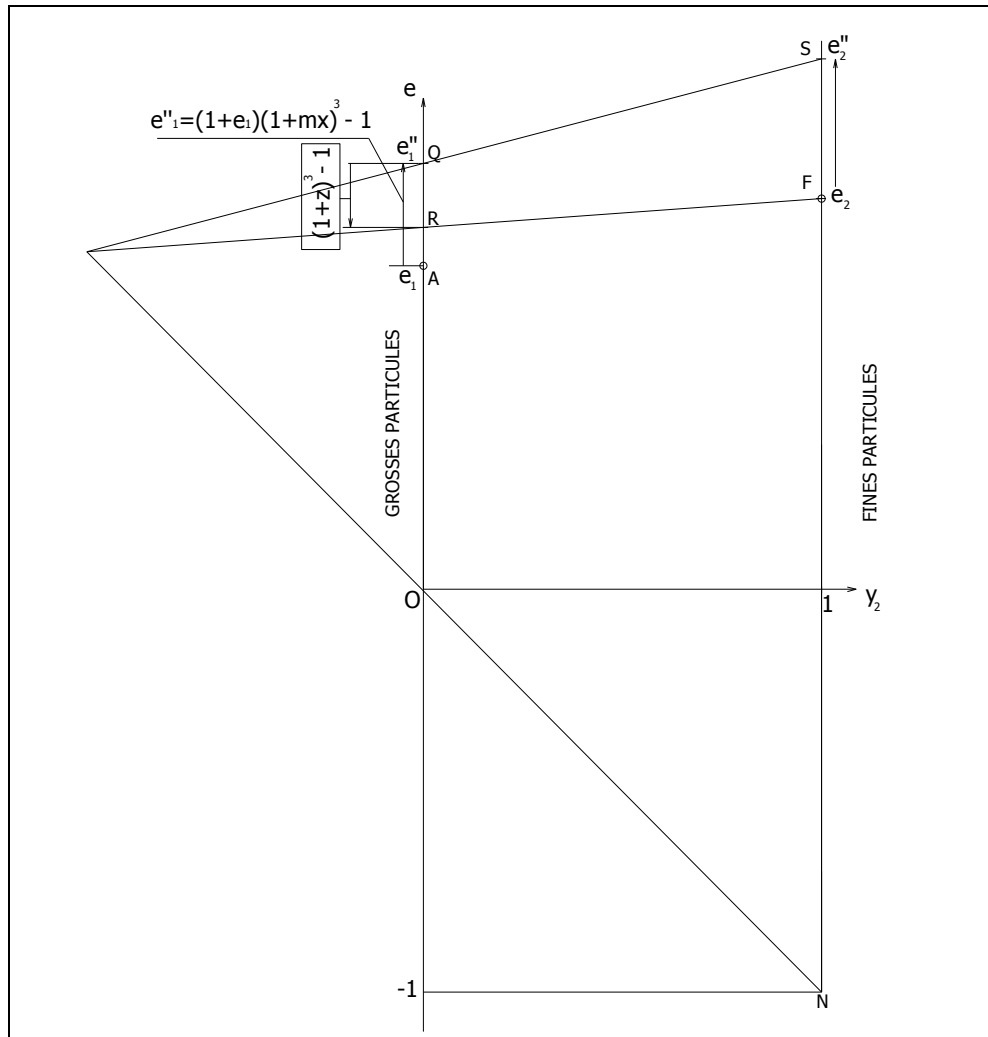


Figure I-29 : visualisation de l'effet de z sur le diagramme d'indice des vides.

L'analyse des relations établies par Dewar permet d'établir les raisonnements géométriques qui suivent.

On passe de A à Q sur l'axe des ordonnées en calculant e''_1 à partir de e_1 , du facteur d'espacement m et du ratio des tailles x . On descend au point R en déduisant de e''_1 une valeur égale à $(1+z)^3 - 1$ représentative de l'effet de paroi. Le théorème de Thalès

permet de montrer que : $\frac{OR}{NF} = \frac{OQ}{NS}$ soit : $\frac{e''_1 - ((1+z)^3 - 1)}{1 + e_2} = \frac{e''_1}{1 + e''_2}$, soit encore :

I-75
$$e''_2 = \frac{(1 + e_2) e''_1}{(1 + e''_1) - (1 + z)^3} - 1$$

En reprenant ensuite la figure I-27, il est relativement aisé d'obtenir les coordonnées du point représentatif du mélange en effectuant l'intersection des droites d'équation $e = e''_1 - (1 + e''_1) y_2$ et $e = e''_2 y_2$. On trouve :

I-76

$$y_2 = \frac{e''_1}{1 + e''_1 + e''_2}$$

$$e = \frac{e''_1 e''_2}{1 + e''_1 + e''_2}$$

Récapitulatif de la démarche de Dewar :

$$e''_1 = (1 + e_1)(1 + mx)^3 - 1$$

$$z = k_{int} + \left((1 + e_1)^{1/3} - 1 - k_{int} \right) x^k$$

$$e''_2 = \frac{(1 + e_2) e''_1}{(1 + e''_1) - (1 + z)^3} - 1$$

$$y_2 = \frac{e''_1}{1 + e''_1 + e''_2}$$

$$e = \frac{e''_1 e''_2}{1 + e''_1 + e''_2}$$

Quand les deux composants consistent en des matériaux gradués, Dewar considère que les effets peuvent être simulés en terme de deux classes mono-modulaires possédant les mêmes diamètres moyens que les deux constituants mais ayant l'indice des vides des matériaux gradués.

1.2.3. Les mélanges poly-dispersés sans interactions.

1.2.3.1. Modèle de Westman et Hugill (1930).

Les équations mathématiques de Westman et Hugill [WEST30] obtenues dans le cadre des mélanges binaires peuvent se généraliser sans peine :

I-77

$$V_{a1} = a_1 y_1$$

$$V_{a2} = y_1 + a_2 y_2$$

$$V_{a3} = y_1 + y_2 + a_3 y_3$$

.....

.....

$$V_{ai} = \sum_{j=1}^{i-1} y_j + a_i y_i$$

.....

$$V_{an} = \sum_{j=1}^{n-1} y_j + a_n y_n$$

V_{ai} correspond au volume apparent calculé avec la $i^{ème}$ taille de particules.

$V_a =$ valeur maximale des $V_{ai} =$ volume apparent du mélange de n tailles de particules.

Chaque équation de la série traite d'une classe de taille différente comme étant la classe dominante qui amène toute la porosité (ex : classe i). Il s'agit de la classe la plus fine du lot. Le volume apparent du mélange correspond alors à la somme du volume apparent de la classe i et du volume absolu des particules plus grosses (classes 1 à $i-1$) qui se trouvent dispersées à l'intérieur de cette classe dominante. Une valeur de volume apparent V_{ai} est calculée pour chaque classe de taille de particule présente dans la distribution. Le meilleur mélange prévisible pour la distribution complète correspond à la plus grande de ces valeurs (le pire cas définit le mélange). Le concept est illustré sur un mélange à 3 classes sur la figure suivante.

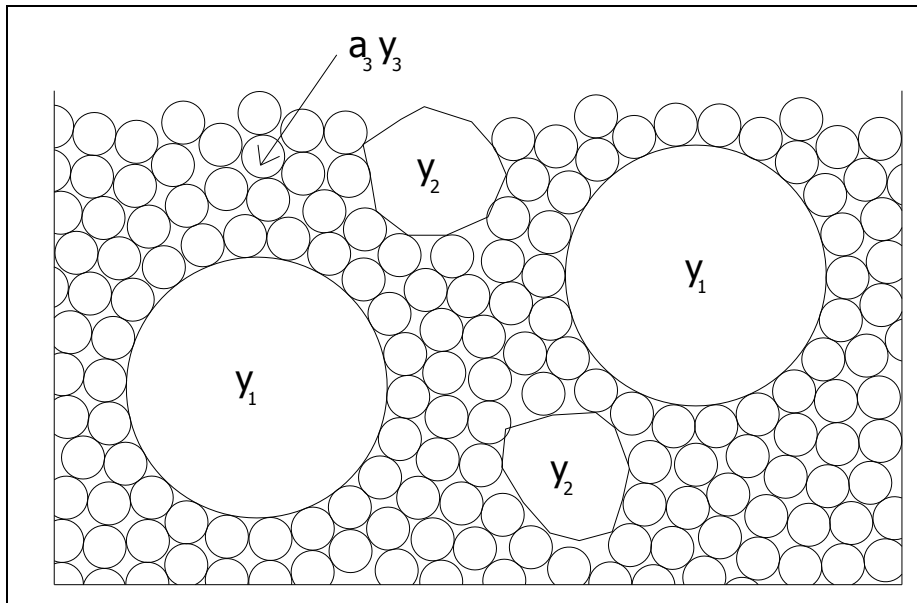


Figure I-30 : volume apparent d'un mélange à 3 classes d'après Westman et Hugill. La classe la plus fine amène du volume apparent. Les classes les plus grosses amènent du volume absolu.

Exprimées en terme de compacité, l'algorithme de Westman et Hugill devient :

I-78

$$c_1 = \frac{\alpha_1}{\gamma_1}$$

$$c_2 = \frac{\alpha_2}{1 - (1 - \alpha_2)\gamma_1}$$

$$c_3 = \frac{\alpha_3}{1 - (1 - \alpha_3)(\gamma_1 + \gamma_2)}$$

.....

.....

$$c_i = \frac{\alpha_i}{1 - (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j}$$

.....

$$c_n = \frac{\alpha_n}{1 - (1 - \alpha_n) \sum_{j=1}^{n-1} \gamma_j}$$

Dans ce cas, le meilleur mélange prévisible pour la distribution complète correspond à la plus petite de ces valeurs.

1.2.3.2. Modèle de Mooney sans interactions (1950).

Pour une suspension de n classes de sphères, chacune d'un diamètre très différent par rapport aux autres ($d_1 \gg d_2 \gg d_3 \gg \dots \gg d_i \gg \dots \gg d_n$), on peut écrire [MOON50], par extension de la formule I-16 :

$$\eta = \eta_0 H(\phi)$$

$$\text{I-79} \quad H(\phi) = \prod_{i=1}^n \exp \left(2,5 \frac{\phi_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j - \frac{\phi_i}{\alpha_i}} \right) = \prod_{i=1}^n \exp \left(2,5 \alpha_i \frac{\phi_i}{\alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j \right) - \phi_i} \right)$$

l'indice de sommation j du dénominateur variant de 1 à $i-1$.

$H(\phi)$ peut également être écrite:

$$\text{I-80} \quad H(\phi) = \prod_{i=1}^n \exp \left(2,5 \alpha_i \frac{\phi_i}{\phi_i^* - \phi_i} \right)$$

avec ϕ_i^* la teneur volumique maximale du mélange en classe i pouvant être ajoutée dans la suspension avant de provoquer le blocage étant donnée la présence des autres classes.

Pour un mélange à n classes sans interactions, Stovall et de Larrard [STOV86] en ont déduit le modèle d'empilement suivant :

$$\text{I-81} \quad \phi_i \leq \phi_i^* = \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j \right)$$

1.2.3.3. Modèle de Lee (1970).

L'algorithme de Westman et Hugill constitue la base de départ de celui de Lee [LEE70] mais rappelons que ce dernier travaille avec un **modèle linéaire de compacité** (et non de volume apparent) **en fonction du titre volumique des particules**. L'approche adoptée pour le mélange binaire s'étend aisément à un mélange multi-composants :

I-82

$$c_i = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \gamma_j$$

avec : $\alpha_{ii} = \alpha$; $\alpha_{ij} = \frac{c_{ijmax} - \alpha}{0,265} + \alpha$ si $i < j$ ou $\alpha_{ij} = \frac{c_{ijmax} - \alpha}{0,735} + \alpha$ si $i > j$.

Là aussi, le meilleur mélange prévisible pour la distribution complète correspond à la plus petite de ces valeurs.

1.2.3.4. Modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard sans interactions (1986).

Reprenons les travaux de Mooney pour un mélange à n classes sans interactions (équations I-81) :

$$\begin{aligned} \phi_1 &\leq \phi_1^* = \alpha_1 \\ \phi_2 &\leq \phi_2^* = \alpha_2(1 - \phi_1) \\ \phi_3 &\leq \phi_3^* = \alpha_3(1 - \phi_1 - \phi_2) \\ &\dots\dots\dots \\ &\dots\dots\dots \\ \phi_i &\leq \phi_i^* = \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j \right) \\ &\dots\dots\dots \\ \phi_n &\leq \phi_n^* = \alpha_n \left(1 - \sum_{j=1}^{n-1} \phi_j \right) \end{aligned}$$

Puisque nous sommes en présence d'un empilement, il existe une classe dominante qui « bloque » le mélange. Dans ce cas, une des inégalités précédentes devient une égalité [DELA88]. S'il s'agit de la classe i :

$$\phi_i = \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j \right)$$

et dans ce cas :

I-83

$$\begin{aligned} c_i &= \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \dots\dots + \phi_i^* + \dots\dots + \phi_n \\ c_i &= \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j + \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j \right) + \sum_{j=i+1}^n \phi_j \\ c_i &= \alpha_i + (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j + \sum_{j=i+1}^n \phi_j \end{aligned}$$

Sachant, par ailleurs, que $\phi_j = c_j \gamma_j$, on en déduit :

I-84

$$c = c_i = \frac{\alpha_i}{1 - (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n \gamma_j}$$

Il s'agit d'un modèle plus complet que celui de Westman et Hugill qui, rappelons-le, ne prend en compte que l'influence des classes plus grosses que la classe i .

1.2.3.5. Modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard sans interactions (1999).

Il suffit de remplacer c par γ et α par β pour effectuer le raisonnement en compacités virtuelles [DELA00] :

$$\text{I-85} \quad \gamma = \gamma_i = \frac{\beta_i}{1 - (1 - \beta_i) \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n \gamma_j}$$

1.2.4. Les mélanges poly-disperses avec interactions.

1.2.4.1. Modèle de Mooney (1950).

Pour une suspension de n classes de sphères, chacune d'un diamètre différent mais avec interactions, Mooney [MOON50] écrit, par extension de la formule I-15 :

$$\eta = \eta_0 H(\phi)$$

$$\text{I-86} \quad H(\phi) = \prod_{i=1}^n \exp \left(2,5 \frac{\phi_i}{1 - \sum_{j=1}^n \lambda_{ij} \phi_j} \right) = \prod_{i=1}^n \exp \left(2,5 \alpha_i \frac{\phi_i}{\alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^n \lambda_{ij} \phi_j \right)} \right)$$

l'indice de sommation j du dénominateur variant cette fois-ci de 1 à n .

Dans la relation précédente, il convient de bien distinguer le facteur d'encombrement qui résulte d'un effet de desserrement que nous allons noter $\lambda_{d,ij}$ et le facteur d'encombrement qui résulte d'un effet de paroi que nous allons noter $\lambda_{p,ij}$:

$$\text{I-87} \quad H(\phi) = \prod_{i=1}^n \exp \left(2,5 \alpha_i \frac{\phi_i}{\alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{p,ij} \phi_j - \frac{\phi_i}{\alpha_i} - \sum_{j=i+1}^n \lambda_{d,ij} \phi_j \right)} \right)$$

Implicitement, le modèle d'empilement de Mooney est donc le suivant :

$$\text{I-88} \quad \phi_i \leq \phi_i^* = \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{p,ij} \phi_j - \sum_{j=i+1}^n \lambda_{d,ij} \phi_j \right)$$

Puisque nous sommes en présence d'un empilement, il existe une classe dominante qui « bloque » le mélange. S'il s'agit de la classe i :

I-89

$$c_i = \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_i^* + \dots + \phi_n$$

$$c_i = \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j + \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{p,ij} \phi_j - \sum_{j=i+1}^n \lambda_{d,ij} \phi_j \right) + \sum_{j=i+1}^n \phi_j$$

$$c_i = \alpha_i + \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \alpha_i \lambda_{p,ij}) \phi_j + \sum_{j=i+1}^n (1 - \alpha_i \lambda_{d,ij}) \phi_j$$

Sachant, par ailleurs, que $\phi_j = c_j \gamma_j$, on en déduit :

I-90

$$c = c_i = \frac{\alpha_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \alpha_i \lambda_{p,ij}) \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n (1 - \alpha_i \lambda_{d,ij}) \gamma_j}$$

Les facteurs d'encombrement liés à l'effet de desserrement $\lambda_{d,ij}$ et à l'effet de paroi $\lambda_{p,ij}$ sont représentés sur la figure I-13 pour un mélange binaire où ils correspondent respectivement à λ_{12} et à λ_{21} . En l'absence d'interaction : $\lambda_{d,ij} = 0$ et $\lambda_{p,ij} = 1$.

1.2.4.2. Modèle de Suzuki et Oshima (1983/85).

La démarche présentée pour un mélange binaire va maintenant être généralisée à un mélange à composants multiples ([SUZU83], [SUZU85]).

La fraction de vide n_{ij} déterminée dans la cellule d'encombrement est ensuite utilisée pour calculer la porosité associée à la famille de particules i :

I-91

$$n_i = \frac{n_{\text{mono}}}{n_{ii}} \sum_j S_{aj} n_{ij}$$

avec :

- n_{mono} la porosité du milieu mono-modulaire ;
- n_{ii} la porosité de la cellule de référence lorsqu'une particule de diamètre d_i est entourée par d'autres particules de diamètre d_i ;
- n_{ij} la porosité de la cellule de référence lorsqu'une particule de diamètre d_i est entourée par des particules de diamètre d_j ;
- S_{aj} le pourcentage surfacique de la famille j dans l'assemblage granulaire .

La porosité du mélange n s'exprime, selon Suzuki et Oshima, comme la somme des produits de la porosité associée à chaque famille de particule n_i par le pourcentage volumique de chacune d'entre elles S_{vi} :

I-92

$$n = \sum_i S_{vi} n_i$$

1.2.4.3. Modèle de Toufar, Klose et Born (1977) modifié par Goltermann, Johansen, Palbol (1997).

Pour calculer la compacité de mélanges multi-composants de classes mono-modulaires avec le modèle de Toufar, Klose et Born (1977) [TOUF77] modifié par Goltermann, Johansen et Palbol [GOLT97], les combinaisons sont effectuées à partir des équations suivantes (Johansen et Andersen, 1991), élaborées à partir du modèle binaire :

I-93

$$c_{ij} = \frac{1}{\frac{y_i}{\alpha_i} + \frac{y_j}{\alpha_j} - y_i \left(\frac{1}{\alpha_i} - 1 \right) k_{d,ij} k_{s,ij}}$$

$$k_{d,ij} = \frac{1 - x_{ij}}{1 + x_{ij}} \text{ avec } x_{ij} = \frac{d_j}{d_i}$$

$$k_{s,ij} = 1 - \frac{1 + 4z_{ij}}{(1 + z_{ij})^4} \text{ pour } z_{ij} \geq 0,4753$$

$$k_{s,ij} = \frac{0,3881z_{ij}}{0,4753} \text{ pour } z_{ij} < 0,4753$$

$$z_{ij} = \frac{\left(\frac{y_j}{y_i} \right) \left(\frac{\alpha_i}{\alpha_j} \right)}{1 - \alpha_i}$$

et :

I-94

$$y_{ij} = \frac{y_i y_j}{1 - y_i} + \frac{y_j y_i}{1 - y_j}$$

$$c = \frac{1}{\sum_{j=2}^n \sum_{i=1}^{j-1} \frac{y_{ij}}{c_{ij}}}$$

Pour calculer la compacité de mélanges multi-composants de fractions poly-dispersées (exemple : sable et gravier d'un béton), Goltermann, Johansen et Palbol suggèrent l'utilisation d'un diamètre caractéristique d_{char} correspondant à un refus de 36,8 % lors du tamisage du constituant. Pour des mélanges ternaires, ils proposent de combiner les deux fractions possédant le plus faible ratio de diamètres caractéristiques avec la troisième fraction. Le processus peut ensuite être étendu à d'autres constituants.

Par ailleurs, Andersen et Johansen (1993) [ANDE93] ont combiné le modèle de Ben-Aïm avec celui de Toufar, Klose et Born pour développer des séries de tableaux dans le but d'étudier des mélanges multi-composants.

1.2.4.4. Modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard avec interactions (1986).

Reprenons le modèle d'empilement aléatoire maximal déduit du modèle de Mooney (équation I-88) :

$$\phi_i \leq \phi_i^* = \alpha_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{p,ij} \phi_j - \sum_{j=i+1}^n \lambda_{d,ij} \phi_j \right)$$

Les coefficients $\lambda_{p,ij}$ et $\lambda_{d,ij}$ de Mooney ont été adaptés par Stovall et de Larrard dans leur modèle MLC (se reporter aux mélanges binaires avec interactions) :

$$\text{I-95} \quad \lambda_{p,ij\text{Mooney}} = \frac{1 - (1 - \alpha_i) g_{ij\text{MLC}}}{\alpha_i} \quad \text{et} \quad \lambda_{d,ij\text{Mooney}} = \frac{1 - f_{ij\text{MLC}}}{\alpha_i}$$

On en déduit :

$$\text{I-96} \quad \phi_i \leq \phi_i^* = \alpha_i - \sum_{j=1}^{i-1} [1 - (1 - \alpha_i) g_{ij}] \phi_j - \sum_{j=i+1}^n (1 - f_{ij}) \phi_j$$

Soit i la classe dominante qui « bloque » le mélange :

$$\begin{aligned} \text{I-97} \quad c_i &= \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_i^* + \dots + \phi_n \\ c_i &= \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j + \alpha_i - \sum_{j=1}^{i-1} [1 - (1 - \alpha_i) g_{ij}] \phi_j - \sum_{j=i+1}^n (1 - f_{ij}) \phi_j + \sum_{j=i+1}^n \phi_j \\ c_i &= \alpha_i + (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} \phi_j + \sum_{j=i+1}^n f_{ij} \phi_j \end{aligned}$$

On constate que les interactions restent additives et la compacité linéaire en fonction des volumes partiels.

Sachant, par ailleurs, que $\phi_j = c_i \gamma_j$, on en déduit [DELA88] :

$$\text{I-98} \quad c = c_i = \frac{\alpha_i}{1 - (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n f_{ij} \gamma_j}$$

Les fonctions d'interaction caractérisant l'effet de paroi g_{ij} et l'effet de desserrement f_{ij} sont représentées sur les figures I-16 et I-17 pour un mélange binaire où elles correspondent respectivement à g_{21} et à f_{12} . En l'absence d'interaction : $g_{ij} = 1$ et $f_{ij} = 1$.

1.2.4.5. Modèle de Yu et Standish (1987).

Transposées du modèle binaire au modèle poly-disperse, les équations de Yu et Standish [YUST87] deviennent :

$$\text{I-99} \quad c_i = \frac{\alpha_i}{1 - \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_{ij}} \right) \frac{\gamma_j}{\gamma_{ij}}}$$

$$c_j = \frac{\alpha_j}{1 - \left(1 - \frac{\alpha_j}{\alpha_{ji}}\right) \gamma_{ji}}$$

ou, en utilisant une forme plus générale :

$$\text{I-100} \quad c = c_i = \frac{\alpha_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_{ij}}\right) \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_{ij}}\right) \gamma_j}$$

que l'on peut écrire :

$$\text{I-101} \quad c = c_i = \frac{\alpha_i}{1 - (1 - \alpha_i) \sum_{j=1}^{i-1} g_{ijys} \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n f_{ijys} \gamma_j}$$

avec :

$$\text{I-102} \quad \alpha_{ij} = \alpha_i + \alpha_i (1 - \alpha_i) (1 - 2,35x_{ij} + 1,35x_{ij}^2) \text{ si } x_{ij} \leq 0,741;$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_i \text{ si } x_{ij} > 0,741;$$

$$\gamma_{ij} = 1 - \frac{1 - x_{ij}^2}{2 - \alpha_i} \text{ pour } j \geq i;$$

$$\gamma_{ij} = \frac{1 - x_{ij}^2}{2 - \alpha_i} \text{ pour } j < i.$$

$$x_{ij} = \frac{d_j}{d_i} \text{ pour } j \geq i;$$

$$x_{ij} = \frac{d_i}{d_j} \text{ pour } j < i;$$

Les fonctions d'interaction ont déjà été établies dans le cas d'un mélange binaire :

$$\text{I-103} \quad f_{ijys} = \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_{ij}}\right) \frac{1}{\gamma_{ij}} \text{ pour } j \geq i;$$

$$g_{ijys} = \frac{1}{1 - \alpha_i} \left(1 - \frac{\alpha_i}{\alpha_{ij}}\right) \frac{1}{\gamma_{ij}} \text{ pour } j < i.$$

En termes de volumes apparents, les fonctions d'interaction s'expriment par :

$$\text{I-104} \quad f_{ijys} = \frac{a_i - V_{ij}}{a_i \gamma_{ij}} \text{ avec : } a_i = \frac{1}{\alpha_i} \text{ et } V_{ij} = \frac{1}{\alpha_{ij}};$$

$$g_{ijys} = \frac{1}{a_i - 1} \frac{a_i - V_{ij}}{\gamma_{ij}}.$$

Le volume apparent du mélange s'exprime par :

$$\text{I-105} \quad V_a = V_{a_i} = \sum_{j=1}^{i-1} (a_i - (a_i - 1) g_{ij}) \gamma_j + a_i \gamma_i + \sum_{j=i+1}^n a_i (1 - f_{ij}) \gamma_j$$

1.2.4.6. Modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard avec interactions (1999).

La formulation linéaire de de Larrard [DELA00] assure l'additivité de toutes les interactions exercées sur une classe. La généralisation du modèle binaire donne :

$$I-106 \quad \gamma = \gamma_i = \frac{\beta_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left(1 - \beta_i + b_{ij}\beta_i \left(1 - \frac{1}{\beta_j} \right) \right) \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n \left(1 - \frac{\beta_i}{\beta_j} a_{ij} \right) \gamma_j}$$

Cette relation permet ainsi d'obtenir la compacité virtuelle du mélange. La représentation des coefficients d'interaction a_{ij} et b_{ij} a été fournie dans le cadre du mélange binaire.

1.2.4.7. Théorie des mélanges de particules de Dewar (1983, 1986, 1999).

Pour trois composants ou plus, les formules établies pour les mélanges binaires par Dewar [DEWA99] restent valables. Elles permettent tout d'abord de calculer le diamètre moyen et l'indice des vides de la combinaison des deux matériaux les plus fins puis d'associer celle-ci avec le plus gros matériau suivant et ainsi de suite jusqu'à ce que tous les composants aient été utilisés.

1.2.5. Survol de quelques théories liées aux mélanges aléatoires.

Les théories liées aux mélanges aléatoires ne prennent pas en compte explicitement les interactions granulaires. Néanmoins, elles vont être décrites succinctement pour deux raisons. Premièrement, parce que nous utiliserons les résultats de l'une d'entre elles, celle de Dodds, ultérieurement. Deuxièmement, car elles traitent également des contacts entre particules et de leur distribution, domaine qui nous sera également utile par la suite. Le lecteur averti trouvera bien plus de détails dans certains travaux bien spécifiques comme, par exemple, la thèse de Wouters intitulée « random packing of colloids and granular matter » [WOUT08].

En 1952, Wise [WISE52] présente une nouvelle approche mathématique pour modéliser une distribution continue. Sa démarche est basée sur l'utilisation de

tétraèdres dont les sommets sont positionnés au centre de chaque particule sphérique. Chacune d'entre elles est supposée en contact avec chacune de ses voisines. Les travaux de Wise s'appliquent à des distributions log-normales mais pourraient être étendus à n'importe quel type de distribution. Ils sont principalement répertoriés dans des publications mathématiques ce qui rend leur accès assez difficile. Wise sera suivi, en 1963, par Hogendijk [HOGE63].

En 1970, Finney [FINN70] choisit de décrire la géométrie d'un empilement aléatoire grâce à des polyèdres de Voronoï. L'empilement est caractérisé par les coordonnées des centres des sphères. Un polyèdre de Voronoï associé au centre d'une sphère est constitué de points dont la position est plus proche de ce centre que des centres des autres sphères. La cellule ainsi obtenue définit un volume. La distribution des différents types de polyèdres peut ensuite être calculée.

En 1980, Dodds [DODD80] poursuit les travaux entrepris par Wise et Hogendijk en conservant la même hypothèse fondatrice concernant les contacts entre particules. Il fait appel à une approche statistique et géométrique pour décrire le milieu granulaire aléatoire poly-disperse. Dodds limite les rapports des tailles de grains à **4,45** pour éviter que les petites sphères puissent passer à travers les plus petits pores situés entre les gros éléments. Comme Wise, les sommets de chaque tétraèdre correspondent aux centres des sphères en contact mutuel. Connaissant le nombre de familles de particules constituant le réseau tridimensionnel, Dodds détermine le nombre de configurations tétraédriques différentes possibles.

Par exemple, pour un mélange de deux tailles différentes de particules (1 pour la grosse, 2 pour la petite), on dénombre :

- 3 types de contacts différents : entre grandes particules, entre petites particules, entre grande et petite particules ;
- 5 sous unités tétraédriques possibles : **1111**, **1112**, **1122**, **1222** et **2222**.

La structure granulaire est décrite lorsque les quantités relatives de ces différentes configurations tétraédriques sont connues. La probabilité p_{ijkl} de former un tétraèdre avec des sphères de rayons r_i , r_j , r_k , r_l aux sommets 1, 2, 3, 4 dépend de la probabilité que possède chaque type de sphère d'être localisée à un sommet particulier du tétraèdre. La distribution des fréquences des sous unités tétraédriques est ensuite déterminée par itération. Elle permet de pondérer le volume d'éléments solides contenu dans chaque tétraèdre pour aboutir à la compacité, au nombre de coordination (nombre moyen de contacts par particule) et à la répartition des différents types de contact du mélange.

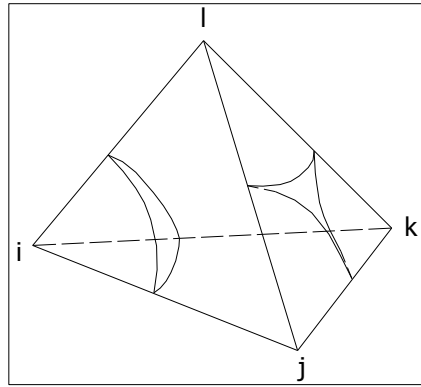


Figure I-31 : réseau tétraédrique « gapless » de Dodds.

Malheureusement, du fait que chaque particule est supposée être en contact avec ses voisines (gapless packing), cette théorie concerne uniquement les milieux particulièrement denses. En fait, elle surestime à la fois le nombre de coordination et la compacité maximale. Ainsi, Dodds aboutit à un nombre de coordination égal à **13,4** pour un milieu mono-taillé alors que des considérations géométriques démontrent qu'il est impossible d'empiler plus de **12** sphères de même diamètre autour d'une sphère de taille similaire. De plus, sa méthode prédit une compacité maximale de **0,7796** pour un tel milieu alors que la limite est de **0,7405**.

Plusieurs tentatives ont été effectuées pour étendre la méthode des empilements « gapless » à des mélanges plus réalistes.

Leitzelment, Lo et Dodds [LEIT85] appliquent un coefficient correcteur de **0,13** pour obtenir des valeurs de compacité cohérentes (**0,63** à **0,66**) dans le cas des empilements aléatoires mono-taillées. Malheureusement, cette correction s'effectue au détriment du nombre de coordination qui perd tout son sens.

Une adaptation plus judicieuse a été proposée par Richard [RICH00] afin de prendre en compte les cas où les grains ne sont pas tous en contact avec leurs voisins.

Chaque élément sphérique de centre P est associé à une cellule polyédrique convexe du point P obtenue dans le cadre de deux généralisations de la tessellation de Voronoï : la tessellation radicale (pondération de la position des plans en fonction de la taille des sphères) et la carte de navigation (prise en compte des points d'égale distance entre les surfaces des deux sphères). Chaque face est commune à deux polyèdres. A chacune de ces tessellations peut être associé un ensemble dual qui consiste à tracer les segments joignant les centres de deux sphères voisines (tessellation de Delaunay) pour former un pavage de l'espace par des tétraèdres de « voisins ».

Richard commence par déterminer la distance moyenne entre voisins. Il adapte pour cela le modèle de Dodds à des empilements binaires à diverses compacités.

Quand la compacité tend vers zéro, le système tend vers un système de points. La distance moyenne entre voisins est obtenue en calculant la longueur moyenne des arêtes de la tessellation de Delaunay d'un système de points aléatoires. Les sphères sont très éloignées et les effets de tailles ne se font plus sentir.

Quand les compacités sont élevées, l'empilement est décrit par un pavage de tétraèdres dans lesquels tous les contacts sont réels ce qui correspond au modèle de Dodds. La distance moyenne entre voisins dépend de la distance entre centres des sphères i et j (égale à la somme des rayons puisque les sphères sont en contact) et de leur probabilité de voisinage.

Pour des compacités intermédiaires, Richard propose une expression approchée des distances moyennes entre voisins.

Il détermine ensuite le nombre moyen de faces d'une cellule.

L'étape finale consiste à calculer d'une part les volumes des cellules polyédriques associées aux sphères en fonction de leur nombre de faces et d'autre part la distribution de ces volumes.

Même si Richard ne va pas jusqu'à déterminer, par itération, la compacité du mélange car tel n'était pas son objectif, sa démarche apparaît plus généraliste que celle de Dodds et semble prometteuse pour des recherches futures. Toutefois, les compacités testées par simulation numérique, entre 0,1 et 0,6, se situent assez loin de celles rencontrées en génie civil.

En 2003, Beck et Volpert [BECK03] ont proposé une extension des mélanges basée sur l'hypothèse « contacts entre voisins » à des mélanges quelconques. Les auteurs considèrent que n'importe quelle texture granulaire peut être transformée en réseau de Dodds (gapless Dodds network) grâce à l'introduction d'un nombre adéquat de « sphères interstitielles » de différentes tailles. Un réseau de contacts est ainsi recréé : soit des contacts « sphère pleine » - « sphère interstitielle » soit des contacts « sphère pleine » - « sphère pleine ».

L'idée de Beck et Volpert est séduisante sur le principe. Seulement, le système devient insoluble pour les mélanges denses (compacité supérieure à 0,66 ou 0,69) pour lesquels il devient nécessaire d'effectuer des hypothèses concernant la distribution des sphères interstitielles. En particulier, le réseau cubique faces centrées (CFC) implique une distribution de vides fournie par une somme de fonctions delta qui rompt avec l'hypothèse aléatoire.

1.2.6. Les modèles continus.

1.2.6.1. Modèles déduits des modèles discontinus.

Le passage du discontinu au continu ne pose pas de problème particulier pour les modèles linéaires de compacité. Il suffit de transformer les signes \sum en intégrales.

Pour une distribution granulaire $\gamma(u)$, la quantité $100 \int_{u_1}^{u_2} \gamma(u) du$ correspond au pourcentage de grains compris entre les tailles u_1 et u_2 .

Nous allons considérer successivement les modèles de Mooney (1950), de Stovall et de Larrard (1986), et de Yu et Standish (1987).

Commençons par le modèle de Mooney [MOON50] :

$$\text{I-107 } c = \inf_{\gamma(d) \neq 0} \frac{\alpha(d)}{1 - \int_0^d (1 - \alpha(d) \lambda_d(d,u)) \gamma(u) du - \int_d^{+\infty} (1 - \alpha(d) \lambda_p(d,u)) \gamma(u) du}$$

$\alpha(d)$ représente la compacité propre des grains de taille d , $\lambda_d(d,u)$ le facteur d'encombrement qui résulte d'un effet de desserrement et $\lambda_p(d,u)$ le facteur d'encombrement qui résulte d'un effet de paroi.

Continuons par le modèle de Stovall et de Larrard [DELA88]:

$$\text{I-108 } c = \inf_{\gamma(d) \neq 0} \frac{\alpha(d)}{1 - \int_0^d f(d,u) \gamma(u) du - (1 - \alpha(d)) \int_d^{+\infty} g(d,u) \gamma(u) du}$$

f et g sont les fonctions d'interaction représentant l'effet de desserrement et l'effet de paroi.

Poursuivons enfin par le modèle de Yu et Standish [YUST87] :

$$\text{I-109 } c = \inf_{\gamma(d) \neq 0} \frac{\alpha(d)}{1 - \int_0^{0,741d} \left(1 - \frac{\alpha(d)}{\alpha_S(d,u)}\right) \frac{\gamma(u)}{\gamma_S(d,u)} du - \int_d^{+\infty} \left(1 - \frac{\alpha(d)}{\alpha_L(d,u)}\right) \frac{\gamma(u)}{\gamma_L(d,u)} du}$$

que l'on peut écrire :

$$\text{I-110 } c = \inf_{\gamma(d)>0} \frac{\alpha(d)}{1 - \int_0^{0,741d} f_{ys}(d,u) \gamma(u) du - (1 - \alpha(d)) \int_{\frac{d}{0,741}}^{+\infty} g_{ys}(d,u) \gamma(u) du}$$

avec :

$$\text{I-111 } \alpha_s(d,u) = \alpha(d) + \alpha(d)(1 - \alpha(d)) \left(1 - 2,35 \frac{u}{d} + 1,35 \left(\frac{u}{d} \right)^2 \right)$$

$$\alpha_L(d,u) = \alpha(d) + \alpha(d)(1 - \alpha(d)) \left(1 - 2,35 \frac{d}{u} + 1,35 \left(\frac{d}{u} \right)^2 \right)$$

$$\gamma_s(d,u) = 1 - \frac{1 - \left(\frac{u}{d} \right)^2}{2 - \alpha(d)}$$

$$\gamma_L(d,u) = \frac{1 - \left(\frac{d}{u} \right)^2}{2 - \alpha(d)}$$

Les fonctions d'interaction de Yu et Standish s'expriment sous la forme :

$$\text{I-112 } f_{ys}(d,u) = \left(1 - \frac{\alpha(d)}{\alpha_s(d,u)} \right) \frac{1}{\gamma_s(d,u)}$$

$$g_{ys}(d,u) = \frac{1}{1 - \alpha(d)} \left(1 - \frac{\alpha(d)}{\alpha_L(d,u)} \right) \frac{1}{\gamma_L(d,u)}$$

Seulement, le passage du discontinu au continu amène la question suivante : un mélange cesse-t-il d'être compacité si les rapports de tailles de deux classes successives se rapprochent trop de 1, un support étant considéré compacité (de Larrard [DELA88]) lorsque la distribution optimale sur ce support utilise chaque classe de grains ? De Larrard, avec le modèle MLC, a conduit un programme de recherche pour déterminer la distribution granulaire de proportions volumiques $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ produisant la plus forte compacité. Il s'agissait en fait d'un problème de programmation linéaire. Avec les fonctions d'interaction utilisées à l'époque, il a montré que des proportions volumiques négatives sont obtenues lorsque les tailles de grains sont trop proches (ce qui revient à dire que le support n'est pas compacité), sans toutefois parvenir à trouver « une distance minimale » entre deux classes successives. Nous reviendrons à ce problème d'optimisation d'une distribution granulaire lorsque les tailles de grains qui se suivent sont très proches les unes des autres avec Brouwers dans le paragraphe suivant.

1.2.6.2. Méthodes liées à la recherche d'une courbe granulométrique idéale.

Depuis que Féret a scientifiquement prouvé que le choix des granulats influençait les caractéristiques du béton, de nombreux chercheurs ont tenté de trouver la courbe granulométrique idéale afin de réaliser un mélange dont les qualités soient celles recherchées. On peut notamment citer la maniabilité, la résistance à la compression et la durabilité. Ces deux dernières sont intimement liées à la compacité du mélange. Relier celle-ci à la distribution de la taille des grains apparaît donc comme fondamental. Mais s'il s'agit d'une préoccupation majeure dans l'industrie du béton, le nombre de secteurs concernés par cette question est particulièrement diversifié. Les études citées en référence nous conduiront par conséquent également vers la mécanique des sols ou l'industrie minière.

Certains précurseurs se sont orientés vers des lois de probabilité plutôt généralistes en utilisant les distributions de Rosin-Rammler (RR), lognormale (LN) ou de Johnson (S_B).

D'autres ont préféré suivre la voie ouverte par Fuller et Thompson dans le domaine plus spécifique des bétons.

La fonction de Rosin-Rammler est en fait une loi de Weibull appliquée à la distribution des tailles de particules. La loi de Weibull est une loi de probabilité continue utilisée dans de nombreux domaines (analyse de la durée de vie, processus stochastiques,...). Son succès se justifie par son efficacité à constituer des approximations alors qu'il s'avère difficile de justifier d'une forme particulière de loi. En partant de la moyenne et de la variance, il est en effet souvent possible de trouver dans la famille de Weibull une loi qui ne s'éloigne pas trop des données disponibles. On peut notamment la faire tendre vers une distribution exponentielle, une distribution de Rayleigh, une distribution normale ou la fonction delta de Dirac selon les circonstances. Appliquée aux tailles de grains, l'équation de Rosin-Rammler donne :

$$I-113 \quad P_{RR}(d) = 1 - \exp\left(-\ln 2 \times \left(\frac{d}{d_{50}}\right)^{n_{rr}}\right)$$

où d_{50} et n_{rr} sont respectivement la taille de grain caractéristique correspondant à 50 % de tamisat et le coefficient d'uniformité de Rosin-Rammler.

Les fonctions de distribution lognormale (LN) et de Johnson (S_B), quant à elles, s'expriment respectivement de la façon suivante :

$$I-114 \quad P_{LN}(d) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) \text{ avec } z = \frac{\ln\left(\frac{d}{d_{50}}\right)}{\ln \sigma_{ga}}$$

$$I-115 \quad P_{SB}(d) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{Z}{\sqrt{2}}\right) \text{ avec } Z = \sigma_{Ja} \left(\ln \frac{d - d_{\min}}{D_{\max} - d} - \ln \frac{d_{50} - d_{\min}}{D_{\max} - d_{50}} \right)$$

où σ_{ga} , σ_{Ja} sont les paramètres de ces fonctions, $\operatorname{erf}(z)$ ou $\operatorname{erf}(Z)$ les fonctions erreur, tandis que d_{\min} et D_{\max} sont les tailles de particules minimale et maximale.

Yu et Standish [YUST90] ont mené une étude comparative des fonctions RR, LN et S_B sur des distributions de tailles de particules de charbon allant jusqu'à 4 mm. Pour chaque système considéré, il existe un paramètre (n_{rr} , σ_{ga} , σ_{Ja}) permettant d'optimiser la distribution et conduisant à l'empilement le plus compact. Mais ils ont surtout mis en évidence la difficulté à caler une de ces fonctions de distribution théorique avec une fonction de distribution réelle, particulièrement pour les larges étendues de tailles de grains. Certes, il serait possible d'y parvenir. En 1994, Fredlund [FRED94] est allé jusqu'à proposer une équation à cinq paramètres dans le domaine des sols. Mais même si elle fournit une meilleure concordance que l'équation lognormale, il ne faut pas perdre de vue qu'elle a pour but de reproduire des courbes granulométriques de sols existants et non d'optimiser une distribution dans l'optique d'obtenir la meilleure compacité possible.

L'absence de sens physique dans l'utilisation de ces lois de probabilité généralistes constitue indiscutablement un handicap même si on peut les considérer comme des outils pratiques.

Dans le domaine plus spécifique des bétons, Fuller et Thompson [FULL07] ont proposé, en 1907, la courbe décrite par :

$$I-116 \quad P_{FT}(d) = \left(\frac{d}{D_{\max}} \right)^{0,5}$$

où D_{\max} est la plus grosse taille de particule, d est la taille de particule considérée et $P(d)$ la fraction des solides de tailles inférieures à d .

Avec un exposant fixé à **0,5**, ce modèle manque de polyvalence. C'est pourquoi, il a été amélioré par Andreasen et Andersen [ANDR30] en 1929 qui ont remplacé la constante **0,5** par une variable **q** :

$$\text{I-117} \quad P_{AA}(d) = \left(\frac{d}{D_{\max}} \right)^q$$

à partir de la formulation et de la résolution de l'équation :

$$\text{I-118} \quad \frac{dP}{d(\ln d)} = q P$$

en tenant compte de la condition aux limites :

$$\text{I-119} \quad P(D_{\max}) = 1.$$

L'équation I-118 est établie de la façon suivante. Soient d_1 la taille des plus grosses particules et d_n celle des plus fines. Les auteurs considèrent que les grains de la classe granulaire de rang i occupent un volume absolu égal à une fraction q du volume absolu occupé par l'ensemble des classes granulaires n à $i + 1$ (n étant la plus fine). Les tailles de particules sont telles qu'elles forment une progression géométrique et donc, que la différence du logarithme de 2 tailles de grains appartenant à 2 classes granulaires successives est constante.

Les équations du type de celle de Andreasen se rencontrent fréquemment dans les discussions de géométrie fractale. En effet, la représentation de P_{AA} en fonction de la taille d dans un système d'axes **log – log** est une droite ce qui correspond au critère de similarité. Or, il s'agit d'une notion omniprésente dans le domaine des fractales. Mandelbrot a décrit de telles conditions de similarités dans son traité. Ici, q ne peut être que positif.

Andreasen et Andersen sont arrivés à la conclusion que l'exposant q de la formule I-117 devait être compris entre **1/3** et **1/2** pour obtenir l'empilement le plus dense.

La valeur de q qui doit être considérée dans cette optique constitue un véritable débat. La tendance qui se dégage des études entreprises depuis de nombreuses années semble être qu'une diminution de q (à partir de **3**) conduise à des mélanges de plus en plus compacts mais qu'il existe un effet seuil en deçà d'une certaine valeur de q . Pour essayer de comprendre pourquoi, considérons les travaux de Peronius et Sweeting (1985), Aberg (1992) et Tsirel (1997).

Peronius et Sweeting (1985) [PERO85], dont l'objet d'étude concerne les minerais, ont établi un modèle qui tient compte de la forme des grains et du degré de compaction du mélange. Leur référence est la loi parabolique de Fuller (formule I-116) qu'ils considèrent comme conduisant à la plus grande compacité. Pour eux, la porosité diminue lorsque q évolue de 3 à 0,5 puis se met à augmenter pour q passant de 0,5 à 0,4.

Aberg [ABER92], quant à lui, développe en 1992 un modèle stochastique pour prédire l'indice des vides des sols granulaires. Dans ce domaine, de nombreux chercheurs ont examiné la possibilité de définir une distribution cumulée du volume des vides à partir de la distribution des tailles de particules. Aberg considère une simple ligne droite passant à travers une collection de particules et compare les longueurs de segments traversant les grains (cordes granulaires) et les longueurs de segments traversant les vides (cordes liées aux vides). Il suppose alors que la longueur d'une corde de vides dépend principalement de la taille du plus petit grain adjacent, censé remplir l'espace situé entre les plus gros. Il fait également intervenir une constante dépendant de la forme des particules qu'il détermine à partir d'un essai Proctor. Celle-ci participe à la détermination d'un pourcentage de passant correspondant à une taille de particule bien spécifique. En dessous de cette dimension, les grains sont suffisamment petits et relâchés pour pouvoir se mouvoir librement à travers le squelette des grains les plus gros. Au-dessus, ils sont irrémédiablement figés à leur position et ne peuvent plus en bouger. Aberg déduit de cette démarche un peu fastidieuse l'indice des vides du mélange. Ce dernier diminue en même temps que q lorsque celui-ci varie entre 3 et 0,4.

Tsirel [TSIR97], enfin, a peut-être produit l'étude la plus complète concernant les empilements de produits miniers et d'extraction. La relation la plus aboutie à laquelle il parvient exprime l'indice des vides e en fonction de l'indice des vides des grains mono-modulaires e_0 dépendant de leur forme et de l'exposant q de Andreasen et Andersen :

$$\text{I-120} \quad e = e_0 \frac{\arctan(q)}{90}$$

Tsirel montre ainsi qu'une décroissance de q conduit à une diminution des vides.

En résumé, Péronius et Sweeting, Aberg, Tsirel sont d'accord pour affirmer qu'il se produit une diminution de la porosité lorsque q passe de 3 à 0,5. En deçà de 0,5, les avis divergent. Les deux derniers chercheurs confirment cette tendance entre 0,5 et 0,4. Les deux premiers la contredisent.

Deux raisons peuvent être avancées pour expliquer cet effet seuil.

La première semble avoir été fournie par Yu et Standish [YUST90]. Ils ont montré que la méthode utilisée pour préparer les composants du mélange jouait un rôle déterminant : la combinaison de distributions discontinues censées former une distribution continue de Andreasen n'aboutit jamais parfaitement au résultat escompté. Il apparaît alors un écart entre la distribution réellement obtenue à partir de l'association des distributions discontinues et la distribution continue théorique visée. Or, cet effet est particulièrement marqué lorsque la quantité de fines augmente. Les porosités, se mesurant sur des mélanges dont la courbe granulométrique n'est pas exactement celle souhaitée, n'atteignent alors jamais les minima attendus.

La deuxième raison est que des valeurs de q inférieures à 0,4 ou 0,45 sont peu probables dans les mélanges réels de minerais car ils contiennent un minimum d'éléments fins non pris en compte dans la distribution des tailles de particules mais qui existent bel et bien en réalité. Il s'agit du même problème que celui mis en évidence par Hüsken et Brouwers [HUSK08] dans le domaine des compositions de béton. Si les méthodes de formulation néerlandaise et allemande des années 1990 préconisent une valeur de q de 0,5, c'est parce que la courbe granulométrique en question ne concerne que les granulats de dimensions supérieurs à quelques centaines de microns lorsqu'ils sont considérés seuls. Ils sont alors combinés avec des éléments plus fins dont les quantités sont bornées, mais sans association véritable des courbes granulométriques respectives. La distribution des tailles de particules du mélange n'est donc pas optimisée sur l'étendue granulaire complète ce qui constitue un handicap pour obtenir l'empilement le plus compact.

Bolomey [BOL047] distingue également clairement les éléments fins des éléments plus grossiers avec une frontière située aux alentours de 100 μm . En 1947, il introduit une constante empirique dans la loi parabolique de Fuller:

$$\text{I-121} \quad P_b(d) = f + (1 - f) \left(\frac{d}{D_{\max}} \right)^{0,5}$$

f est une constante empirique choisie de telle manière qu'elle augmente lorsqu'on souhaite obtenir un béton plus ouvrable, les proportions des plus petites classes étant majorées. Ainsi formulée, l'équation obtenue devrait normalement s'appliquer à tous les composants solides du mélange. Seulement, la courbe granulométrique du ciment étant invariable, Bolomey choisit de n'appliquer cette relation qu'aux grains de taille supérieure à 0,1 mm. Ce faisant, il crée une discontinuité dans la loi de distribution de référence.

Il existe donc une certaine forme d'incohérence dans l'utilisation des expressions de Fuller et de Andreasen: aucune taille minimale de particule n'est prise en compte ce qui indique, implicitement, que la graduation s'étend jusqu'à des dimensions tendant vers zéro. Or, nous venons de voir que les courbes se rapprochant de celle de Fuller sont recommandées pour les granulats des bétons uniquement à condition que les grains aient un diamètre minimum de quelques centaines de microns.

Pour faire face à ces paradoxes, Dinger et Funk (1994) [DING94] choisissent de tenir compte non seulement de la taille de grain maximale mais également de la taille de grain minimale (d_{\min}) en faisant évoluer la formule I-117 de Andreasen :

$$\text{I-122} \quad P_{\text{DF}}(d) = \frac{d^q - d_{\min}^q}{D_{\max}^q - d_{\min}^q}$$

Dans ce cas, l'équation de départ n'est plus l'équation I-118. L'exposant q permet de contrôler les caractéristiques du mélange généré par rapport à la finesse des grains. Des valeurs élevées de q sont à l'origine de mélanges plutôt grossiers ($q > 0,5$) tandis que des valeurs faibles conduisent à des mélanges riches en éléments fins. Contrairement à la formule I-117, des valeurs négatives de q sont permises. A noter que pour $q \rightarrow \infty$ ou $q \rightarrow -\infty$, l'équation I-122 tend vers une distribution monomodulaire avec pour taille de particule D_{\max} ou d_{\min} respectivement.

Brouwers (2006) [BROU06] a montré qu'il est possible de relier l'exposant q au rapport r des volumes absolus de 2 tailles de grains successives. Soient y_i et y_{i+1} les volumes absolus de 2 classes élémentaires de dimensions d_i et d_{i+1} ($d_i > d_{i+1}$) en progression géométrique. Nous avons $r = \frac{y_i}{y_{i+1}} = \text{constante}$. En posant $x = \frac{d_{i+1}}{d_i}$ ou $\frac{1}{x} = \frac{d_i}{d_{i+1}}$, Brouwers obtient :

$$\text{I-123} \quad q = \left(\frac{1}{x}\right) \log r.$$

La notation utilisée pour le logarithme indique qu'il s'agit d'un logarithme de base $\frac{1}{x}$.

De nombreux chercheurs ont établi des lois de distribution en puissance en fonction d'une progression géométrique des tailles des classes élémentaires. Voici les résultats, en fonction du ratio $\frac{1}{x}$ caractérisant l'évolution des dimensions de tamis, obtenus pour r et q et permettant d'aboutir au minimum de vides pour des mélanges denses de particules irrégulières.

Auteurs	Raison $\frac{1}{x}$ de la progression géométrique des tailles de tamis : $\frac{1}{x} = \frac{d_i}{d_{i+1}}$	Ratio r des volumes absolus de deux classes élémentaires successives : $r = \frac{Y_i}{Y_{i+1}}$	Exposant q de la loi de distribution en puissance : $q = \left(\frac{1}{x}\right) \log r$
Furnas et Anderegge (1931)	$\sqrt{2}$	1,10	0,28
	2	1,20	0,26
Caquot (1937)	2	1,15	0,20

Tableau I-4 : valeurs préconisées pour r et q par différents auteurs en vue d'aboutir à des mélanges denses de particules de forme irrégulière.

On voit que q évolue approximativement entre 0,20 et 0,30.

Toutefois, il convient d'être prudent quant à l'exploitation de la valeur de r préconisée par Caquot et la valeur de q qui en découle car elles s'appliquent dans un cadre bien précis. Etablie en 1937, la théorie de la granulation optimale de Caquot [CAQU37] comprend trois étapes principales :

- recherche de la granulométrie idéale d'un mélange indéfini comprenant autant d'éléments fins et gros qu'on le souhaite (1^{ère} étape) ;
- recherche des corrections à apporter aux proportions lorsque la dimension des particules est bornée supérieurement (2^{ème} étape) et inférieurement (3^{ème} étape).

C'est en fait dans la 1^{ère} étape que Caquot about à une valeur r de 1,15 pour des dimensions de tamis évoluant selon une série de Renard ($\frac{1}{x} = 2$).

Pour effectuer ses corrections, Caquot ne retient que la forme additive des deux types d'interaction mis en évidence, l'effet de paroi, et n'applique la correction qu'à la proportion du plus gros granulat et à celle du plus fin.

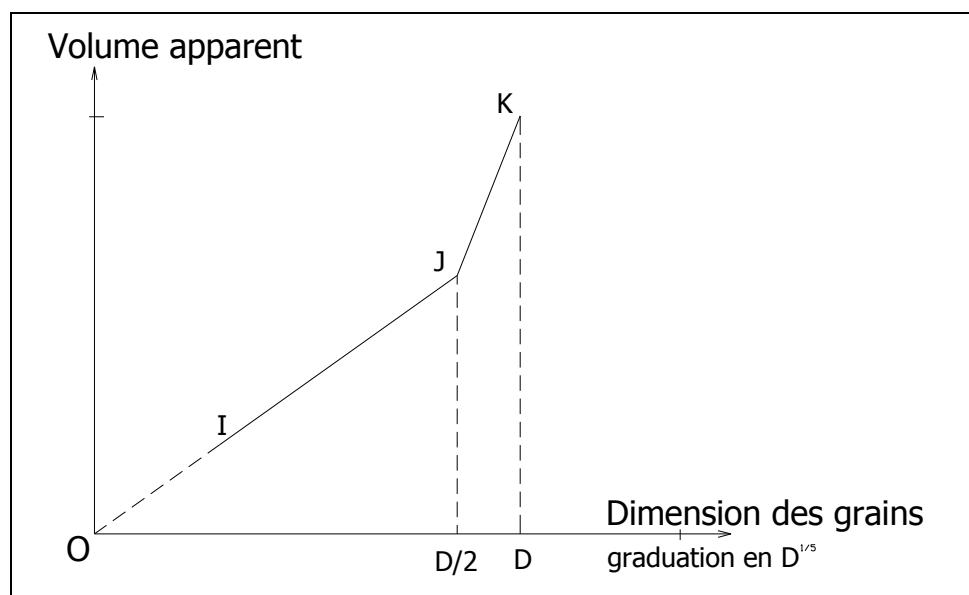


Figure I-32 : courbe de la granularité finie quasi-optimale de Caquot.

Concernant la classe la plus grosse, elle occupe une position singulière dans la mesure où elle ne subit pas l'effet de paroi des classes de rang supérieur. Elle doit donc voir sa proportion augmenter : selon Caquot, la surface du plus gros granulat doit être identique à celle de tous les granulats de rang supérieur dans le mélange indéfini. Cette correction se traduit par un **point de brisure J** à l'abscisse $D/2$ sur la courbe représentative de la granularité finie quasi-optimale. Celle-ci se compose alors de deux tronçons **IJ** et **JK**, la droite **IJ** ayant pour équation celle de la granularité indéfinie optimale.

Concernant la classe la plus fine, elle occupe une position singulière dans la mesure où elle ne subit pas l'effet de desserrement des classes de rang inférieur. Dans la mesure où il ne fait pas intervenir ce type d'interaction, Caquot détermine sa proportion optimale par une règle empirique relativement discutable.

La théorie de Caquot a constitué une source d'inspiration prolifique pour plusieurs auteurs de compositions de béton utilisées en France. Ainsi, les méthodes proposées par Faury et, à un degré moindre, Dreux se situent-elles dans cette filiation.

On a coutume de dire que Faury [FAUR58] suggère précisément un exposant $q = 0,2$ dans l'équation de Dinger et Funk. C'est vrai à condition de garder à l'esprit deux remarques importantes. D'une part, Faury n'applique pas l'expression de Dinger et Funk sur l'étendue $[d_{\min}; D_{\max}]$ mais uniquement sur la fraction $\left[d_{\min}; \frac{D_{\max}}{2} \right]$. D'autre part, il le fait proportionnellement à $\frac{y_D}{2}$ qui représente l'ordonnée du point de brisure de sa

courbe de référence à l'abscisse $\frac{D_{\max}}{2}$. Faury considère en effet le béton de référence comme un mélange en proportions variables de deux constituants :

- un ensemble de grains fins et moyens d'étendue $\left[d_{\min}; \frac{D_{\max}}{2} \right]$;
- un granulat grossier d'étendue $\left[\frac{D_{\max}}{2}; D_{\max} \right]$.

Sur l'étendue granulaire $\left[d_{\min}; \frac{D_{\max}}{2} \right]$, il obtient ainsi :

$$I-124 \quad P(d) = \frac{d^{0,2} - d_{\min}^{0,2}}{\left(\frac{D_{\max}}{2}\right)^{0,2} - d_{\min}^{0,2}} \times Y_{\frac{d}{2}}$$

Reprenons maintenant les travaux de Brouwers [BROU06] et examinons deux cas limites : celui où les tailles des classes élémentaires sont très éloignées les unes des autres (mélange appollonien) et celui où les tailles des classes élémentaires sont très rapprochées, tendant vers une distribution continue.

Dans le cas où les tailles des classes élémentaires sont très distinctes les unes des autres, Zheng (1990) [ZHEN90] détermine le coefficient q de l'équation I-122 à partir de la compacité propre de chaque classe granulaire α :

$$I-125 \quad q = {}^{10}\log(1 - \alpha)^{-1}.$$

La valeur $\frac{1}{x} = 10$, correspondant au rapport de tailles de 2 classes granulaires successives, est sélectionnée par Zheng comme étant la limite au-dessus de laquelle les particules ne subissent **pas d'interactions granulaires** : les petites particules viennent se loger dans les interstices des plus grosses sans les décompacter. La formule I-123 revient à considérer que $r = (1 - \alpha)^{-1}$. Comment Zheng aboutit-il à ce résultat ? Reprenons l'évolution idéalisée de l'indice des vides dans un milieu bi-disperse de Furnas, représentée sur la figure I-1. En combinant les mécanismes d'insertion et de substitution, le minimum de vides est obtenu lorsque $\gamma_2 = \frac{1 - \alpha}{2 - \alpha}$

$\gamma_1 = 1 - \gamma_2 = \frac{1}{2 - \alpha}$ soit $\frac{\gamma_1}{\gamma_2} = (1 - \alpha)^{-1}$. Il suffit ensuite de généraliser ce résultat à l'ensemble des rapports des volumes absolus de 2 classes élémentaires successives dont les tailles suivent une progression géométrique de raison 10.

Auteurs	Raison $\frac{1}{x}$ de la progression géométrique des tailles de tamis : $\frac{1}{x} = \frac{d_i}{d_{i+1}}$	Compacité propre de chacune des classes granulaires : α_{mono}	Ratio r des volumes absolus de deux classes élémentaires successives : $r = \frac{Y_i}{Y_{i+1}} = (1 - \alpha_{\text{mono}})^{-1}$	Exposant q de la loi de distribution en puissance : $q = {}^{10} \log r$
D'après la théorie de Zheng (1990)	10	0,64 : empilement aléatoire	2,78	0,44
		0,68 : structure cubique centrée (CC)	3,125	0,49
		0,71	3,45	0,54
		0,74 : structure hexagonale compacte (HC)	3,85	0,58

Tableau I-5 : valeurs préconisées pour r et q , d'après la théorie de Zheng, en vue d'aboutir à des mélanges denses de particules de forme irrégulière.

Les valeurs de q sont plus élevées que précédemment. Elles conduisent à des granularités plutôt riches en éléments grossiers, moins maniables et plus sujettes à la ségrégation. La forte discontinuité des tailles de grains engendre généralement des mélanges irréguliers, à l'optimum pointu. En effet, lorsqu'on observe la figure I-1, on se rend facilement compte que l'indice des vides se met à augmenter très vite de part et d'autre de la proportion idéale de chacun des constituants du mélange binaire. Elles peuvent néanmoins être associées à des particules plus fines comme c'est le cas dans les compositions de béton.

Dans le cas où les classes élémentaires ont des tailles très rapprochées ($x \rightarrow 1$) et sont en nombre tendant vers l'infini, Brouwers [BROU06] montre que l'empilement le plus compact est obtenu pour $q = 0$. La formule I-122 ne peut plus alors être utilisée car le dénominateur est nul. Toutefois, en faisant tendre q vers 0, on aboutit à une fonction logarithmique de la taille des grains :

$$\text{I-126} \quad P_{\text{In}}(d) = \frac{\ln d - \ln d_{\text{min}}}{\ln D_{\text{max}} - \ln d_{\text{min}}}$$

D'après Brouwers, la courbe granulométrique qui en résulte constitue la référence à atteindre dans la mesure où toutes les tailles de grains sont représentées dans le mélange et qu'il s'agit d'une véritable distribution continue.

L'application de modèles d'empilement élaborés avec des tailles de classes successives très distinctes sur des distributions continues de tailles de particules peut conduire à des résultats aberrants. C'est le cas avec la procédure de Westman et Hugill de 1930. Ce sont Dinger et Funk [DING94] qui en ont effectué la démonstration. Soit $\frac{1}{x} = \frac{d_i}{d_{i+1}}$ le ratio de 2 tailles successives avec

$d_i > d_{i+1}$. Dinger et Funk obtiennent :

$$I-127 \quad \sum_{j=1}^{n-1} y_j = \left(1 - \left(\frac{1}{x}\right)^{-(n-2)q}\right) \text{ et } V_{an} = \left(1 - \left(\frac{1}{x}\right)^{-(n-2)q}\right) + a_n \left(\left(\frac{1}{x}\right)^{-(n-2)q} - \left(\frac{1}{x}\right)^{-(n-1)q}\right).$$

Soient par exemple $\frac{1}{x} = 2$, $q = 0,2$, $a_n = 1,56$ et $n = 16$. On obtient $V_{an} = 0,885$ c'est-à-dire une compacité de 1,129 ce qui est impossible.

L'observation des résultats obtenus par Zheng et Brouwers laisse à penser que l'absence d'interactions entre particules (classes élémentaires très distinctes) conduit à des valeurs de q aux alentours de 0,5 alors que la présence d'interactions liées à des rapports de tailles successives tendant vers 1 engendre des valeurs de q se rapprochant de 0.

En résumé, la loi de distribution de Dinger et Funk, succédant à celle de Andreasen et Andersen et à celle de Fuller et Thompson, constitue un outil pratique pour approcher de l'empilement le plus dense (proche de l'état optimum). D'après Brouwers, le coefficient q correspondant dépend du ratio $\frac{1}{x}$ des tailles de grains successives et du ratio r de leur volume absolu.

Lorsque $\frac{1}{x}$ se situe aux alentours de 10, q augmente, d'après la relation de Zheng, aux environs de 0,50.

Lorsque $\frac{1}{x}$ vaut $\sqrt{2}$ ou 2, q évolue entre 0,20 et 0,37, produisant un mélange plutôt fin. La valeur de 0,20 correspond à celle qu'obtient Caquot dans sa granulométrie idéale d'un mélange indéfini et à celle utilisée par Faury sur la fraction $\left[d_{\min}; \frac{D_{\max}}{2}\right]$. La représentation de la granularité finie quasi-optimale en deux parties linéaires (graduation des abscisses en racine cinquième du diamètre) par les deux chercheurs français résulte, selon Caquot, de la majoration de la proportion du plus gros granulat en l'absence d'effet de paroi exercé par des classes de rang supérieur.

Enfin, lorsque $\frac{1}{x}$ tend vers 1 et que la population de grains présente une infinité de tailles de grains très proches les unes des autres, $q = 0$ est l'exposant qui donne l'empilement le plus compact selon Brouwers.

1.2.7. Comparaison des différents modèles.

Pour déterminer dans quel cadre théorique va s'effectuer notre quantification des effets de paroi et de desserrement, il nous semble important, dans un premier temps, de comparer les hypothèses de constitution, les avantages et inconvénients des principaux modèles d'empilement qui viennent d'être présentés et, dans un deuxième temps, de confronter les 4 modèles possédant le plus d'atouts à des résultats expérimentaux en vue d'estimer leur performance. Nous laisserons de côté les méthodes liées à la recherche d'une courbe granulométrique idéale qui ne permettent pas d'estimer directement la compacité.

Modèle	Hypothèses de constitution / Avantages	Inconvénients
Westman (1936)	Simplicité : équation conique	- Réservé aux mélanges binaires ; - interactions granulaires prises en compte par l'intermédiaire d'un seul coefficient G.
Mooney (1950)	- Simplicité ; - novateur : 1 ^{er} modèle d'empilement introduit dans un modèle de viscosité.	- Effet de desserrement supposé additif ; - fonctions d'interaction non définies précisément.
Ben-Aim (1970)	Cellule d'encombrement autour d'une grosse sphère novatrice. Son contour sphérique passe par les points de contact entre petites sphères situées dans le premier cercle de voisinage de la grosse sphère.	- Réservé aux mélanges binaires ; - seul l'effet de paroi est pris en compte ; - délimitation de la cellule d'encombrement discutable.
Dodds (1980)	Traite des empilements aléatoires en faisant appel à un réseau tétraédrique, chaque grain étant considéré en contact avec ses voisins.	- S'applique uniquement aux empilements particulièrement denses (gapless network packing) ; - fournit des résultats aberrants pour les empilements mono-modulaires .
Suzuki / Oshima (1983/85)	Cellule d'encombrement autour d'une sphère similaire à celle de Ben-Aim.	- Délimitation de la cellule d'encombrement discutable ; - méthode de calcul du nombre de coordination à affiner.
Toufar modifié (1977/97)	Interactions granulaires prises en compte par l'intermédiaire de 2 coefficients k_3 et k_4 : l'un dépend du rapport des diamètres, l'autre du rapport des titres volumiques des classes granulaires.	La modification de Goltermann a pour conséquence de rendre l'effet de desserrement additif.
MLC de Stovall et de Larrard (1986)	Se situe dans la continuité du modèle de Mooney	- Effet de desserrement supposé additif ; - surestime les compacités à l'optimum.
Yu et Standish (1987)	- Obtenu à partir du modèle des volumes apparents de Westman et Huggill (1930) et des expressions de Ridgway et Tarbuck (1968) ; - très proche du MLC de Stovall et de Larrard.	Mêmes inconvénients que le MLC.
MEC de de Larrard (1999)	- Se situe dans la continuité du MLC ; - prend en compte l'influence du serrage lors de la mise en place du mélange ; - traite le cas des mélanges de matériaux de même taille mais de compacités résiduelles différentes.	Effet de desserrement supposé additif dans le modèle de compacité virtuelle obtenue pour un serrage infini.
TPM de Dewar (1999)	- Se situe dans la continuité des travaux de Weymouth (1935) ; - ne suppose pas l'additivité de l'effet d'interférence.	- Conduit à des largeurs de zone affectée par l'effet de paroi parfois aberrantes ; - points du diagramme de l'indice des vides du mélange binaire de référence reliés par des droites.

Tableau I-6 : comparaison des hypothèses de constitution, avantages, inconvénients de différents modèles d'empilement.

Les modèles les plus aboutis qui viennent d'être décrits sont les suivants :

- le modèle de Toufar modifié par Goltermann ;
- le modèle TPM de Dewar qui se situe dans la lignée de Weymouth et Powers ;
- les modèles MLC et MEC de Stovall et de Larrard qui se trouvent dans la continuité de celui de Mooney.

Ces 4 modèles ont été comparés par Jones, Zheng et Newlands [JONE02] en terme de capacité de prédiction de l'indice des vides et de la combinaison des proportions conduisant à l'optimum.

Ils ont été testés avec des combinaisons binaires ou ternaires de gravier, sable, ciment Portland, calcaire, cendres volantes, laitier de haut-fourneau et billes d'acier. Tous les modèles présentent globalement la même efficacité et conduisent aux mêmes combinaisons de matériaux aboutissant à l'indice des vides minimum. Il apparaît que leur fiabilité dépend principalement de la façon dont ils prennent en compte la taille moyenne du matériau considéré et du ratio des diamètres moyens des matériaux combinés. Le modèle MEC de de Larrard a été modifié (MEC modifié) au niveau de l'indice de serrage sélectionné (indice de **12,5** alors que l'échelle proposée par de Larrard propose un spectre de valeurs variant de **4,1** pour un remplissage par déversement à **9** pour une mise en place combinant vibration et compression du mélange) produisant une amélioration notable entre indices des vides calculé et mesuré.

Pour les mélanges testés, Jones, Zheng et Newlands ont proposé de répertorier les modèles conduisant à la meilleure précision. Pour une efficacité élevée, voici les résultats obtenus.

Combinaisons de particules	Ratio de tailles : d_{50fin} / d_{50gros}	Efficacité élevée (écart entre indices des vides mesuré et calculé < 1,5%)
Binaire : granulats 10-20 / 5-10 mm	0,46	MEC modifié
Binaire : granulats 2-8 / 8-16 mm	0,38	MEC modifié, Toufar modifié
Binaire : sable (78,4% de tamisat au tamis 0,6 mm) / granulats 5-10 mm	0,05	MEC modifié
Binaire : sable 0-2 mm / granulats 2-8 mm	0,07	aucun
Binaire : pâte ciment Portland / calcaire	0,40	MEC, MEC modifié
Binaire : pâte ciment Portland / cendres volantes	0,66	MEC, MEC modifié, MLC
Binaire : pâte ciment Portland / laitier de haut-fourneau	0,77	MEC, MEC modifié
Ternaire : 0-2 mm / 2-8 mm / 8-16 mm	0,38 et 0,07	TPM
Ternaire : billes d'acier 6 mm / 9,6 mm / 12,7 mm	0,63 et 0,76	MEC modifié

Tableau I-7 : comparaison de l'efficacité des modèles Toufar modifié, TPM, MLC, MEC et MEC modifié selon Jones, Zheng et Newlands [JONE02].

L'étude de Jones, Zheng et Newlands fait apparaître l'extrême efficacité du MEC (ou MEC modifié) de de Larrard. Ce dernier avait d'ailleurs estimé la précision de son modèle meilleure que le pourcent de compacité en valeur absolue ([DELA00]).

Du fait de ses excellentes capacités prédictives, le cadre scientifique de de Larrard commence à faire référence et ses applications tendent à se multiplier dans de nombreux domaines.

Il a non seulement confirmé son potentiel dans l'optimisation du squelette granulaire des matériaux à consistance très fluide (Béton à Hautes Performances), plastique (bétons calcaires en Lorraine [LECO97]) ou très ferme (bétons compactés au rouleau BCR [POUL01]).

Mais il a également contribué à affiner les prévisions de résistance à la compression des bétons hydrauliques possédant une granularité différente de celle conduisant à la porosité minimale [LECO01].

Notre modélisation des effets de paroi et de desserrement va donc être traitée en faisant référence au Modèle d'Empilement Compressible.

Mais avant, nous nous proposons d'effectuer une synthèse complète de ce dernier afin de préciser le cadre théorique de référence dans lequel va se dérouler notre étude.

1.3. SYNTHÈSE CONCERNANT LE MODÈLE D'EMPILEMENT COMPRESSIBLE.

Notre quantification des effets de paroi et de desserrement va s'effectuer dans le cadre théorique du MEC qui prend en compte deux coefficients d'interaction b_{ij} et a_{ij} pour optimiser la compacité des mélanges granulaires. En inscrivant notre démarche dans la continuité de ce modèle, nous exprimons notre volonté de poursuivre le travail entrepris, il y a de nombreuses années déjà, par un groupe de chercheurs français soucieux de rationaliser l'approche destinée à la formulation des matériaux du génie civil.

Avant d'exposer notre démarche, il nous a semblé opportun d'approfondir la pertinence des hypothèses considérées dans cet outil afin de proposer une analyse critique de sa forme.

Jusqu'à maintenant, la méthodologie généralement adoptée pour doser les constituants consistait à mener des essais technologiques lourds et/ou à utiliser des courbes maîtresses, chaque auteur en proposant différents types. La voie empruntée par les concepteurs du MEC s'inscrit dans une nouvelle logique. Elle vise à fournir une vue cohérente du « système-béton » et à concevoir un logiciel de simulation, véritable laboratoire électronique.

L'une des difficultés majeures rencontrée lors de la mise au point d'un modèle d'empilement concerne la prise en compte des interactions granulaires. Rappelons brièvement la situation.

L'influence des parois des grains du gros granulat sur l'arrangement des particules du granulat fin prend la forme d'un phénomène de décompactage. Comme le précise Caquot, elle intervient entre tous les éléments d'un chapelet théorique et joue un rôle prépondérant lors de l'établissement de la granulométrie optimale. Seulement, lorsque l'on augmente la proportion du gros granulat, on décèle, passé un certain seuil, une interaction supplémentaire : l'effet d'interférence.

L'effet de paroi ne fait aucune hypothèse quant au positionnement des gros grains dans la matrice constituée par les éléments fins. Peu importe leur distribution à partir du moment où l'interface entre grains fins et gros reste constante. Seulement, lorsque ces derniers deviennent trop nombreux, on conçoit aisément que la façon dont ils sont disposés finira par avoir une influence.

Arrive un moment où une certaine quantité de fines particules va se retrouver emprisonnée dans les interstices situés entre les éléments grossiers. Il se produit alors une interférence entre les effets de parois voisines qui interviennent, par conséquent, à double titre : par leurs aires tout d'abord et par leur position relative d'autre part.

En quelque sorte, *l'effet de paroi* devrait plutôt être considéré de façon *locale* puisqu'il peut être expliqué en mettant l'accent sur une décompaction se produisant à la surface de chaque grosse particule alors que *l'effet d'interférence* évoquerait davantage une approche *globale* puisque les éléments du gros granulat interviennent collectivement.

Face à la complexité de ces observations expérimentales, de Larrard *et al.* ont opté pour une hypothèse simple, basée sur le principe d'additivité, pour rendre compte avec beaucoup de souplesse des interactions existant entre tranches granulaires dans le but d'estimer la compacité d'un mélange.

Leur modèle nécessite la connaissance d'un certain nombre de paramètres liés aux différentes populations de grains de taille identique (proportions mutuelles, compacités de chacune d'entre elles empilées isolément) et d'une grandeur dépendant du procédé de remplissage utilisé lors de la fabrication du mélange.

Pour commencer, une distinction est établie entre compacité virtuelle, obtenue en plaçant les grains un par un, et compacité réelle, qui dépend du mode opératoire.

La description de la méthode utilisée pour la détermination de la compacité virtuelle va être renouvelée en considérant un contraste de taille relativement peu important. La classe monodimensionnelle dominante qui assure le serrage du mélange est tout d'abord distinguée. Sans elle, ce dernier « flotterait », incapable de transmettre des contraintes mécaniques. Les grains, qui forment cette phase continue, occupent « en masse » tout l'espace laissé disponible par les classes plus grossières, leur porosité étant partiellement comblée par les classes les plus fines. Distinguons maintenant dans un mélange binaire le domaine des petits dominants (les gros éléments sont noyés dans un océan de petits) et celui des gros dominants. Ils vont rapidement et successivement être abordés, laissant entrevoir le découplage opéré par les auteurs dans la prise en compte des deux types d'interactions.

Dans la première situation, il apparaît un effet de paroi qui se traduit par un supplément de porosité proportionnel à la surface des grains de grande taille.

Dans la deuxième situation, il se produit un desserrement des grosses particules, qui formaient initialement un pavage compact de l'espace, lorsque les petites ne peuvent plus s'insérer dans les cavités disponibles.

Le calcul se généralise au cas d'un nombre quelconque de classes en remarquant l'existence d'au moins une tranche granulaire dominante, celle-ci étant caractérisée par sa capacité à faire transiter des efforts par l'intermédiaire des grains qui la composent et qui forment un empilement.

Le développement théorique s'effectue alors en tenant compte d'une perturbation linéaire définie de la façon suivante : le volume disponible pour loger la classe dominante présente des limitations liées à l'effet de paroi des classes grossières et à l'effet de desserrement des classes fines qui sont additives et proportionnelles à chaque volume partiel.

En d'autres termes et selon cette hypothèse, les coefficients d'interaction peuvent être établis indépendamment l'un de l'autre et l'expression de la compacité virtuelle d'un mélange peut être étudiée à partir du principe de superposition.

Caquot (1937), dans sa théorie de la granulation optimale, n'a adopté ce dernier que pour l'effet de paroi. Stovall et de Larrard (1986), Yu et Standish (1987), Goltermann dans sa modification du modèle de Toufar (1997) l'ont généralisé à l'effet de desserrement. Ainsi, les interactions exercées par un certain nombre d'espèces granulaires, qu'elles soient de plus grande taille ou de dimension moindre que celle de la classe dominante, seraient la somme de celles élémentaires que provoquerait chaque espèce. En fait, c'est Mooney (1950) qui avait émis cette hypothèse le premier pour traiter de la viscosité d'un mélange de grains en suspension (cette dernière devenant empilement lorsque l'espace disponible est rempli au maximum).

L'extrapolation à l'effet d'interférence, localement dénommé effet de desserrement, de l'hypothèse d'additivité communément admise pour l'effet de paroi constitue-t-elle un abus ?

Baron [BAR082] estime qu'elle ne peut en aucun cas constituer une approximation et que la structure du gros granulat doit être considérée comme un tout.

De Larrard [DELA00], pour sa part, reconnaît le caractère excessif de la simplification mais considère qu'il s'agit d'une modélisation élémentaire qui permet une restitution plus que correcte de mesures effectuées sur un milieu particulièrement complexe.

Nous allons maintenant apporter quelques éléments de réflexion sur les questions soulevées par l'emploi d'une théorie linéaire de la compacité virtuelle comme étape de calcul pour mener à bien une optimisation granulaire. Au centre de toutes ces interrogations se trouve le problème de définir une grandeur représentative « en grand » de la qualité de l'empilement (la compacité) sans pendre en compte les positions relatives de chaque particule résultant d'une construction progressive du milieu. Ainsi, des grains mono-modulaires ajoutés dans un mélange interviennent à double titre :

- individuellement tout d'abord du fait de leur position : les nouvelles interactions qui se développent au sein du squelette granulaire peuvent ne pas être réparties uniformément. Au contraire, le retrait de certains d'entre eux en proportion identique mais à des endroits différents de l'édifice peut aboutir à une compacité différente de celle que l'on avait à l'origine.
- collectivement ensuite si l'on considère l'incidence de l'accroissement du volume partiel de la classe dont ils font partie : on sait que la théorie linéaire s'applique particulièrement bien lorsque les espèces dominées sont peu représentées. Mais que se passe-t-il lorsque ce n'est plus le cas ? Peut-on évoquer la possibilité d'une variation des propriétés du mélange aux alentours de la proportion seuil évoquée par Baron ?

En fait, l'évaluation du formalisme linéaire est délicate car il est question d'une compacité virtuelle par définition pratiquement inaccessible à l'expérience. Seul un empilement édifié manuellement, grain par grain, permettrait en effet d'y aboutir.

Cet inconvénient expérimental se transforme en avantage en terme de modélisation puisque la latitude laissée à l'opérateur pour choisir l'endroit où il va déposer chaque particule permet la création de cellules élémentaires juxtaposées.

Cette façon de procéder s'est particulièrement développée, ces 30 dernières années, en physique des milieux granulaires dans les domaines des géomatériaux et des systèmes dispersés concentrés à l'aspect parfois très différent (suspensions, émulsions, colloïdes, etc). Certaines de leurs propriétés possèdent en effet la particularité d'offrir des similitudes qui font disparaître la plupart des différences dues à des effets d'échelle. L'approche consiste alors à relier la structure moléculaire ou particulière interne du matériau à une caractéristique globale. Les chercheurs définissent des motifs représentatifs locaux adaptés à la taille des éléments constitutifs du milieu.

Dans ce cadre, il est envisageable de déterminer l'interaction exercée globalement par une espèce granulaire sur une autre de taille différente à partir d'une étude localisée autour d'une particule « intruse ».

Chaque cellule élémentaire fait apparaître un ensemble géométrique binaire où chaque grain de la classe dominée présente les deux caractéristiques suivantes.

D'une part, il est entouré de particules de la tranche dominante.

D'autre part, il est relativement éloigné de son voisin mono-modulaire le plus proche.

Ainsi présenté, le mélange laisse apparaître une disjonction des différentes zones perturbées justifiant le principe d'additivité retenu : l'analyse de systèmes binaires suffit à généraliser la démarche au cas multimodal en prenant en compte la somme des interactions exercées par chaque fraction granulaire sur les autres.

Après la détermination de la compacité virtuelle vient celle de la compacité réelle qui s'effectue par l'intermédiaire d'un indice de serrage. Un mélange occupe en effet un certain volume qui dépend directement du mode de mise en place des grains.

L'expérience montre que sa compacité va évoluer si on le pique simplement avec une tige, si on le vibre et/ou si on le comprime. La vibration, par exemple, a pour but d'améliorer l'enchevêtrement des grains. Si l'on applique ensuite une contrainte par l'intermédiaire d'un piston tout en continuant à imprimer un mouvement oscillatoire au conteneur, on parvient à une baisse de la porosité, malgré une tendance au blocage du mouvement des grains.

Le MEC fait intervenir un indice de serrage K pour caractériser le mode de mise en place. Lorsque ce dernier croît en efficacité, la compacité augmente et tend vers la compacité virtuelle alors que l'indice de serrage croît et tend vers l'infini. A chaque moyen de mise en œuvre correspond une et une seule valeur de K .

Concrètement, la méthodologie à suivre consiste tout d'abord à définir le processus de mise en place dans un contexte pratique donné (simple déversement, piquage, vibration, vibration + pression) pour aboutir, grâce à cette « échelle graduée » caractérisant le mode de construction de l'empilement, à un certain indice de serrage. La compacité réelle, qui est liée de façon implicite à ce dernier, est finalement obtenue par résolution numérique.

Pour conclure, la minimisation de la porosité des bétons a fait l'objet de multiples recherches depuis l'élaboration par Caquot, en 1937, de la première théorie de la granulation optimale. La variété des études réalisées dans le monde, le nombre important de thèses soutenues sur ce sujet, auraient dû faire abandonner l'idée d'un nouveau travail dans ce domaine.

Élargissant leur sujet de recherche, les concepteurs du MEC ont eu le mérite d'interroger les modèles existants et de revenir à leur source, les principes fondamentaux de la physique, pour aborder dans un cadre plus général le problème de la compacité des empilements granulaires. Les résultats obtenus prouvent la pertinence de la démarche adoptée qui a permis d'aboutir à l'élaboration d'un modèle intégré dans un logiciel de formulation des bétons.

Le caractère original du MEC provient du calcul de la compacité réelle, résultant d'un protocole opératoire donné, à partir d'une compacité virtuelle, obtenue en plaçant les grains du mélange un par un à la manière d'un maçon déposant chaque pierre à son emplacement idéal pour élever un mur. Pour déterminer cette dernière, les interactions granulaires sont prises en compte. L'hypothèse d'additivité retenue par Caquot pour l'effet de paroi est étendue à l'effet de desserrement. Cette idée, inspirée des travaux de Mooney pour évaluer la viscosité des suspensions concentrées, est apparue prometteuse au vu des résultats publiés. Bien que l'application de ce principe soit sujette à caution, il est d'ores et déjà établi que le modèle élaboré est suffisamment précis pour les applications pratiques, et en tout cas préférable aux méthodes empiriques usuelles.

L'avenir dira quel usage sera fait de ce travail. En tout état de cause, la puissance de l'outil théorique développé combinée à une approche expérimentale fructueuse ont, semble-t-il, permis une avancée significative dans deux domaines : celui de l'analyse physique des empilements granulaires, d'une part, celui de la modélisation destinée à la formulation des bétons, d'autre part. Grâce à l'intégration de réflexions théoriques et de résultats avancés dans des outils de calcul « prêts à l'emploi », la démarche adoptée fournit des éléments théoriques fondamentaux au physicien des matériaux granulaires tout en répondant aux obligations industrielles de l'ingénieur, lui aussi demandeur de qualité, d'efficacité et de techniques de pointe.

CHAPITRE 2

MODÉLISATIONS ANTÉRIEURES DES COEFFICIENTS D'INTERACTION.

Pendant très longtemps, les études concernant les mélanges granulaires se sont limitées à certaines caractéristiques globales de l'édifice.

Seulement, au fil des années, dès lors que l'on a étudié des matériaux de plus en plus complexes (bétons hautes performances, suspensions, fluides polymériques, etc), les limites de cette vision à l'échelle macroscopique sont progressivement apparues. D'autres voies ont alors été explorées.

Dès la fin des années 1960, il est devenu clair, pour un certain nombre de chercheurs, que la difficulté de prédiction de la compacité des empilements tirait son origine de l'existence d'une microstructure complexe. L'idée exprimée par ces novateurs a alors été d'étudier le comportement de la microstructure pour en déduire le comportement macroscopique du matériau. Cette approche s'est révélée fructueuse. La vision « zoomée » de la structure des milieux étudiés, localement, à l'échelle du grain, a ainsi permis de confirmer le rôle déterminant de l'effet de paroi existant autour des grosses particules, déjà entrevu par Caquot dans les années 1930, et de l'effet de desserrement autour des petites particules.

Pour les quantifier, deux démarches sont d'utilisation classique.

La première consiste à mettre au point des modèles analytiques issus de théories mathématiques à partir d'un certain nombre d'hypothèses de base. Leur intérêt réside dans la prise en compte d'informations liées à la microstructure et à la géométrie du mélange : rapport des diamètres des petits et gros grains, compacité en pleine masse des éléments fins. Bon nombre de chercheurs ont suivi cette approche. L'explication de ce succès se situe à deux niveaux distincts :

- si l'on souhaite aller plus loin dans la compréhension des empilements, il est nécessaire de changer d'échelle. Dans ce cadre, les analyses théoriques permettent d'examiner à une échelle particulière comment la distribution en tailles et l'arrangement des grains influent sur ces caractéristiques ;
- les milieux granulaires se caractérisent par une nature discrète et la difficulté d'effectuer des mesures et/ou de les reproduire. Cela incite à utiliser d'une part des matériaux modèles que l'on peut étudier plus facilement au laboratoire et d'autre part des analyses théoriques plus fines.

Si les expressions obtenues peuvent devenir très complexes au fur et à mesure que les géométries spatiales se compliquent, elles ont le mérite de faire apparaître l'influence des différents paramètres retenus dans les études menées.

La deuxième démarche consiste à tenter de se rapprocher davantage du comportement du matériau réel par l'intermédiaire de modèles semi-empiriques ou empiriques qui privilégient l'adéquation du résultat calculé au résultat mesuré.

Les premiers sont généralement constitués de certains paramètres ajustables intégrés aux modèles analytiques. La forme mathématique est alors choisie sur la base d'un compromis entre la complexité (nombre des paramètres introduits) et la précision de la reproduction des résultats mesurés. Ce sont des modèles mixtes.

Les seconds permettent de décrire l'allure des courbes expérimentales par des fonctions analytiques relativement simples, le plus performant passant par un maximum de points expérimentaux en respectant certaines conditions aux limites. Ils sont néanmoins discutables dans la mesure où ils sont purement descriptifs et ne font pas apparaître clairement l'origine des phénomènes observés.

L'objectif de cette partie n'est pas de fournir une liste exhaustive de l'ensemble des modèles existants, ni de rentrer dans les détails des démonstrations propres à chacun d'eux, mais de répertorier les plus pertinents et les plus aptes à rendre compte d'un certain nombre de faits expérimentaux.

Commençons tout d'abord par l'effet de paroi.

Dans le cadre des modèles analytiques, Ben-Aïm élabora, à la fin des années 1960, une théorie qui, à l'heure actuelle, est encore citée comme cadre de référence. Se proposant d'étudier la texture des empilements granulaires en vue de déterminer la perméabilité des mélanges binaires dans des milieux géométriquement simplifiés constitués de billes, il fut le premier à suggérer de modéliser l'effet de paroi existant autour d'une grosse sphère par l'intermédiaire d'une cellule élémentaire représentative. Si l'on se replace dans le contexte de cette époque, ce fut un formidable progrès de mener une recherche sur ce type d'interaction à une échelle aussi réduite. A une époque où la perméabilité était reliée globalement à la porosité du milieu, Ben-Aïm introduit, à travers une idée relativement simple, la possibilité de décrire la perturbation créée par la paroi d'un gros grain sur l'empilement des petites particules qui l'entourent dans le cas où ces dernières sont présentes en proportion importante. Pour cela, il définit une cellule de référence sphérique possédant le même centre qu'une grosse particule isolée, englobant totalement cette dernière et comprenant partiellement les petits grains situés à sa périphérie.

A notre connaissance, ce modèle constitue la première approche réellement sérieuse permettant la quantification de l'effet de paroi localement, à l'échelle microscopique.

Ce sont pourtant les travaux précurseurs de Caquot, en 1937, qui avaient ouvert la voie en laissant apparaître une diminution de volume disponible autour d'une paroi proportionnelle à la surface de cette dernière et à la grosseur des petits grains. Mais il n'était pas allé aussi loin dans la recherche d'une solution à l'échelle particulaire.

Le développement, initié par Ben-Aïm, d'une approche locale pour appréhender l'effet de paroi à partir d'un matériau modèle s'est révélé particulièrement fécond. Il semble, par la suite, avoir influencé, directement ou indirectement, bon nombre d'études, elles aussi menées dans des cellules de référence. On peut notamment citer les études de Dodds [DODD80], de Suzuki et Oshima [SUZU83] [SUZU85] dans les années 1980.

Dodds divise l'espace en sous-unités tétraédriques contenant une partie de vide et dont chaque sommet est constitué par le centre d'une particule. Son approche est fondée sur une hypothèse importante : chaque grain est en contact avec tous ses voisins.

Suzuki et Oshima, quant à eux, reprennent la cellule de base de Ben-Aïm mais, par rapport à ce dernier, procèdent différemment pour déterminer la porosité dans la zone perturbée.

Dans le cadre des modèles empiriques ou semi-empiriques et chronologiquement, Yu et Standish [YUST87] en 1987, de Larrard [DELA88] en 1988, Sedran, de Larrard, Angot [SEDR94] en 1994, Yu, Zou, Standish [YUZ096] en 1996, Lecomte et Zennir [LECO97] en 1997, de Larrard à nouveau [DELA00] en 2000, ont effectué des tentatives de quantification du coefficient d'effet de paroi.

De Larrard, au cours de sa thèse [DELA88] en 1988, puis associé avec Sedran et Angot [SEDR94] en 1994, et enfin dans un ouvrage de référence consacré aux structures granulaires [DELA00] en 2000, choisit successivement, pour lisser au mieux les valeurs expérimentales, trois fonctions simples. La dernière constitue la version la plus aboutie dans la mesure où elle prend en compte certaines conditions de continuité qui avaient été ignorées auparavant.

Dans le cadre de l'approche scientifique initiée par de Larrard, Lecomte et Zennir [LECO97] ont obtenu en 1997 une équation qui doit être considérée avec précaution car elle est spécifique à un type de granulats bien particulier dont la nature est susceptible d'avoir altéré la précision des mesures.

Yu et Standish [YUST87], pour leur part, ont examiné les modèles mathématiques qui tentaient de prédire la porosité des mélanges pour en conclure, en 1987, que les discordances entre expériences et théories analytiques pures restaient trop importantes pour se référer uniquement à ces dernières. Ils ont émis l'idée qu'il était préférable d'inclure dans les modèles mathématiques certains résultats qui sont apparus fondamentaux au niveau des mélanges binaires (notamment ceux obtenus par Ridgway et Tarbuck [RIDG68]) et qui ont pu être reproduits expérimentalement avec une grande régularité, pour aboutir à un modèle semi-empirique.

Associés à Zou [YUZ096], enfin, en 1996, ils ont préféré, dans le cadre d'une étude consacrée aux particules non-sphériques, opter pour un modèle empirique simple permettant le meilleur lissage possible des valeurs expérimentales recueillies.

Poursuivons maintenant avec l'effet de desserrement.

Dans le cadre des modèles analytiques, deux modèles théoriques ont retenu notre attention.

Le premier a été élaboré par Stovall. Il figure dans la première publication concernant le modèle linéaire de compacité MLC du même auteur associé à de Larrard ([STOV86]) ainsi que dans la thèse de ce dernier ([DELA88]). L'hypothèse forte consiste à considérer que les petits grains (diamètre d_2) remplissent partiellement le surcroît de vide provoqué par la dilatation du squelette des gros dans une proportion dont on suppose qu'elle varie linéairement en fonction de d_2 . La dénomination qui lui est associée est : modèle « linéaire » de Stovall.

Le second s'intitule : modèle de décompaction locale. Il est également présenté dans la thèse de de Larrard ([DELA88]). Il considère que le volume partiel des gros grains décompacté « localement » par l'introduction de quelques petits peut se calculer moyennant l'hypothèse de dilatation isotrope.

Dans le cadre des modèles empiriques ou semi-empiriques, on retrouve les auteurs qui ont déjà travaillé sur l'effet de paroi : Yu et Standish [YUST87], de Larrard [DELA88], Sedran, de Larrard, Angot [SEDR94], Yu, Zou, Standish [YUZ096], Lecomte et Zennir [LECO97] et de Larrard [DELA00]. On y associera le modèle de Goltermann, Johansen, Palbol [GOLT97] en 1997 qui, en modifiant le modèle de Toufar, ont fait apparaître un coefficient caractérisant l'effet de desserrement.

Chaque modèle recensé nous permettra de déduire un coefficient d'interaction lié à l'effet de paroi b_{ij} et/ou à l'effet de desserrement a_{ij} figurant dans le cadre théorique nous servant de référence : le Modèle d'Empilement Compressible de de Larrard.

Pour cela, nous nous limiterons au cas de particules présentant des compacités résiduelles égales : $\beta_1 = \beta_2$ (dans le cadre d'une compacité virtuelle).

Il s'agit d'une restriction importante dans la mesure où il n'est plus possible de traiter le cas d'un mélange de grains de tailles égales mais possédant des volumes solides élémentaires différents. Ceci est problématique car les constituants utilisés pour le génie civil ont souvent des granularités qui se recouvrent partiellement alors que leurs compacités propres ne sont pas semblables.

Néanmoins, l'observation des milieux granulaires en général montre que chaque élément constituant le matériau est unique de par ses caractéristiques géométriques (volume, forme, etc) et mécaniques (masse, coefficient de frottement, etc) comme l'explique Patrick Richard [RICH00]. En raison du nombre de particules mises en jeu, la quantité de paramètres est tellement importante que le traitement de tels systèmes s'avère particulièrement délicat. C'est pourquoi la communauté scientifique spécialisée en mécanique des milieux granulaires (agro-alimentaire, industrie pharmaceutique, céramique, etc) s'accorde en général pour admettre qu'il est acceptable de simplifier le problème en considérant que tous les grains possèdent des propriétés physiques identiques égales aux valeurs moyennes de ces dernières. S'agissant de la forme par exemple, la démarche réside dans l'utilisation de sphères afin de s'affranchir de l'anisotropie géométrique et des phénomènes liés à l'état de surface des particules. Nous nous placerons dans le cadre de cette approximation pour quantifier les effets de paroi et de desserrement.

En nous situant ainsi dans un contexte plus général d'étude des mélanges granulaires sur ce milieu « modèle », il est cohérent de prendre en compte des compacités propres virtuelles égales pour les deux classes de grains ($\beta_1 = \beta_2$).

Il s'agit donc d'une hypothèse simplificatrice qui va permettre un « dégrossissage » de la théorie sans la dénaturer.

2.1. DOMAINE DES PETITS DOMINANTS : EFFET DE PAROI.

2.1.1. Modèle de Caquot (1937).

Depuis la première formulation mathématique de l'effet de paroi par Caquot, c'est ce modèle qui a servi de référence pendant très longtemps dans le domaine des bétons.

Caquot considère que la décompaction des petits grains 2 autour des gros 1 se traduit par une variation de volume proportionnelle à la surface d'interface totale :

$$\Delta V = k_c(d_1, d_2) \frac{\pi d_1^2 \phi_1}{\frac{\pi}{6} d_1^3} = k_c(d_1, d_2) \frac{6\phi_1}{d_1}$$

Il vient alors :

$$\phi'_2 = \beta_2 (1 - \phi_1 - \Delta V) = \beta_2 \left(1 - \phi_1 \left(1 + \frac{6k_c(d_1, d_2)}{d_1} \right) \right)$$

d'où la compacité virtuelle :

$$\gamma_2 = \phi_1 + \phi'_2 = \beta_2 + \phi_1 \left\{ 1 - \beta_2 \left(1 + \frac{6k_c(d_1, d_2)}{d_1} \right) \right\}$$

Sachant que : $\phi_1 = \gamma_2 \gamma_1$, nous pouvons écrire :

$$\text{II-1} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 \left(1 + \frac{6k_c(d_1, d_2)}{d_1} \right) \right) \gamma_1}$$

Rappelons ici l'expression I-66 lorsque l'effet de paroi s'exerce seul :

$$\gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right) \gamma_1}$$

En considérant $\beta_1 = \beta_2$, la formule ci-dessus devient :

$$\text{II-2} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - (1 - \beta_2) (1 - b_{21}) \gamma_1}$$

En écrivant l'égalité des relations II-1 et II-2, on aboutit à :

$$b_{21} = \frac{\beta_2}{1 - \beta_2} \frac{6k_c(d_1, d_2)}{d_1}$$

En supposant que $k_c(d_1, d_2)$ est une fonction linéaire de d_1 et d_2 et en considérant les conditions aux limites $b(0) = 0$ et $b(1) = 1$, il vient :

$$k_c(d_1, d_2) = \frac{1 - \beta_2}{6\beta_2} d_2$$

De Larrard note le coefficient d'effet de paroi b_{21} . Puisque nous allons l'étudier en fonction de x , notons le $b(x)$. Des deux formules précédentes, on déduit :

$$\text{II-3} \quad b_c(x) = \frac{d_2}{d_1} = x$$

$b_c(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi selon Caquot.

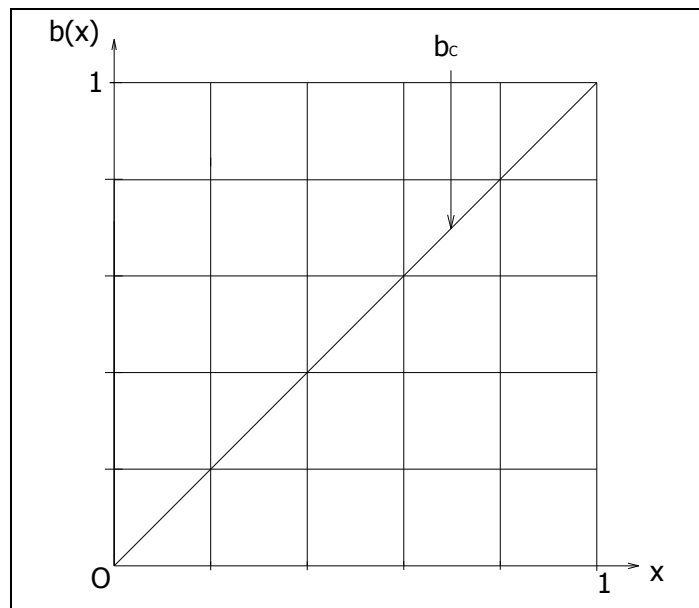


Figure II-1 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres selon la théorie de Caquot lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

Les utilisateurs sont, bien entendu, sensibles à la simplicité de cette formule. Pourtant, l'hypothèse de base posée par Caquot revêt un caractère approximatif. Elle implique en effet que la paroi du gros grain est rectiligne indéfinie ce qui, bien entendu, n'est jamais le cas.

Néanmoins, nous retiendrons de la théorie de Caquot qu'elle satisfait aux conditions aux limites $b(0) = 0$ et $b(1) = 1$ et que la fonction b_c est monotone croissante.

2.1.2. Modèle de Ben-Aïm (1970).

Le modèle de Ben-Aïm a déjà été présenté dans le cadre de la prise en compte des interactions granulaires dans les modèles d'empilement. Nous allons le reprendre de façon plus approfondie.

En vue d'étudier la perméabilité des mélanges binaires, Ben-Aïm s'est livré à l'étude de la texture des empilements désordonnés de grains de forme sphérique.

Dans un « océan » de petits grains de compacité β_2 , il vient placer deux sphères concentriques de diamètres d_1 et $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$.

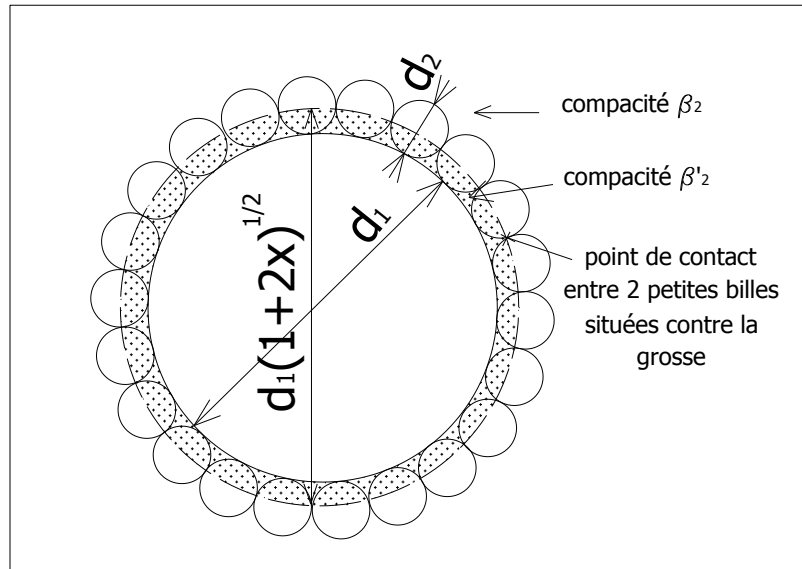


Figure II-2 : cellule de référence de Ben-Aïm.

La première représente un gros grain.

Le diamètre de la seconde est déterminé de telle façon que les points de contact entre chaque petite bille positionnée contre la grosse soient situés à sa surface.

Ces deux sphères délimitent une zone dans laquelle Ben-Aïm suppose que la structure des petits grains est relâchée du fait de la présence du gros. Leur compacité y est égale à β'_2 au lieu de β_2 .

Pour la calculer, il effectue une hypothèse simplificatrice discutable dans la mesure où il considère que β'_2 est constante quel que soit le rapport des diamètres x .

Ce faisant, il se place dans la situation d'étude la plus facile à aborder, celle où x tend vers 0. Dans ce cas, le gros grain possède une paroi quasiment rectiligne à l'échelle des petits grains et l'épaisseur de la zone perturbée vaut $\frac{d_2}{2}$.

La détermination de β'_2 peut alors être effectuée moyennant quelques hypothèses concernant les petites sphères à considérer en fonction de la position de leur centre par rapport à la zone perturbée.

Trois cas sont pris en compte :

- la petite bille a son centre situé à l'intérieur du volume fictif occupé par la sphère de diamètre d_1 : elle est exclue de la zone perturbée.
- la petite bille a son centre qui se trouve à l'intérieur de la zone perturbée : elle est conservée et positionnée contre la paroi de la grosse sphère.
- la bille empiète la zone perturbée mais son centre se situe du côté considéré non perturbé : sa position est conservée.

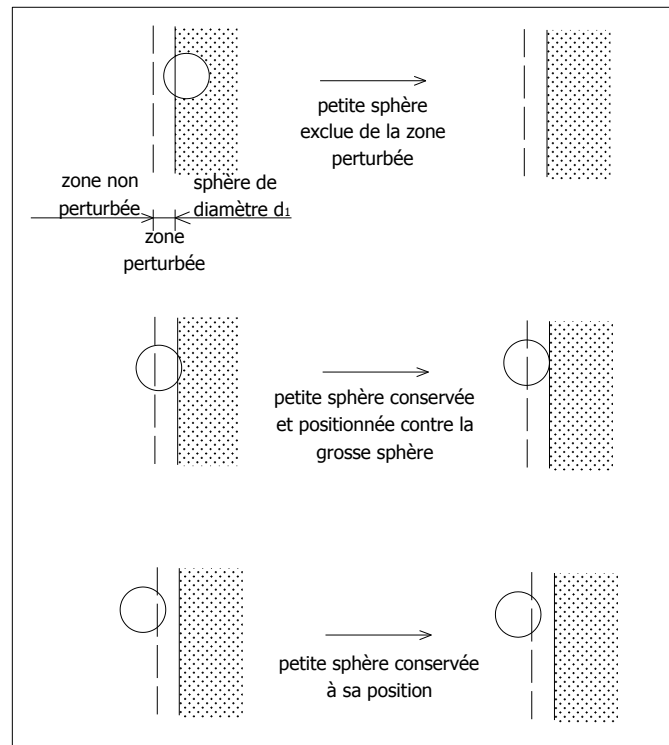


Figure II-3 : effet de paroi d'après Ben-Aïm.

A partir de ces hypothèses d'ordre géométrique, Ben-Aïm aboutit au résultat suivant :

$$\text{II-4} \quad \beta'_2 = k_w \beta_2 = \frac{11}{16} \beta_2$$

Puis, il affecte la différence relative de compacité $\frac{\beta_2 - \beta'_2}{\beta_2}$ au volume partiel ϕ_1 des grains de diamètre d_1 pour obtenir un nouveau volume partiel ϕ'_1 égal à :

$$\phi'_1 = \left(\frac{\beta_2 - \beta'_2}{\beta_2} \left((1+2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) + 1 \right) \phi_1 \text{ avec } \frac{\beta_2 - \beta'_2}{\beta_2} = \frac{5}{16}$$

que l'on peut également écrire :

$$\phi'_1 = \left(1 + k_{BA}(x) \right) \phi_1 \text{ avec } k_{BA}(x) = \frac{5}{16} \left((1+2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)$$

Le volume partiel ϕ'_2 des grains de diamètre d_2 devient :

$$\phi'_2 = \beta_2 \left(1 - \left(1 + k_{BA}(x) \right) \phi_1 \right)$$

La compacité du mélange s'exprime alors par :

$$\gamma_2 = \phi_1 + \phi'_2 = \beta_2 + \phi_1 \left(1 - \beta_2 \left(1 + k_{BA}(x) \right) \right) \text{ avec } \phi_1 = \gamma_2 \gamma_1$$

d'où :

$$\text{II-5} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 \left(1 + k_{BA}(x) \right) \right) \gamma_1}$$

En écrivant l'égalité des relations II-2 et II-5, on aboutit à :

$$b_{BA}(x) = \frac{\beta_2}{1 - \beta_2} k_{BA}(x)$$

soit :

$$\text{II-6} \quad b_{BA}(x) = \frac{\beta_2}{1 - \beta_2} \frac{5}{16} \left((1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)$$

$b_{BA}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi selon Ben-Aim.

En considérant β_2 égal à 0,64 puisque l'auteur travaille sur des empilements désordonnés, la courbe obtenue est la suivante.

On peut remarquer qu'une bonne approximation peut être obtenue avec : $b_{BA}(x) = 2x$.

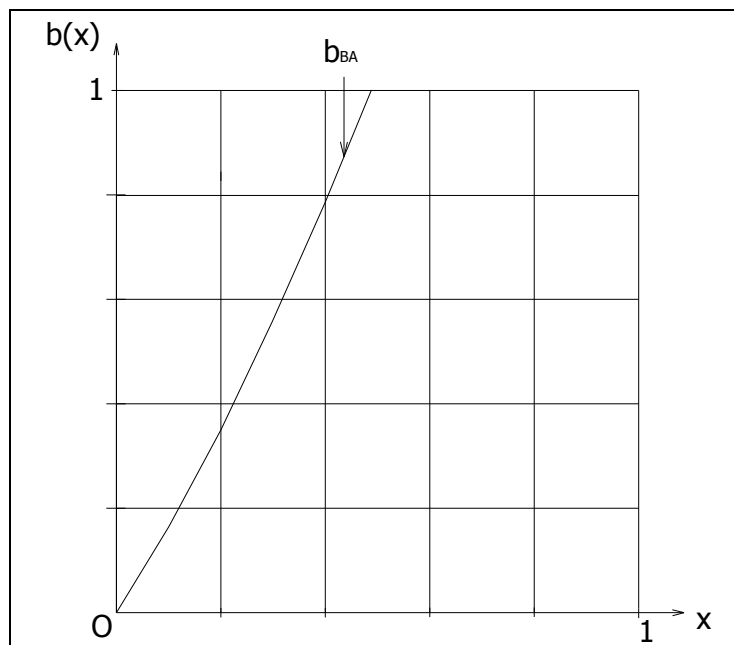


Figure II-4 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres selon Ben-Aim lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

Le modèle de Ben-Aïm ne vérifie pas $b(1) = 1$.

Néanmoins, à la différence de Caquot, il tient compte de la courbure du gros grain pour déterminer le volume de la zone perturbée. C'est ainsi que sa démarche consistant à considérer un espace où les petites billes ont une compacité β'_2 inférieure à β_2 entre deux sphères concentriques de diamètres d_1 et $d_1\sqrt{1+2x}$ apparaît très intéressante. Le modèle de Ben-Aïm peut toutefois être amélioré, semble-t-il, sur deux points : d'une part, en affinant la délimitation entre les zones perturbée et non perturbée pour respecter la condition aux limites citée plus haut et, d'autre part, en tenant compte du rapport des diamètres x dans le calcul de β'_2 .

2.1.3. Modèle de Dodds (1980).

Dans les deux premiers modèles, aucune hypothèse concernant l'arrangement des petits grains en zone courante n'est effectuée. Leur compacité n'intervient pas dans le calcul de $b_c(x)$ selon Caquot. Ben-Aïm, quant à lui, considère ce paramètre. Mais avec la valeur courante qui lui est affectée (0,64 pour un mélange aléatoire), le coefficient d'interaction dû à l'effet de paroi obtenu pour $d_1 = d_2$ est toujours supérieur à 1.

Dans cette dernière modélisation inspirée des travaux de Dodds qui ont déjà été évoqués dans les théories liées aux mélanges aléatoires [DODD80], les petites sphères, supposées en contact parfait, forment un empilement hexagonal compact : leurs centres correspondent aux sommets de tétraèdres réguliers et leur compacité vaut 0,74. Pour quantifier l'effet de paroi, des tétraèdres irréguliers, dont 3 sommets sont constitués par les centres de 3 petites billes en contact avec la grosse et le 4^{ème} par le centre de cette dernière, sont considérés. Le volume des vides calculé à l'intérieur de ces grandes cavernes tétraédriques est logiquement affecté pour $\frac{3}{4}$ aux petites sphères. Le dernier quart est, bien entendu, alloué à la grosse bille. En le divisant par le volume de cette dernière, on obtient un coefficient $k_{EHC}(x)$ qui s'exprime de la façon suivante :

II-7

$$k_{EHC}(x) = \arctan^{-1} \left(\sqrt{\tan\left(\frac{3}{2}v\right)} \times \left(\sqrt{\tan\left(\frac{v}{2}\right)} \right)^3 \right) \times$$

$$\left\{ \frac{\sqrt{3}}{4} u x^3 - 3x^3 \arctan \left(\tan\left(\frac{\pi}{12}\right) \times \sqrt{\tan\left(w + \frac{\pi}{12}\right) \tan\left(w - \frac{\pi}{12}\right)} \right) - \arctan \sqrt{\tan\left(\frac{3}{2}v\right) \tan^3\left(\frac{v}{2}\right)} - 0,1075x^3 \right\}$$

avec :

$$u = \sqrt{\left(1 + \frac{1}{x}\right)^2 - \frac{4}{3}}; v = \arcsin \frac{1}{1 + \frac{1}{x}}; w = \frac{1}{2} \arccos \frac{1}{1 + \frac{1}{x}}$$

Le coefficient d'interaction se calcule de manière identique à celui de Ben-Aïm en prenant $\beta_2 = 0,74$ (hypothèse de l'empilement hexagonal compact) :

$$\text{II-8} \quad b_{\text{EHC}}(x) = \frac{0,74}{1 - 0,74} \times k_{\text{EHC}}(x)$$

$b_{\text{EHC}}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi selon le modèle de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC) de Dodds.

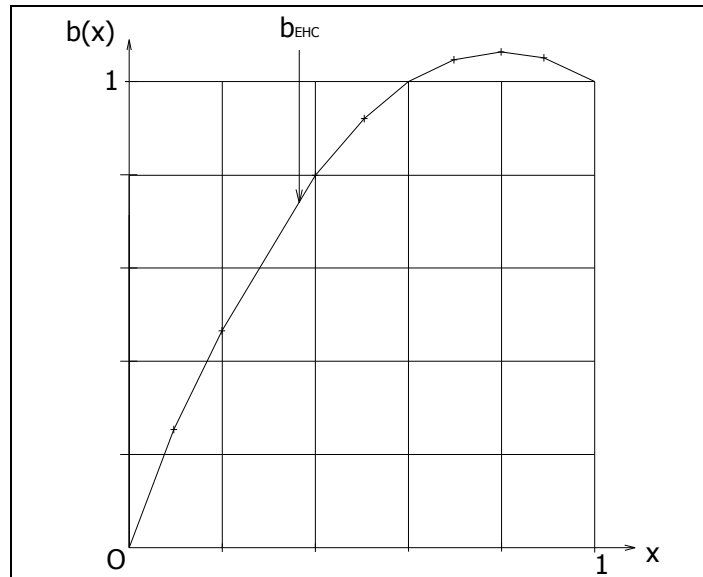


Figure II-5 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après la théorie de Dodds lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

Le modèle EHC respecte les conditions aux limites $b(0) = 0$ et $b(1) = 1$.

Toutefois, il fournit des coefficients d'effet de paroi supérieurs à 1 lorsque x est compris entre 0,6 et 1. Cela signifierait que, dans cet intervalle, l'effet de paroi est tel que la compacité du mélange binaire est plus faible que celle des petits grains empilés isolément. Nous reviendrons sur ce problème au paragraphe 5.1.6.

En résumé, le modèle de Dodds consiste à calculer la fraction solide à l'intérieur d'un tétraèdre constitué de 4 sphères. Son approche est fondée sur l'hypothèse que chaque particule est en contact avec toutes ses voisines. Cela implique d'une part que l'assemblée granulaire présente un état de densité maximum et d'autre part que l'espace tridimensionnel peut être rempli avec un assemblage de tétraèdres en contact. Or, on sait qu'il est impossible de respecter cette dernière condition.

2.1.4. Modèle de Suzuki et Oshima (1983/85).

Le modèle de Suzuki et Oshima a été exposé dans le paragraphe 1.2.2.7, auquel il faut se reporter pour comprendre ce qui va suivre. La cellule considérée par ces auteurs n'est pas tétraédrique comme dans le modèle précédent mais sphérique. Elle est en fait similaire à celle définie par Ben-Aïm.

Exploitions ce modèle dans le cadre de notre étude et intéressons-nous à la compacité β'_2 des petits grains dans le volume perturbé compris entre les deux sphères concentriques de diamètres d_1 et $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2x}$:

$$\text{II-9} \quad \beta'_2 = \frac{N_{12} V_{21}}{\frac{\pi}{6} (d_{hyp}^3 - d_1^3)} = \frac{6N_{12} (V_1 + V_2)}{\pi d_1^3 \left((1+2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)}$$

N_{12} représente le nombre de coordination calculé par la formule I-39.

V_1 et V_2 sont représentés sur la figure I-15.

V_2 représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et EF. Pour le calculer, on démontre tout d'abord que $CF = \frac{d_2}{2} \frac{1}{1+x}$ et $EF = \frac{d_2}{2}$ pour obtenir :

$$V_2 = \frac{\pi d_1^3}{24} \frac{x^3}{(1+x)^2} \left(3 - \frac{1}{1+x} \right)$$

V_1 représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et OD. Pour le calculer, on démontre que $CD = \frac{d_1}{2} \left[\sqrt{1+2x} - \frac{1+2x}{1+x} \right]$ et $OD = \frac{d_1}{2} \sqrt{1+2x}$ pour obtenir :

$$V_1 = \frac{\pi d_1^3}{24} \left(\sqrt{1+2x} - \frac{1+2x}{1+x} \right)^2 \left(2\sqrt{1+2x} + \frac{1+2x}{1+x} \right)$$

Finalement, β'_2 peut s'exprimer par :

$$\text{II-10} \quad \beta'_2 = \frac{\omega(1+x)}{2(1+x - \sqrt{1+2x}) \left((1+2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)}$$

$$\left\{ \frac{x^3}{(1+x)^2} \left(3 - \frac{1}{1+x} \right) + \left(\sqrt{1+2x} - \frac{1+2x}{1+x} \right)^2 \left(2\sqrt{1+2x} + \frac{1+2x}{1+x} \right) \right\}$$

Rappelons que ω est directement lié au nombre de coordination N_c d'un cas mono-modulaire ($x=1$) (formule I-40) :

$$\omega = \frac{N_c}{4} (2 - \sqrt{3}).$$

Dans le cas d'un empilement aléatoire, Suzuki et Oshima obtiennent $N_c = 7,4$ mais une étude publiée dans [MASU06] et regroupant les travaux de 10 chercheurs montre que la moyenne se situe à $N_c = 9$ pour une porosité de $0,36$. D'après I-40, on en déduit :

$$\omega = \frac{9}{4}(2 - \sqrt{3})$$

Dans les milieux denses, nous savons depuis 1953, année où la conjecture de Kepler a enfin été démontrée, que 12 sphères peuvent entrer en contact avec une sphère de même diamètre. Nous obtenons par conséquent :

$$\text{II-11} \quad N_c = 12 \text{ et } \omega = 3(2 - \sqrt{3})$$

Le supplément de porosité existant autour de chaque grosse sphère engendre un coefficient de paroi $b_{50}(x)$ déterminé en utilisant la même démarche que celle présentée dans le modèle de Ben-Aïm :

$$\text{II-12} \quad b_{50}(x) = \frac{\beta_2 - \beta'_2}{1 - \beta_2} \left((1 + 2x)^3 - 1 \right)$$

$b_{50}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi d'après la théorie de Suzuki et Oshima.

Dans le tableau suivant, nous présentons, pour 2 types d'empilement, les valeurs :

- de la compacité β'_2 en zone perturbée ;
- du rapport des compacités en zone perturbée et en zone courante $k_w = \frac{\beta'_2}{\beta_2}$;
- du nombre de coordination N_{12} ;
- du coefficient d'effet de paroi d'après la théorie de Suzuki et Oshima b_{50} .

x	Empilement							
	Aléatoire				Hexagonal compact			
	$\beta_2 = 0,64 ; N_c = 9 ; \omega = \frac{9}{4}(2 - \sqrt{3})$				$\beta_2 = 0,74 ; N_c = 12 ; \omega = 3(2 - \sqrt{3})$			
	β'_2	k_w	N_{12}	b_{50}	β'_2	k_w	N_{12}	b_{50}
0,1	0,416	0,650	291	0,196	0,554	0,749	388	0,225
0,2	0,427	0,667	86	0,388	0,569	0,769	114	0,432
0,3	0,437	0,683	44	0,577	0,582	0,786	59	0,622
0,4	0,445	0,695	28	0,766	0,593	0,801	38	0,800
0,5	0,452	0,706	21	0,955	0,603	0,815	28	0,964
0,6	0,459	0,717	16	>1	0,611	0,826	22	>1
0,7	0,465	0,727	13	>1	0,619	0,837	18	>1
0,8	0,470	0,734	11	>1	0,626	0,846	15	>1
0,9	0,474	0,741	10	>1	0,632	0,854	13	>1
1	0,478	0,747	9	>1	0,638	0,862	12	>1

Tableau II-1 : valeurs de la compacité β'_2 en zone perturbée, du rapport des compacités en zone perturbée et en zone courante k_w , du nombre de coordination N_{12} et du coefficient d'effet de paroi b_{50} en fonction du rapport des diamètres x d'après la théorie de Suzuki et Oshima.

En faisant varier β_2 entre 0,64 (empilement aléatoire) et 0,74 (empilement hexagonal compact), les deux courbes limites sont les suivantes :

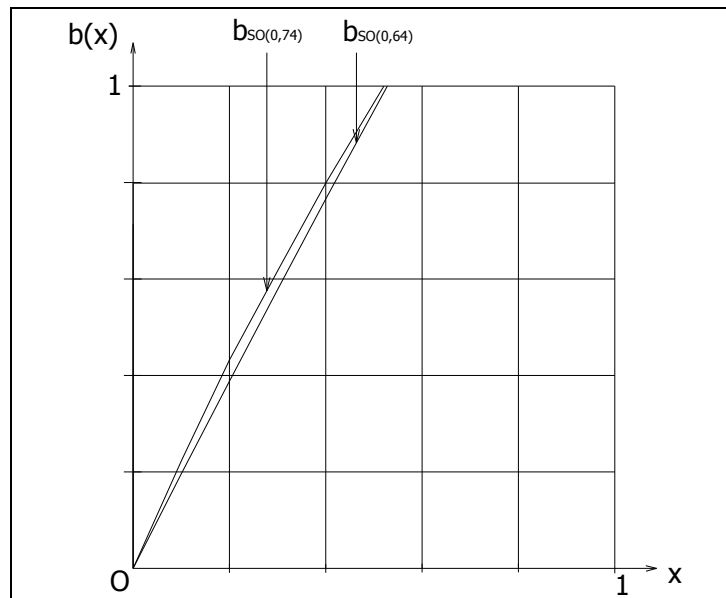


Figure II-6 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après la théorie de Suzuki et Oshima lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

Le modèle de Suzuki et Oshima est novateur sur plusieurs points.

Premièrement, il tient compte de la courbure de la paroi non seulement pour délimiter le volume de la zone perturbée mais également pour calculer la compacité des petits grains à l'intérieur.

Deuxièmement, il permet d'estimer le nombre de contacts N_{12} d'une particule de diamètre d_1 avec des particules de diamètre d_2 en faisant intervenir l'état de densité du milieu grâce à un paramètre ω . Ce dernier permet de caler l'approche théorique sur des résultats expérimentaux grâce à la connaissance du nombre de coordination d'un milieu mono-modulaire. N_{12} peut donc être déterminé aussi bien pour un empilement aléatoire que pour un empilement fortement compact.

Troisièmement, il fait apparaître l'influence du rapport des tailles sur le coefficient k_w . Là où Ben-Aïm considère une valeur constante égale à $\frac{11}{16} = 0,6875$ pour un empilement aléatoire, il fournit des résultats variant de 0,65 pour $x = 0,1$ à 0,747 pour $x = 1$ avec la valeur de N_c retenue.

Quatrièmement enfin, il ne présente pas de restriction concernant le rapport de taille du milieu bi-disperse contrairement à l'approche de Dodds (voir paragraphe 1.2.5).

Néanmoins, il n'est pas satisfaisant à plusieurs égards.

D'un point de vue résultats, deux défauts apparaissent.

Le premier résulte de l'influence considérable du choix de N_c sur les résultats de k_w et de b_{s0} pour un empilement aléatoire. Avec une valeur discutable de $N_c = 9$ pour un empilement aléatoire et une valeur beaucoup plus indiscutable de $N_c = 12$ pour un empilement très dense, le fuseau obtenu pour le coefficient d'effet de paroi est peu élargi (valeurs proches pour $\beta_2 = 0,64$ et $\beta_2 = 0,74$) alors qu'une autre sélection aurait pu conduire à un fuseau beaucoup plus ouvert.

Le second réside, à l'instar du modèle de Ben-Aïm, dans l'obtention de valeurs supérieures à 1 pour une large gamme de rapports de tailles de grains.

Il est important toutefois de noter que la démarche de Suzuki et Oshima adopte une approche différente de celle de Larrard avec son modèle d'empilement compressible et qu'il est toujours délicat de vouloir déterminer les valeurs d'un coefficient à partir d'un modèle imprégné d'une autre philosophie. Pour calculer la porosité associée à chaque classe granulaire, Suzuki et Oshima font notamment appel à une variable déjà présentée précédemment (paragraphe 1.2.2.7), rapport de la porosité d'un milieu mono-modulaire n_{mono} et de la porosité de la cellule de référence (particule d_i entourée de particules d_i) n_{ii} , qui permet quelque peu artificiellement de caler les résultats théoriques sur les résultats expérimentaux. Cette astuce permet ainsi aux auteurs de compenser une éventuelle lacune concernant la définition de la cellule de référence.

En résumé, Suzuki et Oshima adoptent une démarche intéressante à partir de la cellule de référence imaginée par Ben-Aïm.

Par rapport à ce dernier, ils intègrent certains nouveaux paramètres liés à la courbure de la paroi mais les gains en termes de résultats ne sont pas sensibles.

Le principal défaut recensé dans les travaux de Ben-Aïm, à savoir l'obtention de coefficients de paroi supérieurs à 1 pour une large amplitude de rapport de taille y compris lorsque ce dernier vaut 1, n'est par ailleurs pas corrigé.

Il semblerait, en fait, que le problème se situe davantage dans la définition de la cellule de référence que dans la précision des calculs à l'intérieur de celle-ci.

2.1.5. Modèle de Yu et Standish (1987).

Le modèle de Yu et Standish a fait l'objet d'une présentation dans le paragraphe 1.2.2.10. S'appuyant sur les équations en volume apparent de Westman et Hugill, il fait également appel aux expressions de Ridgway et Tarbuck (paragraphe 1.2.2.5) pour estimer l'accroissement de compacité obtenu dans le cadre d'un mélange binaire par rapport à un empilement mono-modulaire pour un rapport de tailles quelconque. Les interactions granulaires ainsi prises en compte permettent d'aboutir à un modèle linéaire de compacité similaire à celui de Stovall et de Larrard.

La combinaison de la 2^{ème} expression de I-57 et de I-68 permet d'obtenir dans le cadre des compacités virtuelles et lorsque $\beta_1 = \beta_2$:

$$\text{II-13} \quad b_{21} = 1 - \frac{1}{1 - \beta_2} \left(1 - \frac{\beta_2}{\beta_{21}} \right) \frac{1}{\gamma_{21}}$$

D'après les équations I-37 de Ridgway et Tarbuck exprimées en compacités virtuelles, il est possible d'écrire :

$$\begin{aligned} \text{II-14} \quad \beta_{21} &= \beta_2 + \beta_2 (1 - \beta_2) (1 - 2,35x + 1,35x^2) \text{ si } x \leq 0,741; \\ \beta_{21} &= \beta_2 \text{ si } x > 0,741; \\ \gamma_{21} &= \frac{1 - x^2}{2 - \beta_2}. \end{aligned}$$

Le coefficient d'effet de paroi de Yu et Standish issu des travaux de Ridgway et Tarbuck s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \text{II-15} \quad b_{ys}(x) &= 1 - \frac{2 - \beta_2}{1 - \beta_2} \left(1 - \frac{1}{1 + (1 - \beta_2) (1 - 2,35x + 1,35x^2)} \right) \frac{1}{1 - x^2} \text{ si } x \leq 0,741; \\ b_{ys}(x) &= 1 \text{ si } x > 0,741. \end{aligned}$$

$b_{ys}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi d'après la théorie de Yu et Standish et les travaux de Ridgway et Tarbuck.

L'observation des résultats issus de la modélisation de Yu et Standish amène trois commentaires principaux :

- les conditions aux limites $b(0) = 0$ et $b(1) = 1$ sont bien respectées ;
- le fuseau des valeurs obtenues est très resserré : l'influence de la valeur de la compacité en pleine masse est relativement limitée puisque les coefficients d'effet de paroi sont quasiment identiques pour un empilement très dense ou pour un empilement aléatoire ;

- pour les faibles contrastes de tailles ($x > 0,741$) et selon les travaux de Ridgway et Tarbuck, la compacité d'un mélange binaire dans le cadre des « petits dominants » serait égale à la compacité de ces derniers en pleine masse quelle que soit la proportion volumique de chacun des constituants : l'apport d'un matériau légèrement plus grossier ne serait pas efficace et n'engendrerait pas le gain de compacité escompté.

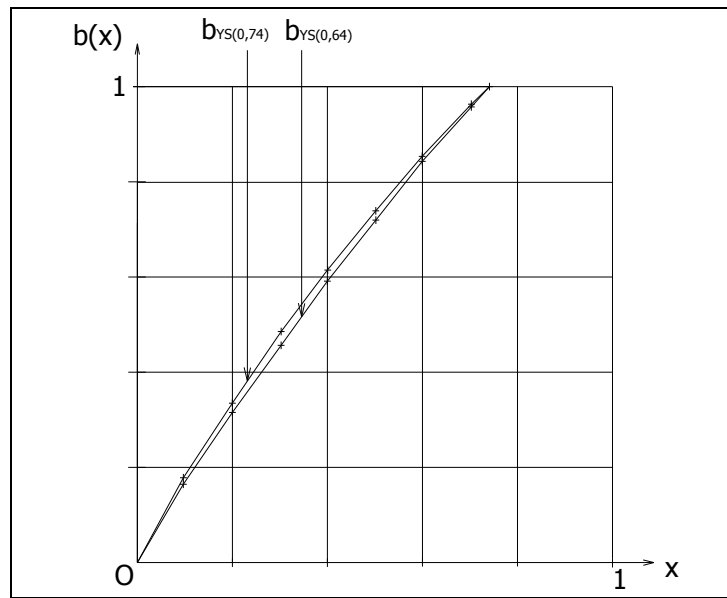


Figure II-7 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après la théorie de Yu et Standish et les travaux de Ridgway et Tarbuck lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

2.1.6. Modèles empiriques.

Les modèles empiriques sont relativement nombreux ce qui illustre bien la difficulté des différents chercheurs à quantifier l'effet de paroi.

De Larrard [DELA88] est le premier, en 1988, à s'orienter vers une fonction de lissage relativement simple. A cette époque, il utilise comme cadre théorique le modèle d'empilement dénommé modèle linéaire de compacité (MLC) conçu en collaboration avec Stovall. La fonction d'interaction représentant l'effet de paroi est alors appelée : g_{21} (voir 1.2.2.9 pour un mélange binaire). A partir de 27 points expérimentaux obtenus sur des sphères et des théories de Caquot, Ben-Aïm et de Dodds, il propose une fonction d'interaction liée à l'effet de paroi de la forme :

$$g(x) = (1 - x)^p$$

pour aboutir à :

$$g(x) = (1 - x)^{1,6}$$

Compte tenu de I-68 et avec $\beta_1 = \beta_2$, il vient :

$$\text{II-16} \quad b_{L88}(x) = 1 - (1 - x)^{1,6}$$

$b_{L88}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi d'après de Larrard [DELA88].

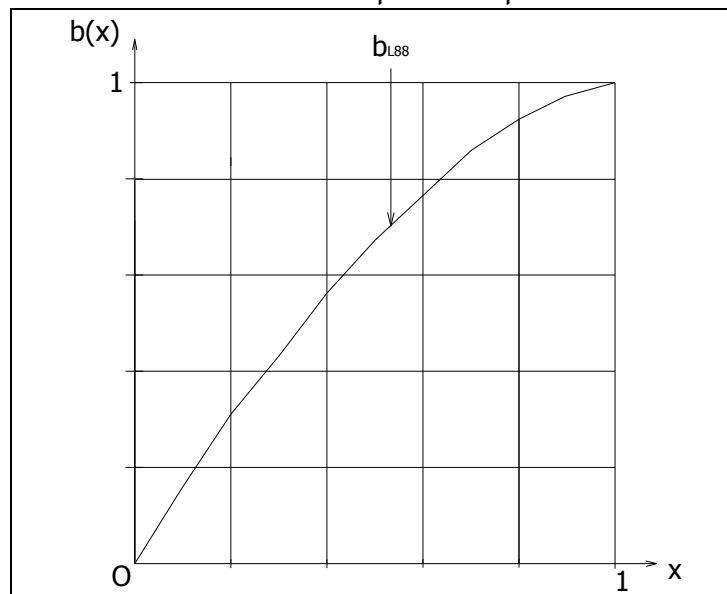


Figure II-8 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après De Larrard [DELA88].

En 1994, Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94] développent le modèle de suspension solide, théorie intermédiaire entre le modèle linéaire de compacité (MLC) et le futur modèle d'empilement compressible (MEC). Dans le but de déterminer les coefficients d'interaction, ils effectuent des essais sur des granulats roulés de la Loire et sur des granulats concassés anguleux de carrière. Cherchant avant tout à aligner les 14 points expérimentaux obtenus pour l'effet de paroi sur une courbe décrite par une équation simple, ils proposent tout simplement de reprendre l'expression de Caquot :

$$\text{II-17} \quad b_{SLA}(x) = b_C(x) = x$$

En 1997, Lecomte et Zennir [LECO97] appliquent le modèle de suspension solide à la formulation d'un béton courant. Ils viennent enrichir les données existantes en effectuant des essais sur des concassés calcaires tendres de Moselle en vue d'exploiter des gisements potentiels. Ils associent leurs 11 résultats à ceux obtenus sur des granulats « étalons » roulés et concassés pour en déduire au total 25 valeurs et proposent l'équation suivante :

$$\text{II-18} \quad b_{LZ}(x) = x^{1,33} + x(1 - x)$$

$b_{LZ}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi d'après Lecomte et Zennir [LECO97].

Il faut toutefois souligner que le caractère tendre des calcaires les rendait relativement friables et peut avoir modifié leur état de surface au fur et à mesure des essais.

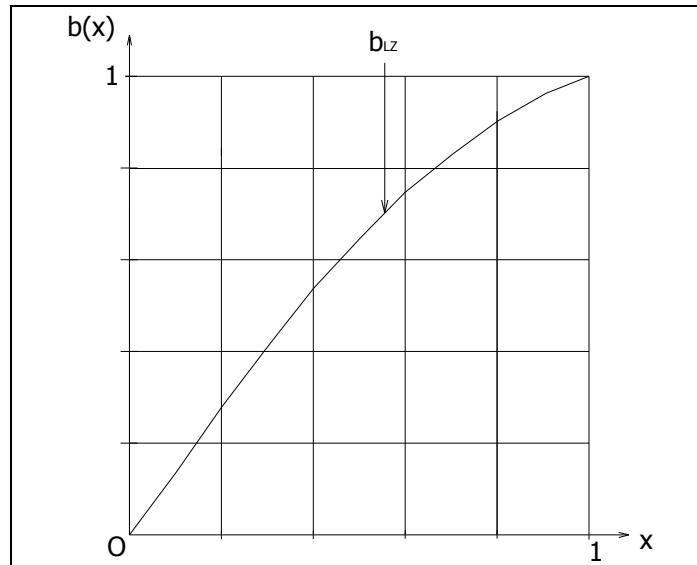


Figure II-9 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après Lecomte et Zennir [LECO97].

En 2000, de Larrard [DELA00] met à profit l'évolution du modèle de suspension solide vers un modèle d'empilement compressible (MEC) pour modifier les expressions empiriques permettant de calculer les coefficients d'interaction. Il souhaite ainsi améliorer une fois de plus le lissage des données expérimentales et intégrer une nouvelle condition aux limites fournie par l'équation I-70 : $\left. \frac{\partial b}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$.

Il propose finalement pour l'effet de paroi :

$$\text{II-19} \quad b_{L00}(x) = 1 - (1-x)^{1.5}$$

$b_{L00}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi d'après de Larrard [DELA00].

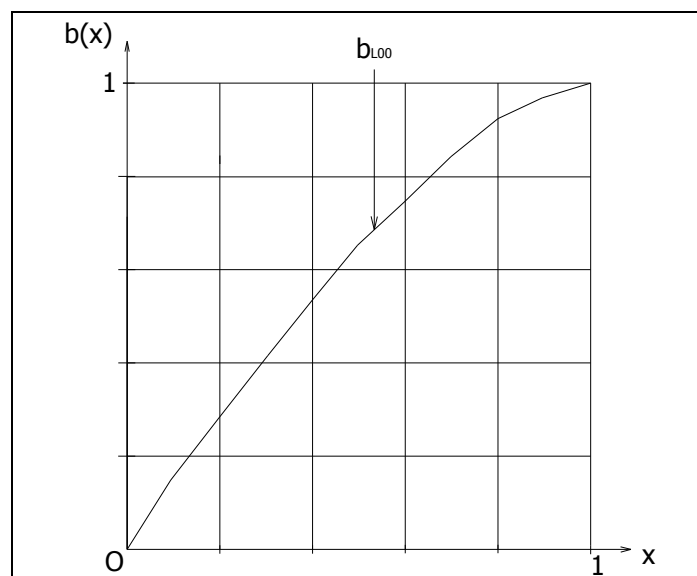


Figure II-10 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après de Larrard [DELA00].

L'expression II-19 [DELA00] est celle utilisée dans la version la plus aboutie des modèles successifs de de Larrard. C'est elle qui figure dans son ouvrage de référence : « Structures granulaires et formulation des bétons » publié en 2000. Elle est finalement assez proche et de la même forme que celle utilisée par le même auteur dans sa thèse une douzaine d'années plus tôt (expression II-16) [DELA88] lors de l'élaboration de son modèle linéaire de compacité (MLC) en compagnie de Stovall.

C'est d'ailleurs dans le cadre d'une évolution d'un autre modèle linéaire de compacité, celui de Yu et Standish [YUST87], que le dernier modèle empirique lié à l'effet de paroi qui va être présenté ici a été élaboré en 1996. En collaboration avec Zou [YUZO96], les deux auteurs précédents parviennent à l'expression :

$$g(x) = (1-x)^{1,97} + 0,36 x (1-x)^{3,67}$$

de laquelle on déduit :

$$\text{II-20} \quad b_{yZS}(x) = 1 - (1-x)^{1,97} - 0,36 x (1-x)^{3,67}$$

$b_{yZS}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi d'après Yu, Zou et Standish [YUZO96].

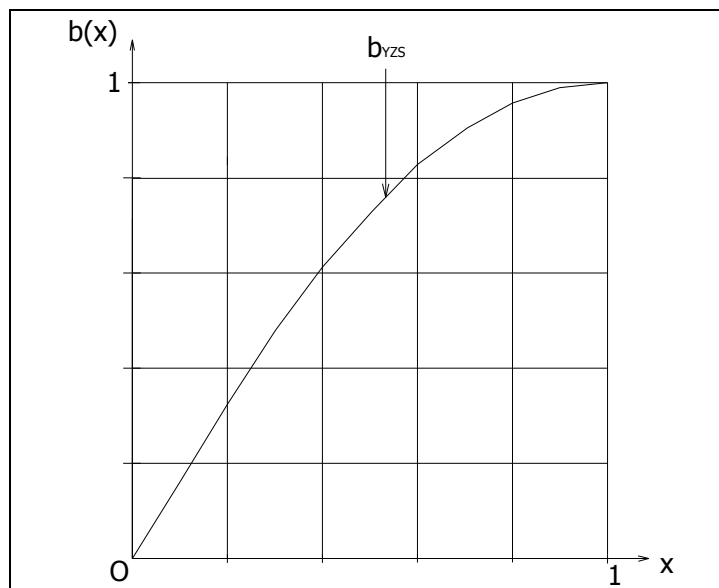


Figure II-11 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après Yu, Zou et Standish [YUZO96].

2.1.7. Résumé et conclusions.

Les modèles conduisant aux valeurs les plus extrêmes du coefficient d'effet de paroi sont des modèles analytiques:

- pour la limite inférieure : celui de Caquot b_c ;
- pour la limite supérieure : ceux de l'empilement hexagonal compact b_{EHC} (Dodds), de Suzuki et Oshima b_{SO} et de Ben-Aïm b_{BA} . Les trois fournissent d'ailleurs des valeurs supérieures à 1 lorsque le contraste de tailles est suffisamment faible.

Les modèles fournissant des résultats intermédiaires sont des modèles empiriques (de Larrard 1988 b_{L88} et 2000 b_{L00} , Lecomte et Zennir b_{LZ} , Yu, Zou et Standish b_{YZS}) ou semi-empiriques (Yu et Standish b_{YS} d'après les travaux de Ridgway et Tarbuck).

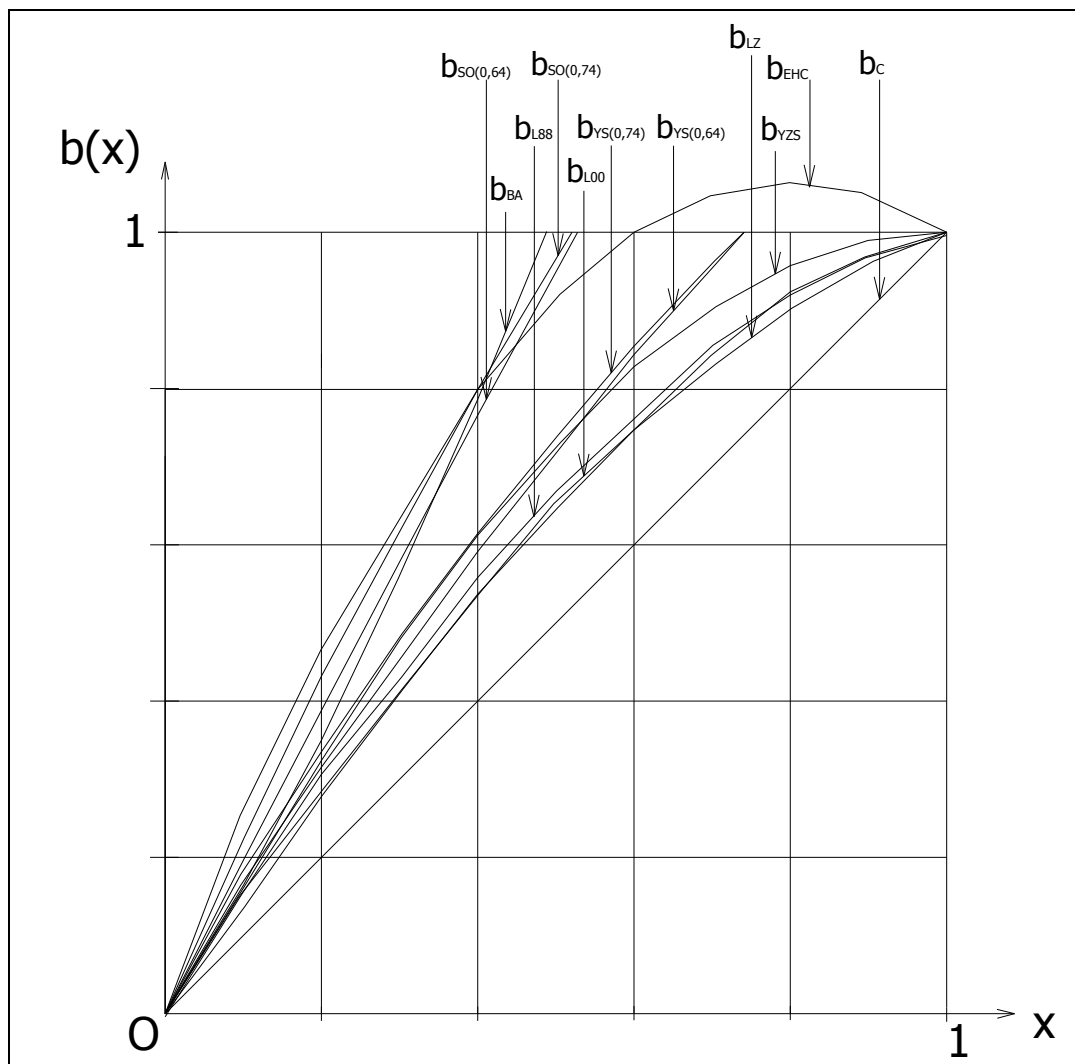


Figure II-12 : coefficient d'effet de paroi $b(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après les différents modèles recensés.

Dans le tableau suivant sont répertoriés les différents modèles, afin de les évaluer, et leur compatibilité avec 3 conditions liées au modèle d'empilement compressible (MEC). La dernière condition aux limites du MEC, $\left. \frac{\partial b}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$, a été élargie à un intervalle de pentes admissibles : $0 \leq \left. \frac{\partial b}{\partial x} \right|_{x=1} \leq 0,5$. La justification se trouve dans le paragraphe qui sera consacré aux modélisations antérieures de l'effet de desserrement. Nous verrons que deux d'entre elles, $a_{SLA} = \sqrt{x}$ et $a_{L00} = \sqrt{1 - (1-x)^{1,02}}$, présentent des résultats quasi-identiques alors que leurs pentes en $x=1$ sont relativement différentes : $\left. \frac{\partial a_{SLA}}{\partial x} \right|_{x=1} = 0,5$ et $\left. \frac{\partial a_{L00}}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$. La première, qui fournit des valeurs très convenables, a été amendée pour devenir la seconde, finalement retenue par de Larrard, non pas pour obtenir des résultats plus précis puisqu'il y a pratiquement similarité entre les deux fonctions, mais simplement du fait que la deuxième présente cette spécificité concernant sa pente en $x=1$, qui répond à une condition à respecter lors de l'utilisation du MEC (voir expression I-70). Puisque nous choisissons d'assouplir les conditions à remplir par les différents modèles du coefficient de desserrement pour jauger leur qualité, nous préférons partir sur les mêmes bases avec les différents modèles du coefficient d'effet de paroi.

	$b(0) = 0$	$b(1) = 1$	$0 \leq \left. \frac{\partial b}{\partial x} \right _{x=1} \leq 0,5$
b_C	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	non
b_{BA}	<u>OUI</u>	non	non
b_{EHC}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	non
b_{SO}	<u>OUI</u>	non	non
b_{YS}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u> mais point de brisure sur la courbe	<u>OUI</u> mais point de brisure sur la courbe
b_{L88}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
b_{LZ}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
b_{L00}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
b_{YZS}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>

Tableau II-2 : situation des différents modèles par rapport à 3 conditions liées au MEC.

Ces résultats montrent à quel point les théories permettant de décrire l'effet de paroi ne sont pas encore suffisamment abouties ($b_C, b_{BA}, b_{EHC}, b_{SO}$) et qu'un effort dans ce sens doit être entrepris. C'est ce que nous allons nous efforcer de réaliser dans ce travail en nous appuyant néanmoins sur les atouts de chacun des modèles

analytiques déjà présentés : ceux de Caquot, Ben-Aïm, Dodds et enfin Suzuki et Oshima.

Caquot propose une solution simple sans effectuer d'hypothèse concernant l'arrangement des petits grains contre la paroi d'un gros. Pour lui, le coefficient permettant de quantifier cet effet est proportionnel au rapport des tailles. Si cette supposition paraît acceptable lorsque ce dernier tend vers 0, il est loin d'en être de même pour les faibles contrastes de tailles (x fort). Les valeurs de b_c qu'il obtient sont sous-estimées du fait qu'il ne tient pas compte de la courbure des gros grains dans sa modélisation. Ce faisant, les valeurs de compacités du mélange binaire prédites sont trop fortes.

Ben-Aïm, quant à lui, considère une zone perturbée autour de chaque grosse particule. Extérieurement, elle est délimitée par une sphère concentrique à la grosse bille et son diamètre est choisi de telle manière que l'on trouve à sa surface les points de contact entre chaque petite bille plaquée contre la paroi ($d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$). Selon Ben-Aïm, son contour extérieur ne dépend pas de la compacité des petits grains en pleine masse (β_2 n'intervient pas dans le calcul de d_{hyp}). Mais si Ben-Aïm tient compte de la courbure pour déterminer le volume de la zone perturbée, il la néglige quand il calcule la compacité des petites billes situées à l'intérieur. C'est pourquoi il obtient, moyennant certaines hypothèses, un coefficient k_w , rapport de la compacité des petits grains en zone perturbée et de leur compacité en zone courante, constant et égal à $\frac{11}{16}$. Selon de Larrard [DELA88], le modèle de Ben-Aïm fournit d'excellentes valeurs dans le domaine $x < 0,3$. Elles sont surestimées au-delà et ce d'autant plus que x augmente. La condition aux limites $b(1)=1$ est ainsi loin d'être respectée. Comment expliquer cela ? Examinons l'expression II-6 obtenue par Ben-Aïm :

$$b_{BA}(x) = \frac{\beta_2}{1 - \beta_2} (1 - k_w) \left((1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \text{ avec } \beta_2 = 0,64 \text{ et } k_w = \frac{11}{16}.$$

Plusieurs hypothèses peuvent être émises :

- le terme $\left((1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)$ devient trop important au fur et à mesure que x augmente dans le cadre d'une compacité β_2 correspondant à un empilement aléatoire (objet de l'étude de Ben-Aïm). Pour $\beta_2 = 0,64$, le diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$ de la sphère délimitant l'extérieur de la zone perturbée serait surestimé. Dans ce cas et de manière plus globale, pourquoi ne pas le faire dépendre également de la compacité des petits grains en pleine masse ?

- le terme $k_w = \frac{11}{16}$ est valable uniquement pour un empilement aléatoire, pour une paroi plane (α faible), pour un volume de zone perturbée tel qu'il vient d'être défini et selon les hypothèses de calcul de Ben-Aïm. Qu'en est-il dans d'autres circonstances ? Une modification de la définition de la zone perturbée et la prise en compte de la courbure de la paroi engendreraient nécessairement des variations de k_w .

Le modèle inspiré des travaux de Dodds, également dénommé modèle de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC), suppose, comme son nom l'indique, un arrangement idéal de sphères considérées en contact parfait avec celles qui les entourent (gapless packing). Des cavernes tétraédriques dont les sommets sont constitués par les centres de 4 particules jointives sont créées et divisent ainsi l'espace. La détermination du volume de vide à l'intérieur de celles composées de 3 petites sphères et d'une grosse permet d'en déduire un coefficient d'interaction dû à l'effet de paroi qui intègre la forme arrondie de la grosse particule (figure II-13). La courbe b_{EHC} obtenue se situe dans la limite haute des résultats fournis par les différents modèles. Elle est très proche de celle correspondant à la théorie de Ben-Aïm pour un rapport de tailles inférieur à 0,4. Au-delà de cette valeur et contrairement à la représentation graphique de ce dernier qui continue sa progression rapide dans le domaine des coefficients b supérieurs à 1, elle effectue son entrée dans cette région mais s'infléchit rapidement et entame une décroissance pour finalement respecter la condition aux limites $b(1) = 1$.

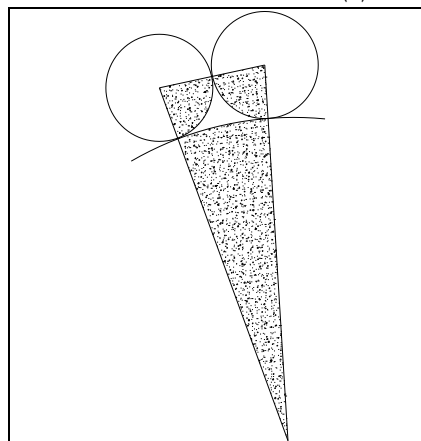


Figure II-13 : projection plane d'un tétraèdre de Dodds permettant de calculer l'effet de paroi.

Dodds propose une méthode constituant un complément intéressant par rapport au modèle de Ben-Aïm car la cellule de référence n'est plus sphérique mais tétraédrique. Contrairement à ce dernier qui prend directement en compte une zone perturbée

contre la paroi entière d'un gros élément, Dodds considère seulement 3 petites sphères jointives et les associe avec une portion de la grosse particule pour composer sa cellule. Appliquer son modèle pour déterminer le coefficient d'effet de paroi revient donc à estimer que le résultat obtenu localement autour d'une petite zone de la grosse particule peut se généraliser à son pourtour complet. Cela revient à dire qu'il serait possible de placer un ensemble de petites sphères en contact parfait contre sa surface. Dans ce cas, la zone perturbée dans laquelle se fait sentir l'interaction granulaire serait extérieurement délimitée par un deltaèdre, polyèdre dont les faces sont toutes des triangles équilatéraux ayant ici pour côtés les segments reliant, deux à deux, les centres de petites sphères jointives situées contre la paroi. Même si ce cas de figure est théoriquement impossible, il n'en constitue pas moins une base intéressante pour poursuivre notre analyse.

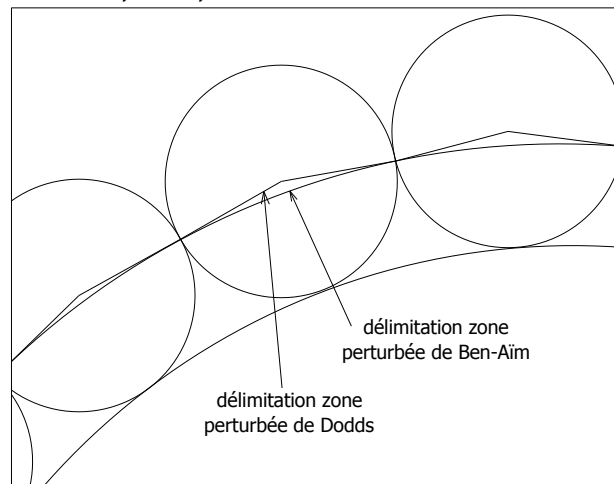


Figure II-14 : comparaison des délimitations de la zone perturbée selon Ben-Aïm et d'après la théorie de Dodds.

Le volume perturbé ainsi obtenu est légèrement plus important que celui de Ben-Aïm dont la frontière extérieure est constituée par une sphère de diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$.

Récapitulons les constatations qui viennent d'être effectuées :

- dans le cas d'un empilement aléatoire, le modèle de Ben-Aïm fournit des valeurs trop importantes pour $x > 0,3$, le phénomène s'amplifiant au fur et à mesure que x croît et la condition aux limites $b(1) = 1$ n'étant absolument pas respectée. La cause pourrait être la surestimation du diamètre de la sphère délimitant l'extérieur de la zone perturbée. Il semble donc qu'un diamètre légèrement inférieur à $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$ pourrait convenir.
- dans le cas d'un empilement hexagonal compact, le modèle de Dodds fournit des valeurs élevées, certes, mais respectant les conditions aux limites $b(0) = 0$ et $b(1) = 1$. En choisissant de délimiter la surface extérieure de

la zone perturbée par une sphère et non par un deltaèdre, il semble qu'un diamètre légèrement supérieur à $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$ pourrait convenir.

Suzuki et Oshima, enfin, reprennent la cellule sphérique de Ben-Aïm pour délimiter la zone dans laquelle l'interaction se produit. Mais ils complètent la démarche de celui-ci en tenant compte de la courbure pour déterminer le nombre de petites sphères contre une grosse et le volume partiel de chacune d'entre elles situé dans cette cellule de référence. Même si ces calculs peuvent encore être affinés, il est possible d'en déduire une compacité des petits grains en zone perturbée et un coefficient k_w pour chaque rapport de taille x et pour chaque type d'empilement, aussi bien aléatoire qu'hexagonal compact. Ce degré de sophistication plus élevé n'apporte, malheureusement, aucune amélioration par rapport aux travaux de Ben-Aïm puisque les deux courbes obtenues à partir de la théorie de Suzuki et Oshima (correspondant à des compacités de 0,64 et 0,74) sont pratiquement confondues avec celle de leur prédécesseur. La quantification de l'effet de paroi qui en est déduite est donc, là aussi, surestimée à partir d'un certain rapport de tailles (environ 0,3) et la condition aux limites en $x = 1$ toujours pas respectée.

Puisque le point commun entre les 2 modèles concerne la définition du volume de la zone perturbée, il est tentant d'en déduire que le terme $\left((1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)$ intervenant dans la formulation du coefficient d'effet de paroi tirée des travaux de Ben-Aïm d'une part et de Suzuki et Oshima d'autre part n'est pas parfaitement adapté à la situation.

Examinons dans un premier temps le cas de l'empilement aléatoire $\beta_2 = 0,64$. Comment expliquer que la théorie de Ben-Aïm avec un coefficient k_w constant, déterminé avec l'hypothèse d'une paroi plane, et la théorie de Suzuki et Oshima avec un coefficient k_w variable, obtenu en tenant compte de la courbure, conduisent à des résultats quasi-similaires dans la zone où les coefficients d'effet de paroi restent inférieurs à 1 ? Tout simplement en remarquant que le coefficient k_w déduit du modèle de Suzuki et Oshima (avec $\beta_2 = 0,64$) évolue entre 0,65 et 0,70 (tableau II-1), pour x compris entre 0,1 et 0,5, et que ces valeurs sont très proches de celles obtenues par Ben-Aïm : $\frac{11}{16} \approx 0,68$. Dans la fourchette de rapports de tailles prise en compte, la courbure n'influence par conséquent pratiquement pas la compacité des petits grains en zone perturbée telle que celle-ci a été définie. Pour $\beta_2 = 0,64$, il semble se confirmer qu'un diamètre légèrement inférieur à $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$ puisse convenir.

Examinons dans un deuxième temps le cas de l'empilement hexagonal compact $\beta_2 = 0,74$. En considérant que l'analyse du modèle de Dodds est pertinente et qu'un diamètre légèrement supérieur à $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$ soit approprié, comment expliquer que les valeurs du coefficient d'effet de paroi sont surestimées pour $x > 0,3$? Examinons l'expression II-12 obtenue par Suzuki et Oshima :

$$b_{50}(x) = \frac{\beta_2 - \beta'_2}{1 - \beta_2} \left((1 + 2x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right)$$

La réponse pourrait résider dans une surévaluation de la première partie de la formule : $\frac{\beta_2 - \beta'_2}{1 - \beta_2}$. Puisque $\beta_2 = 0,74 = \text{constante}$, cela pourrait signifier que la compacité des petits grains en zone perturbée β'_2 est sous-estimée.

Effectuons une synthèse des analyses concernant les modèles présentés. A notre avis, le plus développé semble être celui de Suzuki et Oshima qui utilise la cellule sphérique de Ben-Aïm pour définir le volume dans lequel se produit l'effet de paroi. Pour l'améliorer, il faudrait prévoir :

- de diminuer le diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}$ dans le cas d'un empilement aléatoire ($\beta_2 = 0,64$) ;
- d'augmenter ce même diamètre dans le cas d'un empilement hexagonal compact ($\beta_2 = 0,74$) et de vérifier que la compacité des petits grains en zone perturbée β'_2 qui en résulte subit une légère croissance.

Il reste donc à établir un modèle plus général qui « réunifie » les quatre théories exposées en considérant différents types d'arrangement des petits grains en pleine masse compris entre l'empilement complètement aléatoire (modèle de Caquot) et l'empilement le plus compact qui soit (modèle EHC).

C'est donc avant tout par un choix judicieux de la délimitation de la zone perturbée que l'on pourra espérer améliorer les théories concernant l'effet de paroi avant d'envisager d'affiner la méthode de calcul du volume des petites sphères partiellement situées à l'intérieur. En prenant comme base le modèle de Suzuki et Oshima situé dans la continuité de celui de Ben-Aïm, pourquoi ne pas envisager, par exemple, une sphère de diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2 k_p x}$ pour constituer la frontière extérieure en question, expression dans laquelle k_p serait un coefficient ajustable en fonction de β_2 pour respecter la condition $b(1) = 1$?

2.2. DOMAINE DES GROS DOMINANTS : EFFET DE DESSERREMENT.

2.2.1. Modèle « linéaire » de Stovall (1986).

Lors de la mise au point du modèle linéaire de compacité (MLC), Stovall [STOV86] rédige une première théorie permettant de déterminer la fonction de desserrement f_{12} considérée alors (voir paragraphe 1.2.2.9). Nous allons l'appliquer au coefficient de desserrement α_{12} figurant dans le Modèle d'Empilement Compressible (MEC).

Stovall effectue trois hypothèses principales :

- la première concerne le diamètre critique d'un petit grain introduit dans une matrice constituée d'éléments beaucoup plus gros. Si son diamètre est inférieur à cette valeur critique, il a la possibilité de s'immiscer dans l'espace laissé libre entre 4 grandes particules en contact sans déstructurer leur organisation. Si son diamètre est supérieur à cette valeur, il modifie le squelette initialement constitué en dilatant la structure en place. Pour des sphères, le rapport de tailles critique s'écrit, comme nous l'avons déjà indiqué :

$$\text{I-2} \quad x_0 = 0,224$$

Stovall préfère arrondir à la valeur suivante :

$$\text{II-21} \quad x_0 \approx 0,2$$

- pour $x > x_0$, l'insertion de sphères de diamètre d_2 supérieur à $x_0 d_1$ engendre une diminution de la compacité résiduelle de l'assemblée granulaire des grains 1 d'une valeur β_1 à une valeur β'_1 . La quantité d'espace vide qui en résulte est partiellement comblée par l'introduction des petites particules dans une proportion β^* supposée varier linéairement en fonction du rapport de taille x (d'où la dénomination de modèle linéaire de Stovall).
- quand $x \rightarrow 1$, toutes les particules deviennent identiques. Les compacités calculées dans le cadre des petits dominants et dans le cadre des gros dominants doivent être égales lorsque les titres volumiques des petites et grosses particules valent 0,5.

De la 2^{ème} hypothèse, Stovall considère que la décompaction des grosses particules se traduit par une augmentation de la quantité de vides de $\frac{\phi_1}{\beta_1}$ à $\frac{\phi_1}{\beta'_1}$ et que le volume partiel des petites particules peut se calculer de la manière suivante :

$$\text{II-22} \quad \phi_2 = \beta^*(d_1, d_2) \phi_1 \left(\frac{1}{\beta'_1} - \frac{1}{\beta_1} \right) \frac{d_2^3}{d_2^3 - (x_0 d_1)^3} = \beta^*(x) \phi_1 \left(\frac{1}{\beta'_1} - \frac{1}{\beta_1} \right) \frac{1}{1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3}$$

Cette expression est ensuite utilisée pour exprimer β'_1 en fonction de β_1 :

$$\beta'_1 = \frac{\beta_1}{1 + \frac{\beta_1}{\beta^*(x)} \frac{\phi_2}{\phi_1} \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right)} = \frac{\beta_1}{1 + \frac{\beta_1}{\beta^*(x)} \frac{\gamma_2}{\gamma_1} \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right)}$$

La compacité du mélange s'obtient en reprenant l'expression I-26 mais en remplaçant β_1 par β'_1 :

$$\gamma_1 = \frac{\beta'_1}{\gamma_1} = \frac{\beta_1}{1 - \gamma_2}$$

En combinant les deux formules précédentes, il vient :

$$\text{II-23} \quad \gamma_1 = \frac{\beta_1}{\gamma_1 + \frac{\beta_1}{\beta^*(x)} \gamma_2 \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right)} = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta^*(x)} \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right) \right) \gamma_2}$$

Rappelons maintenant l'expression I-65 lorsque l'effet de desserrement s'exerce seul :

$$\gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} a_{12} \right) \gamma_2}$$

Avec $\beta_1 = \beta_2 = \beta$, la formule ci-dessus devient :

$$\text{II-24} \quad \gamma_1 = \frac{\beta}{1 - (1 - a_{12}) \gamma_2}$$

En écrivant l'égalité des relations II-23 et II-24 et en écrivant que a_{12} est une fonction de x , on aboutit à :

$$\text{II-25} \quad a_s(x) = \frac{\beta}{\beta^*(x)} \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right) \quad \text{pour } x \geq x_0$$

$$\text{Par ailleurs :} \quad a_s(x) = 0 \quad \text{pour } x < x_0$$

$a_s(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement selon Stovall.

Il reste maintenant à déterminer $\beta^*(x)$.

Stovall utilise tout d'abord la condition aux limites $a(1) = 1$ pour parvenir à :

$$\beta^*(x) = \beta(1 - x_0^3)$$

Plus généralement et toujours dans le cadre de sa 2^{ème} hypothèse, il suggère ensuite que β^* pourrait s'exprimer en fonction de x sous la forme :

II-26
$$\beta^*(x) = A(1 - x) + \beta(1 - x_0^3)$$

Le paramètre A est déterminé à partir de sa 3^{ème} hypothèse. D'après les relations II-2 et II-24, Stovall aboutit à la condition suivante à respecter :

II-27
$$\lim_{x \rightarrow 1} (1 - \beta)(1 - b(x)) = \lim_{x \rightarrow 1} (1 - a(x))$$

Pour $b(x)$, il fait appel au coefficient d'effet de paroi obtenu à partir du modèle de Caquot. Il s'ensuit, d'après les équations II-3, II-25, II-26 et II-27 que :

$$A = \beta \left((1 - x_0^3)(1 - \beta) - 3x_0^3 \right) \text{ et}$$

II-28
$$\beta^*(x) = \beta \left((1 - x_0^3)(1 - \beta) - 3x_0^3 \right) (1 - x) + \beta(1 - x_0^3)$$

Le coefficient d'effet de desserrement selon Stovall $a_s(x)$ s'exprime donc par :

II-29
$$a_s(x) = \frac{1}{(1 - x_0^3) \left(\left(1 - \beta - \frac{3x_0^3}{1 - x_0^3} \right) (1 - x) + 1 \right)} \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right) \quad \text{pour } x \geq x_0$$

$a_s(x) = 0 \quad \text{pour } x < x_0$

et $x_0 \approx 0,2$

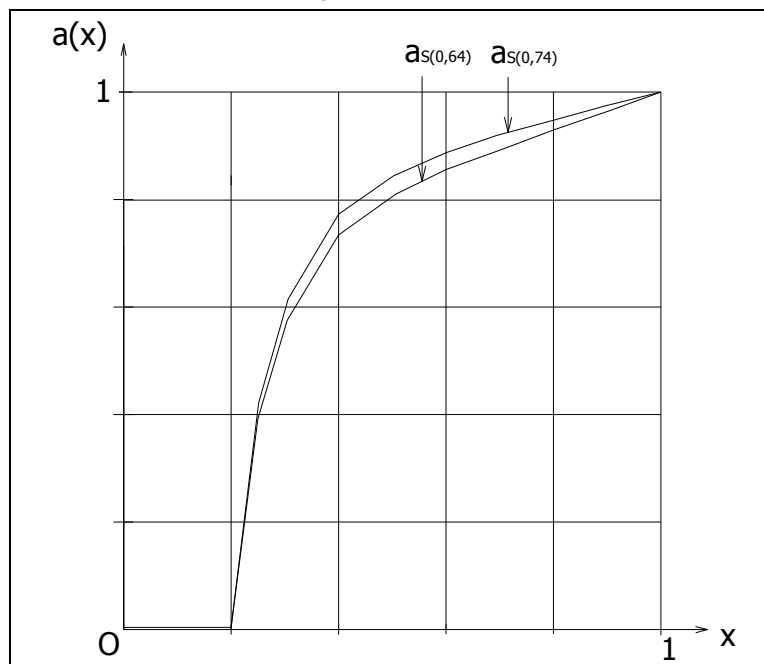


Figure II-15 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres selon la théorie de Stovall lorsque $x_0=0,2$ et $\beta_1 = \beta_2$.

Le modèle de Stovall respecte les conditions aux limites $\alpha(0) = 0$ et $\alpha(1) = 1$. Sa représentation graphique permet de remarquer une forte croissance du coefficient relatif à l'effet de desserrement dès que $x > x_0 = 0,2$. Dès cette limite dépassée et d'après cette théorie, cela signifierait que l'introduction de petites sphères insuffisamment fines pour se glisser dans les cavernes situées entre les gros éléments en contact se traduit par une augmentation relativement importante de la porosité du mélange ainsi constitué. En d'autres termes, on passerait d'une matrice de gros éléments parfaitement structurée à une matrice subissant des dilatations localement relativement élevées dès le franchissement de cette dimension critique. Cela provient de la méthode utilisée pour le calcul du volume partiel de petites particules ϕ_2 . Stovall choisit en effet de considérer que le supplément d'espace vide créé par l'insertion de ces dernières et égal à $\phi_1 \left(\frac{1}{\beta'_1} - \frac{1}{\beta_1} \right)$ est comblé dans une proportion inversement égale

à : $\frac{d_2^3 - (x_0 d_1)^3}{d_2^3} = 1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3$. Or, d'un point de vue purement mathématique, c'est ce

dernier terme qui, combiné avec l'évolution linéaire de $\beta^*(x)$, provoque la nette augmentation du coefficient d'effet de desserrement pour un rapport de tailles x immédiatement supérieur à $x_0 = 0,2$. Il est en effet possible de démontrer que :

$$\lim_{x \rightarrow x_0 = 0,2} \left(\frac{\partial \alpha_s(x)}{\partial x} \right) \approx \lim_{x \rightarrow x_0 = 0,2} \left(\frac{\beta}{\beta^*(x_0)} \frac{\partial}{\partial x} \left(1 - \left(\frac{x_0}{x} \right)^3 \right) \right) \approx \frac{\beta}{\beta^*(x_0)} \frac{3}{x_0} = \frac{\beta}{\beta^*(0,2)} \frac{3}{0,2} = \frac{15\beta}{\beta^*(0,2)}$$

$\frac{\beta}{\beta^*(0,2)}$ passant de 0,795 pour $\beta = 0,64$ à 0,848 pour $\beta = 0,74$ et

$\frac{15\beta}{\beta^*(0,2)}$ évoluant entre environ 11,9 pour $\beta = 0,64$ et 12,7 pour $\beta = 0,74$.

Sans présumer de la forme réelle de la courbe, il semble donc que la 2^{ème} hypothèse de Stovall ne soit pas adaptée.

2.2.2. Modèle de décompaction locale (1988).

Ce modèle a fait l'objet d'une présentation dans la thèse de de Larrard [DELA88].

Les 1^{ère} et 3^{ème} hypothèses de Stovall sont conservées mais le principe de linéarité pris en compte dans la 2^{ème} est abandonné. Il est remplacé par le concept de dilatation isotrope locale du squelette des gros grains autour d'un petit dans le cas où $x > x_0$.

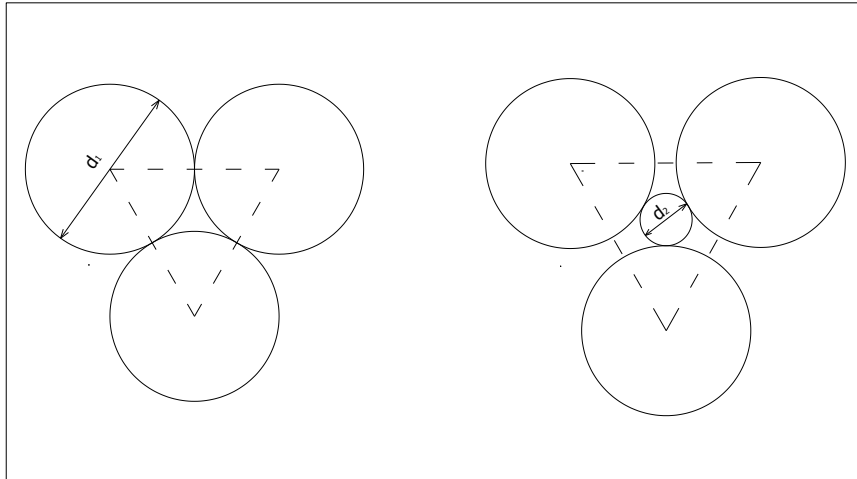


Figure II-16 : hypothèse de dilatation isotrope locale du squelette des gros grains autour d'un petit dans une cellule de référence tétraédrique.

Le volume partiel de gros grains dans une zone perturbée due à la présence d'une petite particule de taille insuffisamment faible pour se glisser dans la cavité disponible se calcule de la façon suivante :

$$\text{II-30} \quad \beta'_1 = \frac{\beta_1}{(1 + \nu(x - x_0))^3}$$

Le paramètre ν est utilisé pour tenir compte du fait que la dilatation dans la cellule de référence tétraédrique représentée en projection plane sur la figure II-16 est supérieure à celle obtenue en moyenne dans la zone perturbée. Concrètement, il permet d'ajuster le modèle de manière à respecter l'hypothèse n°3 de Stovall (se reporter au paragraphe 2.2.1).

L'introduction progressive de petits grains dans une matrice de gros engendre une décompaction de ces derniers jusqu'à l'obtention de la compacité maximale du mélange et au passage des gros dominants aux petits dominants : « l'eutectique » d'après l'expression de de Larrard.

A « l'eutectique », on peut écrire :

$$\phi_1^* = \beta'_1 = \beta_1 \left(1 + v(x - x_0)\right)^{-3}$$

La compacité du mélange se calcule, comme nous l'avons déjà exprimé dans le domaine des petits dominants, par l'intermédiaire de la formule :

$$\gamma_2 = \beta_2 + \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right) \phi_1$$

ou, dans le cas où $\beta_2 = \beta_1$: $\gamma_2 = \beta_2 + (1 - \beta_2)(1 - b_{21}) \phi_1$

A « l'eutectique », cette compacité s'écrit :

$$\gamma_2^* = \beta_2 + (1 - \beta_2)(1 - b_{21}) \phi_1^* = \beta_2 + \beta_1 (1 - \beta_2)(1 - b_{21}) \left(1 + v(x - x_0)\right)^{-3}$$

et $\phi_2^* = \gamma_2^* - \phi_1^* = \beta_2 + \beta_1 \left(1 + v(x - x_0)\right)^{-3} \left((1 - \beta_2)(1 - b_{21}) - 1\right)$

L'hypothèse n°3 posée par Stovall permet de déduire : $\lim_{x \rightarrow 1} \left(\frac{\phi_2^*}{\phi_1^*}\right) = 1$

ce qui rend possible la détermination du paramètre v en prenant $b_{21}(1) = 1$: $v = \frac{\sqrt[3]{2} - 1}{1 - x_0}$

Ensuite, le volume partiel des grosses particules dominantes est calculé, en tenant compte de la dilatation isotrope de leur squelette, comme une fonction linéaire du volume partiel des petites particules relativement à l'espace que ces dernières

occupent à l'eutectique : $\phi_1 = \left(1 - \frac{\phi_2}{\phi_2^*}\right) \beta_1 + \frac{\phi_2}{\phi_2^*} \beta'_1$

La compacité du mélange s'écrit alors :

$$\gamma_1 = \phi_1 + \phi_2 = \beta_1 + \left(1 - \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*}\right) \phi_2 \Rightarrow \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*}\right) \gamma_2}$$

On en déduit :

$$\text{II-31} \quad \alpha_{DL}(x) = \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*} \quad \text{pour } x \geq x_0$$

$$\alpha_{DL}(x) = 0 \quad \text{pour } x < x_0$$

avec :

$$\beta'_1 = \beta_1 \left(1 + v(x - x_0)\right)^{-3}$$

$$\phi_2^* = \beta_2 + \beta'_1 \left((1 - \beta_2)(1 - b_{21}) - 1\right)$$

$a_{DL}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement selon le modèle de décompaction locale.

De Larrard considère que la taille de la caverne x_0 peut varier entre 0 et d_1 . Nous représentons ici les courbes obtenues lorsque $x_0 = 0,2$ qui correspond à la valeur précédemment retenue par Stovall.

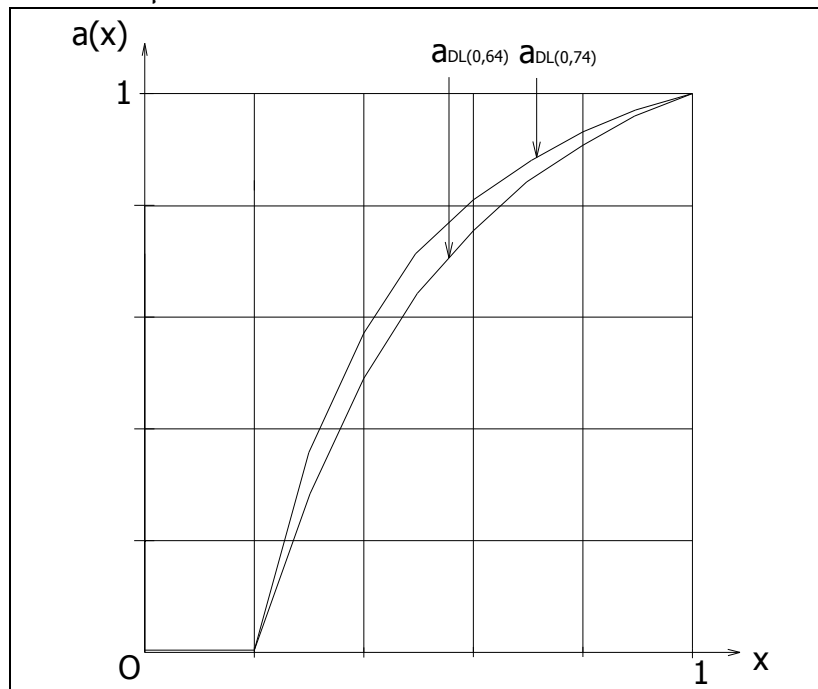


Figure II-17 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres selon le modèle de décompaction locale lorsque $x_0=0,2$ et $\beta_1 = \beta_2$.

Le modèle de décompaction locale respecte lui aussi les conditions aux limites $a(0) = 0$ et $a(1) = 1$. L'effet de desserrement est moins marqué avec cette théorie qu'avec la précédente. C'est donc la seule hypothèse qui n'est pas commune aux deux modèles qui fait la différence : il s'agit du concept de dilatation isotrope du squelette des gros grains autour d'un petit dans une cellule tétraédrique. La description mathématique qui en est faite est à la fois simple et intuitive. On la retrouve dans de nombreux domaines comme, par exemple, la thermique : le rapport des volumes final et initial d'un objet soumis à une augmentation de température

$T - T_0$ vaut $\left(1 + \alpha_L (T - T_0)\right)^3$ où α_L représente le coefficient de dilatation thermique linéaire. Ici, le rapport des compacités des gros grains en zone courante et en zone perturbée par l'effet de desserrement est égal à $\left(1 + v(x - x_0)\right)^3$, v permettant le passage de la dilatation dans le tétraèdre contenant la petite sphère à la dilatation moyenne dans la zone perturbée.

Deux interrogations viennent néanmoins à l'esprit :

- peut-on parler de dilatation isotrope autour de chaque petite particule sans se préoccuper de la position de chacune d'entre elles dans le mélange ?
- pourquoi ne pas avoir opté pour une autre géométrie de cellule ?

Concernant le premier point, l'hypothèse d'isotropie implique que les grains fins soient suffisamment espacés et qu'ils soient répartis indépendamment de la direction d'observation. Ce problème a déjà été abordé. Une des hypothèses forte du modèle d'empilement de de Larrard consiste justement à supposer la disjonction des zones perturbées en laissant la possibilité à l'opérateur de disposer chaque particule manuellement, à l'endroit où il le souhaite, permettant ainsi la création d'une structure isotrope.

Concernant le deuxième point, deux autres géométries de cellule simples sont évidemment envisageables : il s'agit de cellules cubique ou sphérique.

Dans le cas d'une cellule cubique, on aboutit en partie à la modélisation de Dewar (paragraphe 1.2.2.14). Selon celui-ci, l'indice des vides effectif des grosses particules dilatées e''_1 s'écrit (expression I-73) :

$$e''_1 = (1 + e_1)(1 + m x)^3 - 1$$

Exprimée en terme de compacité, cette relation devient :

$$\text{II-32} \quad \beta'_1 = \frac{\beta_1}{(1 + m x)^3}$$

m représentant le facteur d'espacement de Dewar. Multiplié par le diamètre des petites particules, il représente l'espacement entre les grosses. Il évolue entre 0 et l'infini, respectivement pour des empilements mono-modulaires constitués de grains de grosse et de petite tailles.

Si l'on compare le modèle de dilatation isotrope contenu dans le modèle de décompaction locale (relation II-30) avec le modèle de dilatation de Dewar (relation II-32), il est possible d'affirmer que :

- le second considère une taille de cavité nulle mais choisit de privilégier l'espacement réel entre grosses particules ;
- le premier considère une taille de cavité susceptible de varier, influençant un paramètre v permettant le passage du local (le tétraèdre) au moins

local (la zone perturbée). Placé dans le référentiel du second, v correspondrait à un facteur d'espacement lorsque la taille de la caverne tend vers 0 et uniquement dans ce cas-là.

Sur la figure suivante, on remarque que toutes les valeurs du rapport $\frac{\beta'_1}{\beta_1}$ issues du premier modèle et ce, quelle que soit la taille de la caverne, se situent entre les courbes correspondant à des facteurs d'espacement m de 0 (point A du diagramme d'indice des vides de Dewar) et 0,3 (point B du diagramme d'indice des vides de Dewar) issues du second modèle. Contrairement aux résultats fournis par ce dernier, elles convergent vers une valeur unique égale à $\frac{1}{2}$ lorsque x tend vers 1 en accord avec la 3^{ème} hypothèse posée par Stovall à l'eutectique. Seule une valeur de m égale à $\sqrt[3]{2} - 1 \approx 0,26$ permet de respecter cette condition aux limites. Elle engendre alors une convergence parfaite des deux modèles pour une taille de caverne nulle ($x_0 = 0$) quel que soit le rapport de tailles x .

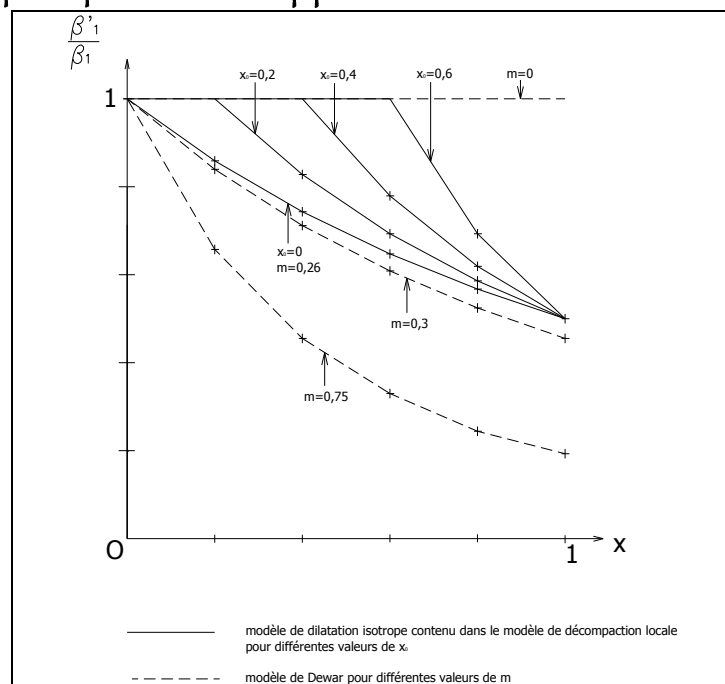


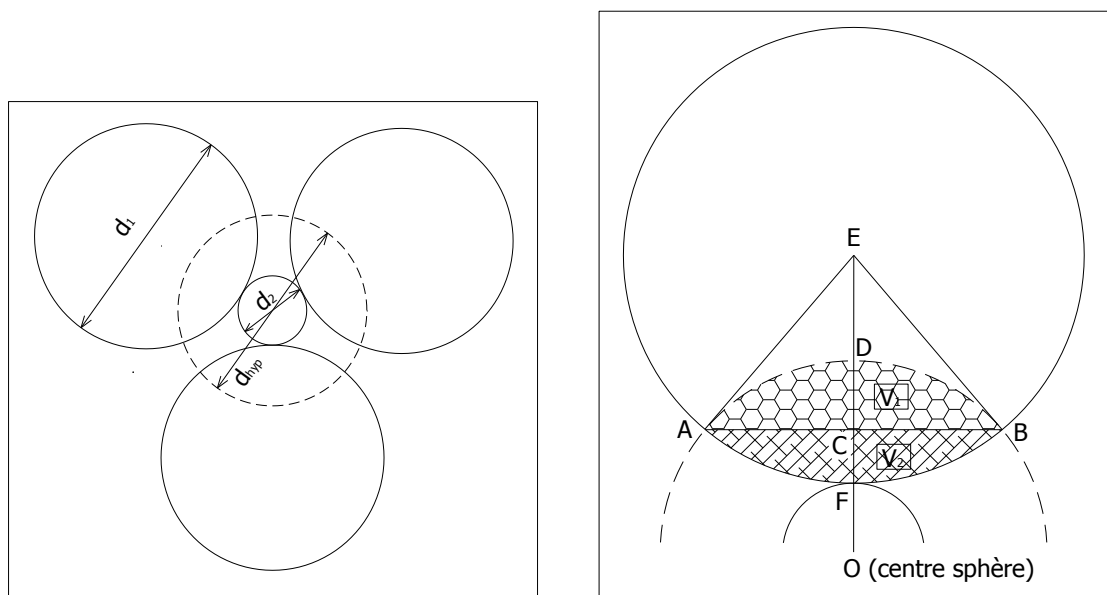
Figure II-18 : rapport des compacités des grosses particules dilatées et non dilatées en fonction du rapport de tailles x ; comparaison entre les valeurs fournies par le modèle de Dewar et par le modèle de dilatation isotrope contenu dans le modèle de décompaction locale.

Il faut rappeler que, pour Dewar, un facteur d'espacement de 0,3 correspond à la quantité juste suffisante de fines particules pour remplir les vides situés entre les grosses sans créer de dilatation majeure du squelette de ces dernières. Pour m compris entre 0 et 0,3 (droite AB du diagramme d'indice des vides de Dewar), les

éléments fins comblent partiellement l'espace disponible entre les gros, les premiers interférant seulement légèrement avec l'empilement des seconds.

Dans le cas d'une cellule sphérique, on pense immédiatement aux travaux de Suzuki et Oshima. Ils ont été présentés dans le paragraphe 1.2.2.7 dans le cadre de la prise en compte des interactions granulaires dans le calcul de la compacité des empilements et déjà été utilisés pour la modélisation de l'effet de paroi (paragraphe 2.1.4.).

Intéressons-nous à la compacité β'_1 des gros grains compris partiellement dans une sphère de diamètre $d_{hyp} = d_2 \sqrt{1 + \frac{2}{x}}$ dont le centre est identique à celui d'une sphère de diamètre d_2 modélisant un petit grain autour duquel se produit l'effet de desserrement.



Le contour de la sphère de diamètre d_{hyp} passe par les points de contact hypothétiques des sphères de diamètre d_1 situées contre une petite, si elles étaient suffisamment rapprochées les unes des autres.

$$\text{II-33} \quad \beta'_1 = \frac{N_{21} V_{12}}{\frac{\pi}{6} d_{hyp}^3} = \frac{6 N_{21} (V_1 + V_2)}{\pi d_2^3 \left(1 + \frac{2}{x}\right)^{\frac{3}{2}}}$$

N_{21} représente le nombre de contacts de la particule de diamètre d_2 avec des particules de diamètre d_1 :

$$\text{II-34} \quad N_{21} = \frac{2\omega}{1 - \frac{2+x}{(1+x)\sqrt{1+\frac{2}{x}}}}$$

V_1 et V_2 sont représentés sur la figure II-19.

V_2 représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et EF. Pour le calculer, on démontre tout d'abord

$$\text{que } CF = \frac{d_2}{2} \frac{1}{1+x} \text{ et } EF = \frac{d_2}{2x} \text{ pour obtenir : } V_2 = \frac{\pi d_2^3}{24} \frac{3+2x}{x(1+x)^3}$$

V_1 représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et OD. Pour le calculer, on démontre que

$$CD = \frac{d_2}{2} \left[\sqrt{1+\frac{2}{x}} - \frac{2+x}{1+x} \right] \text{ et } OD = \frac{d_2}{2} \sqrt{1+\frac{2}{x}} \text{ pour obtenir :}$$

$$V_1 = \frac{\pi d_2^3}{24} \left(\sqrt{1+\frac{2}{x}} - \frac{2+x}{1+x} \right)^2 \left(2\sqrt{1+\frac{2}{x}} + \frac{2+x}{1+x} \right)$$

Finalement, β'_1 peut s'exprimer par :

$$\text{II-35} \quad \beta'_1 = \frac{\omega}{2 \left(1 + \frac{2}{x}\right) \left(\sqrt{1+\frac{2}{x}} - \frac{2+x}{1+x} \right)} \left\{ \frac{3+2x}{x(1+x)^3} + \left(\sqrt{1+\frac{2}{x}} - \frac{2+x}{1+x} \right)^2 \left(2\sqrt{1+\frac{2}{x}} + \frac{2+x}{1+x} \right) \right\}$$

Rappelons que ω est directement lié au nombre de coordination N_c d'un cas mono-

modulaire ($x=1$) (formule I-40) : $\omega = \frac{N_c}{4} (2 - \sqrt{3})$.

Dans le cas d'un empilement aléatoire, une valeur égale à $N_c = 9$ est privilégiée pour

une porosité de 0,36. D'après I-40, on en déduit : $\omega = \frac{9}{4} (2 - \sqrt{3})$

Dans les milieux denses, nous considérons :

$$N_c = 12 \text{ et } \omega = 3 (2 - \sqrt{3})$$

Pour déterminer le rapport $\frac{\beta'_1}{\beta_1}$, il nous faut maintenant calculer la compacité locale β_1 des gros grains partiellement contenus dans la cellule de référence de Suzuki et Oshima en l'absence de desserrement, c'est-à-dire lorsque $x = x_0 = \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{\sqrt{2}} \approx 0,224$.

Nous obtenons :

II-36
$$\beta_1 = \beta'_1(x_0) \approx 0,862 \omega$$

Nous en déduisons :

II-37
$$\frac{\beta'_1}{\beta_1} \approx \frac{1}{1,724 \left(1 + \frac{2}{x}\right) \left(\sqrt{1 + \frac{2}{x}} - \frac{2+x}{1+x}\right) \left\{ \frac{3+2x}{x(1+x)^3} + \left(\sqrt{1 + \frac{2}{x}} - \frac{2+x}{1+x}\right)^2 \left(2\sqrt{1 + \frac{2}{x}} + \frac{2+x}{1+x}\right) \right\}}$$

On remarque que les rapports $\frac{\beta'_1}{\beta_1}$ obtenus à partir de la cellule de référence sphérique de Suzuki et Oshima se rapprochent de ceux issus de la cellule cubique de Dewar lorsque le facteur d'espacement m de ce dernier vaut 0,1. L'interférence qui en résulte est donc plutôt légère selon la classification du chercheur britannique.

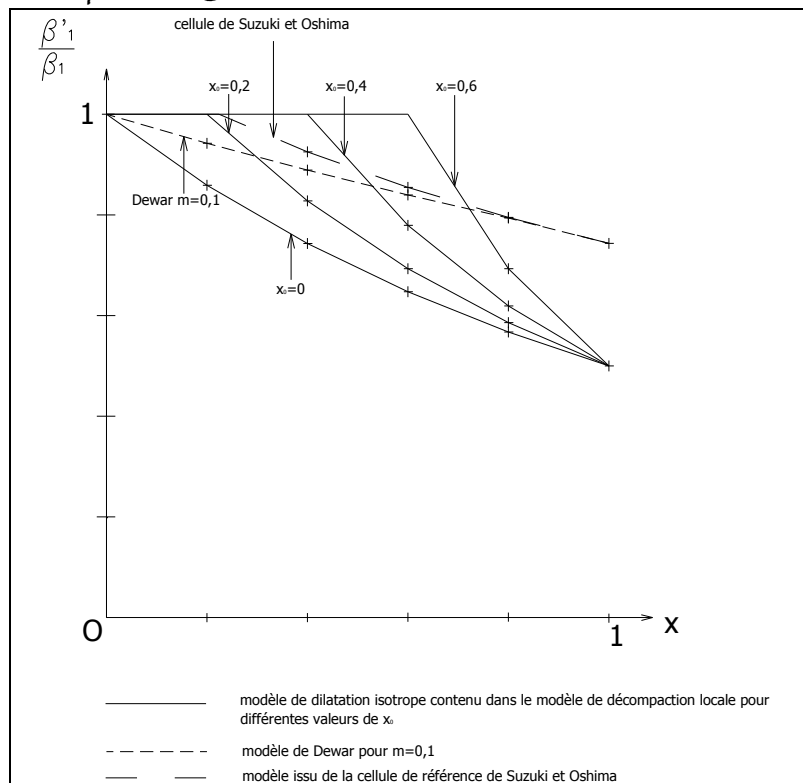


Figure II-20 : rapport des compacités des grosses particules dilatées et non dilatées en fonction du rapport de tailles x ; comparaison entre les valeurs fournies par le modèle issu de la cellule de référence de Suzuki et Oshima, par le modèle de Dewar avec $m = 0,1$ et par le modèle de dilatation isotrope contenu dans le modèle de décompaction locale.

La forme géométrique de la cellule de référence permettant de calculer la dilatation isotrope des gros grains subissant l'effet de desserrement présente une influence plus ou moins considérable selon les cas. Entre Dewar et le modèle de décompaction locale, les écarts entre les résultats obtenus pour $\frac{\beta_1'}{\beta_1}$ résident, avant tout, dans les hypothèses de constitution de chacune des théories. L'utilisation de la cellule sphérique de Suzuki et Oshima donne des valeurs :

- assez proches de celles de Dewar pour un facteur d'espacement bien déterminé ;
- plus importantes que celles du modèle de décompaction locale pour une taille de caverne commune égale à 0,2.

2.2.3. Modèle de Yu et Standish (1987).

Le modèle de Yu et Standish a fait l'objet d'une présentation dans le paragraphe 1.2.2.10 et a également été utilisé pour l'effet de paroi dans le paragraphe 2.1.5. Il se fonde sur les équations en volume apparent de Westman et Hugill et les expressions de Ridgway et Tarbuck.

L'association de la 1^{ère} expression de I-57 et de I-64 permet d'obtenir dans la cadre des compacités virtuelles et lorsque $\beta_1 = \beta_2$:

$$\text{II-38} \quad \alpha_{12} = 1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_{12}}\right) \frac{1}{\gamma_{12}}$$

D'après les équations I-37 de Ridgway et Tarbuck exprimées en compacités virtuelles, il est possible d'écrire :

$$\text{II-39} \quad \beta_{12} = \beta_1 + \beta_1 (1 - \beta_1) (1 - 2,35 x + 1,35 x^2) \quad \text{si } x \leq 0,741;$$

$$\beta_{12} = \beta_1 \quad \text{si } x > 0,741;$$

$$\gamma_{12} = 1 - \frac{1 - x^2}{2 - \beta_1}.$$

Le coefficient d'effet de desserrement de Yu et Standish issu des travaux de Ridgway et Tarbuck s'écrit donc :

$$\text{II-40} \quad \alpha_{ys}(x) = 1 - \left(1 - \frac{1}{1 + (1 - \beta_1)(1 - 2,35 x + 1,35 x^2)}\right) \frac{2 - \beta_1}{1 - \beta_1 + x^2} \quad \text{si } x \leq 0,741;$$

$$\alpha_{ys}(x) = 1 \quad \text{si } x > 0,741.$$

$\alpha_{ys}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement d'après la théorie de Yu et Standish et les travaux de Ridgway et Tarbuck.

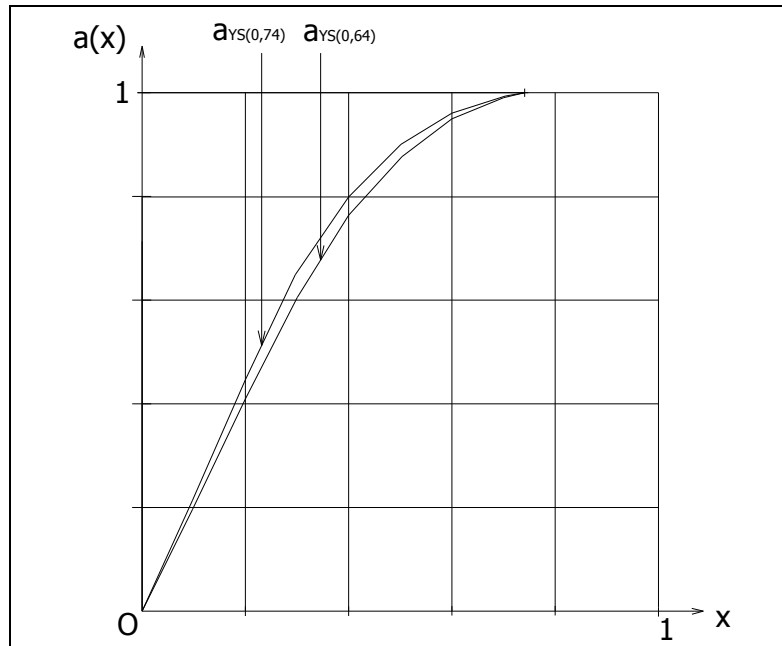


Figure II-21 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d après la théorie de Yu et Standish et les travaux de Ridgway et Tarbuck lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

Le même genre d'observations que celles effectuées lors de la modélisation de l'effet de paroi par les mêmes auteurs peuvent être formulées :

- les conditions aux limites $a(0) = 0$ et $a(1) = 1$ sont bien respectées ;
- les valeurs obtenues dépendent peu de la compacité en pleine masse de la classe dominante ;
- pour les faibles contrastes de tailles ($x > 0,741$) et selon les travaux de Ridgway et Tarbuck, le coefficient d'effet de desserrement vaut 1 : mélanger les deux classes de grains n'apporte aucun bénéfice en terme de compacité par rapport à un empilement mono-modulaire constitué de grains de grosse taille.

Néanmoins, d'après la théorie de Yu et Standish dans le cas où $\beta_1 = \beta_2$ et pour $x \leq 0,741$, l'effet de desserrement est légèrement plus important que l'effet de paroi pour n'importe quel rapport de tailles x . La démonstration est relativement simple.

En effet, pour que $a_{ys}(x)$ soit supérieur à $b_{ys}(x)$, nous devons vérifier que :

$$1 - \left(1 - \frac{\beta}{\beta_{12}}\right) \frac{1}{\gamma_{12}} \geq 1 - \left(1 - \frac{\beta}{\beta_{21}}\right) \frac{1}{(1-\beta)\gamma_{21}}$$

avec : $\beta_{12} = \beta_{21}$; $\gamma_{12} = 1 - \frac{1-x^2}{2-\beta}$ et $\gamma_{21} = \frac{1-x^2}{2-\beta}$.

On en déduit $\gamma_{12} \geq (1-\beta)\gamma_{21}$ ce qui conduit à : $1 - \frac{1-x^2}{2-\beta} \geq (1-\beta) \frac{1-x^2}{2-\beta}$

Pour que cette relation soit vérifiée, il faut que : $x^2 \geq 0$. Puisque c'est toujours le cas, l'inégalité $a_{ys}(x) \geq b_{ys}(x)$ est bien démontrée.

2.2.4. Modèle de Goltermann, Johansen, Palbol (1997).

Le modèle de Goltermann, Johansen, Palbol (1997) reprend et modifie celui de Toufar, Klose et Born (1977) (paragraphe 1.2.2.8). Dans le domaine des gros dominants, la compacité virtuelle du mélange binaire s'écrit, dans le cas où $\beta_1 = \beta_2$ (d'après la formule I-46) :

$$\gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left[\frac{(1-x)}{(1+x)} \frac{0,3881}{0,4753} \right] \gamma_2}$$

On en déduit aisément que :

$$\text{II-41} \quad a_{GJP}(x) = 1 - 0,8165 \frac{1-x}{1+x}$$

$a_{GJP}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement d'après la modification de Goltermann, Johansen, Palbol apportée à la théorie de Toufar, Klose et Born.

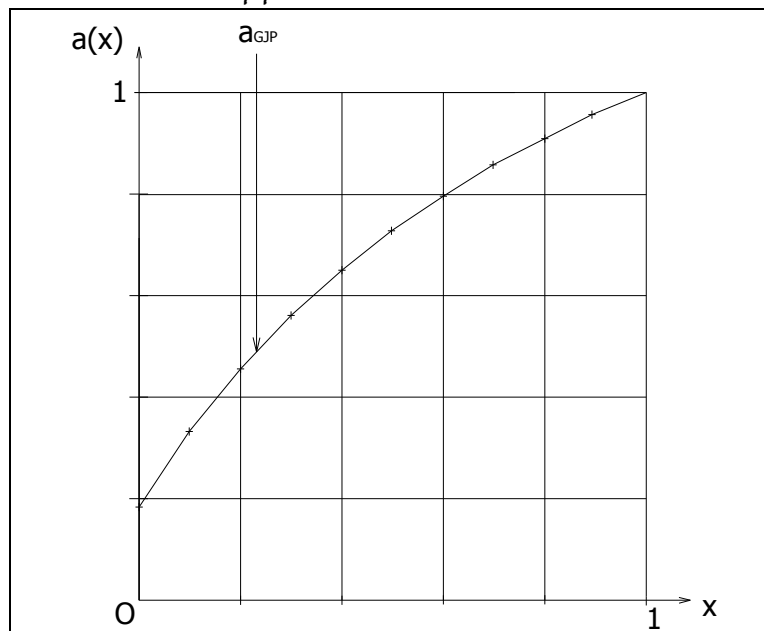


Figure II-22 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après la modification de Goltermann, Johansen, Palbol apportée à la théorie de Toufar, Klose et Born lorsque $\beta_1 = \beta_2$.

Le modèle de Goltermann, Johansen et Palbol présente l'inconvénient majeur de ne pas respecter la condition aux limites $a(0) = 0$. Cela signifierait qu'un effet de

deserrement se produit y compris lorsque le contraste de tailles est très important. En d'autres termes, les grains, même très fins, ne parviendraient pas à se glisser complètement dans les interstices disponibles. Deux raisons peuvent être fournies. La première serait qu'ils ne sont pas suffisamment mobiles : le problème résulterait alors d'une vibration manquant d'efficacité. Cette explication ne cadrerait pas avec l'hypothèse d'empilement virtuel de de Larrard où chaque particule est censée pouvoir être positionnée à son emplacement idéal. La seconde correspondrait à une fraction d'éléments fins trop importante pour que le squelette granulaire soit constitué uniquement de grosses particules. Cette justification est cependant incompatible avec le cadre posé par Goltermann, Johansen et Palbol eux-mêmes qui suggèrent de modifier l'expression de Toufar, Klose et Born dans le cas où (paragraphe 1.2.2.8) :

$$z = \frac{\begin{pmatrix} \gamma_2 \\ \gamma_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}}{1 - \beta_1} < 0,4753$$

Lorsque $\beta_1 = \beta_2 = 0,74$, cela correspond à un titre volumique de gros grains γ_1 supérieur à 89% qui démontre bien leur situation dominante.

2.2.5. Modèles empiriques.

Nous allons retrouver les mêmes auteurs que ceux ayant proposé des modèles empiriques pour l'effet de paroi.

De Larrard [DELA88] choisit, pour lisser les 14 points expérimentaux dont il dispose pour quantifier l'effet de deserrement dans son modèle linéaire de compacité présenté dans sa thèse de 1988, une fonction un peu moins simple que celle correspondant à l'effet de paroi. La fonction d'interaction f_{12} qui y figure est liée au rapport de tailles x grâce à l'expression :

$$f(x) = (1-x)^{3,1} + 3,1x(1-x)^{2,9}$$

Compte tenu de I-64 et avec $\beta_1 = \beta_2$, il vient :

$$\text{II-42} \quad a_{L88}(x) = 1 - (1-x)^{3,1} - 3,1x(1-x)^{2,9}$$

$a_{L88}(x)$ représente le coefficient d'effet de deserrement d'après de Larrard [DELA88].

Il respecte les 4 conditions aux limites suivantes : $a(0) = 0$, $a(1) = 1$, $\left. \frac{\partial a}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$ et

$\left. \frac{\partial a}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$. La courbe possède donc deux tangentes horizontales, en $x = 0$ et $x = 1$.

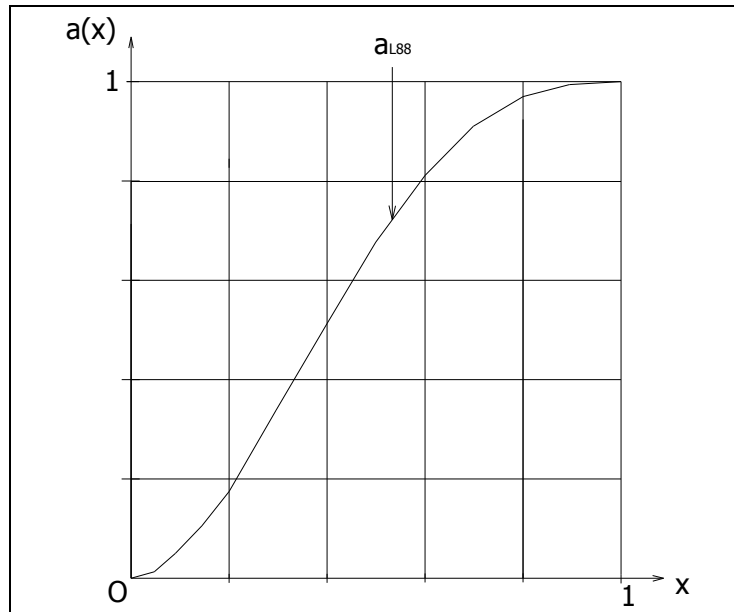


Figure II-23 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après de Larrard [DELA88].

Yu, Zou et Standish [YUZ096] modifient légèrement, en 1996, l'expression précédente tout en conservant les 1^{ère}, 2^{ème} et 4^{ème} conditions aux limites précédentes :

$$f(x) = (1-x)^{3,33} + 2,81 x (1-x)^{2,77} \text{ soit :}$$

$$\text{II-43} \quad a_{\text{YZS}}(x) = 1 - (1-x)^{3,33} - 2,81 x (1-x)^{2,77}$$

$a_{\text{YZS}}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement d'après Yu, Zou et Standish [YUZ096]. L'effet de desserrement qui en est déduit est légèrement accentué par rapport à celui de de Larrard.

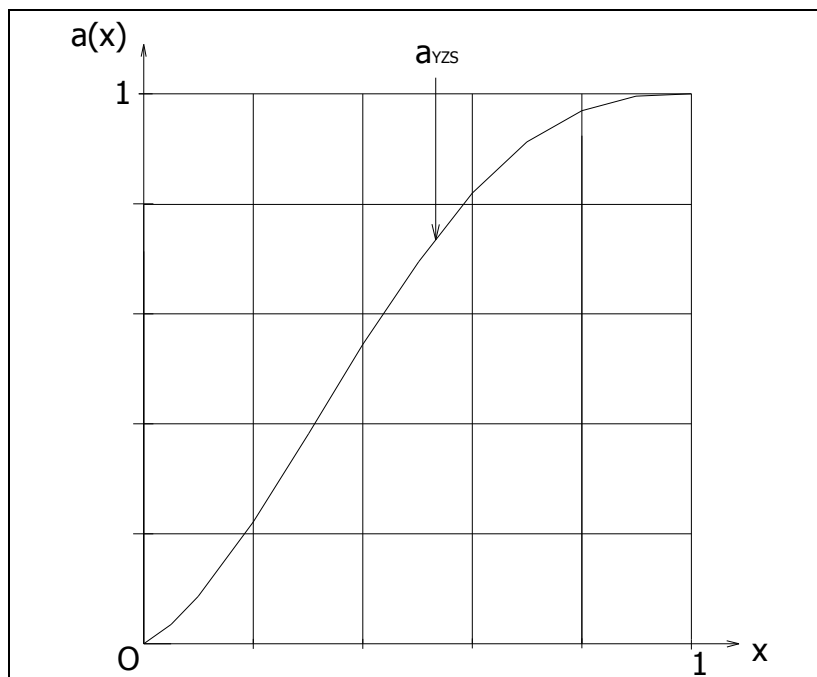


Figure II-24 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après Yu, Zou et Standish [YUZ096].

Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94], pour leur part, exploitent, en 1994, 14 points expérimentaux obtenus sur des granulats roulés et concassés anguleux pour étalonner le modèle de suspension solide qu'ils ont mis au point. Tout comme pour l'effet de paroi (où le modèle de Caquot est sélectionné), ils choisissent une expression simple mais considèrent, à l'instar de Yu et Standish en 1987, que l'effet de desserrement est plus prononcé que l'autre type d'interaction granulaire:

$$\text{II-44} \quad a_{\text{SLA}}(x) = \sqrt{x} = x^{0,5}$$

$a_{\text{SLA}}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement d'après Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94]. Seules deux conditions aux limites sont vérifiées : $a(0) = 0$, $a(1) = 1$.

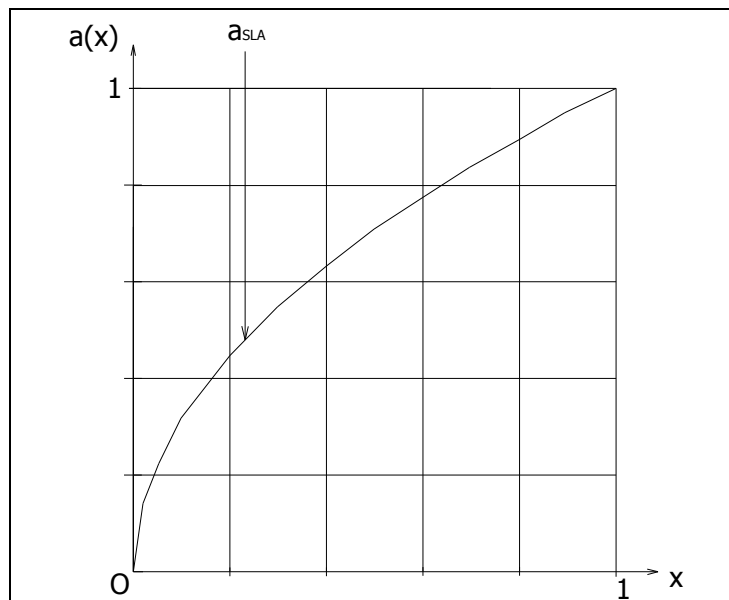


Figure II-25 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94].

Lecomte et Zennir [LECO97], quant à eux, proposent une expression établie à partir de 25 points expérimentaux dont 11 proviennent de mesures effectuées sur des calcaires tendres de Moselle, avec les deux conditions aux limites précédemment énoncées :

$$\text{II-45} \quad a_{\text{LZ}}(x) = x^{0,414}$$

$a_{\text{LZ}}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement d'après Lecomte et Zennir [LECO97].

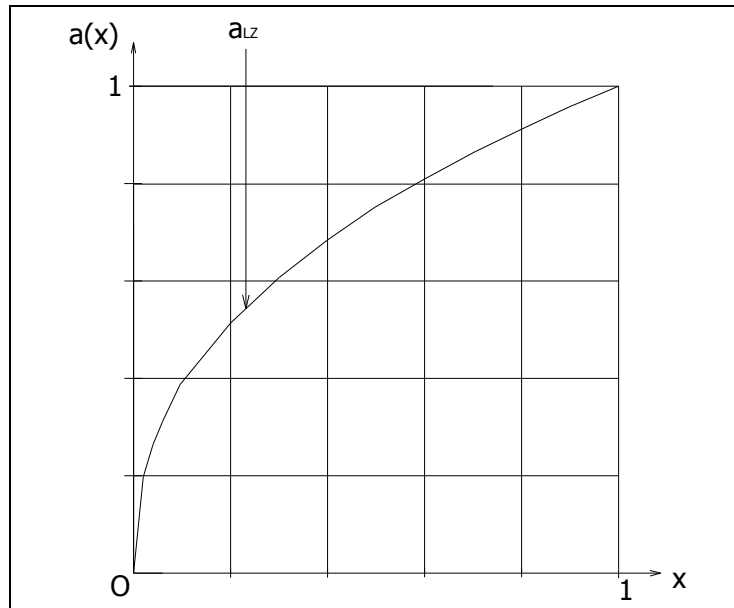


Figure II-26 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après Lecomte et Zennir [LECO97].

La rugosité des calcaires tendres de Moselle engendrant des réactions légèrement plus fortes vers les forts contrastes de taille, le lissage proposé par Sedran, de Larrard et Angot a été légèrement modifié par Lecomte et Zennir (de $x^{0,5}$ à $x^{0,414}$) afin que leur modèle prenne mieux en compte ce phénomène.

De Larrard [DELA00], enfin, en 2000, dans son ouvrage de référence intitulé « structures granulaires et formulation des bétons » met en avant une nouvelle expression empirique censée reprendre les enseignements des formules précédentes. Par rapport aux deux modèles précédents, il intègre une condition aux limites supplémentaire (malgré tout présente dans son modèle de 1988), déjà énoncée pour l'effet de paroi et fournie par l'équation I-70 : $\left. \frac{\partial a}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$.

Il propose finalement pour l'effet de desserrement :

$$\text{II-46} \quad a_{L00}(x) = \sqrt{1 - (1-x)^{1,02}}$$

$a_{L00}(x)$ représente le coefficient d'effet de desserrement d'après de Larrard [DELA00].

D'un point de vue mathématique, cette expression est finalement très proche de

$a_{SLA}(x) = \sqrt{x} = \sqrt{1 - (1-x)^1}$. L'astuce consistant à utiliser une puissance de 1,02 en lieu

et place de 1 permet simplement de respecter $\left. \frac{\partial a}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$.

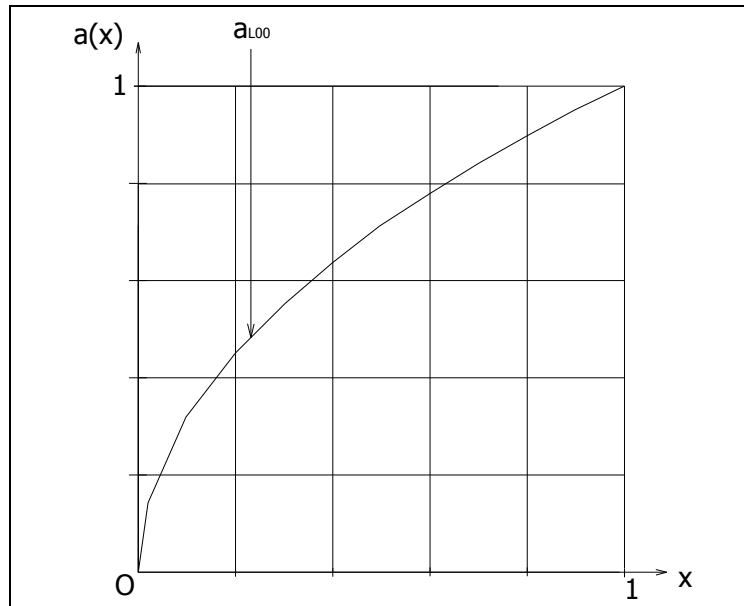


Figure II-27 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après de Larrard [DELA00].

Notons qu'il existe une différence fondamentale entre les deux premiers modèles empiriques présentés et les trois derniers, liée à leur dérivée en $x = 0$:

$$\left. \frac{\partial a_{L88}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \text{ et } \left. \frac{\partial a_{YZS}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0,52 \text{ alors que } \left. \frac{\partial a_{SLA}}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial a_{LZ}}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial a_{L00}}{\partial x} \right|_{x=0} = \infty$$

L'évolution du coefficient d'effet de desserrement pour un rapport de tailles immédiatement supérieur à 0 est donc très contrastée et laisse apparaître l'indécision des chercheurs dans cette zone : est-elle pratiquement imperceptible ou, au contraire, se manifeste-t-elle de façon très sensible ?

De Larrard, en 1988, choisit la 1^{ère} hypothèse car il s'inspire des modèles théoriques de Stovall et de décompaction locale qui présentent un palier horizontal avec une ordonnée nulle tant que la taille des petits grains leur permet de se nicher dans les interstices disponibles, avant de subir un accroissement plus ou moins marqué dès que la dimension des cavernes ne l'autorise plus.

Les auteurs des trois derniers modèles, au contraire, privilégient la 2^{ème} hypothèse, se basant avant tout sur les données expérimentales et estimant que l'effet de desserrement n'est pas lié à une taille de cavité particulière. Celui-ci se manifesterait dès que les classes granulaires ne sont pas nettement « éloignées » en dimension l'une de l'autre et avec plus d'intensité que l'effet de paroi. Par exemple, un ciment et un sable de tailles respectives moyennes $15 \mu\text{m}$ et 1mm engendreraient un coefficient d'effet de desserrement de 12%.

2.2.6. Résumé et conclusions.

La limite inférieure du coefficient d'effet de desserrement est obtenue avec le modèle théorique de décompaction locale (a_{DL}) pour une compacité en pleine masse des gros grains β_1 égale à 0,64 et pour $x_0 \approx 0,2$.

Le choix de la taille de caverne x_0 est en fait déterminant : une dimension plus importante aurait conduit à des valeurs encore plus basses de $a(x)$, une dimension plus faible, au contraire, aurait relevé la borne inférieure.

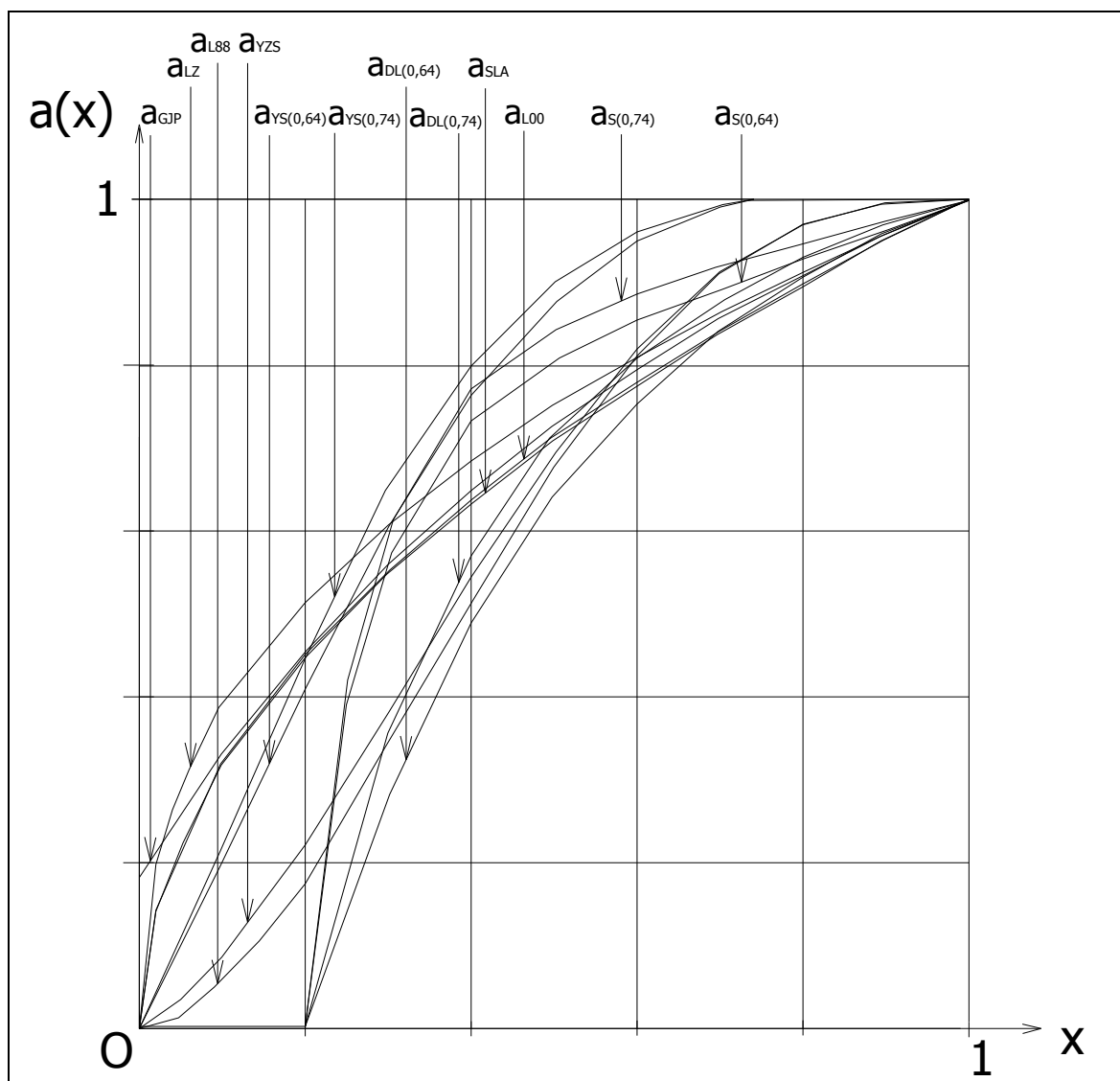


Figure II-28 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres d'après les différents modèles recensés.

La valeur sélectionnée pour x_0 joue également un rôle primordial pour le modèle « linéaire » de Stovall (a_s) : ainsi, l'adoption de $x_0 = 0$ en lieu et place de $x_0 = 0,2$ aurait engendré des résultats constituant la limite supérieure du coefficient d'effet de desserrement pour un large éventail de rapports de tailles.

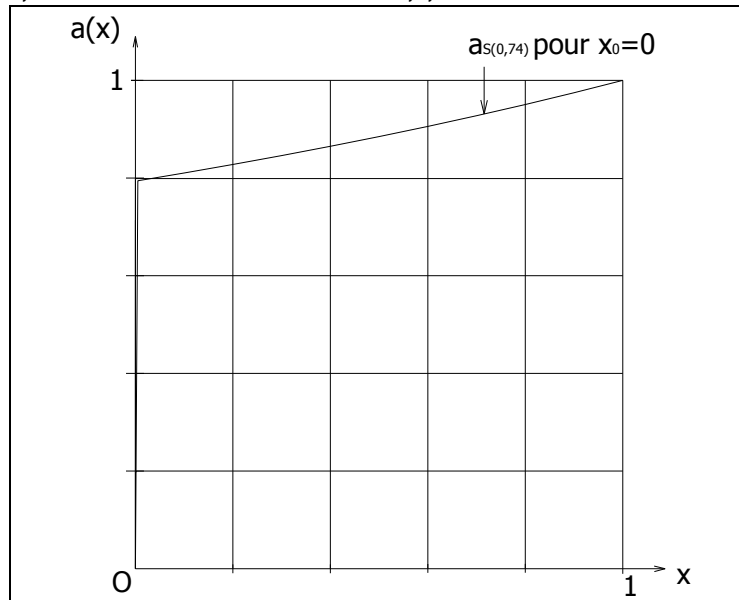


Figure II-29 : coefficient d'effet de desserrement $a(x)$ en fonction du rapport des diamètres selon la théorie de Stovall lorsque $x_0=0$ et $\beta_1 = \beta_2$.

Si l'on ne considère pas ce cas, la limite supérieure est en réalité fournie par Goltermann, Johansen, Palbol (a_{GJP}) pour les rapports de tailles très proches de 0 (x compris entre 0 et 0,03) et par les modèles empirique de Lecomte et Zennir (a_{LZ}) pour les forts contrastes de tailles (x compris entre 0,03 et 0,26) et semi-empirique de Yu et Standish de 1987 (a_{YS}) pour les plus faibles (x compris entre 0,26 et 1). Elle est néanmoins à considérer avec prudence en raison des constatations suivantes.

Dans la 1^{ère} situation, le modèle a_{GJP} ne respecte pas la condition aux limites élémentaire $a(0) = 0$.

Dans la 2^{ème} situation, les résultats obtenus par Lecomte et Zennir sont vraiment spécifiques à un type de granulat bien déterminé, des calcaires lorrains rugueux, qui ont développé une réaction granulaire importante.

Dans la 3^{ème} situation, les valeurs fournies sont sujettes à caution pour deux raisons majeures :

- les expressions de Ridgway et Tarbuck, utilisées par Yu et Standish en 1987, sont imprécises dans la fourchette de rapport de tailles où, justement,

la courbe obtenue constitue la limite supérieure du coefficient d'effet de desserrement. Reprenons les expressions I-36, II-38 et II-39 :

$$a_{ys}(x) = 1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_{12}}\right) \frac{1}{y_{12}} \quad \text{avec} \quad \beta_{12} = \beta_1 + \beta_1 (1 - \beta_1) \frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)}$$

$$\frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)} = 1 - 2,35x + 1,35x^2 \quad \text{si } x \leq 0,741$$

$$\frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)} = 0 \quad \text{si } x > 0,741$$

$$y_{12} = 1 - \frac{y_{1\max}(x)}{y_{1\max}(0)} \times y_{1\max}(0)$$

$$\frac{y_{1\max}(x)}{y_{1\max}(0)} = 1 - x^2 \quad \text{et} \quad y_{1\max}(0) = \frac{1}{2 - \beta_1}$$

L'expression $\frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)}$ est estimée par Ridgway et Tarbuck grâce à une

régression quadratique en fonction du rapport de tailles x . Mais la grande majorité des points expérimentaux concerne des valeurs $x < 0,5$. Très peu se trouvent dans l'autre intervalle dans lequel se situe pourtant l'abscisse $x = 0,741$ (déterminée par l'outil statistique discutable préalablement cité) à partir de laquelle l'accroissement de compacité du mélange binaire par rapport à un empilement mono-modulaire devient nul : $\frac{\Delta c(x)}{\Delta c(0)} = 0$ et le

coefficient de desserrement égal à 1. La même remarque concernant la méthode de détermination du rapport $\frac{y_{1\max}(x)}{y_{1\max}(0)} = 1 - x^2$ qui intervient dans le

calcul de y_{12} , et donc dans celui de $a_{ys}(x)$, peut être formulée.

- les expériences ont été conduites sur des empilements plutôt lâches (compacité du milieu mono-modulaire comprise entre 0,60 et 0,64).

Les modèles fournissant des résultats intermédiaires entre les bornes supérieure et inférieure sont empiriques. Ils peuvent être classés en deux catégories :

- les modèles influencés par les théories (de Stovall et de décompaction locale) prenant en compte une taille de caverne avec un coefficient de desserrement faible ou nul pour les très forts contrastes de tailles. Ce sont les modèles de de Larrard de 1988 (a_{L88}) et de Yu, Zou et Standish de 1996 (a_{YZS}).

- les modèles privilégiant, au contraire, une forte croissance du coefficient de desserrement dès que le rapport de tailles commence à s'éloigner de manière infime de 0. Ils respectent la condition aux limites : $\left. \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=0} = \infty$. Il s'agit du modèle de Sedran, de Larrard, Angot de 1994 (\mathbf{a}_{SLA}) et de celui de de Larrard de 2000 (\mathbf{a}_{L00}) qui constitue la version la plus aboutie de tous ceux présentés. Ils sont en réalité pratiquement confondus à une différence près : leur pente en $\mathbf{x} = 1$: $\left. \frac{\partial \mathbf{a}_{SLA}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=1} = 0,5$ pour le premier et $\left. \frac{\partial \mathbf{a}_{L00}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=1} = 0$ pour le second, qui utilise un artifice mathématique de manière à respecter cette condition aux limites spécifique au modèle d'empilement compressible (MEC).

Nous avons donc pris le parti d'effectuer une évaluation des différents modèles de coefficient de desserrement par rapport :

- à leur pente en $\mathbf{x} = 1$ en admettant les valeurs comprises dans la fourchette délimitée par les 2 précédents modèles. Le second constituant une référence puisqu'il figure dans le MEC, il serait dommage de considérer que le premier ne remplit pas les critères d'évaluation en raison de sa pente en $\mathbf{x} = 1$ alors qu'ils conduisent quasiment aux mêmes résultats.
- aux deux conditions aux limites incontournables $\mathbf{a}(0) = 0$ et $\mathbf{a}(1) = 1$.

	$\mathbf{a}(0) = 0$	$\mathbf{a}(1) = 1$	$0 \leq \left. \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} \right _{\mathbf{x}=1} \leq 0,5$
\mathbf{a}_S	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{DL}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{YS}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u> mais point de brisure sur la courbe	<u>OUI</u> mais point de brisure sur la courbe
\mathbf{a}_{GJP}	non	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{L88}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{YZS}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{SLA}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{LZ}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>
\mathbf{a}_{L00}	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>	<u>OUI</u>

Tableau II-3 : situation des différents modèles par rapport à 3 conditions liées au MEC.

Les modèles testés respectent globalement les critères d'évaluation proposés.

Seulement, les théories permettant de décrire l'effet de desserrement sont peu nombreuses (seulement deux : α_S et α_{DL}) et non pleinement satisfaisantes pour les raisons que nous allons développer. Elles ont été élaborées à l'époque de la mise au point de la 1^{ère} génération de modèles d'empilement par l'équipe de de Larrard qui distingue déjà les cas des « gros » dominants et des « petits » dominants.

Elles présentent deux hypothèses de constitution en commun :

- dans le cadre de l'existence de cavernes dont la dimension peut être considérée comme un paramètre, il existe un diamètre critique de petit grain lui permettant de se nicher dans l'interstice disponible entre 4 plus gros sans les écarter;
- lorsque les diamètres des petites et grosses particules tendent l'un vers l'autre, il ne doit pas y avoir de discontinuité dans les valeurs de compacités calculées dans le cadre des petits dominants et dans le cadre des gros dominants quand le titre volumique des deux classes granulaires vaut 0,50.

Les deux théories divergent ensuite dans leur dernière hypothèse. Dans le cas où un petit grain présente une dimension trop importante pour pouvoir s'insérer dans une caverne du squelette des gros, celui-ci se dilate. Le modèle de Stovall (α_S) considère que le surcroît d'espace vide qui en résulte est rempli par les éléments fins dans une proportion variant linéairement en fonction du rapport de tailles x . Le modèle de décompaction locale (α_{DL}) considère que la dilatation précédemment citée s'effectue localement de façon isotrope dans une cellule de référence tétraédrique. Plus globalement, elle est transposée dans la zone perturbée grâce à l'introduction d'un paramètre v .

La seconde théorie est la plus aboutie. Il suffit en effet d'observer, sur la figure II-29, l'évolution aberrante du coefficient d'effet de desserrement, au voisinage de 0, issu de la première théorie pour une taille de caverne nulle.

Le modèle de décompaction locale semble donc constituer une bonne base de départ. Ses atouts sont les suivants :

- il fait la jonction entre les gros dominants et les petits dominants grâce à un calcul des volumes partiels des 2 classes granulaires dans un volume unité de mélange à l'eutectique.
- de ce fait, le coefficient d'effet de desserrement est lié à celui d'effet de paroi.

Seulement, à l'eutectique, la méthode de détermination du volume partiel des gros grains, dont le squelette est dilaté par la présence des petits, amène trois questions:

- existe-t-il réellement un rapport de tailles critique x_0 ?
- le paramètre v est-il pertinent ou arbitrairement inséré pour respecter une des conditions aux limites fixée ?
- la cellule de référence tétraédrique est communément utilisée dans le domaine des milieux granulaires car le tétraèdre régulier représente la configuration la plus dense pour 4 sphères en contact placées à ses sommets. Mais pourquoi ne pas envisager une autre géométrie de cellule ?

Concernant le premier point, on peut répondre par l'affirmative car notre étude se situe dans le cadre d'un empilement virtuel où les grains sont censés pouvoir être déposés « manuellement » à leur emplacement idéal. D'un point de vue géométrique, il est donc possible de positionner une petite particule, si sa taille le lui permet, dans l'espace laissé libre entre 4 grandes particules en contact sans déstructurer leur organisation.

Concernant le deuxième point, on peut répondre que v correspond au facteur d'espacement m de Dewar uniquement dans un cas limite : celui où la taille de la cavité est nulle. Mais v est constant et ajusté une bonne fois pour toutes de manière à respecter une des hypothèses de constitution énoncée plus haut alors que m , qui représente l'espacement entre les grosses particules lorsqu'il est multiplié par le diamètre des petites, est variable. Les deux démarches étant fondées sur 2 approches philosophiques totalement différentes, il en résulte finalement une divergence relativement importante entre les valeurs de $\frac{\beta'_1}{\beta_1}$ (rapport des compacités des grosses particules dilatées et non dilatées) obtenues par le modèle de décompaction locale et par Dewar, principalement lorsque x tend vers 1. Examinons ce cas particulier.

Pour le premier, elles convergent vers 0,5 quelle que soit la taille de la cavité : les deux classes granulaires possèdent les mêmes volumes partiels à l'eutectique. Pour le second, tout dépend du facteur d'espacement m . Lorsque celui-ci tend vers l'infini, $\frac{\beta'_1}{\beta_1}$ tend vers 0 : les grosses particules sont tellement dispersées que leur compacité est pratiquement nulle mais nous ne sommes plus dans la situation « gros dominants » pour laquelle le coefficient de desserrement est déterminé. Lorsque m vaut 0, $\frac{\beta'_1}{\beta_1}$ est égal à 1 : les gros grains sont tellement rapprochés qu'ils occupent tout l'espace : il n'y a plus de petites particules y compris dans les interstices disponibles.

Le bilan concernant l'insertion du paramètre v apparaît donc comme étant relativement contrasté. En tout état de cause, il ne nous apparaît pas comme étant incontournable.

Concernant le troisième point, trois géométries de cellule différentes ont déjà été évoquées : celle cubique de Dewar, celle tétraédrique du modèle de décompaction locale et celle sphérique de Suzuki et Oshima.

A propos des deux premières, nous venons de voir que la divergence des résultats n'est pas liée à leur forme géométrique mais plutôt « à l'esprit » des deux démarches envisagées.

La troisième fournit des résultats assez similaires à ceux de Dewar pour un facteur d'espacement de $0,1$, correspondant à des grosses particules relativement proches les unes des autres, ce qui cadre bien avec la dénomination « domaine des gros dominants » utilisée par de Larrard dans ses travaux. Elle présente l'énorme avantage de pouvoir être utilisée pour les deux types d'interaction granulaire.

Il nous reste donc à élaborer un modèle de l'effet de desserrement qui soit en mesure de réunir les atouts des différentes théories présentées tout en se situant dans la continuité de celui de l'effet de paroi.

Deux étapes principales sont à prévoir :

- celle du calcul du coefficient de desserrement proprement dit ;
- celle de la détermination de la compacité des grosses particules dilatées β'_1 .

La 1^{ère} phase pourrait s'effectuer en reprenant le modèle de décompaction locale, plus abouti que le modèle « linéaire » de Stovall, pour la définition du coefficient $\alpha(x)$ et le calcul du volume partiel des petits grains à l'eutectique ϕ_2^* . Celui-ci faisant appel au coefficient d'effet de paroi, une première liaison entre les deux interactions granulaires serait établie.

La 2^{ème} phase pourrait être entreprise grâce à l'utilisation d'une cellule sphérique, à l'instar de celle de Suzuki et Oshima. Celle-ci nous semble particulièrement intéressante dans la mesure où elle permettrait d'assurer la continuité avec celle susceptible d'être employée pour l'effet de paroi. Un deuxième lien entre les deux interactions granulaires serait ainsi créé. La taille de la cavité x_0 interviendrait au cours de cette étape alors que le paramètre v serait abandonné. Il resterait toutefois à délimiter le contour de la cellule sphérique grâce au choix judicieux de son diamètre.

Pourquoi ne pas envisager, par exemple, une sphère de diamètre $d_{hyp} = d_2 \sqrt{1 + \frac{2k_p}{x}}$ pour conserver une parfaite cohérence avec celle utilisée pour l'effet de paroi?

CHAPITRE 3

PRÉSENTATION D'UNE MODÉLISATION DE L'EFFET DE PAROI DANS LE CAS DE SPHÈRES.

Entre 1986 et 2000, de Larrard *et al.* développent ce qui semble être la première théorie permettant de prévoir la compacité d'un mélange sec avec une précision suffisante. Deux types d'interaction granulaire sont introduits : l'effet de paroi dans le cas des « petits dominants » et l'effet de desserrement dans le cas des « gros dominants ». Ils sont considérés comme étant linéaires en fonction du volume partiel de la classe étrangère introduite. Diverses tentatives ont été effectuées pour déterminer les fonctions d'interaction correspondantes. L'étude présentée a pour but d'apporter des informations théoriques complémentaires en faisant appel, dans un premier temps, à des sphères.

L'effet de paroi correspond au supplément de porosité qui apparaît lorsque des petits grains se trouvent plaqués contre la paroi d'un plus gros. Neuf modèles, dont quatre théoriques, ont été recensés et analysés.

Précisons maintenant le chemin méthodique que nous allons suivre, le fil qui va nous guider.

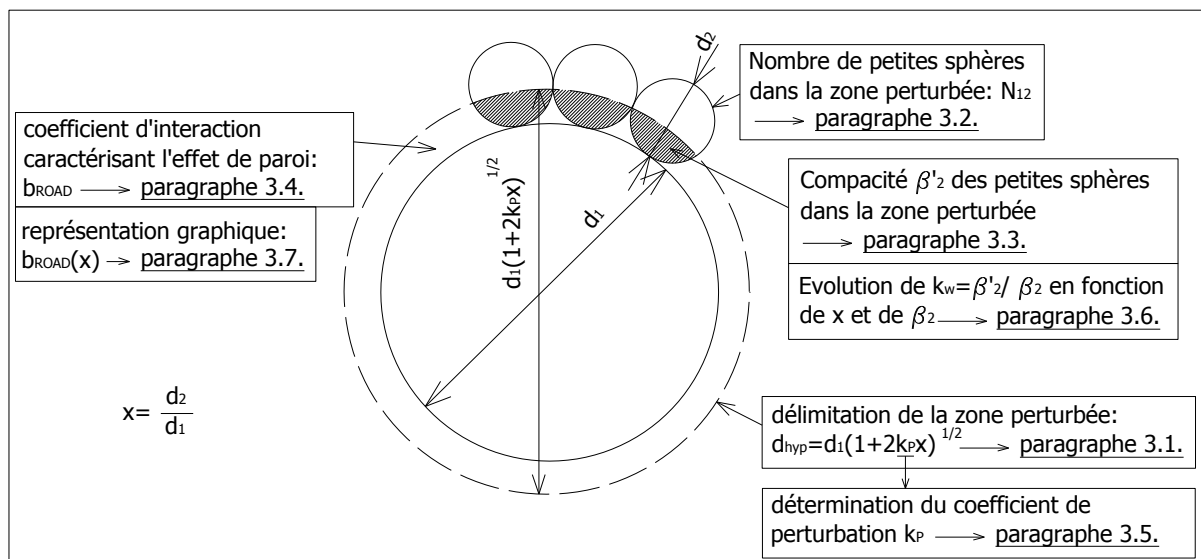


Figure III-1 : phasage d'élaboration du modèle d'effet de paroi.

Dans un premier temps, il convient de délimiter la zone perturbée autour d'un gros grain. Inspiré par les travaux de Ben-Aïm d'une part et de Suzuki et Oshima d'autre part, nous considérons que le supplément de porosité se manifeste entre deux sphères concentriques. La première, symbolisant une grosse particule, possède un diamètre d_1 . La seconde, en revanche, a été modifiée par rapport aux théories élaborées par les auteurs précédents qui considèrent que son diamètre d_{hyp} doit être choisi de façon à ce que son contour extérieur passe par les points de contact entre petites particules plaquées contre une grosse. La synthèse des études effectuées par Ben-Aïm, Dodds, Suzuki et Oshima laisse en effet apparaître que d_{hyp} doit être

diminué dans le cas d'un empilement aléatoire et augmenté dans le cas d'un empilement hexagonal compact. Nous effectuerons cette correction par l'intermédiaire d'un coefficient de perturbation k_p .

Dans un deuxième temps, le nombre de petites billes N_{12} situées dans la zone perturbée est estimé en tenant compte de la courbure de la grosse sphère grâce à l'introduction du rapport $x = \frac{d_2}{d_1}$ dans les calculs. Suzuki et Oshima ont procédé de façon similaire mais leur méthodologie de détermination ne nous apparaît pas pleinement satisfaisante. Il s'agit en réalité d'un problème infiniment complexe qui a déjà mobilisé l'énergie d'un grand nombre de mathématiciens.

Dans un troisième temps, la compacité des petites sphères situées dans la zone où elles subissent l'effet de paroi β_2 est évaluée. Outre N_{12} , le calcul fait intervenir des considérations géométriques pour déterminer précisément le volume partiel de chaque petite sphère présente dans l'espace perturbé.

Dans un quatrième temps, l'expression du coefficient d'effet de paroi $b_{\text{ROAD}}(x)$ est établie en tenant compte du coefficient de perturbation k_p qui intervient dans la délimitation de la zone subissant l'effet de paroi, de la compacité des petites sphères dans cet espace β_2 et de leur compacité en zone courante β_2 .

Dans un cinquième temps, l'équation permettant la détermination de k_p est posée de façon à ce que le coefficient d'effet de paroi soit égal à l'unité lorsque les deux classes granulaires possèdent le même diamètre (interaction totale). Nous verrons qu'il existe une dépendance entre k_p et β_2 .

Dans un sixième temps, l'évolution du rapport $k_w = \frac{\beta_2'}{\beta_2}$ est étudiée en fonction du rapport de tailles $x = \frac{d_2}{d_1}$ et de β_2 . Il sera ainsi possible d'établir des comparaisons avec les travaux de Ben-Aïm et de Suzuki et Oshima.

Dans un septième temps enfin, une représentation graphique du coefficient d'effet de paroi $b_{\text{ROAD}}(x)$ est proposée en fonction de x pour différentes valeurs de β_2 . Une analyse des résultats théoriques est ensuite effectuée, un comparatif étant mené avec les modèles antérieurs.

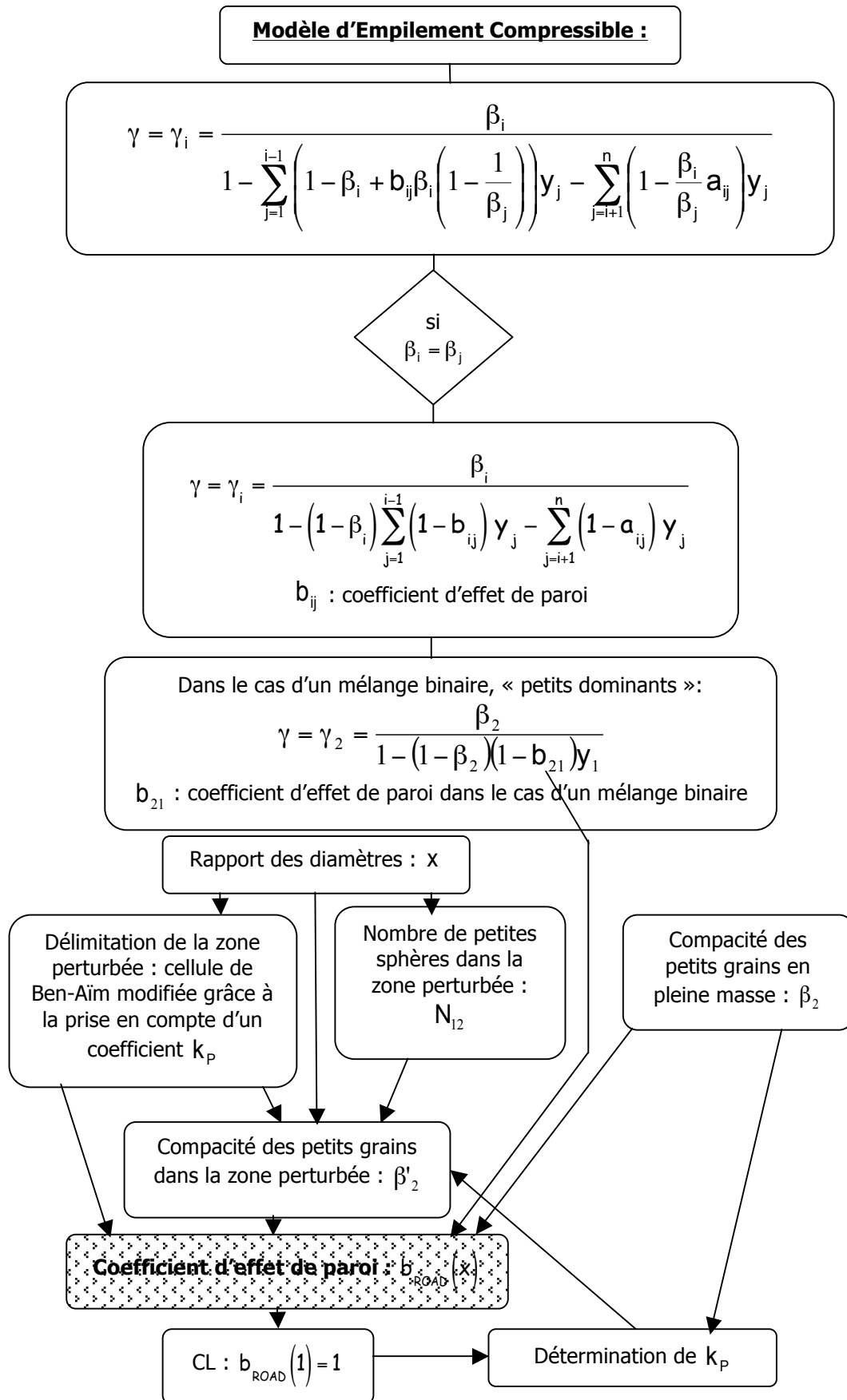


Figure III-2 : organigramme de détermination du coefficient d'effet de paroi $b(x)$.

3.1. DÉLIMITATION DE LA ZONE PERTURBÉE.

Dans les années 1960, Ben-Aïm lance l'idée d'étudier l'effet de paroi par l'intermédiaire d'une cellule de référence.

La zone perturbée est délimitée par une sphère :

- dont le centre est confondu avec celui de la grosse particule autour de laquelle se manifeste l'interaction ;
- dont le contour extérieur est choisi pour passer par les points de contact entre chaque petite bille plaquée contre la paroi (diamètre :

$$d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2x}.$$

Lorsque le rapport des diamètres des petites et de la grosse sphère est très faible ($d_2 \ll d_1$), l'épaisseur du volume perturbé tend, d'après Ben-Aïm, vers $\frac{d_2}{2}$ qui correspond évidemment au rayon des petites billes.

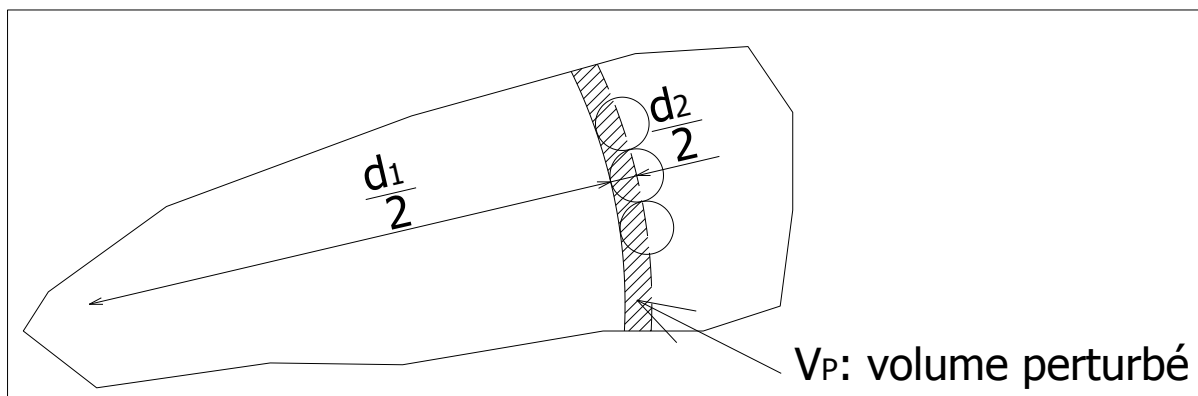


Figure III-3 : épaisseur de la zone perturbée d'après Ben-Aïm dans le cas où $d_2 \ll d_1$.

La cellule de Ben-Aïm a ensuite été reprise par Suzuki et Oshima. Seulement, comme il a déjà été précisé, les modèles d'effet de paroi élaborés par ces chercheurs ne respectent pas la condition aux limites $b(1) = 1$.

Par conséquent, pour appliquer le concept de Ben-Aïm, il convient d'ajuster au préalable le diamètre de la sphère séparant les zones perturbée et non perturbée pour respecter cette condition.

L'examen des résultats théoriques obtenus par Ben-Aïm, Dodds, Suzuki et Oshima nous a conduit aux conclusions rappelées dans le tableau ci-après. Pour bien comprendre le cheminement qui a permis d'y aboutir, il est nécessaire de se reporter au paragraphe 2.1.7.

Auteurs	Type de cellule	Respect de $b(1) = 1$	Type de mélange	Conclusions
Ben-Aïm	Cellule sphérique de Ben-Aïm	Non : $b(1) > 1$	Aléatoire	Diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2x}$ de la sphère délimitant l'extérieur de la zone perturbée <u>suresstimé</u> et conduisant à des valeurs $b(x)$ trop importantes pour $x > 0,3$ lorsque $\beta_2 = 0,64 \Rightarrow$ <u>considérer un diamètre $< d_{hyp}$ dans le cas d'un empilement aléatoire.</u>
Dodds	Deltaèdre*	oui	Empilement hexagonal compact	Condition $b(1) = 1$ respectée avec le deltaèdre* de Dodds. Celui-ci équivaut à une sphère de diamètre légèrement supérieur à $d_{hyp} \Rightarrow$ <u>considérer un diamètre $> d_{hyp}$ dans le cas d'un empilement très compact.</u>
Suzuki et Oshima	Cellule sphérique de Ben-Aïm	Non : $b(1) > 1$	Aléatoire et/ou très compact	- Diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2x}$ de la sphère délimitant l'extérieur de la zone perturbée <u>suresstimé</u> et conduisant à des valeurs $b(x)$ trop importantes pour $x > 0,3$ lorsque $\beta_2 = 0,64 \Rightarrow$ <u>considérer un diamètre $< d_{hyp}$ dans le cas d'un empilement aléatoire.</u> - Compacité des petits grains en zone perturbée β'_2 <u>sous-estimée</u> conduisant à des valeurs $b(x)$ trop importantes pour $x > 0,3$ lorsque $\beta_2 = 0,74 \Rightarrow$ <u>vérifier que β'_2 subit une légère croissance en considérant, conformément à l'analyse des résultats de Dodds, un diamètre $> d_{hyp}$ dans le cas d'un empilement très compact.</u>
* : deltaèdre de Dodds : polyèdre dont les faces sont toutes des triangles équilatéraux ayant pour côtés les segments reliant, deux à deux, les centres des petites sphères jointives situées contre la paroi d'une grosse particule. Il s'agit d'une appellation personnelle issue du modèle de Dodds mais non employée par ce dernier qui établit son raisonnement avec des tétraèdres. Se reporter au paragraphe 2.1.7 pour plus de détails.				

Tableau III-1 : analyse des résultats théoriques obtenus par différents auteurs concernant l'effet de paroi et permettant d'en tirer des conclusions quant aux modifications à apporter à la cellule de Ben-Aïm.

L'expression proposée constitue une adaptation de celle fournie par Ben-Aïm. Il s'agit en effet de :

III-1

$$d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2k_p x}$$

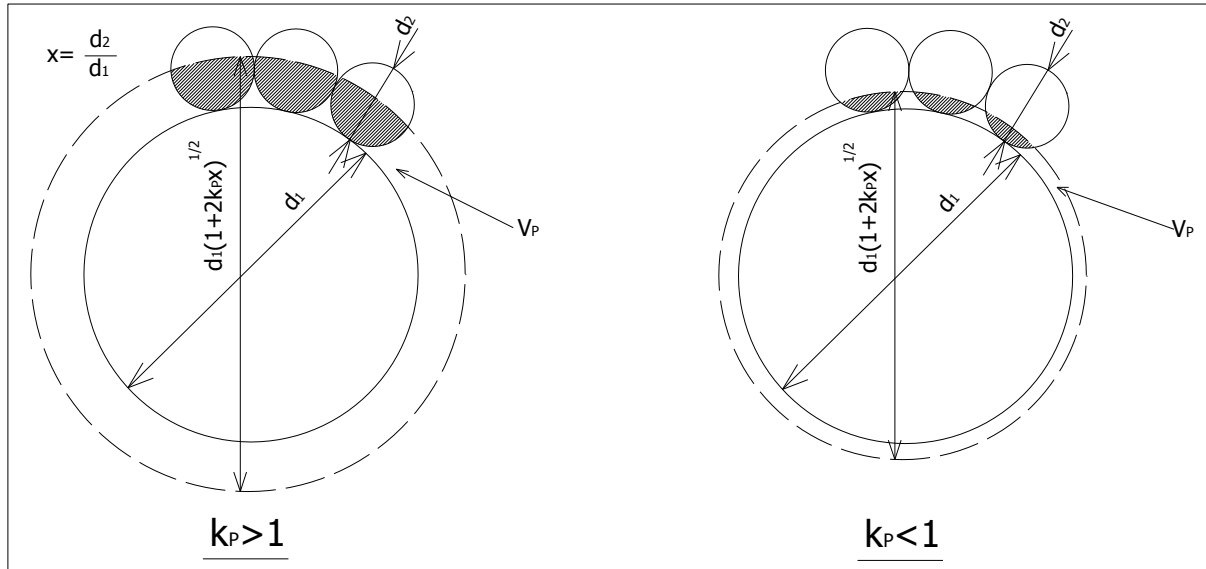


Figure III-4 : délimitation de l'extérieur de la zone perturbée.

k_p représente le coefficient de perturbation dépendant de la compacité β_2 des petits grains en zone courante.

L'épaisseur du volume perturbé, lorsque $d_2 \ll d_1$, tend alors vers :

$$\frac{k_p d_2}{2}$$

3.2. NOMBRE DE PETITES SPHÈRES À CONSIDÉRER DANS LA ZONE PERTURBÉE.

Après avoir délimité le volume dans lequel la structure des petits grains est perturbée, nous allons déterminer leur compacité dans cet espace. Pour cela, il faut connaître le nombre de petites sphères, positionnées contre une grosse, à prendre en compte.

Il est question en fait d'un problème très complexe. A titre d'illustration, c'est seulement en 1953 qu'une réponse négative a été apportée à la controverse opposant Newton à l'abbé Grégory datant de 1694 : y'a-t-il possibilité de placer une 13^{ème} sphère en contact avec une sphère centrale de même diamètre ? Il s'agit du fameux « Kissing Number Problem » (KNP) en dimension 3, ou comment un abbé cherche à résoudre un problème de nombre d'étreintes !!!!!

Newton pense que l'on ne peut en positionner que 12. Grégory estime qu'il est possible d'en rajouter une 13^{ème} car l'angle solide occupé par une sphère externe est inférieur au 1/13^{ème} du total et car le volume disponible autour d'une sphère centrale permet de loger 12 autres sphères identiques sans que celles-ci ne se touchent, laissant entrevoir la possibilité d'en glisser une supplémentaire. La question sera tranchée par Schütte et Van der Waerden [SCHU53] qui mettent en évidence, par ailleurs, un arrangement de 13 sphères de diamètre **0,916** venant tangenter une bille centrale de diamètre **1**. On pense qu'il s'agit du plus grand diamètre possible mais la démonstration n'a pas encore été établie. La méthode de Hales et Ferguson permettra peut-être d'y accéder [OEST98]. Elle consiste à utiliser un pavage hybride entre celui de Voronoï et celui de Delaunay (évoqués au paragraphe 1.2.5) et a déjà été employée pour démontrer, en 1998, la fameuse conjecture de Kepler, assertion selon laquelle il n'est pas possible d'aboutir à un empilement de sphères, toutes de même diamètre, plus compact que celui à *faces cubiques centrées*. Il faut savoir que 300 pages de raisonnement et 100 000 problèmes d'optimisation linéaires en 100 à 200 variables avec 1000 à 2000 contraintes ont alors été nécessaires.

Il est évidemment impossible d'entreprendre une démarche d'une telle ampleur pour déterminer le nombre de petites sphères pouvant « embrasser » une grosse, en fonction de leur rapport de tailles. Nous désirons simplement aboutir à un compromis entre facilité d'utilisation et précision satisfaisante.

Une approche plus sobre consiste à aborder la question par l'intermédiaire du nombre de coordination, d'après des modèles théoriques. Il s'agit d'un paramètre

essentiel qui intervient dans de nombreux domaines pour étudier par exemple : les liquides métalliques dont l'utilisation peut être celle de fluide caloporteur dans les circuits de refroidissement miniatures, les matériaux amorphes comme le verre de silice susceptible d'être employé pour des revêtements de boucliers thermiques d'engins spatiaux, les liquides moléculaires tels l'eau sous pression qui intervient dans le cycle de retraitement des déchets nucléaires, les matériaux frittés dont certains, par pressage à chaud, présentent des propriétés supraconductrices. Des méthodes spécifiques performantes et pleines d'avenir laissent par ailleurs présager des avancées considérables dans le domaine des suspensions et des pâtes granulaires [ROUX07].

Avant de proposer un modèle inédit (à notre connaissance), nous allons commencer par présenter 4 modèles théoriques fondés sur des postulats divers qui nous permettront d'obtenir des bases de comparaison.

3.2.1. Modèle du nombre de coordination de Suzuki et Oshima (1983/85).

Ce modèle a déjà été présenté dans les paragraphes 1.2.2.7 et 2.1.4.

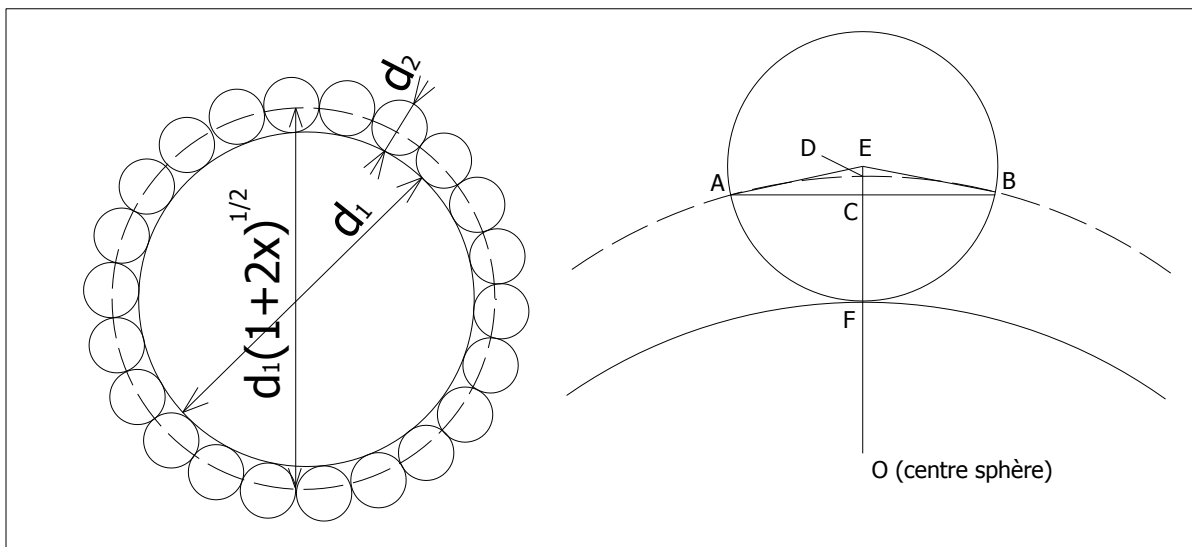


Figure III-5 : géométrie de contact d'après Suzuki et Oshima permettant de déterminer le nombre de coordination.

Soit A_c l'aire de la calotte sphérique de diamètre AB , de hauteur CD et de rayon de courbure OD : $A_c = 2\pi \times OD \times CD$.

Soit A_s l'aire de la surface de la sphère hypothétique de diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2x}$: $A_s = 4\pi \times OD^2$.

Suzuki et Oshima admettent que le nombre de coordination N_{12} s'écrit :

$$\text{I-39} \quad N_{12,SO}(x) = \omega \frac{A_s}{A_c} = \frac{2\omega}{1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}}$$

$N_{12,SO}(x)$: nombre de coordination, d'après Suzuki et Oshima.

ω est directement lié au nombre de coordination N_c d'un cas mono-modulaire ($x = 1$) :

$$\text{I-40} \quad \omega = \frac{N_c}{4} (2 - \sqrt{3}).$$

Dans le cas d'un empilement aléatoire, il est possible de considérer :

$$\text{III-2} \quad N_c = 9, \quad \omega = \frac{9}{4} (2 - \sqrt{3}) \quad \text{et} \quad N_{12,SO}^{\text{aléatoire}}(x) = \frac{9}{2} \frac{(2 - \sqrt{3})}{\left(1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}\right)}$$

$N_{12,SO}^{\text{aléatoire}}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Suzuki et Oshima, pour un empilement aléatoire avec une valeur $N_c = 9$.

Dans les milieux denses, les expressions deviennent :

$$\text{III-3} \quad N_c = 12, \quad \omega = 3(2 - \sqrt{3}) \quad \text{et} \quad N_{12,SO}^{\text{dense}}(x) = \frac{6(2 - \sqrt{3})}{\left(1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}\right)}$$

$N_{12,SO}^{\text{dense}}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Suzuki et Oshima, pour un empilement dense avec une valeur $N_c = 12$.

Les courbes correspondantes sont représentées sur la figure III-9.

Le modèle de détermination du nombre de coordination de Suzuki et Oshima respecte bien la condition $N_{12,SO}^{\text{dense}}(1) = 12$, correspondant au « Kissing Number Problem » en dimension 3.

3.2.2. Modèle du nombre de coordination de Bouvard et Lange (1991).

Bouvard et Lange [BOUV91] proposent une méthode basée sur la corrélation existant entre « empilement dense aléatoire » (random dense packing) et « rangement dense aléatoire » (random dense parking). Celui-ci est défini comme étant le rangement aléatoire de disques (ou sphères) mono-modulaires sur une surface plane. Sa limite correspond « à la fraction de surface plane recouverte par des

disques (ou sphères) quand ces derniers sont ajoutés selon des séquences aléatoires, sans chevauchement, jusqu'à impossibilité d'en additionner un supplémentaire ».

Bouvard et Lange estiment que ce concept peut également s'appliquer dans le cas de surfaces non planes.

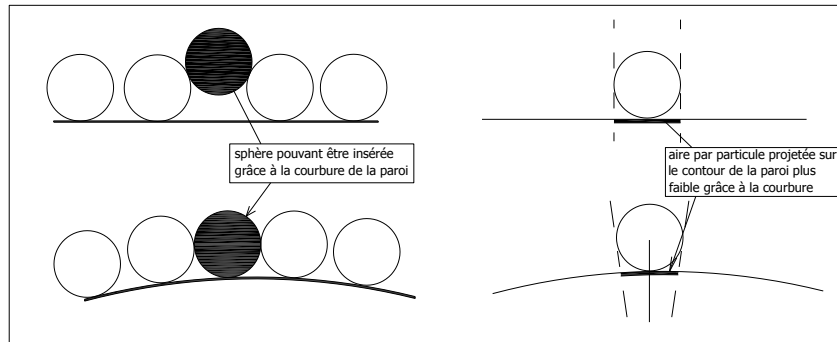


Figure III-6 : effet de la courbure de la surface sur le placement de particules sphériques selon Bouvard et Lange.

L'action de courber la paroi a pour effet :

- d'augmenter l'espace inter-particulaire permettant à une petite sphère de venir « embrasser » le contour extérieur d'une grosse alors qu'elle ne le pouvait pas auparavant ;
- de diminuer l'aire projetée par particule sur la paroi bien que le nombre de contacts inter-particulaires par unité de surface augmente.

Bouvard et Lange émettent ensuite l'hypothèse que la limite de rangement aléatoire dense de sphères est indépendante de la courbure de la surface. Ce faisant, elle peut être utilisée pour déterminer le nombre de coordination pour n'importe quel rapport de diamètres χ .

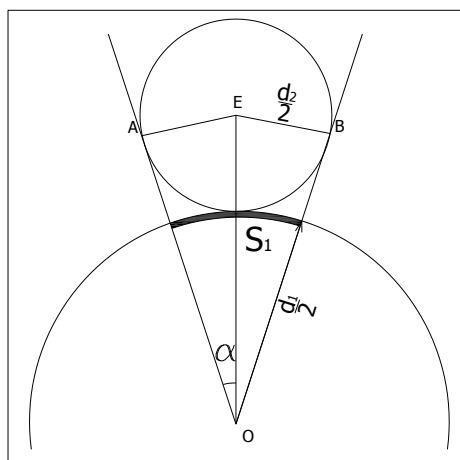


Figure III-7 : géométrie de contact entre une petite et une grosse particule d'après Bouvard et Lange.

La fraction de surface S_1 correspondant à la projection d'une petite particule sur le contour d'une grosse se calcule facilement :

$$\text{III-4} \quad S_1 = \frac{\frac{\pi d_1^2}{2}(1 - \cos \alpha)}{\pi d_1^2} = \frac{1 - \cos \alpha}{2} \text{ avec } \sin \alpha = \frac{d_2}{d_1 + d_2} = \frac{x}{1+x}$$

Le numérateur représente la surface projetée d'une petite particule sur le contour d'une grosse, la surface de celui-ci figurant au dénominateur.

$$\text{On en déduit aisément : } S_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x} \right)$$

Bouvard et Lange estimant la limite de rangement aléatoire, A_p , indépendante de la courbure de la surface, le nombre de coordination s'écrit :

$$\text{III-5} \quad N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(x) = \frac{A_p}{S_1} = \frac{2A_p}{1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}}$$

Onoda et Liniger [ONOD86] ont expérimentalement trouvé une limite maximale $A_p = 0,55$ conduisant à :

$$\text{III-6} \quad N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(x) = \frac{1,1}{1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}}$$

$N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Bouvard et Lange, pour un empilement aléatoire.

La courbe correspondante est représentée sur la figure III-9. Il est évidemment facile de comparer cette expression avec celle établie par Suzuki et Oshima (formule III-2).

On peut remarquer que : $\frac{N_{12,SO}^{\text{aléatoire}}(x)}{N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(x)} \approx 1,1$.

Tout dépend, en réalité, de la valeur choisie pour N_c , nombre de coordination de l'empilement mono-modulaire, dans la théorie des deux chercheurs précédemment cités.

Pour $N_c = 8,2$, les deux formules sont parfaitement équivalentes. Il convient toutefois de préciser, conformément à ce qui a été écrit dans le paragraphe 2.1.4, que Suzuki et Oshima préconisent en fait $N_c = 7,4$ alors qu'une synthèse effectuée sur les travaux d'une dizaine de chercheurs publiée dans [MASU06] aboutit à $N_c = 9$. Notre choix s'est porté sur cette dernière valeur pour un empilement aléatoire mais $N_c = 8,2$ constitue un résultat intermédiaire susceptible d'être sélectionné.

3.2.3. Modèle du nombre de coordination de Egami (1997).

Nous allons présenter le modèle de Egami [EGAM97] dans un formalisme légèrement différent de celui de la publication initiale pour effectuer le lien avec la théorie précédente.

Egami considère que le nombre de coordination de l'empilement mono-modulaire N_c vaut 4π . La fraction de surface S_1 correspondant à la projection d'une petite particule sur le contour d'une grosse valant, dans un cas général, $S_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x} \right)$, il est aisé d'en déduire, dans le cas particulier où $x = 1$:

$$N_c = \frac{A_p}{S_1} = \frac{2 A_p}{1 - \frac{\sqrt{3}}{2}} = 4\pi \text{ d'où } A_p = \pi (2 - \sqrt{3})$$

Le nombre de coordination devient alors :

$$\text{III-7} \quad N_{12,E}^{\text{dense}}(x) = \frac{A_p}{S_1} = \frac{2\pi(2-\sqrt{3})}{\left(1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}\right)}$$

$N_{12,E}^{\text{dense}}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Egami, pour un empilement dense.

La courbe correspondante est représentée sur la figure III-9. Si l'on compare cette expression avec celle établie par Suzuki et Oshima (formule III-3), on peut remarquer

$$\text{que : } \frac{N_{12,E}^{\text{dense}}(x)}{N_{12,SO}^{\text{dense}}(x)} = \frac{\pi}{3} \approx 1,047 .$$

3.2.4. Modèle du nombre de coordination de Miracle, Sanders et Senkov (2003).

Apparus dans les années 60, les verres métalliques présentent une structure non ordonnée qui les distingue, par conséquent, des alliages métalliques traditionnels. Ils présentent des propriétés remarquables (grande résistance mécanique, bonne tenue à la corrosion) qui rendent multiples leurs possibilités d'application, notamment dans l'aéronautique. Un empilement efficace d'atomes constitue une base incontournable à leur formation. Miracle, Sanders et Senkov [MIRA03] ont développé un modèle relativement simple afin d'établir l'influence, sur l'efficacité de l'empilement local, des rapports de tailles atomiques. En 3D, il s'agit de déterminer combien d'atomes de

solvant de même diamètre d_2 peuvent entourer un atome de soluté central de diamètre d_1 en fonction de leur rapport de diamètres $x = \frac{d_2}{d_1}$. Si x est choisi de telle manière qu'aucune sphère située autour de la paroi ne se trouve « exclue » par manque de place, il s'agit d'une géométrie d'empilement efficace.

Selon les auteurs, certaines configurations constituées de sphères de rapport $\frac{d_1}{d_2} = 0,902$ peuvent conduire à un nombre de coordination N_{12} égal à 12. Or, l'expression III-7 de Egami (à utiliser avec $x = \frac{1}{0,902}$) fournit une valeur de 11,27. Miracle, Sanders et Senkov suggèrent donc de la modifier en procédant de la façon suivante.

L'aire de la surface d'une sphère centrale **1** associée à une sphère **2** de référence en contact avec elle, 2_{ref} , est déterminée grâce au concept de tessellation. Cela nécessite de faire appel au nombre de coordination de surface q défini comme étant le nombre de sphères **2** en contact à la fois avec 2_{ref} et avec l'élément central **1**. Il évolue en fonction du rapport des diamètres comme l'indique le tableau ci-dessous.

$\frac{d_1}{d_2}$	q
$\geq 0,902$	5
compris entre 0,414 et 0,902	4
compris entre 0,225 et 0,414	3

Tableau III-2 : nombre q de sphères **2 en contact à la fois avec 2_{ref} et avec l'élément central **1** en fonction du rapport des diamètres d_1/d_2 d'après Miracle, Sanders et Senkov [MIRA03].**

L'aire de la surface courbée de **1** associée à 2_{ref} est obtenue par construction de plans bissecteurs, perpendiculaires aux segments reliant le centre de 2_{ref} aux centres de chacune des sphères **2** qui la touche. Les intersections de ces plans imaginaires avec la surface de **1** engendrent des séries de grands cercles qui délimitent l'aire de la surface courbée associée à 2_{ref} . Celle-ci, notée A_q , est représentée sur le dessin du bas de la figure III-8. La surface de **1** est donc recouverte par les aires, ainsi déterminées, associées à chaque sphère **2**.

Le nombre de coordination N_{12} est obtenu en divisant l'aire de la surface totale de **1**, A_1 , par A_q . Cette dernière est calculée, en admettant une répartition symétrique

des sphères 2 autour de 2_{ref} , grâce à la relation $A_q = 2q A_{triangle}$, où $A_{triangle}$ représente l'aire du triangle sphérique délimité par les sommets O, B, C.

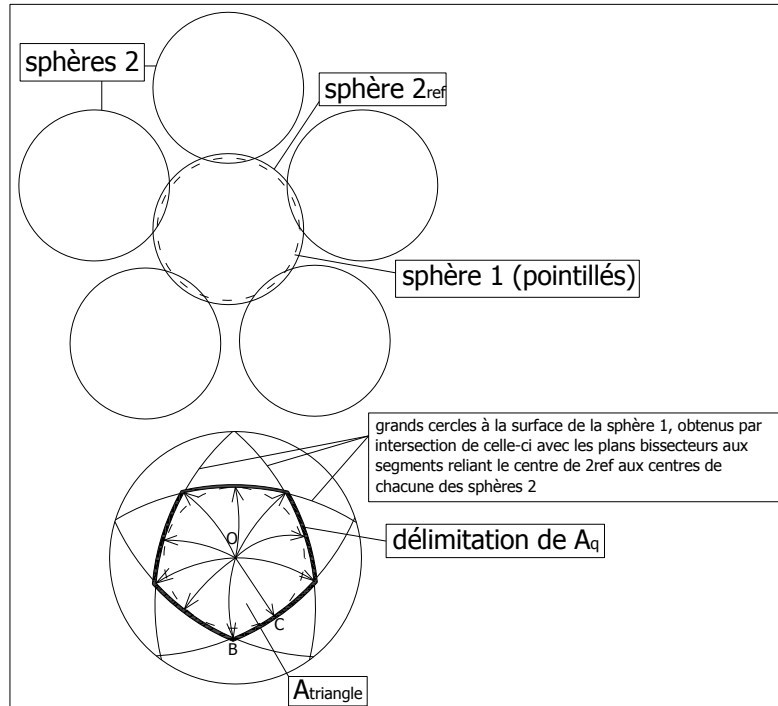


Figure III-8 : images illustrant une sphère de référence 2_{ref} en contact simultané avec une sphère centrale 1 et cinq autres sphères 2 entourant cette dernière ($q=5$). La sphère 1 définit le centre de l'amas. Elle apparaît en pointillés sous la sphère semi transparente 2_{ref} sur le dessin du haut. L'aire A_q sur 1 associée à 2_{ref} est symbolisée sur le dessin du bas. Elle vaut $A_q = 2qA_{triangle}$ ($10 A_{triangle}$ dans l'exemple traité), $A_{triangle}$ correspondant à l'aire du triangle sphérique délimité par les sommets O, B, C [MIRA03].

Le nombre de coordination N_{12} se calcule de la façon suivante :

$$\text{III-8} \quad N_{12, MSS}^{dense}(\mathbf{x}) = \frac{2\pi}{q \left(\alpha_q + \beta_q - \frac{\pi}{2} \right)} \text{ avec :}$$

- $\alpha_q = \frac{\pi}{q}$ qui représente l'angle au sommet O du triangle sphérique OBC ;

- β_q qui représente l'angle au sommet B :

$$\beta_q = \arccos \left(\sin(\alpha_q) \cos(\overline{OC}) \right) = \arccos \left[\left(\sin \alpha_q \right) \sqrt{1 - \left(\frac{x}{1+x} \right)^2} \right]$$

On obtient finalement :

$$\text{III-9} \quad N_{12, MSS}^{dense}(\mathbf{x}) = \frac{4\pi}{\pi(2-q) + 2q \arccos \left[\left(\sin \frac{\pi}{q} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{x}{1+x} \right)^2} \right]}$$

$N_{12, MSS}^{dense}(\mathbf{x})$: nombre de coordination, d'après la théorie de Miracle, Sanders et Senkov, pour un empilement dense.

Lors de l'étude de l'effet de paroi, $x = \frac{d_2}{d_1} \leq 1$ et donc $\frac{d_1}{d_2} \geq 0,902$. Le tableau III-2 nous indique alors que la valeur de q à prendre en compte est : $q = 5$.

On en déduit :

$$\text{III-10} \quad N_{12, \text{MSS}}^{\text{dense}}(x) = \frac{4\pi}{10 \arccos \left[\left(\sin \frac{\pi}{5} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{x}{1+x} \right)^2} \right] - 3\pi}$$

$$N_{12, \text{MSS}}^{\text{dense}}(x) = \frac{4\pi}{10 \arccos \left[\left(\sin \frac{\pi}{5} \right) \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x} \right] - 3\pi}$$

Les résultats de l'équation III-10 sont présentés sur la figure III-9.

Selon nous, l'expression de Miracle, Sanders et Senkov peut être approximée grâce à la relation suivante, pour x compris entre 0,5 et 1 :

$$\text{III-11} \quad N_{12, \text{MSS, appro}}^{\text{dense}}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}}$$

Il s'agit d'une proposition personnelle qui n'engage que son auteur.

Si l'on compare cette expression avec celles établies par Suzuki et Oshima d'une part (formule III-3) et par Egami d'autre part (formule III-7), on peut remarquer que :

$$\frac{N_{12, \text{MSS, appro}}^{\text{dense}}(x)}{N_{12, \text{SO}}^{\text{dense}}(x)} \approx 1,1 \quad \text{et} \quad \frac{N_{12, \text{MSS, appro}}^{\text{dense}}(x)}{N_{12, \text{E}}^{\text{dense}}(x)} \approx 1,05 \quad \text{dans l'intervalle de } x \text{ pris en compte (entre 0,5 et 1).}$$

Miracle, Sanders et Senkov utilisent leur expression du nombre de coordination pour définir une efficacité maximale d'empilement. Celle-ci est obtenue lorsqu'un des atomes de solvant faisant partie du « 1^{er} cercle » de voisinage d'un atome de soluté central de diamètre d_1 , s'en trouve « exclu » si son diamètre d_2 vient à augmenter de manière infime, par manque de place. En d'autres termes, cela revient à dire qu'il existe des valeurs spécifiques de x , notées x^* , qui engendrent des valeurs de N_{12} entières. Certaines sont répertoriées dans le tableau suivant. La valeur absolue de la pente de $\frac{dN_{12}(x)}{dx}$ augmentant lorsque x diminue, la séparation entre les valeurs de x^* décroît.

N_{12}	x^*	N_{12}	x^*
14	0,955	20	0,697
15	0,896	21	0,671
16	0,845	22	0,646
17	0,801	23	0,623
18	0,762	24	0,603
19	0,728		etc

Tableau III-3 : valeurs de x^* et valeurs correspondantes de N_{12} d'après Miracle, Sanders et Senkov [MIRA03].

Si une efficacité d'empilement atomique est importante dans la formation des verres métalliques, ceux-ci devraient, selon les auteurs de l'article, afficher une propension pour ces ratios spécifiques de diamètres soluté/solvant. C'est pourquoi Miracle, Sanders et Senkov ont tenté d'établir une corrélation entre ces derniers, réellement observés, et ceux répertoriés dans le tableau. Pour cela, ils ont passé en revue un nombre significatif de verres métalliques binaires (84 pour être précis, issus des travaux de Egami et Waseda (1984) et de Inoue (2000)).

Ils obtiennent effectivement une forte corrélation, ce qui leur permet d'en conclure que leur modèle, utilisé pour qualifier l'efficacité d'un empilement, constitue une représentation physique convenable de la structure atomique locale dans les verres métalliques. Il convient toutefois de souligner qu'il existe parfois d'importantes différences dans les valeurs de diamètres référencés dans les manuels spécialisés et que les auteurs ont parfois dû procéder à certains ajustements pour en tenir compte.

Dans une publication plus récente [MIRA06], Miracle, Lord et Ranganathan montrent que la valeur $q = 5$ est relativement rare pour des amas de sphères dures présentant un nombre de coordination $N_{12} \geq 13$ et que les rapports $\frac{d_1}{d_2}$ sont sous-estimés d'environ 0,1 pour N_{12} fixé et compris dans l'intervalle d'étude $[13; 20]$. Dans [MIRA03], chaque sphère de solvant faisant partie du « 1^{er} cercle » de voisinage se voit allouer la valeur de q maximale. Seulement, les contraintes d'empilement dans le cas de sphères dures restreignent leur capacité à atteindre des configurations aussi denses. Des sphères molles, en revanche, sont en mesure de se positionner géométriquement avec une efficacité prodigieuse et de former des amas localement très compacts. Si elles conviennent bien aux modélisations de la structure atomique

des verres métalliques, il est évident qu'il est nécessaire de faire appel à un modèle de sphères dures dans le cas des mélanges granulaires.

Cela revient à dire que, dans l'intervalle [13 ; 20], N_{12} devrait se calculer de la façon suivante :

$$\text{III-12 } N_{12, \text{MSSmodifié}}^{\text{dense}}(x) = \frac{4 \pi}{10 \arccos \left[\left(\sin \frac{\pi}{5} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{x}{1 + 0,9 x} \right)^2} \right] - 3 \pi} ; N_{12} \in [13 ; 20]$$

La courbe correspondante figure ci-dessous.

3.2.5. Bilan des différents modèles présentés permettant le calcul du nombre de coordination.

Proposons tout d'abord une représentation graphique des différents modèles recensés.

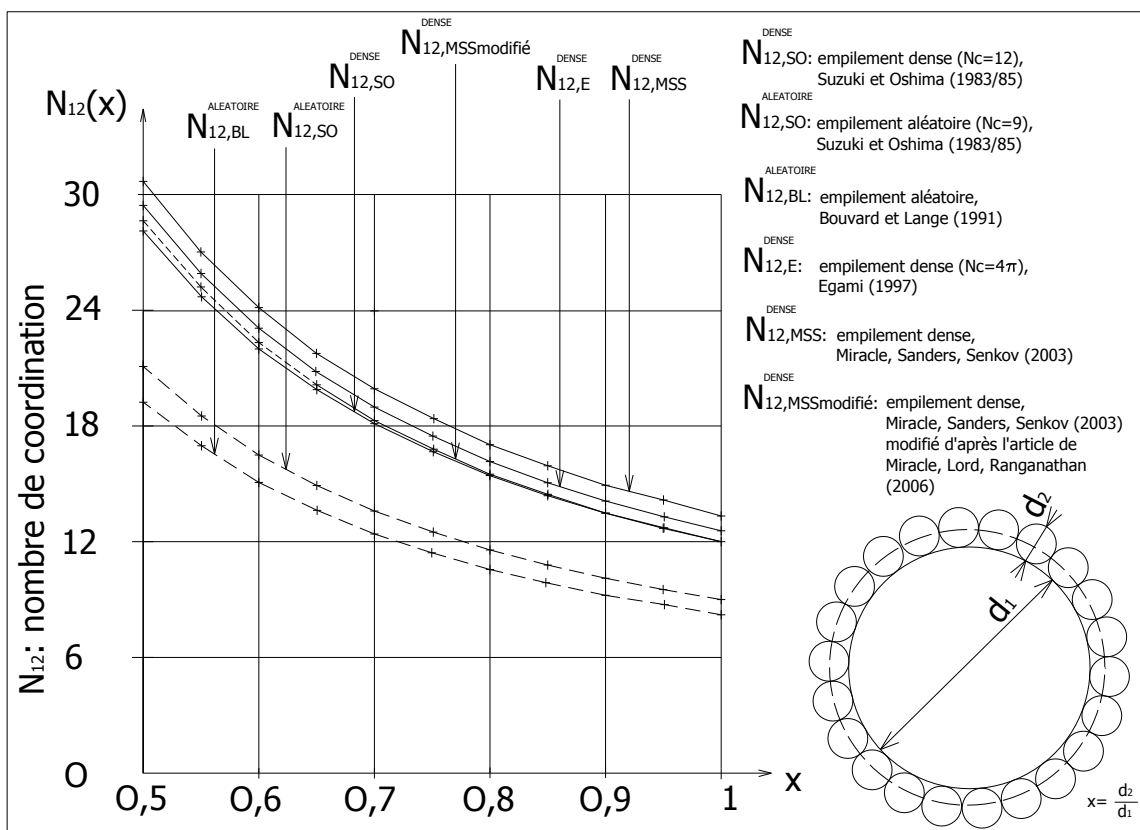


Figure III-9 : nombre de coordination N_{12} en fonction du rapport de tailles $x=d_2/d_1$ d'après Suzuki et Oshima (1983/85), Bouvard et Lange (1991), Egami (1997), Miracle, Sanders, Senkov (2003), Miracle, Sanders, Senkov modifié d'après Miracle, Lord, Ranganathan (2006).

Le bilan que nous estimons pouvoir en tirer est le suivant.

Modèles	Hypothèses de constitution / Avantages	Inconvénients
Suzuki et Oshima (1983/85)	Modèle simple faisant intervenir l'état de densité du milieu grâce à un paramètre ω .	Le paramètre ω est-il introduit de façon pertinente dans le modèle ?
Bouvard et Lange (1991)	<ul style="list-style-type: none"> - méthode adaptée aux mélanges aléatoires ; - modèle basé sur la corrélation existant entre « empilement dense aléatoire » et « rangement dense aléatoire ». 	<ul style="list-style-type: none"> - méthode ne convenant pas aux mélanges denses ; - limite de rangement aléatoire indépendante de la courbure de la surface.
Egami (1997)	Méthode permettant une estimation simple et rapide du nombre de coordination pour un mélange dense.	Nombre de coordination de l'empilement mono-modulaire considéré égal à 4π , soit l'angle solide sous lequel on voit la surface totale d'une sphère depuis le centre de cette dernière.
Miracle, Sanders, Senkov (2003)	<ul style="list-style-type: none"> - modèle adapté à des sphères molles formant un empilement dense ; - méthode la plus aboutie pour les applications liées aux verres métalliques. 	<ul style="list-style-type: none"> - modèle convenant moins bien au cas des sphères dures ; - rapports $\frac{d_1}{d_2}$ sous estimés pour N_{12} fixé dans l'intervalle $[13 ; 20]$.
Miracle, Sanders, Senkov (2003) modifié d'après l'article de Miracle, Lord, Ranganathan (2006)	Modèle obtenu en apportant une correction au précédent pour tenir compte de la sous-estimation des rapports $\frac{d_1}{d_2}$ évoquée ci-dessus.	Modèle valable uniquement dans la gamme de valeurs de N_{12} indiquée ci-dessus.

Tableau III-4 : comparaison des hypothèses de constitution, avantages, inconvénients des différents modèles permettant de calculer le nombre de coordination d'un mélange binaire de sphères.

La littérature concernant les modèles permettant la détermination du nombre de coordination en fonction du rapport de tailles est finalement assez peu développée. Elle est beaucoup moins fournie que ce à quoi nous nous attendions même si, au cours de nos recherches, nous avons recensé un certain nombre d'algorithmes itératifs permettant d'établir des recueils de données pour les empilements les plus denses connus de N_{12} sphères sur une surface sphérique.

Chacune des théories du nombre de coordination récapitulée dans le tableau III-4 possède des atouts mais aucune ne nous convient pleinement. Le modèle recensé le plus élaboré, celui de Miracle, Sanders et Senkov, concerne des sphères molles (« soft spheres ») qui donne sa pleine mesure dans le cadre des empilements atomiques liés aux verres métalliques. Mais des configurations aussi denses ne peuvent pas être atteintes dans le cas de sphères rigides. La mise au point d'une théorie adaptée permettrait pourtant de franchir un pas supplémentaire dans bien des domaines que nous avons déjà évoqués. Concernant les effets de paroi et de desserrement, notre ambition va se limiter à établir un modèle alliant simplicité et bonnes capacités prédictives.

3.2.6. Modèle des carrés sphériques proposé pour calculer le nombre de coordination.

La première question qui vient à l'esprit avant d'entreprendre une telle démarche est la suivante :

- faut-il établir un modèle pour les empilements denses puisque l'étude entreprise concerne des empilements virtuels?
- ou faut-il établir un modèle qui s'adapte à l'état de densité du milieu, tel celui de Suzuki et Oshima?

La 2^{ème} possibilité ne nous apparaît pas cadrer parfaitement avec les hypothèses de constitution du Modèle d'Empilement Compressible (MEC) de de Larrard puisque celui-ci fait appel à la notion d'empilement virtuel où chaque particule est censée pouvoir être positionnée « manuellement » à son emplacement idéal. Nous allons donc nous placer dans le cadre d'empilements compacts de sphères dures sans pour autant chercher à atteindre les degrés de densité atteints avec les amas atomiques de soluté et de solvant étudiés par Miracle, Sanders et Senkov qui font plutôt appel à la notion de sphères molles.

Soit un arrangement de sphères **2** de diamètre d_2 juxtaposées contre une sphère **1** de diamètre d_1 . Le rapport des diamètres s'écrit : $x = \frac{d_2}{d_1}$. La densité des sphères **2** est telle que chacune d'entre elles est susceptible de pouvoir être coincée par ses voisines. Soit la sphère de diamètre $d_1\sqrt{1+2x}$ concentrique à **1** dont le contour passe par les points de contact de toutes les sphères **2** plaquées contre **1**. On appelle \vec{n} l'axe passant par les centres respectifs de la sphère **1** et d'une sphère **2**_{ref} qui l'entoure, prise comme référence. Soit **p** le plan perpendiculaire à \vec{n} passant

par les points de contact de 2_{ref} avec d'autres sphères 2 situées contre 1 . L'intersection de p avec la sphère 2_{ref} forme un cercle c de diamètre d_c .

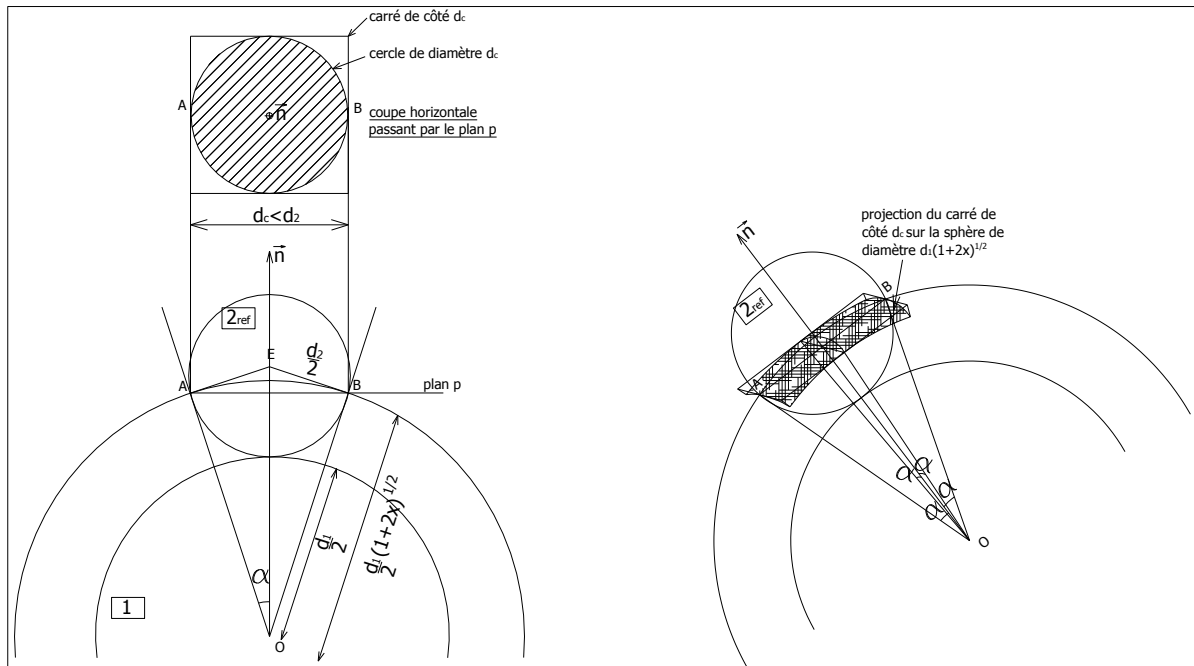


Figure III-10 : surface d'emprise d'une sphère de diamètre d_2 caractérisée par un carré sphérique sur la sphère de diamètre $d_1(1+2x)^{1/2}$.

Considérons un carré de côté d_c dont le centre coïncide avec celui du cercle c . La projection de ce carré sur la sphère de diamètre $d_1 \sqrt{1+2x}$ crée un carré sphérique convexe dont l'aire peut être calculée de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 \text{III-13} \quad A_{\text{sphérique}}^{\text{carré}} &= \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{-\alpha}^{\alpha} \left(\frac{d_1 \sqrt{1+2x}}{2} \right)^2 \cos \phi \, d\phi \, d\theta = d_1^2 (1+2x) \alpha \sin \alpha \\
 A_{\text{sphérique}}^{\text{carré}} &= d_1^2 (1+2x) \frac{x}{1+x} \arcsin \left(\frac{x}{1+x} \right) \text{ car } \sin \alpha = \frac{x}{1+x}
 \end{aligned}$$

Les carrés sphériques liés à chaque sphère 2 créent un pavage de la sphère de diamètre $d_1 \sqrt{1+2x}$. Chacun est susceptible d'être coïncé par ses voisins mais peut également disposer d'un « jeu » lui permettant de se mouvoir légèrement sans pour autant permettre l'insertion d'un carré sphérique supplémentaire. Nous postulons qu'aucun d'entre eux ne doit se chevaucher avec un autre : ils doivent se juxtaposer. Le problème consiste à déterminer combien peuvent constituer le pavage le plus dense possible. Si la densité de juxtaposition d_j se définit comme étant la somme des aires des carrés sphériques divisée par l'aire de la sphère de diamètre $d_1 \sqrt{1+2x}$, on obtient :

$$\text{III-14} \quad d_j(x) = \frac{N_{12,CS}^{\text{dense}}(x) A_{\text{sphérique}}^{\text{carré}}}{\pi d_1^2 (1+2x)} = \frac{N_{12,CS}^{\text{dense}}(x)}{\pi} \frac{x}{1+x} \arcsin \left(\frac{x}{1+x} \right)$$

$N_{12,CS}^{dense}(x)$: nombre de coordination, d'après le modèle des carrés sphériques, pour un empilement dense.

Si nous visons une densité de juxtaposition d_j égale à 1, nous pouvons en déduire le nombre de coordination suivant $x = \frac{d_2}{d_1} \in [0, 1]$:

III-15

$$N_{12,CS}^{dense}(x) = \frac{\pi}{\frac{x}{1+x} \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)} = \frac{\pi(1+x)}{x \cdot \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)}$$

Nous pouvons d'ores et déjà remarquer que pour un empilement mono-modulaire :

III-16

$$N_{12,CS}^{dense}(1) = 12$$

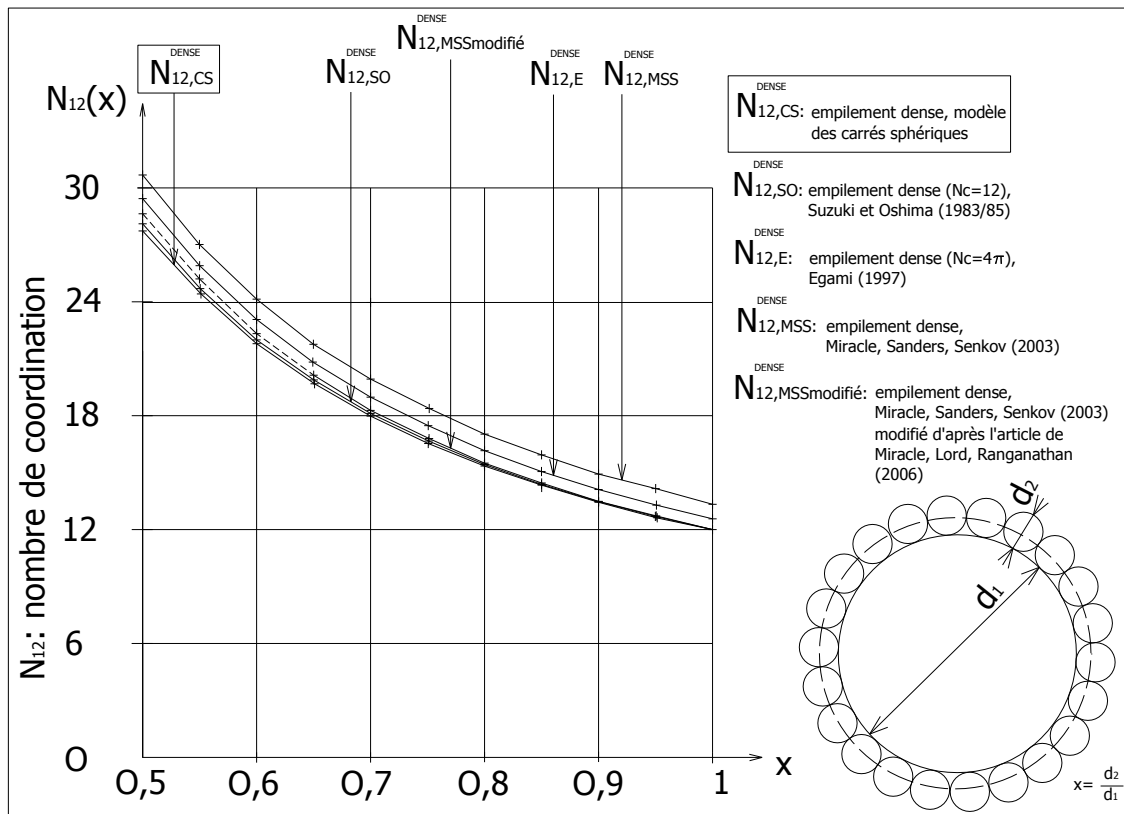


Figure III-11 : nombre de coordination N_{12} d'après le modèle des carrés sphériques en fonction du rapport de tailles $x=d_2/d_1$. Comparaison avec les modèles de Suzuki et Oshima (1983/85), Egami (1997), Miracle, Sanders, Senkov (2003), Miracle, Sanders, Senkov modifié d'après Miracle, Lord, Ranganathan (2006).

Nous retrouvons bien la solution du « Kissing Number Problem » (KNP) en dimension 3 avec cette méthode approchée, inédite à notre connaissance. Si on laisse de côté les modèles de Egami (1997) et de Miracle, Sanders, Senkov (2003) destinés prioritairement aux sphères molles (« soft spheres »), on est frappés par la similarité des résultats obtenus avec le modèle de Miracle, Sanders, Senkov modifié par nos

soins d'après l'article de Miracle, Lord et Ranganathan (2006) pour une meilleure adaptation aux sphères dures, et avec le modèle de Suzuki et Oshima (1983/85) considéré avec $N_c = 12$.

Examinons les valeurs spécifiques de x , notées x^* , qui engendrent des valeurs de N_{12} entières, notées N_{12}^* , dans l'intervalle $[12; 27]$ et répertorions les dans le tableau suivant. Elles sont évidemment plus faibles que celles fournies par [MIRA03].

N_{12}^*	x^*	N_{12}^*	x^*
12	1	20	0,642
13	0,928	21	0,618
14	0,867	22	0,596
15	0,816	23	0,575
16	0,772	24	0,557
17	0,733	25	0,540
18	0,699	26	0,524
19	0,669	27	0,510

Tableau III-5 : valeurs de x^* et valeurs correspondantes de N_{12}^* d'après le modèle des carrés sphériques.

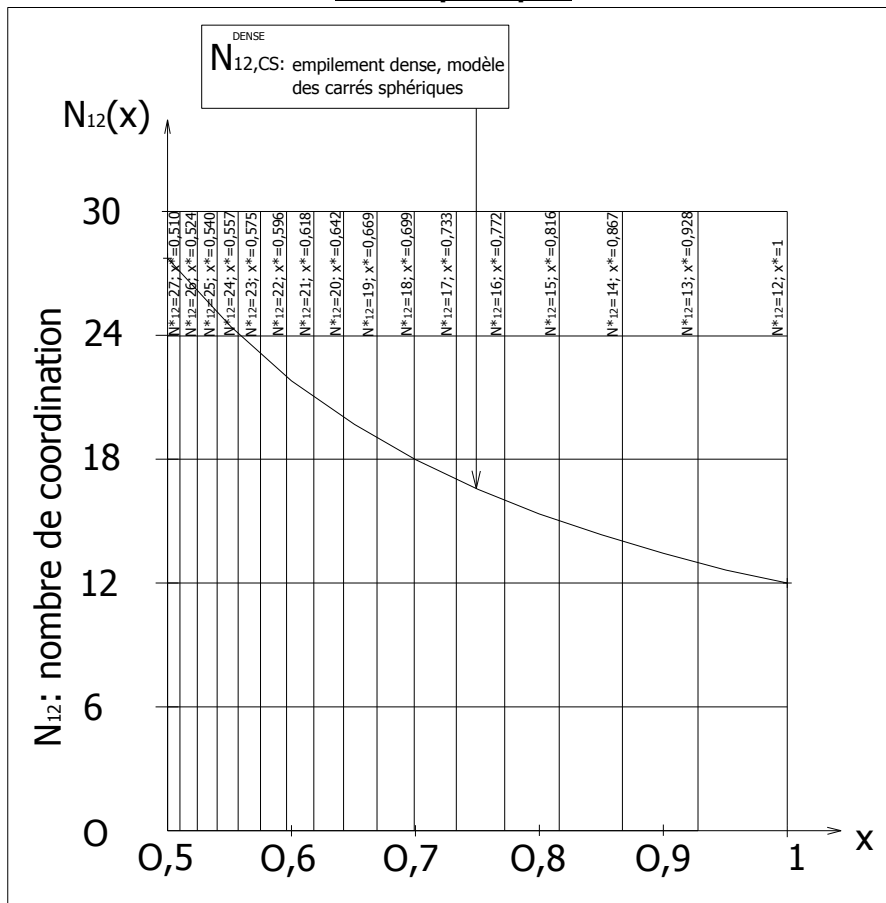


Figure III-12 : valeurs de x^* pour lesquelles le nombre de coordination N_{12}^* est un entier, d'après le modèle des carrés sphériques.

La question qui se pose maintenant est de savoir si l'on doit conserver la valeur exacte (1^{er} cas : en gardant les chiffres après la virgule) ou au contraire la partie entière (2^{ème} cas : entier naturel) de $N_{12,CS}^{dense}(x)$ pour calculer la compacité des petits grains dans la zone perturbée par l'effet de paroi. Examinons pour cela comment évolue la densité de juxtaposition d_j en fonction de x .

Dans le premier cas, d_j se calcule avec la formule III-14 :

$$\text{III-14} \quad d_j(x) = \frac{N_{12,CS}^{dense}(x)}{\pi} \frac{x}{1+x} \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)$$

Elle est toujours égale à 1 puisque $N_{12,CS}^{dense}(x)$ est déduit de cette expression en posant précisément $d_j = 1$.

Dans le second cas, d_j se calcule avec la formule III-17 :

$$\text{III-17} \quad d_j(x) = \frac{\text{INT}\{N_{12,CS}^{dense}(x)\}}{\pi} \frac{x}{1+x} \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right) = \frac{\text{INT}\{N_{12,CS}^{dense}(x)\}}{N_{12,CS}^{dense}(x)}$$

INT $\{N_{12,CS}^{dense}(x)\}$ désignant la partie entière (entier naturel) de $N_{12,CS}^{dense}(x)$.

d_j est strictement inférieure à 1 sauf si le rapport des diamètres x vaut x^* . En d'autres termes, la valeur maximale susceptible d'être atteinte par d_j vaut l'unité lorsque $N_{12,CS}^{dense}(x) = N_{12}^*$, ce qui se produit quand $x = x^*$.

A partir d'une valeur donnée de x^* , la densité de juxtaposition diminue progressivement au fur et à mesure que x décroît, $N_{12,CS}^{dense}(x)$ augmentant graduellement tandis que N_{12}^* , correspondant à la partie entière de $N_{12,CS}^{dense}(x)$, reste constante.

Prenons un exemple :

Valeurs données de départ :

$$\text{ex : } x^* = 0,928 \rightarrow N_{12,CS}^{dense}(0,928) = N_{12}^* = 13 ; d_j(0,928) = 1.$$

x décroît en-deçà de 0,928 :

$$\text{ex : } x = 0,900 \rightarrow N_{12,CS}^{dense}(0,9) = 13,44 ; d_j(0,9) = 0,967.$$

$$\text{ex : } x = 0,868 \rightarrow N_{12,CS}^{dense}(0,868) = 13,99 ; d_j(0,868) = 0,929.$$

Mais si x continue à décroître jusqu'à la valeur suivante de x^* , N_{12}^* augmente d'une unité et une discontinuité apparaît dans les valeurs de d_j qui subit une croissance brutale et reprend une valeur de 1.

$$\text{ex : } x = x^* = 0,867 \rightarrow N_{12,CS}^{dense}(0,867) = N_{12}^* = 14 ; d_j(0,867) = 1.$$

Puis l'évolution décrite ci-dessus reprend. Réciproquement, si x croît et dépasse légèrement la valeur suivante de x^* , une petite sphère est exclue du voisinage d'une

grosse, N_{12}^* diminue d'une unité et une discontinuité apparaît dans les valeurs de d_j qui subit une décroissance brutale juste après avoir pris une valeur de **1** : c'est l'effet d'exclusion. La valeur absolue de la pente de $\frac{dN_{12,CS}^{dense}(x)}{dx}$ diminuant lorsque x augmente, la séparation entre les valeurs de x^* s'accroît. Pour x compris entre **0** et **1**, la plus petite valeur de d_j s'obtient pour un rapport de tailles légèrement supérieur à celui permettant de mettre en place une 13^{ème} sphère autour de la sphère centrale : $d_{j,mini} = d_j(0,929) = 0,924$.

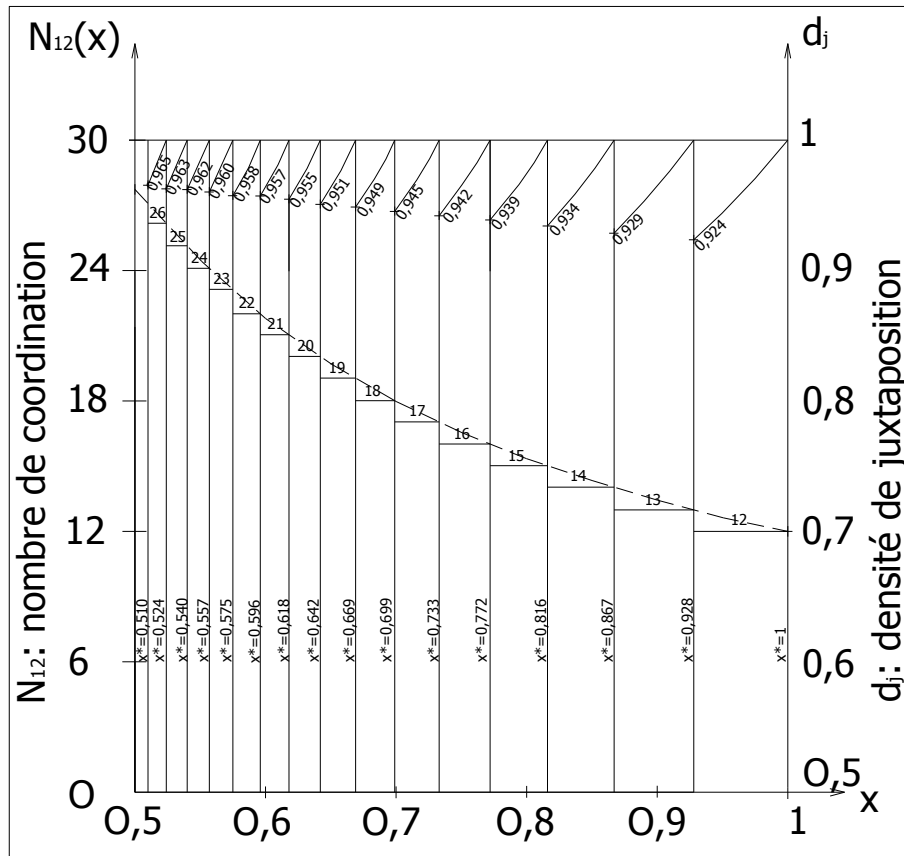


Figure III-13 : nombre de coordination N_{12} et densité de juxtaposition d_j en fonction de x , d'après le modèle des carrés sphériques, dans l'hypothèse où la partie entière (entier naturel) du nombre de coordination est retenue.

Prendre en compte la valeur exacte (1^{er} cas) de $N_{12,CS}^{dense}(x)$ au lieu de sa partie entière (2^{ème} cas) peut donc engendrer un écart d'au maximum **8%**, alors que l'on sait que le nombre de coordination est, par nature, le nombre entier de sphères **2** entourant une sphère **1**, la partie après la virgule représentant l'interstice disponible entre les sphères **2**.

La réponse à notre interrogation, qui paraît anodine au départ, revêt une certaine importance dans la mesure où cela revient à se demander si la fonction caractérisant l'effet de paroi $b(x)$ est continue (1^{er} cas) ou peut être discontinue (2^{ème} cas).

Pour nous, il ne subsiste guère de doutes. Si, à l'échelle locale, le modèle géométrique de sphères dures laisse apparaître une évolution du nombre de coordination en escalier qui se traduirait par l'obtention d'une fonction $b(x)$ présentant des discontinuités aux mêmes abscisses que pour la densité de juxtaposition d_j , le passage aux réalités de la physique, à l'échelle plus globale du tas de grains, laisse entrevoir la possibilité d'utiliser un formalisme continu pour au moins 3 raisons :

- les grains ne sont pas réellement des sphères.
- la fonction $b(x)$ est utilisée pour déterminer une grandeur représentative « en grand » de la qualité de l'empilement, la compacité, à une échelle bien plus importante que celle du grain, sur des mélanges bien plus souvent ternaires ou quaternaires que binaires et avec des constituants possédant chacun une certaine étendue granulaire.
- l'écart maximal entre les valeurs fournies par la fonction en escalier $\text{INT}\{N_{12,CS}^{\text{dense}}(x)\}$ et par la fonction $N_{12,CS}^{\text{dense}}(x)$, pour une même abscisse $x \in [0, 1]$, est faible et ne dépasse pas **8%**. Or, il est précisément obtenu en $x = 0,929$ qui n'est pas le rapport de tailles le plus couramment rencontré lorsque l'on cherche à quantifier les interactions granulaires.

Si, néanmoins, l'industrie du **BTP** venait à accomplir des progrès tels qu'il serait possible de concevoir des bétons binaires discontinus avec des grains de forme plutôt arrondie et qui seraient mis en place avec une énergie de serrage extrêmement élevée pour tendre vers un empilement virtuel, la version discontinue du modèle des carrés sphériques constituerait un outil potentiellement intéressant pour déterminer quelles tailles de grains devraient être supprimées afin de limiter l'effet d'exclusion d'une petite particule située dans le proche voisinage d'une grosse, dû à l'effet de paroi. En voici quelques exemples :

Densité de juxtaposition	Rapport des tailles x de grains à supprimer
> 0,93	de 0,868 à 1
> 0,94	de 0,773 à 1
> 0,95	de 0,670 à 1

Tableau III-6 : rapports de tailles de grains à supprimer pour limiter l'effet d'exclusion dans l'effet de paroi en fonction de la densité de juxtaposition choisie, d'après le modèle des carrés sphériques.

Nous avons développé dans ce paragraphe un modèle, dit des carrés sphériques, permettant le calcul du nombre de coordination de petites sphères contre une grosse dans le but de déterminer leur compacité dans la zone perturbée par l'effet de paroi. Seules les petites particules appartenant au 1^{er} cercle de voisinage sont prises en compte. Le milieu y est considéré particulièrement dense.

L'emprise d'une petite particule sur le contour d'une sphère, concentrique à la grosse et passant par l'ensemble des points de contact des petits éléments entre eux, est matérialisée par un carré sphérique convexe. L'ensemble de ces derniers, en se juxtaposant, crée un pavage qui doit être le plus dense possible. Un concept, déjà utilisé en topologie structurale, est ensuite introduit. La densité de juxtaposition, si elle est égale à 1 , constitue une étape intermédiaire avant d'aboutir à une fonction continue du nombre de coordination. Celle-ci permet notamment de retrouver la valeur singulière obtenue lors de la résolution du fameux problème connu sous le nom de « Kissing Number Problem » (KNP) en dimension 3 et fournit des résultats concordant avec ceux donnés par deux autres modèles. Elle est également utilisée afin de déterminer les rapports de diamètres spécifiques pour lesquels le nombre de coordination est un entier.

La question qui s'est ensuite posée concernait la forme de la fonction à utiliser : soit continue dans le cadre d'une densité de juxtaposition égale à 1 , soit discontinue (fonction partie entière) avec une densité de juxtaposition variable. La première forme est finalement retenue. Mais la seconde permet de tirer certains enseignements susceptibles d'être mis à profit dans le cadre des empilements virtuels binaires : il s'agit d'éliminer certains rapports de tailles de grains pour lesquels la densité de juxtaposition est jugée insuffisante suite à l'exclusion d'une petite sphère de l'entourage d'une grosse par effet de paroi.

3.3. COMPACITÉ β'_2 DES PETITES SPHÈRES DANS LA ZONE PERTURBÉE.

Pour calculer la compacité β'_2 des petits grains dans la zone perturbée par l'effet de paroi, on commence par déterminer la partie de volume de l'un d'entre eux comprise dans cet espace. Rappelons que le volume perturbé est délimité extérieurement par une sphère de diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2k_p x}$ concentrique à une sphère de diamètre d_1 .

Des considérations géométriques relativement simples permettent d'aboutir aux résultats suivants.

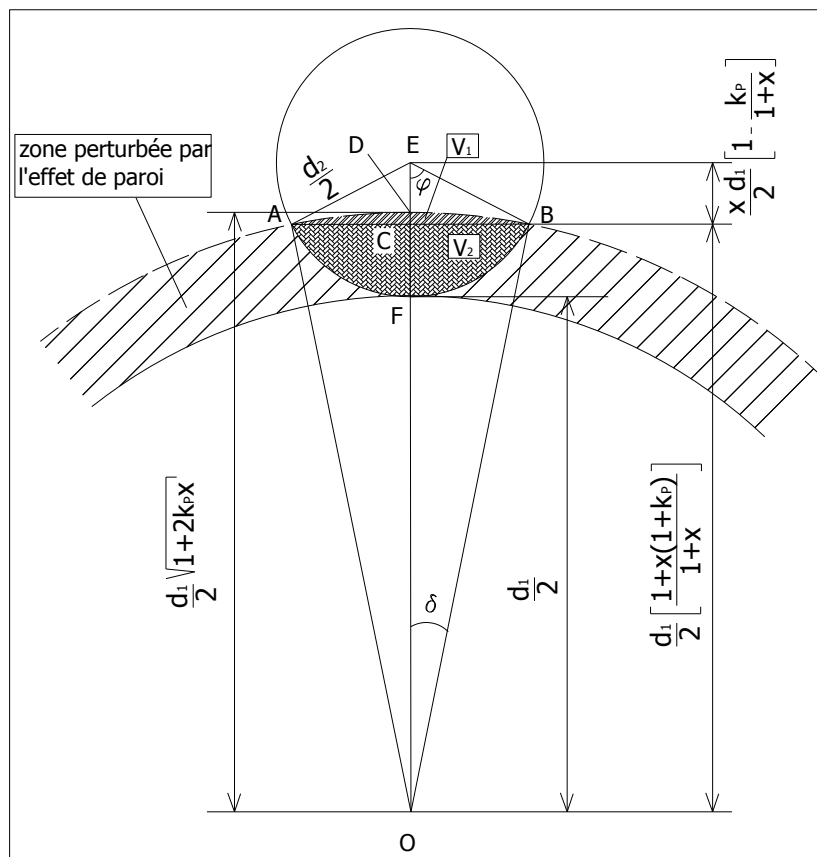


Figure III-14 : présentation des différentes cotes nécessaires au calcul de la compacité des petits grains dans la zone perturbée.

On obtient également :

$$\delta = \arccos \left[\left(1 + 2k_p x \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{k_p x}{1 + x} \right) \right]$$

$$\varphi = \arccos \left(1 - \frac{k_p}{1 + x} \right)$$

Le volume de la sphère de diamètre d_2 compris dans la zone perturbée vaut :

$$V_{21}(x) = V_1(x) + V_2(x).$$

$V_1(x)$ représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et OD.

$$V_1(x) = \frac{\pi}{24} d_1^3 \left(2(1+2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 3(1+2k_p x) \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right) + \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right)^3 \right)$$

$V_2(x)$ représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et EF.

$$V_2(x) = \frac{\pi}{24} (x d_1)^3 \left(-1 + \frac{3k_p}{1+x} + \left(1 - \frac{k_p}{1+x} \right)^3 \right)$$

On en déduit $v_{21}(x)$:

$$\text{III-18 } v_{21}(x) = \frac{\pi}{24} d_1^3 \left(2(1+2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 3(1+2k_p x) \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right) + \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right)^3 - x^3 + \frac{3k_p x^3}{1+x} + x^3 \left(1 - \frac{k_p}{1+x} \right)^3 \right)$$

Le volume de la zone perturbée est délimité par les sphères de diamètre d_1 et $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2k_p x}$:

$$\text{III-19 } V_p(x) = \frac{\pi d_1^3}{6} \left[(1+2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]$$

Le nombre de petites sphères entourant une grosse, enfin, est déterminé grâce à la fonction continue du nombre de coordination obtenue à partir du modèle des carrés sphériques développé dans le paragraphe précédent :

$$\text{III-15 } N_{12,CS}^{dense}(x) = \frac{\pi(1+x)}{x \cdot \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)}$$

La compacité $\beta'_2(x)$ des petits grains dans la zone perturbée par l'effet de paroi s'écrit, par conséquent :

$$\text{III-20 } \beta'_2(x) = \frac{N_{12,CS}^{dense}(x) V_{21}(x)}{V_p(x)}$$

$$\beta'_2(x) = \frac{\pi(1+x)}{4x \left((1+2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)} \times \left(2(1+2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 3(1+2k_p x) \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right) + \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right)^3 - x^3 + \frac{3k_p x^3}{1+x} + x^3 \left(1 - \frac{k_p}{1+x} \right)^3 \right)$$

Il reste maintenant à établir l'expression du coefficient d'effet de paroi $b_{\text{ROAD}}(x)$ et à poser l'équation permettant la détermination du coefficient de perturbation k_p .

3.4. COEFFICIENT D'INTERACTION CARACTÉRISANT L'EFFET DE PAROI b_{ROAD} .

Rappelons les désignations utilisées :

- ϕ_1 et ϕ_2 les volumes occupés par les classes granulaires de diamètres d_1 et d_2 dans l'unité de volume du mélange granulaire.
- γ_1 et γ_2 leur titre volumique dans le mélange :

$$\gamma_1 = \frac{\phi_1}{\phi_1 + \phi_2} \quad \text{et} \quad \gamma_2 = \frac{\phi_2}{\phi_1 + \phi_2}$$

La différence relative des compacités en zone courante et en zone perturbée $\frac{\beta_2 - \beta'_2}{\beta_2}$ est affectée au volume partiel ϕ_1 des grains de diamètre d_1 pour obtenir un nouveau volume partiel ϕ'_1 égal à :

$$\text{III-21} \quad \phi'_1 = \left(\frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{\beta_2} \left((1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) + 1 \right) \phi_1$$

Le volume partiel ϕ'_2 des grains de diamètre d_2 devient :

$$\text{III-22} \quad \phi'_2 = \beta_2 (1 - \phi'_1) = \beta_2 \left[1 - \left(\frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{\beta_2} \left((1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) + 1 \right) \phi_1 \right]$$

La compacité virtuelle du mélange binaire, dans le cas où les petits grains sont dominants, s'exprime alors par :

$$\text{III-23} \quad \gamma_2 = \phi_1 + \phi'_2 = \beta_2 + \phi_1 \left\{ 1 - \beta_2 \left[1 + \frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{\beta_2} \left((1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \right] \right\} \quad \text{avec} \quad \phi_1 = \gamma_2 \gamma_1$$

d'où :

$$\text{III-24} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left\{ 1 - \beta_2 \left[1 + \frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{\beta_2} \left((1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \right] \right\} \gamma_1}$$

Rappelons ici l'expression I-66 lorsque l'effet de paroi s'exerce seul :

$$\gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right) \gamma_1}$$

Notre modélisation s'appuyant sur l'hypothèse $\beta_1 = \beta_2$, l'expression ci-dessus devient (formule II-2) :

$$\gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - (1 - \beta_2)(1 - b_{21})} \gamma_1$$

En écrivant l'égalité des relations II-2 et III-24 et en notant le coefficient d'effet de paroi $b_{\text{ROAD}}(x)$ plutôt que b_{21} , on aboutit à :

$$\text{III-25} \quad b_{\text{ROAD}}(x) = \frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{1 - \beta_2} \left[(1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]$$

$b_{\text{ROAD}}(x)$ représente le coefficient d'effet de paroi selon la théorie « ROund ADjustable cell » qui consiste à ajuster le diamètre de la cellule de référence sphérique comme nous allons l'expliquer dans le paragraphe suivant.

A ce stade de la modélisation, nous avons donc délimité le contour de la zone perturbée en faisant intervenir un coefficient k_p et établi une expression permettant de déterminer le nombre de petites sphères à l'intérieur pour en déduire leur compacité dans cette zone. Puis nous avons obtenu un coefficient d'effet de paroi, s'exprimant en fonction de k_p , et s'intégrant dans le Modèle d'Empilement Compressible. Il reste maintenant à déterminer k_p pour que l'écriture du modèle soit complète.

3.5. COEFFICIENT DE PERTURBATION k_p .

Rappelons que le coefficient k_p permet de délimiter l'emprise de la zone perturbée en intervenant dans l'expression du diamètre de la cellule sphérique choisie comme référence.

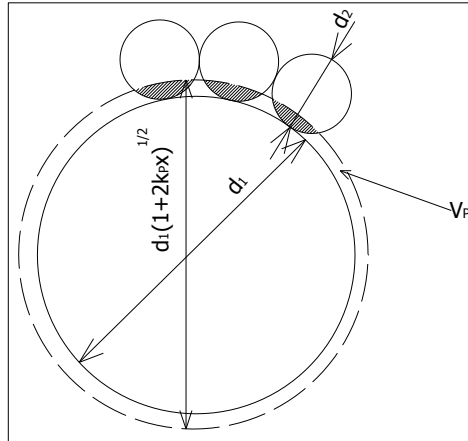


Figure III-15 : intervention du coefficient k_p dans la délimitation de la zone perturbée.

Il s'obtient par la résolution de l'équation $b_{\text{ROAD}}(1) = 1$, permettant ainsi de respecter une des conditions aux limites fondamentale du Modèle d'Empilement Compressible (MEC).

Les expressions permettant d'y parvenir sont les suivantes :

$$\text{III-25} \quad b_{\text{ROAD}}(x) = \frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{1 - \beta_2} \left[(1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]$$

III-20

$$\beta'_2(x) = \frac{\pi(1+x)}{4x \left((1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)} x$$

$$\left(2(1 + 2k_p x)^{\frac{3}{2}} - 3(1 + 2k_p x) \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right) + \left(1 + \frac{k_p x}{1+x} \right)^3 - x^3 + \frac{3k_p x^3}{1+x} + x^3 \left(1 - \frac{k_p}{1+x} \right)^3 \right)$$

On aboutit finalement à l'équation :

$$\text{III-26} \quad (\beta_2 - 6)(1 + 2k_p)^{\frac{3}{2}} + \frac{9}{2}k_p^2 + 18k_p + 5 = 0$$

β_2 représente la compacité des petites sphères de taille unique en pleine masse.

La méthode de calcul de k_p qui va être décrite ci-après est valable pour

$$\beta_2 \in \left[6 - \frac{9}{8} \sqrt{\frac{1}{23} \left(\frac{128}{9\sqrt{3}} - 40 \right)} + 24 \approx 0,65 ; 6 - \frac{9}{8} \sqrt{\frac{1}{23} \left(-\frac{128}{9\sqrt{3}} - 40 \right)} + 24 \approx 0,734 \right].$$

En dehors de cet intervalle, la condition $b_{\text{ROAD}}(1) = 1$ ne peut pas être respectée.

La borne inférieure est proche de **0,64** qui correspond à un empilement aléatoire dense (random close packing).

La borne supérieure, quant à elle, est voisine de **0,74** qui correspond à l'arrangement théorique le plus compact. Cependant, si on réalise que le motif de base le plus simple pour y parvenir est obtenu en plaçant 4 billes en contact parfait aux 4 sommets d'un tétraèdre régulier, on constate que ce type d'agencement ne permet pas de constituer un empilement périodique. En d'autres termes, il est impossible de remplir l'espace avec des tétraèdres réguliers même en déposant les sphères une par une à la main. La limitation de notre étude à $\beta_2 \approx 0,734$ ne constitue donc pas un handicap.

La démarche permettant d'aboutir à k_p peut être décrite de la façon suivante.

On commence par calculer les coefficients a_0 , a_1 , a_2 d'un polynôme du 3^{ème} degré tel que :

$$\text{III-27 } z^3 + a_2 z^2 + a_1 z + a_0 = 0$$

$$a_2 = -\frac{4}{27} \left[123 - 4(6 - \beta_2)^2 \right]$$

$$a_1 = \frac{4}{81} \left[-100 + 4(6 - \beta_2)^2 + \frac{8}{81} \left(81 - 4(6 - \beta_2)^2 \right) \left(180 - 6(6 - \beta_2)^2 \right) \right]$$

$$a_0 = \frac{64}{729} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{3} \left[(6 - \beta_2)^2 - 25 \right] \left[\frac{4}{243} \left(81 - 4(6 - \beta_2)^2 \right)^2 - \left(123 - 4(6 - \beta_2)^2 \right) \right] \\ - \left[30 - (6 - \beta_2)^2 \right]^2 \end{array} \right\}$$

On le transforme en un second polynôme du 3^{ème} degré sans terme en puissance 2 :

$$\text{III-28 } w^3 + p_1 w + p_0 = 0$$

$$p_1 = -\frac{1}{3} a_2^2 + a_1 \text{ et } p_0 = \frac{2}{27} a_2^3 - \frac{1}{3} a_2 a_1 + a_0$$

On en déduit :

$$\text{III-29 } \chi = \arccos \left(\frac{3 p_0}{2 p_1} \sqrt{\frac{-3}{p_1}} \right) \text{ et } s = 2 \sqrt{\frac{-p_1}{3}}$$

$$w = s \cos\left(\frac{\chi}{3}\right), \text{ solution du second polynôme du } 3^{\text{ème}} \text{ degré}$$

$$z = w - \frac{a_2}{3}, \text{ solution du premier polynôme du } 3^{\text{ème}} \text{ degré}$$

Les derniers calculs permettant d'aboutir à k_p sont les suivants :

$$q_0 = \sqrt{\frac{16}{6561} \left[81 - 4(6 - \beta_2)^2 \right]^2 + z - \frac{12}{81} \left[123 - 4(6 - \beta_2)^2 \right]}$$

$$q_1 = -\sqrt{\frac{z^2}{4} + \frac{4}{81} \left[(6 - \beta_2)^2 - 25 \right]}$$

$$\Delta = \left\{ \frac{4}{81} \left[81 - 4(6 - \beta_2)^2 \right] - q_0 \right\}^2 - 4 \left(\frac{z}{2} - q_1 \right)$$

III-30

$$k_p = \frac{1}{2} \left(q_0 - \sqrt{\Delta} \right) - \frac{2}{81} \left[81 - 4(6 - \beta_2)^2 \right]$$

Voici quelques valeurs de k_p en fonction de β_2 :

β_2	0,65	0,66	0,67	0,68	0,69	0,70	0,71	0,72	0,73	0,734
k_p	0,4466	0,5854	0,6729	0,7543	0,8369	0,9253	1,0252	1,1476	1,3284	1,4729

Tableau III-7 : valeurs de k_p en fonction de la compacité des petits grains en pleine masse β_2 .

La représentation graphique correspondante est donnée ci-dessous.

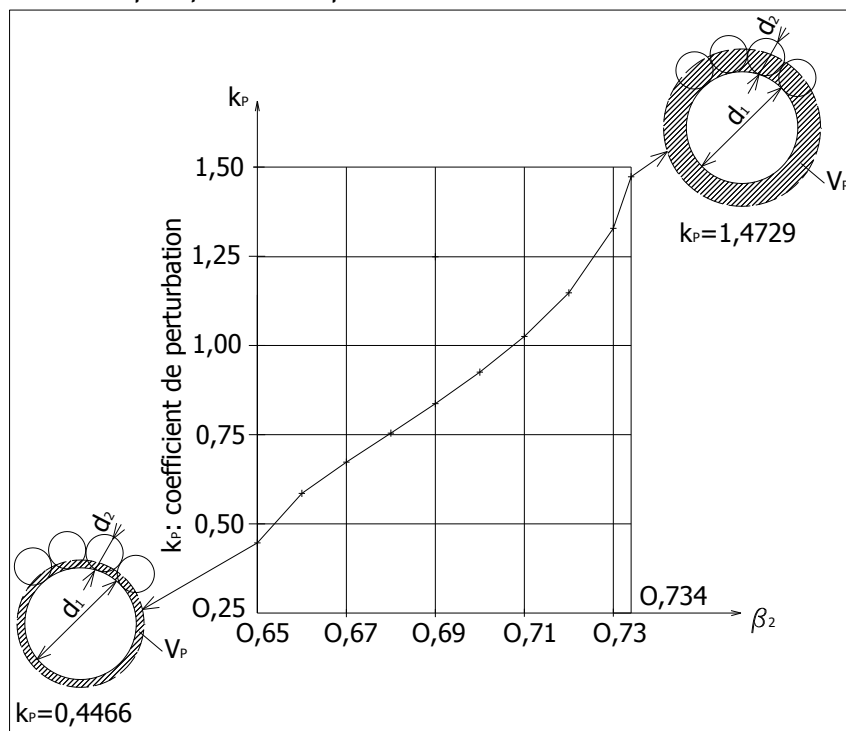


Figure III-16 : représentation de k_p en fonction de la compacité des petits grains en pleine masse β_2 .

D'après les valeurs fournies par le modèle et pour un rapport de tailles fixé, on constate que le diamètre de la sphère hypothétique dans lequel l'arrangement des petits grains est perturbé du fait de la présence d'un gros est d'autant plus important que leur empilement en pleine masse est compact. La courbe semble présenter une partie concave pour β_2 compris entre 0,65 et 0,67, une partie quasi-linéaire avec semble-t-il un point d'inflexion entre 0,67 et 0,70 et une partie convexe entre 0,70 et 0,734 avec une forte croissance pour finir.

C'est pour une compacité β_2 légèrement inférieure à 0,71 que le modèle fournit une épaisseur de zone perturbée équivalente à la cellule de référence de Ben-Aïm et de Suzuki et Oshima (pour $\beta_2 = 0,71$, $k_p \approx 1$).

Par ailleurs, les résultats obtenus semblent cohérents avec l'analyse effectuée sur 3 modèles théoriques présentés dans le tableau III-1 que nous allons reprendre.

Auteurs	Type de cellule	Type de mélange	Conclusions / comparaison avec notre modèle.
Ben-Aïm	Cellule sphérique de Ben-Aïm.	Aléatoire	Diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2x}$ de la cellule sphérique de Ben-Aïm <u>surestimé</u> et conduisant à des valeurs $b(x)$ trop importantes pour $x > 0,3$ lorsque $\beta_2 = 0,64 \Rightarrow$ <u>vérifié avec $k_p < 1$.</u>
Dodds	Deltaèdre.	Empilement hexagonal compact	Condition $b(1) = 1$ <u>respectée</u> avec le deltaèdre de Dodds. Celui-ci équivaut à une sphère de diamètre légèrement $> d_{hyp} \Rightarrow$ <u>vérifié avec $k_p > 1$.</u>
Suzuki et Oshima	Cellule sphérique de Ben-Aïm.	Aléatoire et/ou très compact	- Diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2x}$ de la cellule sphérique de Ben-Aïm <u>surestimé</u> et conduisant à des valeurs $b(x)$ trop importantes pour $x > 0,3$ lorsque $\beta_2 = 0,64 \Rightarrow$ <u>vérifié avec $k_p < 1$ dans le cas d'un empilement aléatoire.</u> - Compacité des petits grains en zone perturbée β'_2 <u>sous-estimée</u> conduisant à des valeurs $b(x)$ trop importantes pour $x > 0,3$ lorsque $\beta_2 = 0,74 \Rightarrow$ <u>avec $k_p > 1$, il restera à vérifier, dans le paragraphe suivant, que β'_2 subit une légère croissance par rapport aux valeurs de Suzuki et Oshima.</u>

Tableau III-8 : vérification de la cohérence de la géométrie de cellule obtenue avec notre modèle « ROUNd ADjustable cell » grâce à l'insertion d'un coefficient k_p , par comparaison avec d'autres géométries de cellules utilisées par différents auteurs pour déterminer l'effet de paroi.

Quelques questions méritent maintenant d'être posées :

- combien vaut l'épaisseur maximale de la zone perturbée relativement au diamètre des petits grains ? Peut-elle être supérieure à 0,5 ?
- Si oui, la méthode de calcul de β'_2 est-elle toujours adaptée ?
- Est-il possible qu'une fraction des petites particules appartenant au « 2^{ème} cercle » de voisinage puisse occuper partiellement la zone dans laquelle se fait sentir l'effet de paroi ?

Abordons tout d'abord la 1^{ère} question : combien vaut l'épaisseur maximale de la zone perturbée relativement au diamètre des petits grains ?

L'épaisseur relative se calcule de la façon suivante :

$$\frac{d_1 \sqrt{1+2k_p x} - d_1}{2d_2} = \frac{\sqrt{1+2k_p x} - 1}{2x}$$

Elle atteint sa valeur relative la plus élevée lorsque x tend vers 0 et vaut environ $\frac{k_p}{2}$. Sachant que k_p évolue jusqu'à 1,4729 pour $\beta_2 \approx 0,734$ (empilement en pleine masse des éléments fins très dense), elle peut se situer, au maximum, aux alentours de 0,736. L'épaisseur maximale de la zone perturbée peut donc valoir environ $0,736 d_2$ et être supérieure au rayon d'une petite particule.

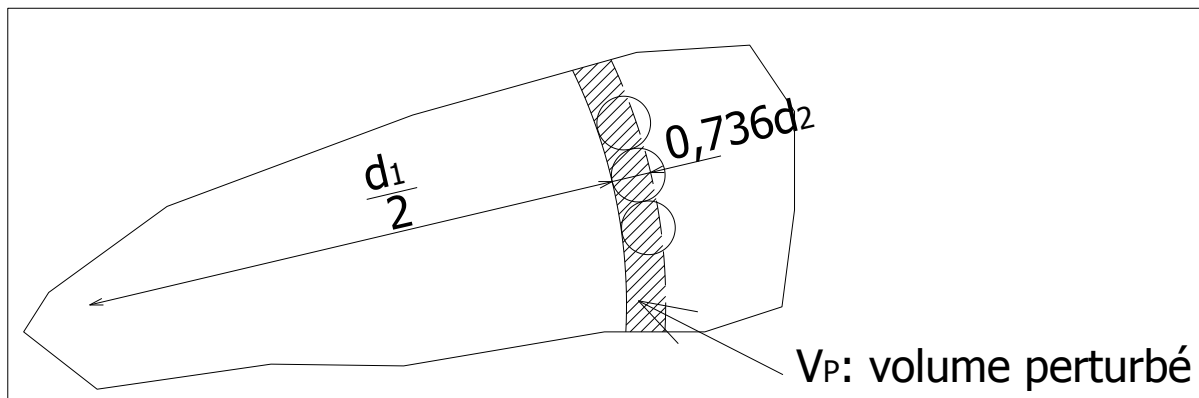


Figure III-17 : épaisseur maximale de la zone perturbée lorsque x tend vers 0 pour une compacité des petits grains en pleine masse β_2 se rapprochant de 0,734.

Abordons maintenant la question suivante : la méthode de calcul de β'_2 est-elle toujours adaptée ? Les formules permettant les calculs des volumes V_1 et V_2 figurant sur la figure III-14 et dont la somme correspond à la fraction de volume d'une petite particule comprise dans la zone perturbée sont-elles toujours correctes lorsque l'épaisseur maximale relative de cette dernière est supérieure à 0,5 ?

Nous les avons vérifiées et nous pouvons répondre par l'affirmative.

Abordons enfin la 3^{ème} question : est-il possible que des fractions de petites sphères appartenant à la 2^{ème} couche de voisinage d'une grosse particule se situent dans la zone perturbée ?

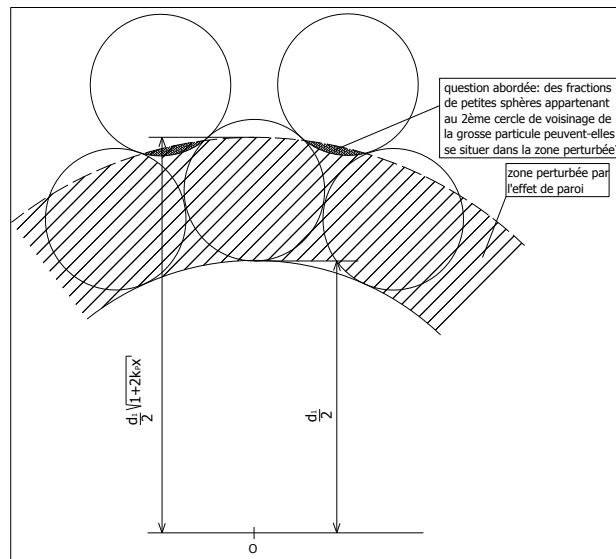


Figure III-18 : illustration de la question posée concernant la présence de fractions de petites particules appartenant au 2^{ème} cercle de voisinage dans la zone perturbée.

Puisque l'épaisseur de la zone perturbée atteint sa valeur relative la plus élevée lorsque x tend vers 0, nous allons nous placer dans cette situation. L'utilisation du modèle des carrés sphériques, que nous avons mis au point pour déterminer le nombre de coordination, implique une disposition des centres de petites sphères, situées dans le voisinage de la paroi quasi-plane d'une grosse, aux nœuds d'un réseau parallélépipédique centré.

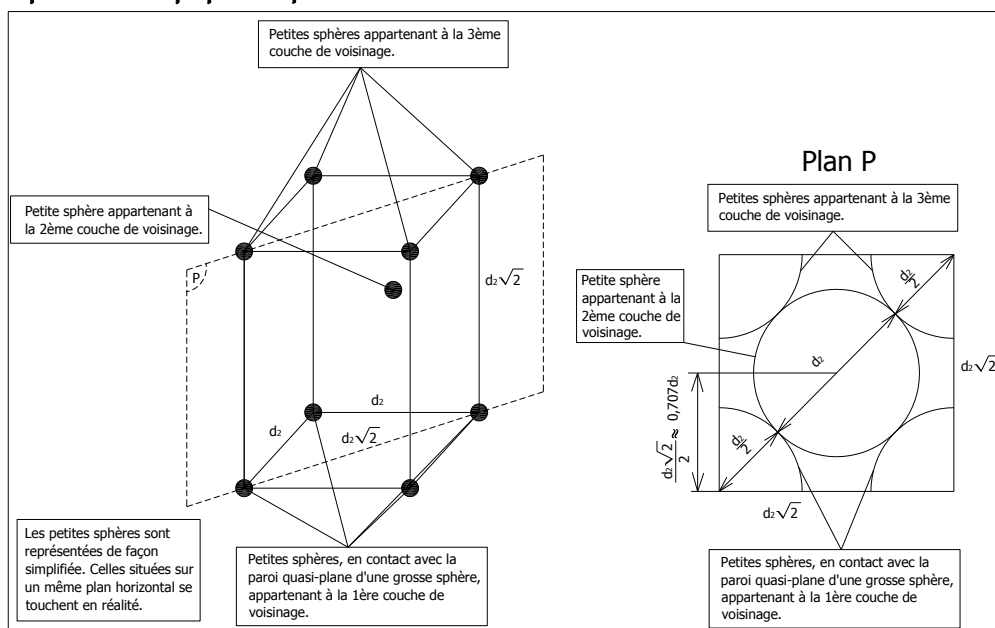


Figure III-19 : petites sphères, situées en 1^{ère}, 2^{ème} et 3^{ème} couches de voisinage d'une grosse sphère dont la paroi est quasi-plane, disposées en réseau parallélépipédique centré.

On a représenté, sur le côté droit de la figure III-19, la coupe passant par le plan P de petites sphères appartenant à trois couches de voisinage, la plus basse étant celle en contact avec une grosse particule.

Les faces carrées inférieure et supérieure du parallélépipède possèdent des côtés de longueur d_2 , puisqu'on trouve deux rayons de petites particules en contact l'une avec l'autre, et des diagonales de longueur $d_2\sqrt{2}$. Le long d'une diagonale du parallélépipède, on dénombre deux demi diamètres et un diamètre d_2 soit une longueur égale à $2d_2$. Le rectangle apparaissant sur le plan P, dont les sommets sont constitués par les centres de 4 petites particules opposées, possède donc un côté horizontal de longueur $d_2\sqrt{2}$ et une diagonale de longueur $2d_2$. Il s'agit donc d'un carré de hauteur $d_2\sqrt{2}$. La distance entre le niveau inférieur des petites sphères appartenant à la 2^{ème} couche de voisinage et la paroi quasi-plane d'une grosse sphère vaut par conséquent $\frac{d_2\sqrt{2}}{2} \approx 0,707 d_2$. Elle est à comparer avec l'épaisseur maximale de la zone perturbée estimée à environ $0,736 d_2$ lorsque x tend vers 0 et lorsque la compacité des éléments fins en pleine masse est égale à $\beta_2 \approx 0,734$.

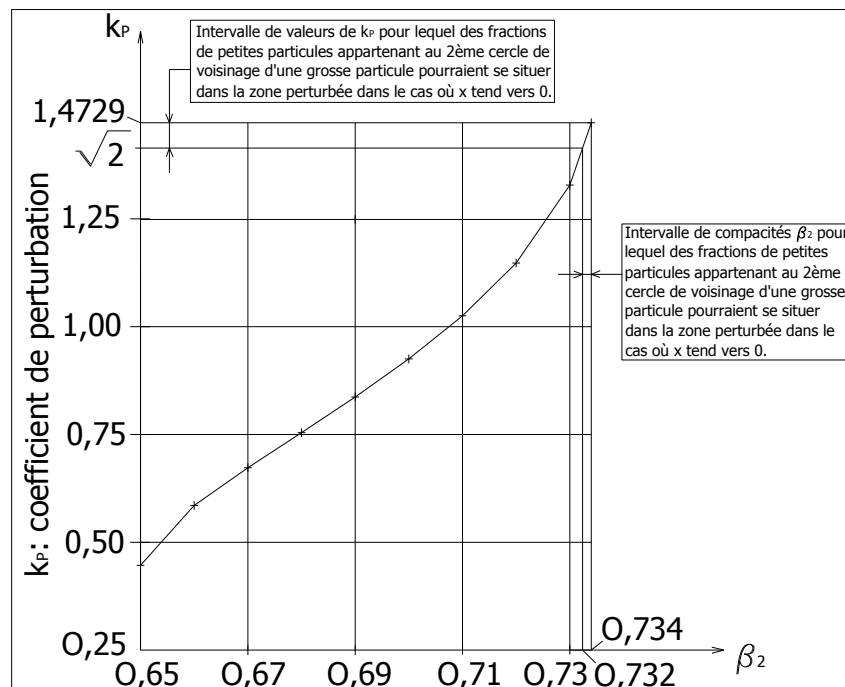


Figure III-20 : situation de la zone de compacité en pleine masse β_2 pour laquelle des fractions de petites particules appartenant au 2^{ème} cercle de voisinage d'une grosse particule pourraient se situer dans la zone perturbée.

Plus généralement, on remarque, sur la figure III-20, que la fourchette de valeurs de β_2 concernée par une éventuelle intrusion partielle des particules appartenant à la 2^{ème} couche de voisinage dans l'espace où se fait sentir l'effet de paroi est, selon notre modèle, à la fois très réduite puisque comprise entre 0,732 et 0,734 et située dans la zone des très fortes compacités pratiquement rarement atteintes. Par ailleurs, le phénomène évoqué a été étudié dans le cadre d'un fort contraste de tailles (x tend vers 0) pour lequel le coefficient d'effet de paroi est très faible malgré une épaisseur de zone perturbée plus importante, relativement au diamètre des éléments fins. Ces trois raisons justifient son absence de prise en compte dans les calculs.

Pour finir, une des hypothèses forte du Modèle d'Empilement Compressible (MEC) concerne la linéarité de l'effet de paroi par rapport au volume de la classe possédant le plus grand diamètre. Pour être vérifiée, il est nécessaire que les espaces subissant l'effet de paroi autour de chaque grosse particule soient disjoints. Dans le cadre des hypothèses de constitution de notre modèle, cette assertion apparaît justifiée puisque leur épaisseur vaut au maximum environ 73% du diamètre des éléments fins (dans le cas où $x \rightarrow 0$, $\beta_2 \approx 0,734$, $k_p \approx 1,4729$).

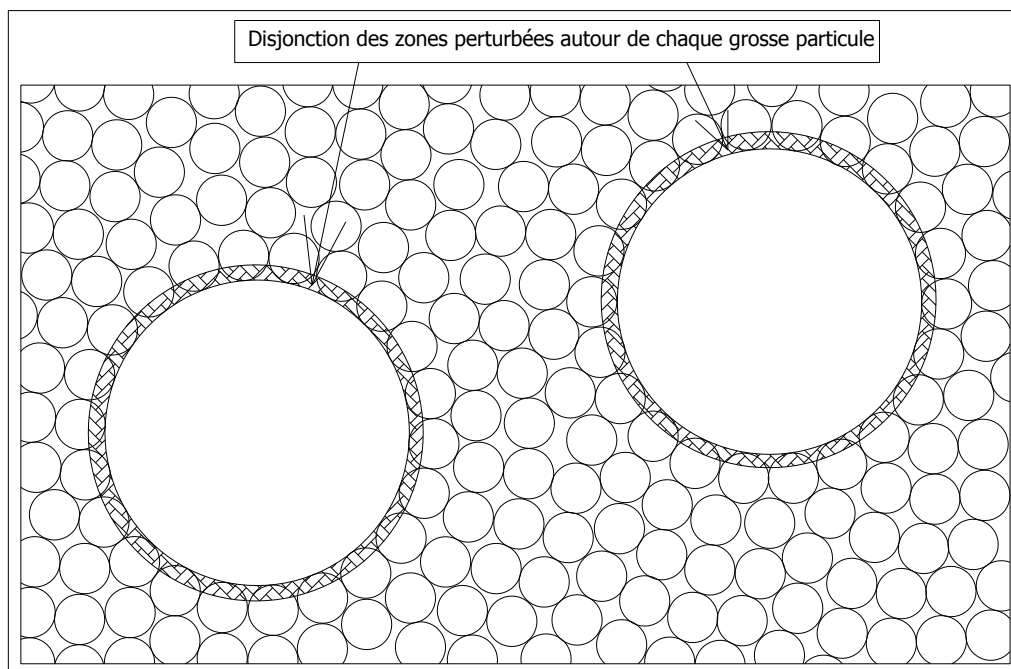


Figure III-21 : hypothèse de disjonction des zones perturbées autour de chaque grosse particule incluse.

3.6. ÉVOLUTION DU RAPPORT $k_w = \beta'_2/\beta_2$ EN FONCTION DU RAPPORT DES DIAMÈTRES x ET DE β_2 .

Reportons, sur la figure suivante, le rapport des compacités en zone perturbée et en zone courante $k_w = \frac{\beta'_2}{\beta_2}$ en fonction du rapport des diamètres x et de β_2 .

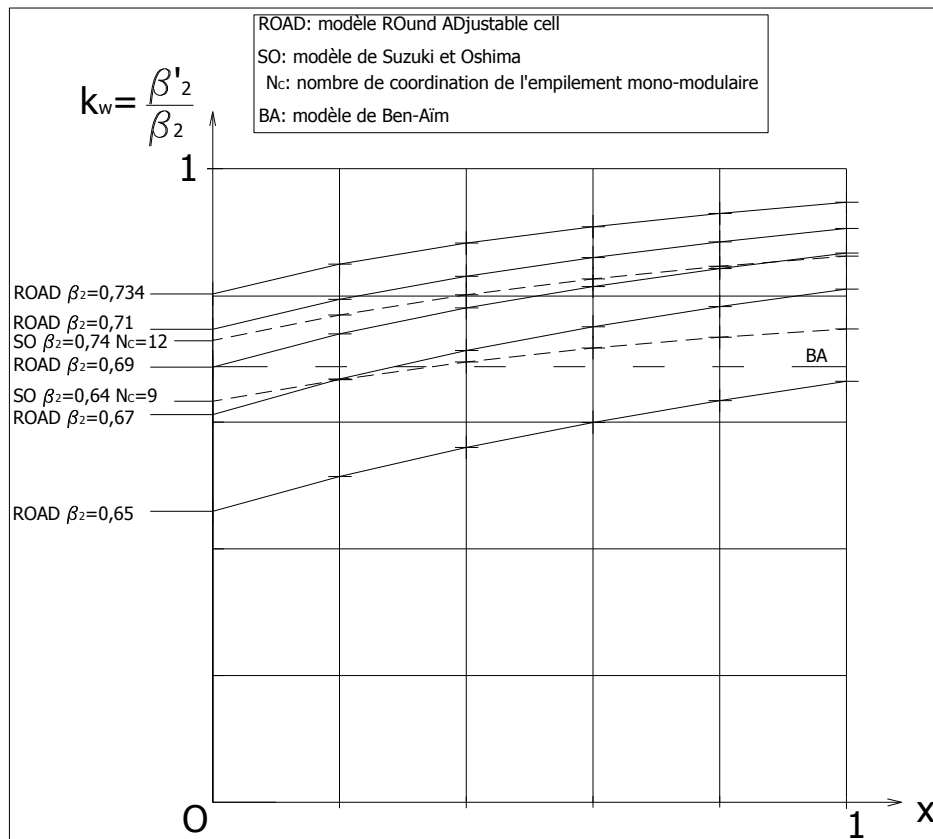


Figure III-22 : évolution du rapport des compacités en zone perturbée et en zone courante k_w en fonction du rapport des diamètres x et de β_2 , d'après les modèles ROund ADjustable cell (ROAD), de Suzuki et Oshima (SO), et de Ben-Aïm (BA).

Dans le domaine d'étude de k_p ($k_p \in [0,4466 ; 1,4729]$), les résultats fournis par la théorie ROund ADjustable cell (ROAD) amènent les commentaires suivants concernant $k_w = \frac{\beta'_2}{\beta_2}$. Celui-ci est d'autant plus élevé :

- que le contraste des tailles est faible (x fort) pour un arrangement des petits grains en pleine masse donné (β_2 constante) ;
- que l'empilement de ces derniers est compact (β_2 forte) pour un rapport x fixé.

Lorsque x tend vers 0 (exemple de l'effet exercé par la paroi d'un coffrage ou d'un récipient), il est aisé de montrer que k_w peut s'obtenir grâce à la relation suivante :

III-31

$$k_w(x=0; k_p) = \frac{\pi}{4\beta_2} k_p \left(1 - \frac{k_p}{3}\right)$$

Ainsi, les points de départ des courbes, situés sur l'axe des ordonnées, vont se rapprocher au fur et à mesure que le coefficient de perturbation k_p va régulièrement s'accroître.

Pour les autres valeurs de x , les évolutions de k_w sont plus marquées pour les forts contrastes de tailles (x faible) pour finalement s'atténuer lorsque le diamètre des éléments fins se rapproche de celui de la sphère intruse. Cette dernière tendance se manifeste d'autant plus que β_2 est élevée ce qui crée un resserrement des courbes au fur et à mesure de l'accroissement de x .

Toutes les constatations précédentes, résultant de l'analyse théorique, peuvent se résumer de la façon suivante : k_w augmente avec l'épaisseur de la zone perturbée, qui

vaut $\frac{d_1}{2} \left(\sqrt{1 + 2k_p x} - 1 \right)$, lorsque celle-ci est provoquée soit par une augmentation du rapport des diamètres x (pour k_p fixé), soit du coefficient k_p (pour x constant) qui croît lui-même en même temps que la compacité des petits grains en pleine masse β_2 .

Néanmoins, quand x et k_p atteignent des valeurs proches de la borne supérieure de leur domaine d'étude, cette évolution s'effectue de moins en moins nettement.

Concernant la pertinence du choix de la géométrie de cellule adoptée dans le modèle ROAD, il restait à vérifier (se reporter au tableau III-8) que la compacité des éléments fins en zone perturbée β'_2 est plus importante que celle fournie par le modèle de Suzuki et Oshima dans le cas d'un empilement très compact, avec $k_p > 1$. Ce résultat se vérifie clairement sur la figure III-22 où les courbes issues de la théorie ROAD obtenues dans le cas $\beta_2 \geq 0,71$ ($k_p > 1$) se situent au-dessus de celle obtenue à partir du modèle de Suzuki et Oshima avec $N_c = 12$. Ce dernier fournit néanmoins des évolutions de k_w en fonction de x moins marquées que les nôtres. Pour $N_c = 9$ correspondant à un empilement aléatoire, il engendre même des résultats finalement peu éloignés de la valeur constante de Ben-Aïm égale à $\frac{11}{16} \approx 0,6875$. Les deux théories utilisent d'ailleurs la même géométrie de cellule pour délimiter l'extérieur de la zone perturbée en tenant compte de la courbure de la paroi. Mais Ben-Aïm néglige cette dernière pour déterminer la compacité des petits grains à l'intérieur. Ce faisant, son coefficient k_w , indépendant du rapport des diamètres, apparaît plus adapté au cas où x tend vers 0, qui se produit lorsque la grosse particule possède une paroi quasi-rectiligne à l'échelle des petites particules.

Cette spécificité du modèle de Ben-Aïm le rend également particulièrement attractif pour l'étude de l'effet de paroi exercé par la surface plane d'un récipient ou d'un coffrage. A ce titre, il nous a semblé intéressant d'établir une comparaison entre sa théorie et la nôtre, dans ce cas très spécifique, en nous basant sur des résultats répertoriés dans [DELA00].

Ben-Aïm considère un volume perturbé V_p (dans l'unité de volume total du mélange) situé entre la paroi rectiligne et $\frac{d_2}{2}$ correspondant à une épaisseur égale au rayon d'une petite particule. Dans cette zone, la compacité est $k_{wBA}\alpha_2$ (exprimée en compacité réelle et non virtuelle). Dans tout le récipient, elle vaut alors, en moyenne :

$$\text{III-32} \quad \overline{\alpha_2} = (1 - V_p) \alpha_2 + V_p k_{wBA} \alpha_2$$

$$\overline{\alpha_2} = \left[1 - (1 - k_{wBA}) V_p \right] \alpha_2$$

k_{wBA} : coefficient k_w d'après la théorie de Ben-Aïm

V_p peut être remplacé par : $A_p \frac{d_2}{2}$ où A_p peut être désignée comme étant l'aire perturbée. On en déduit :

$$\overline{\alpha_2} = \left[1 - (1 - k_{wBA}) A_p \frac{d_2}{2} \right] \alpha_2$$

D'après Ben-Aïm, k_{wBA} vaut donc : $\frac{11}{16} \approx 0,6875$ qui concorde avec ses données expérimentales.

D'après [DELA00], k_{wBA} est estimé à 0,88 pour les grains roulés et à 0,73 pour les concassés. Les résultats obtenus sont donc supérieurs à la valeur originelle de Ben-Aïm.

Utilisons maintenant le modèle ROAD :

- dans le cadre d'un empilement aléatoire avec $\alpha_2 = 0,65$;
- avec un coefficient de perturbation correspondant égal à : $k_p = 0,4466$;
- avec une épaisseur de zone perturbée obtenue dans le cas où $x \rightarrow 0$ égale

$$\text{à : } k_p \frac{d_2}{2} ;$$

Dans ce cas, la compacité moyenne dans le récipient s'exprime par :

$$\text{III-33} \quad \bar{\alpha}_2 = \left[1 - (1 - k_{wROAD}) A_p k_p \frac{d_2}{2} \right] \alpha_2$$

k_{wROAD} : coefficient k_w d'après la théorie ROund ADjustable cell (ROAD).

L'égalité des relations III-32 et III-33 permet d'exprimer le coefficient k_{wBA} en fonction de k_{wROAD} dans le cas $x \rightarrow 0$:

$$\text{III-34} \quad 1 - k_{wBA} = (1 - k_{wROAD}) k_p$$

soit : $k_{wBA} = 1 - (1 - k_{wROAD}) k_p = 1 - 0,4466 (1 - k_{wROAD})$

L'expression III-31 permet de calculer k_{wROAD} :

$$k_{wROAD} = \frac{\pi}{4 \times 0,65} \times 0,4466 \times \left(1 - \frac{0,4466}{3} \right) \approx 0,459$$

En remplaçant dans III-34, on obtient :

$$k_{wBA} = 1 - 0,4466 (1 - 0,459) \approx 0,76$$

Dans le référentiel de Ben-Aïm qui considère une épaisseur de zone perturbée égale à $\frac{d}{2}$, le modèle ROund ADjustable cell (ROAD) fournit un coefficient k_w égal à 0,76 qui se situe dans la fourchette de valeurs obtenue dans [DELA00] (0,73 pour les concassés, 0,88 pour les grains roulés) et qui s'avère supérieur à celui de Ben-Aïm qui était insuffisant $\left(\frac{11}{16} \approx 0,6875 \right)$.

Il semble donc que dans le cas d'un effet de paroi exercé par la surface plane d'un coffrage ou d'un récipient, notre modèle apporte une amélioration par rapport au modèle antérieur de Ben-Aïm.

3.7. REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DE LA FONCTION b_{ROAD} DÉCRIVANT L'EFFET DE PAROI EN FONCTION DE x ET DE β_2 , COMPACTITÉ DES PETITES SPHÈRES EN PLEINE MASSE.

On a traduit les résultats de plusieurs simulations sur la figure suivante. Elles donnent le coefficient d'effet de paroi b_{ROAD} , selon la théorie ROund ADjustable cell, en fonction du rapport x des diamètres des petites sphères à celui de la grosse pour différentes valeurs β_2 de la compacité des petits grains en pleine masse.

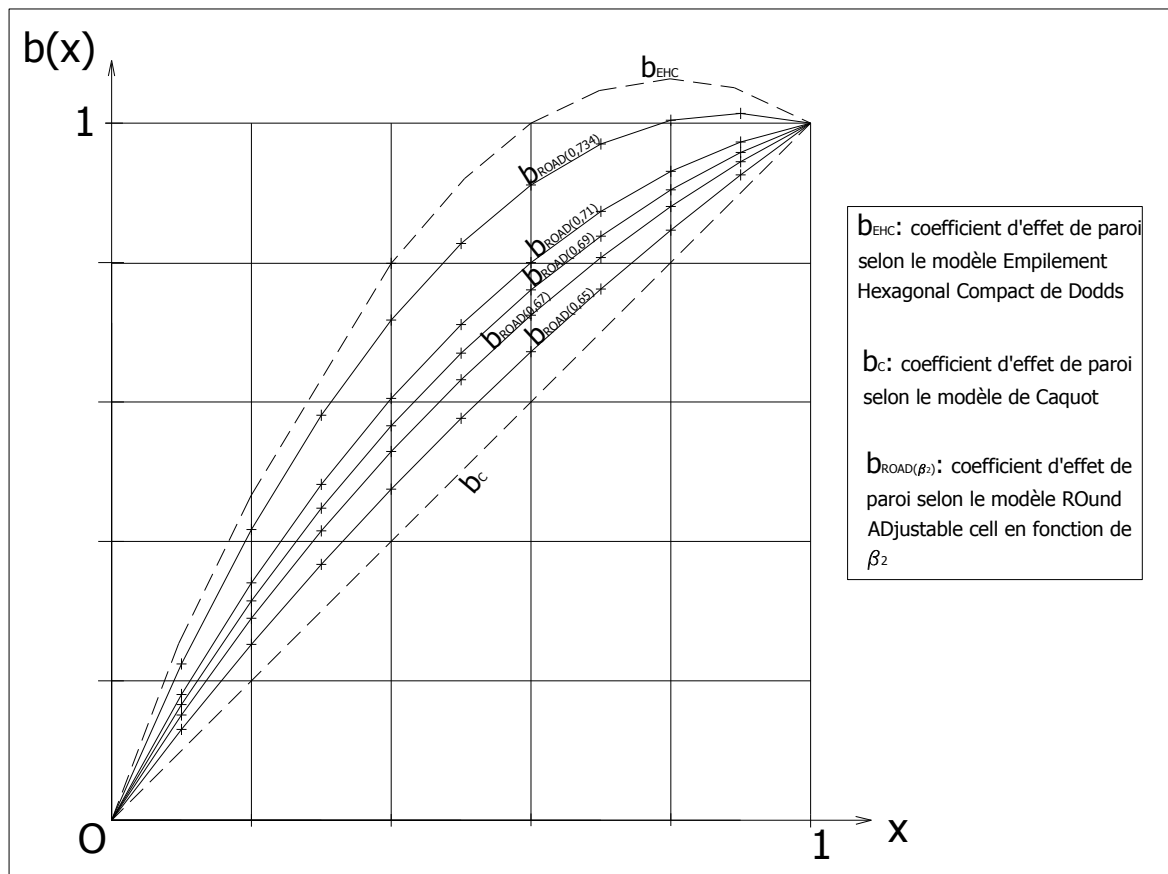


Figure III-23 : représentation de la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » en fonction du rapport x des grosseurs fins/gros pour différentes valeurs de β_2 d'après le modèle ROund ADjustable cell (ROAD). Comparaison avec la fonction b_c du modèle de Caquot et la fonction b_{EHC} issue du modèle Empilement Hexagonal Compact de Dodds.

On a également fait figurer les courbes de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC) et de Caquot mais pas celles de Ben-Aïm et de Suzuki et Oshima (représentées sur la figure II-12) dans la mesure où :

- le diamètre de la sphère délimitant l'extérieur de leur zone perturbée n'est pas adapté à toutes les situations, comme nous l'avons montré. La condition aux limites $b(1) = 1$ n'est donc pas respectée.

- leur domaine de validité concerne avant tout les forts contrastes de tailles (x faible).

Le modèle de Caquot a été établi sans hypothèses particulières concernant la forme des grains ou la façon dont l'empilement est constitué que l'on peut considérer comme aléatoire. Il présente, par conséquent, un caractère tout à fait général à une nuance près cependant : la courbure du gros grain qui provoque l'effet de paroi n'est pas prise en compte. Celui-ci est donc sous-estimé.

Le modèle EHC de Dodds, en revanche, suppose un arrangement théorique idéal des petites particules de forme sphérique sous forme de tétraèdres réguliers en pleine masse (β_2 fixée à son maximum). Or, il aboutit, conformément aux calculs présentés dans le paragraphe consacré au modèle de Ben-Aïm, au résultat suivant : le coefficient d'interaction, pour un contraste de tailles x fixé, est proportionnel à $\frac{\beta_2}{1-\beta_2}$. Par conséquent, grâce à l'hypothèse d'un environnement mono-modulaire le plus compact qui soit et à l'obtention d'une fonction b_{EHC} strictement croissante de β_2 , ce modèle conduit implicitement à une limite maximale du coefficient d'interaction.

Les théories de Caquot et de l'EHC peuvent donc être, en quelque sorte, considérées respectivement comme les bornes inférieure et supérieure entre lesquelles doivent se situer les résultats expérimentaux.

Certes, de Larrard [DELA00] a montré que ces derniers peuvent être, dans certains cas, plus faibles que la borne inférieure de Caquot du côté des grains fins dominants. Certaines valeurs négatives de b ont même été obtenues, la compacité des mélanges correspondants étant plus forte que s'il n'y avait pas d'interaction. Aïtcin et Albinger [AITC89] l'expliquent par le rôle de vibrateurs internes que pourraient tenir les gros grains vis-à-vis des petits, lesquels se mettraient en place plus facilement lorsque leur empilement initial en pleine masse est lâche. Ils subiraient alors un anti-effet de paroi.

Le modèle présenté ici fournit donc des courbes comprises entre celles de Caquot et de l'EHC.

Pour un mélange aléatoire correspondant à notre courbe $\beta_2 = 0,65$, la différence avec la borne inférieure de Caquot passe par un maximum pour un rapport de tailles x aux alentours de $0,5$. Négliger la courbure des gros grains dans le calcul de la fonction « effet de paroi » peut conduire, d'après notre modèle, à un écart relatif pouvant atteindre un peu plus de **10%** dans ce cas.

On peut également remarquer que les prévisions qu'il donne s'approchent progressivement de la borne supérieure lorsque β_2 augmente.

En d'autres termes, une grosse sphère constitue un intrus qui crée une perturbation d'autant plus forte que son environnement mono-modulaire est compact.

On peut donc s'attendre à ce qu'une augmentation de β_2 engendre un accroissement de compacité du mélange binaire de plus en plus pénalisé par l'amplification locale des interactions.

Au-delà d'une certaine valeur ($\beta_2 = 0,726$) et pour des faibles contrastes de tailles, on peut même remarquer des valeurs de la fonction b supérieures à 1 .

Cet aspect constitue une particularité de notre modèle qui a déjà été relevée dans les prévisions fournies par celui de l'EHC. Dans ces conditions et selon nos hypothèses, l'ajout d'une grosse sphère dans un empilement de petites billes mono-modulaires conduirait à un mélange présentant une compacité inférieure à β_2 . L'explication serait l'importance du volume de la zone perturbée autour de la sphère intruse ($k_p > 1,24$). De Larrard [DELA88] a mis en évidence, de façon quelque peu similaire, que l'insertion d'un grain intermédiaire dans un mélange binaire pouvait entraîner une diminution de la compacité virtuelle. Dans le même ordre d'idées, un germe de glace ne provoque-t'il pas une modification sensible de la densité de l'eau en état de surfusion ?

Quoi qu'il en soit, ce résultat obtenu théoriquement sera probablement impossible à valider expérimentalement d'une part car il concerne des compacités virtuelles élevées et d'autre part car il faudrait les mesurer sur des sphères parfaitement mono-modulaires que l'on ne sait pas fabriquer.

3.8. RÉSUMÉ ET CONCLUSIONS.

Nous avons présenté, dans ce chapitre, les différentes étapes de l'élaboration d'un modèle permettant la détermination du coefficient d'effet de paroi b , entre sphères exclusivement. Cette interaction se traduit par un relâchement de l'empilement des petits grains au voisinage de l'interface avec un gros.

Le coefficient b est essentiellement destiné au calcul de la compacité virtuelle de mélanges granulaires [DELA00], étape intermédiaire avant la détermination de leur compacité réelle. On entend par compacité virtuelle la valeur maximale qui peut être atteinte lorsque chaque grain est placé de façon idéale dans un empilement, à tel point que l'on peut considérer qu'il s'agit d'une caractéristique du mélange. La compacité réelle, quant à elle, résulte d'un processus de mise en place plus ou moins énergique. C'est donc en supposant que chaque petite sphère est parfaitement placée autour de la grosse que cette étude théorique a été effectuée.

Celle-ci a, par ailleurs, été menée en faisant intervenir, dans la détermination du volume de la zone perturbée, la courbure du gros grain. Il s'agit d'une des hypothèses principales de Ben-Aïm [BENA70] qui, pourtant, ne tient plus compte de cette forme arrondie lorsqu'il s'agit de calculer la compacité β_2 des petits grains à l'intérieur. Suzuki et Oshima [SUZU83] [SUZU85] ont amélioré l'approche précédente en ne considérant plus cette simplification. Mais les fonctions d'effet de paroi obtenues à partir de leurs travaux n'apportent pratiquement aucune amélioration par rapport à celle de leur prédécesseur. Elles surestiment en effet les valeurs de b dès que le rapport de tailles x dépasse 0,3 ou 0,4 et la condition aux limites $b(1) = 1$ est loin d'être respectée.

Une analyse approfondie des hypothèses de constitution de leur modèle et de celui inspiré des travaux de Dodds dénommé modèle de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC) nous a permis d'aboutir à la conclusion que la cellule sphérique de Ben-Aïm, reprise par Suzuki et Oshima, et permettant de délimiter le contour extérieur de la zone perturbée, présentait un grand intérêt mais que son diamètre d_{hyp} devait être mieux adapté.

La première originalité du modèle présenté ici réside dans la redéfinition de la délimitation du volume subissant l'effet de paroi en estimant qu'il est non seulement influencé par x (hypothèse de Ben-Aïm reprise par Suzuki et Oshima), mais également par la compacité résiduelle β_2 des petits grains, prise en compte dans la définition du diamètre d_{hyp} par l'intermédiaire d'un coefficient de perturbation k_p . Celui-ci vaut 1 lorsque la zone perturbée possède une épaisseur identique à celle définie par Ben-Aïm. Rappelons que cette dernière tend vers $\frac{d_2}{2}$ (rayon des petites sphères) pour les forts contrastes de tailles. k_p est obtenu en écrivant que l'interaction est totale lorsque $x = 1$. Les valeurs du coefficient de perturbation se déduisent alors des compacités des petits grains empilés isolément grâce à la résolution d'une équation du 3^{ème} degré.

L'épaisseur de l'espace subissant l'effet de paroi ainsi déterminée est inférieure à celle de Ben-Aïm ($k_p \leq 1$) lorsque l'arrangement des petites sphères en pleine masse se rapproche de l'empilement aléatoire et supérieure ($k_p \geq 1$) lorsqu'il tend vers un ordonnancement quasi-parfait. Elle évolue donc dans le même sens que β_2 .

Intuitivement, l'explication qui peut être fournie est la suivante. L'espace vide entre la surface d'une grosse bille isolée et les petits grains qui l'entourent est plus grand par unité de volume dans cette région qu'il ne l'est à l'intérieur d'un granulat où les particules s'entremêlent. A l'interface avec la paroi de la sphère intruse, la compacité locale des éléments fins tend vers 0 ($k_p \rightarrow 0 \Rightarrow \beta'_2 \rightarrow 0$). Au fur et à mesure que l'on s'en éloigne, elle se rapproche de β_2 . Plus cette dernière sera faible, plus la distance à parcourir pour relier ces deux zones sera courte. On comprend alors pourquoi l'effet engendré par une hétérogénéité locale (la grosse particule) se fait sentir sur une épaisseur qui augmente avec la qualité de l'empilement des petites sphères en pleine masse. Cela se traduit par un accroissement du rapport des compacités en zone perturbée et en zone courante $k_w = \frac{\beta'_2}{\beta_2}$ (pour un rapport x fixé). On aboutit au même résultat lorsque le contraste des tailles diminue (x fort) pour un coefficient de perturbation k_p donné. Toutefois, cette évolution est de moins en moins marquée au fur et à mesure que x et k_p atteignent leur borne supérieure.

Enfin, dans le cas $x \rightarrow 0$ qui correspond à l'effet de paroi exercé par la surface plane d'un coffrage ou d'un récipient, nous obtenons un rapport k_w présentant une meilleure concordance avec les mesures recensées dans [DELA00] sur des empilements aléatoires que celui fourni par Ben-Aïm en nous plaçant dans son référentiel qui, rappelons-le, utilise une épaisseur de zone perturbée égale à $\frac{d_2}{2}$ en cette occasion.

La première originalité de notre modèle justifie son appellation : théorie ROAD pour ROund ADjustable cell.

La seconde originalité réside dans la mise au point d'une méthode de calcul permettant de connaître le nombre de petites billes en contact avec une grosse en fonction de leur rapport de diamètres x .

C'est un problème qui peut paraître primaire mais qui n'a toujours pas reçu de réponse claire malgré la contribution d'illustres chercheurs au domaine de la physique des grains. Et pourtant, sa résolution trouverait des applications dans de nombreux domaines tant les matériaux granulaires occupent une place importante dans le monde qui nous entoure (matériaux de construction, matériaux amorphes, matériaux frittés, industries pharmaceutiques et cosmétiques, alimentation notamment).

La formule proposée se veut un compromis entre simplicité et facilité d'utilisation d'une part et précision d'autre part. En plus de fournir des résultats proches de ceux enregistrés avec deux autres modèles pour x compris entre 0 et 1, elle permet de retrouver la valeur singulière correspondant à la résolution du « Kissing Number Problem » en dimension 3 : 12 sphères peuvent entourer une sphère centrale, toutes de même diamètre. Le calcul s'effectue grâce au modèle des carrés sphériques. Chacun d'entre eux, convexe, matérialise l'emprise, sur le contour de la cellule sphérique de Ben-Aïm, de chacune des petites billes plaquées contre la paroi d'une grosse. Leur ensemble forme un pavage qui doit être le plus dense possible. La densité de juxtaposition d_j , concept utilisé en topologie structurale, permet d'aboutir à la fonction du nombre de coordination N_{12} . Si d_j est considérée en permanence égale à 1, la fonction obtenue est continue. Dans le cas contraire, elle est discontinue ; un « effet d'exclusion » se produit : une petite sphère se trouve exclue du voisinage immédiat d'une grosse par manque de place si son diamètre vient à augmenter de manière infime. Dans le domaine des empilements atomiques consacrés aux verres métalliques, Miracle, Sanders et Senkov [MIRA03] ont montré, à partir d'un modèle adapté aux sphères molles, que les valeurs spécifiques de x , notées x^* , qui donnent des valeurs entières de N_{12} , présentent une forte corrélation avec les ratios spécifiques de diamètres soluté/solvant réellement observés. Pour notre part, dans le cadre d'un modèle plus particulièrement dédié aux matériaux du génie civil dont l'étude constitue l'aboutissement du présent travail, nous avons opté pour le formalisme continu. Cela revient à considérer qu'une portion de petite particule, correspondant à la partie décimale du nombre calculé à partir de la formule de N_{12} que nous avons élaborée, fait partie de la zone perturbée.

Ce choix se justifie d'une part en raison des faibles écarts ($< 8\%$) avec le modèle discontinu, et d'autre part par une structuration incomplète de l'empilement constitué de grains poly-dispersés, non parfaitement sphériques, dont les caractéristiques s'évaluent à une échelle bien plus importante que celle de la particule, et qui présentent par conséquent un caractère aléatoire.

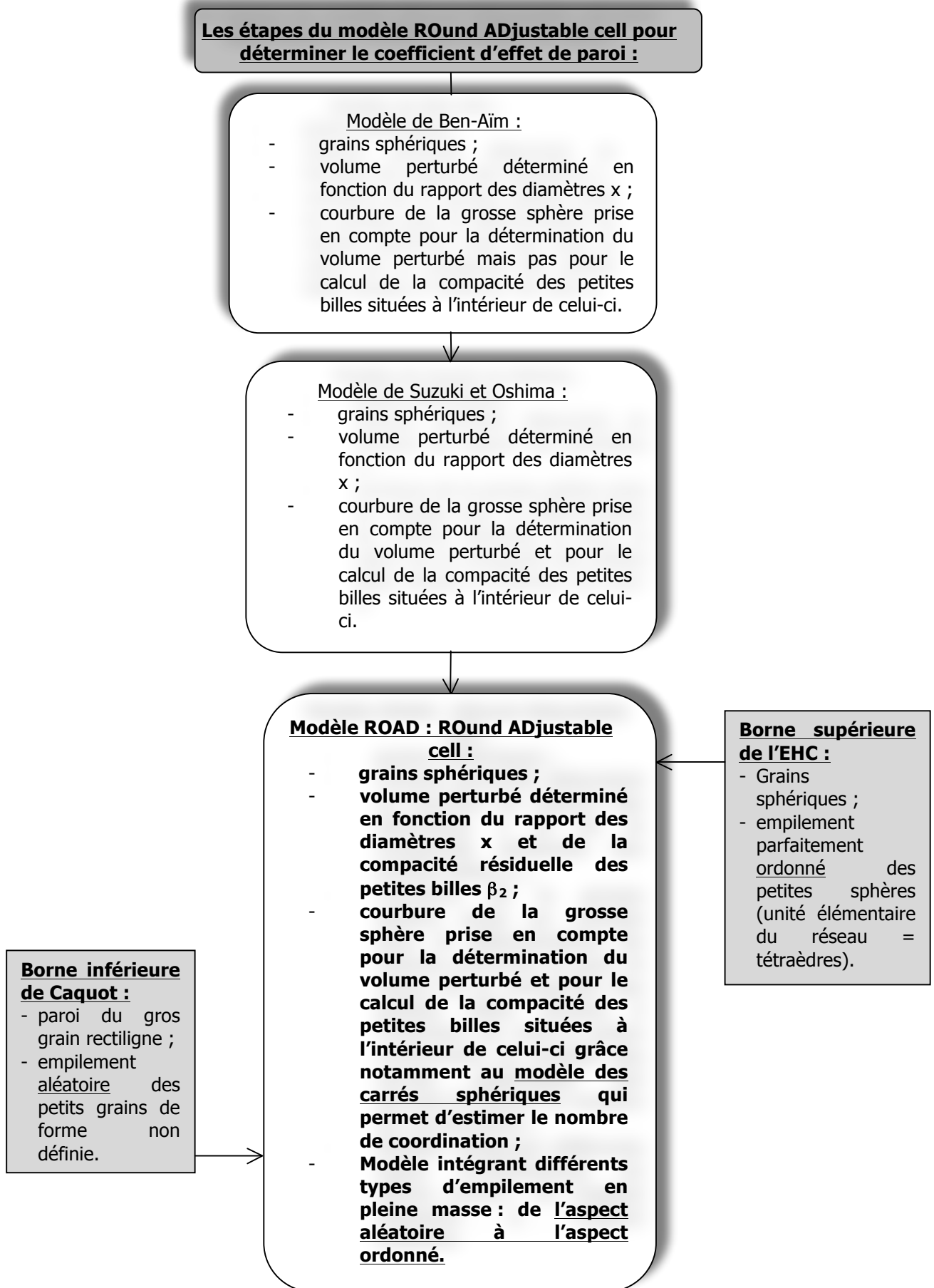
Du fait des hypothèses adoptées, les valeurs du coefficient de paroi b_{ROAD} se situent entre les bornes de Caquot et de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC) à condition de considérer ces dernières comme des limites résultant de paramètres géométriques : surface de la paroi des gros grains (supposée rectiligne) et diamètre des petits pour Caquot, vides contenus dans des tétraèdres irréguliers constitués par le contact de trois petites sphères et d'une grosse pour l'auteur de la seconde modélisation.

Bien que cette dernière prenne en considération des volumes élémentaires différents de ceux utilisés dans l'approche adoptée (tétraèdres dans un cas, sphères concentriques entre lesquelles se situe la zone perturbée dans l'autre), le présent travail aboutit à des résultats qui convergent vers la borne EHC à mesure que l'environnement mono-modulaire de la sphère intruse devient plus compact.

Les deux méthodes s'accordent en particulier sur l'existence de valeurs supérieures à 1 dans certains cas bien spécifiques. Correspondent-elles à une réalité physique ? Pour la mettre en évidence, il faudrait réaliser des essais sur des empilements virtuels très compacts en plaçant les billes une par une, à la main, et en s'assurant qu'elles gardent leur position originelle. Il s'agit donc d'expérimentations aux conditions très spéciales qui devraient, par ailleurs, s'effectuer sur des sphères parfaitement mono-modulaires. Si ce résultat venait à être confirmé, l'explication qui pourrait être proposée est la suivante : la modification de la structuration quasi-idéale des petites billes par la sphère étrangère se ferait sentir sur une épaisseur relativement importante autour de celle-ci (dans la zone perturbée). La porosité globale du mélange binaire qui en résulte serait alors supérieure à celle des éléments fins considérés isolément.

Enfin, lorsque l'empilement est de moins en moins serré, les résultats fournis par le modèle se rapprochent de la borne de Caquot. Celle-ci constitue une limite inférieure pour deux raisons. La première concerne le caractère aléatoire des mélanges étudiés par l'auteur de la première théorie partielle de la granularité optimale. La seconde résulte dans l'absence de prise en compte, par ce dernier, de la courbure de l'hétérogénéité locale.

Les différentes étapes du modèle sont présentées page suivante.

Figure III-24 : les étapes du modèle ROund ADjustable cell $b_{ROAD}(x)$.

CHAPITRE 4

PRÉSENTATION D'UNE MODÉLISATION DE L'EFFET DE DESSERREMENT DANS LE CAS DE SPHÈRES.

L'effet de desserrement est le deuxième type d'interaction granulaire intervenant dans la théorie élaborée pour déterminer la compacité d'un mélange sec. Se produisant dans le cas des « gros dominants », il est considéré comme étant linéaire en fonction du volume partiel de la classe fine. Cette hypothèse est discutable dans la mesure où il apparaît, en réalité, à partir d'une proportion seuil.

Les concepteurs du MEC ont cependant choisi d'adopter cette simplification pour, nous semble t'il, 4 raisons :

- elle est déjà contenue dans le modèle de Mooney (1950) et a été reprise, depuis, par plusieurs équipes de chercheurs : Yu et Standish (1987) et Goltermann, Johansen, Palbol dans le modèle de Toufar modifié (1997) ;
- elle se situe dans la continuité de la démarche adoptée pour l'effet de paroi ;
- elle concerne l'empilement virtuel où chaque petite particule peut théoriquement être déposée « manuellement » à son emplacement idéal, à une distance suffisamment éloignée d'une congénère, pour que le principe d'additivité puisse être retenu ;
- elle permet, malgré tout, l'obtention de résultats d'une remarquable précision dans un milieu particulièrement complexe ;

Tout comme pour l'effet de paroi, nous allons faire appel, dans cette partie, à un matériau modèle constitué de sphères.

L'effet de desserrement correspond au supplément de porosité qui apparaît lorsque des petits grains sont insuffisamment fins pour se glisser dans les interstices disponibles entre les gros. Neuf modèles, dont deux théoriques, ont été répertoriés et ont fait l'objet d'un examen détaillé.

Précisons maintenant notre méthodologie.

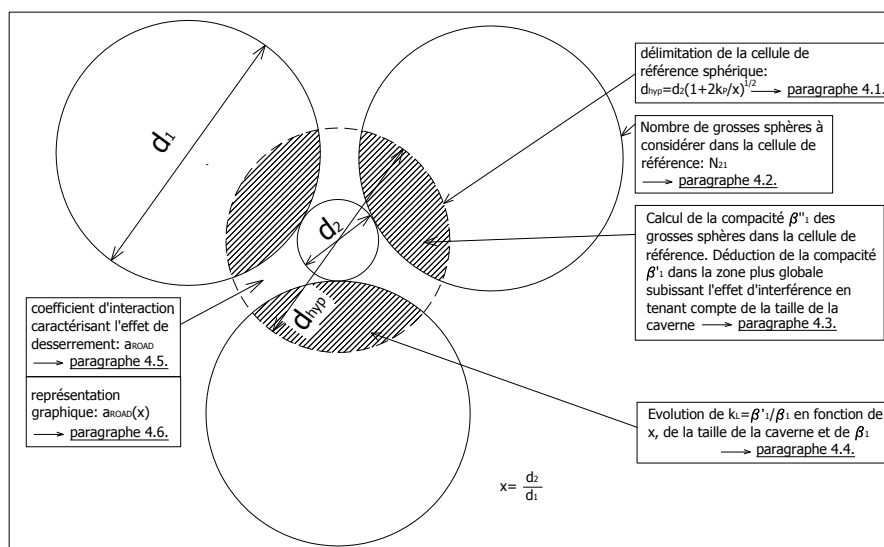


Figure IV-1 : phasage d'élaboration du modèle d'effet de desserrement.

Dans un premier temps, il convient de délimiter la cellule de référence dans laquelle se produit la dilatation causée par l'insertion d'un grain insuffisamment fin pour pouvoir s'insérer dans une cavité du squelette des gros. Inspiré par les travaux de Suzuki et Oshima, nous considérons une cellule sphérique dont le diamètre dépend du coefficient κ_p déjà introduit dans la délimitation de la zone perturbée par l'effet de paroi.

Dans un deuxième temps, le nombre de grosses billes N_{21} situées partiellement dans la cellule de référence sphérique est estimé. Nous conservons la même méthode de calcul, dite des carrés sphériques, que celle mise au point lorsqu'il s'agit d'une grosse sphère qui est entourée de petites.

Dans un troisième temps, la compacité des grosses particules situées dans la cellule de référence β'_1 est évaluée. Le principe de calcul est identique à celui adopté dans la zone perturbée par l'effet de paroi. On en déduit la compacité β'_1 dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence en vérifiant l'absence de décompaction des gros grains lorsque le rapport de tailles x vaut x_0 : il s'agit de la valeur en deçà de laquelle une petite particule peut s'insérer parfaitement dans la cavité du squelette des grosses. On vérifie alors : $\beta'_1(x_0) = \beta_1$.

Dans un quatrième temps, l'évolution du rapport $\kappa_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$ est étudiée en fonction de x , de x_0 et de β_1 . Il sera ainsi possible d'établir des comparaisons avec les valeurs obtenues avec une géométrie de cellule tétraédrique.

Dans un cinquième temps, l'expression du coefficient d'effet de desserrement $\alpha_{ROAD}(x)$ est établie en reprenant le modèle de décompaction locale déjà présenté. Le principe de détermination du volume partiel des petits grains à l'eutectique ϕ_2^* est conservé. Celui-ci s'effectuant grâce à la prise en compte du coefficient d'effet de paroi, les deux théories se trouvent unies par un deuxième lien, en plus de celui existant entre les géométries des cellules considérées autour de chaque particule intruse dans le domaine des « gros dominants » et dans celui des « petits dominants ».

Dans un sixième temps enfin, une représentation graphique du coefficient d'effet de desserrement $\alpha_{ROAD}(x)$ est proposée en fonction de x pour différentes tailles de cavernes et pour différentes valeurs de β_1 . Une analyse des résultats théoriques est ensuite effectuée, un comparatif étant mené avec les modèles antérieurs.

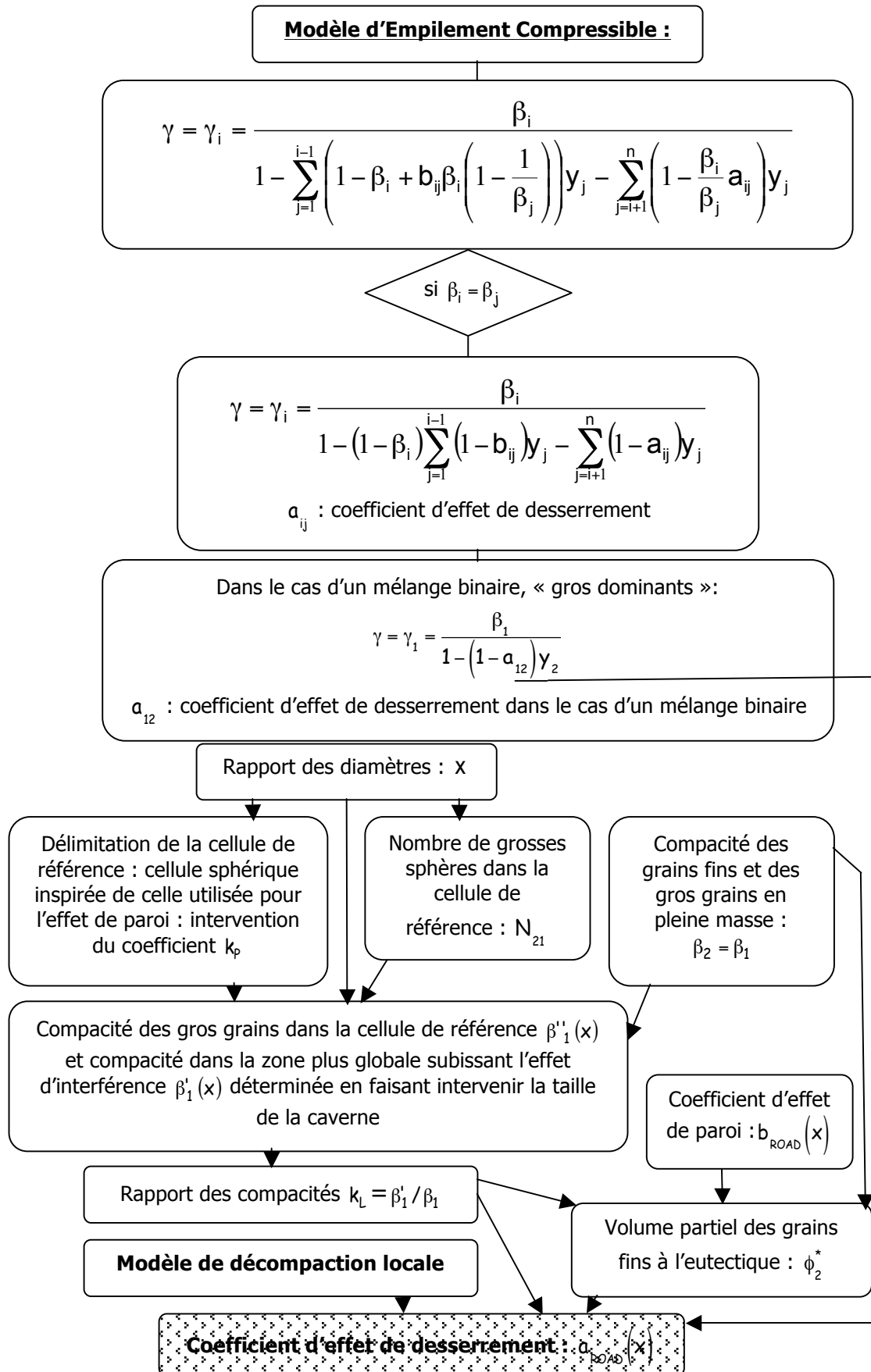


Figure IV-2 : organigramme de détermination du coefficient d'effet de desserrement $a(x)$.

4.1. DÉLIMITATION DE LA CELLULE DE RÉFÉRENCE SPHÉRIQUE.

Parmi les deux modèles théoriques de l'effet de desserrement recensés, l'un, le modèle linéaire de Stovall, considère que le surcroît de vide résultant de l'interaction est rempli par les éléments fins dans une proportion variant linéairement en fonction du rapport de tailles x , alors que l'autre, le modèle de décompaction locale, fait appel à la notion de dilatation isotrope se produisant dans une cellule de référence tétraédrique. Le second produisant des résultats plus cohérents que le premier, il nous a paru opportun de conserver cette notion pour constituer un des fondements de notre modèle.

La cellule tétraédrique est souvent adoptée dans les milieux granulaires car elle constitue la disposition théorique la plus compacte lorsque 4 sphères de même taille ont leur centre placé à ses sommets. D'autres géométries peuvent néanmoins être considérées. Ainsi, Dewar utilise une cellule cubique pour conduire ses raisonnements dans un double but de simplification analytique et de facilitation de la compréhension. Suzuki et Oshima, pour leur part, font appel à une cellule sphérique aussi bien lorsque des petites particules entourent une plus grosse que l'inverse. Cette approche nous a semblé constituer une base intéressante et nous avons décidé de la conserver pour effectuer une transition cohérente entre l'effet de paroi et l'effet de desserrement.

Notre cellule de référence va, par conséquent, être délimitée par une sphère :

- dont le centre est confondu avec celui de la petite particule autour de laquelle se manifeste l'interaction ;
- dont le contour extérieur est choisi pour assurer une continuité avec celle utilisée pour l'effet de paroi.

Rappelons que cette dernière possède un diamètre égal à : $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1+2k_p x}$ lorsqu'une grosse sphère de diamètre d_1 est entourée de petites sphères de diamètre d_2 avec un rapport x égal à :

$$\frac{d_2}{d_1} = \frac{\text{diamètre d'une sphère située dans le 1^{er} cercle de voisinage}}{\text{diamètre d'une sphère centrale}}.$$

Pour l'effet de desserrement où une petite sphère de diamètre d_2 est entourée de grosses sphères de diamètre d_1 , il convient donc de remplacer, dans l'expression précédente de d_{hyp} , d_1 par d_2 et x par $\frac{1}{x} = \frac{d_1}{d_2} = \frac{\text{diamètre d'une sphère située dans le 1}^{\text{er}} \text{ cercle de voisinage}}{\text{diamètre d'une sphère centrale}}$ pour obtenir finalement :

IV-1

$$d_{hyp} = d_2 \sqrt{1 + \frac{2 k_p}{x}}$$

k_p représente le coefficient permettant de délimiter la zone perturbée par l'effet de paroi. Il dépend de la compacité résiduelle β_2 des petits grains.

Lorsque x vaut 1, on vérifie, pour la cellule de référence :

$$d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2 k_p} = d_2 \sqrt{1 + 2 k_p}$$

Lorsque x se rapproche de $x_0 \approx 0,2$ qui correspond au rapport de tailles théorique critique en deçà duquel une petite sphère a la possibilité de s'immiscer dans l'espace laissé libre entre 4 grosses sphères en contact sans déstructurer leur organisation, on obtient :

$$d_{hyp} \approx 0,2 d_1 \sqrt{1 + 10 k_p} \approx d_2 \sqrt{1 + 10 k_p}$$

x	$\beta_2 = 0,65 \quad k_p = 0,4466$	$\beta_2 = 0,734 \quad k_p = 1,4729$
1	$d_{hyp} = 1,376 d_1 = 1,376 d_2$	$d_{hyp} = 1,986 d_1 = 1,986 d_2$
0,2	$d_{hyp} = 0,468 d_1 = 2,338 d_2$	$d_{hyp} = 0,793 d_1 = 3,966 d_2$

Tableau IV-1 : diamètres de la cellule de référence en fonction de d_1 ou d_2 pour $x=1$ et $x=0,2$.

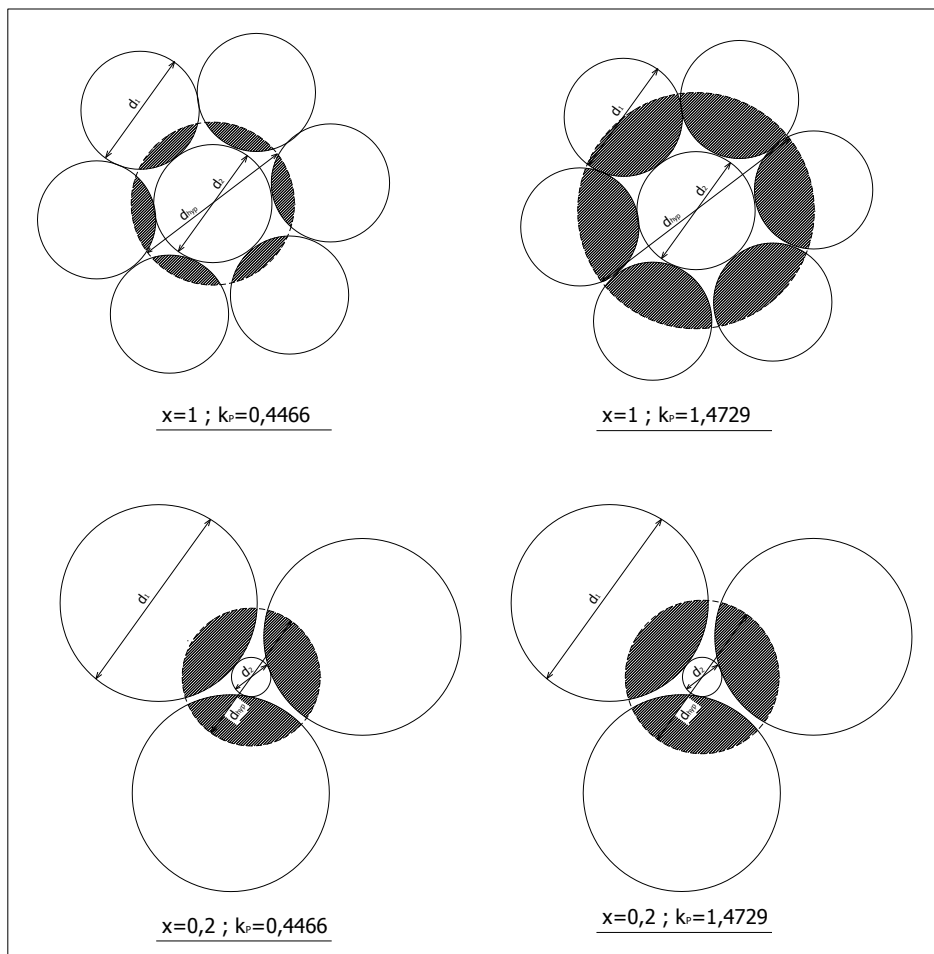


Figure IV-3 : visualisation de l'emprise de la cellule de référence.

Lorsque x se rapproche de 0 enfin, la cellule de référence peut se retrouver entièrement contenue dans l'interstice disponible entre 4 gros grains. Il est possible, en effet, de montrer que :

$$\frac{d_{hyp}}{d_1} \leq 0,224 \Rightarrow x \sqrt{1 + \frac{2k_p}{x}} \leq 0,224$$

en résolvant l'inégalité du second degré suivante :

$$x^2 + 2k_p x - 0,050176 \leq 0$$

C'est le cas lorsque :

$$x \leq -k_p + \sqrt{k_p^2 + 0,050176}$$

Pour $\beta_2 = 0,65$ et $k_p = 0,4466$, on obtient : $x \leq 0,053$.

Pour $\beta_2 = 0,734$ et $k_p = 1,4729$, on obtient : $x \leq 0,017$.

4.2. NOMBRE DE GROSSES SPHÈRES À CONSIDÉRER DANS LA CELLULE DE RÉFÉRENCE.

Après avoir délimité le volume dans lequel la structure des gros grains est desserrée, nous allons déterminer leur compacité dans cet espace. Pour cela, il faut connaître le nombre de grosses sphères, positionnées contre une petite, à prendre en compte.

Avant de vérifier si le modèle des carrés sphériques, que nous avons développé, est adapté, nous allons commencer par passer en revue 3 des 4 modèles théoriques déjà présentés dans le cadre de l'étude sur l'effet de paroi pour obtenir des bases de comparaison. Le quatrième, celui de Bouvard et Lange, sera laissé de côté car il est basé sur le concept d'un rangement de disques (ou sphères) mono-modulaires sur une surface plane ce qui ne correspond pas du tout à la situation.

4.2.1. Modèle du nombre de coordination de Suzuki et Oshima (1983/85).

Le calcul du nombre de coordination a déjà été présenté dans le paragraphe 2.2.2. Rappelons le résultat obtenu (formule II-34) :

$$N_{21,SO}(x) = \frac{2\omega}{1 - \frac{2+x}{(1+x)\sqrt{1+\frac{2}{x}}}} = \frac{2\omega}{1 - \frac{\sqrt{x(x+2)}}{1+x}}$$

$N_{21,SO}(x)$: nombre de coordination, d'après Suzuki et Oshima.

ω est directement lié au nombre de coordination N_c d'un cas mono-modulaire ($x = 1$) :

$$\text{I-40} \quad \omega = \frac{N_c}{4} (2 - \sqrt{3}).$$

Dans le cas d'un empilement aléatoire, il est possible de considérer :

$$\text{IV-2} \quad N_c = 9, \quad \omega = \frac{9}{4} (2 - \sqrt{3}) \quad \text{et} \quad N_{21,SO}^{\text{aléatoire}}(x) = \frac{\frac{9}{4} (2 - \sqrt{3})}{1 - \frac{\sqrt{x(x+2)}}{1+x}}$$

$N_{21,SO}^{\text{aléatoire}}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Suzuki et Oshima, pour un empilement aléatoire avec une valeur $N_c = 9$.

Dans les milieux denses, les expressions deviennent :

$$\text{IV-3} \quad N_c = 12, \quad \omega = 3(2 - \sqrt{3}) \quad \text{et} \quad N_{21,SO}^{\text{dense}}(x) = \frac{6(2 - \sqrt{3})}{1 - \frac{\sqrt{x(x+2)}}{1+x}}$$

$N_{21,SO}^{\text{dense}}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Suzuki et Oshima, pour un empilement dense avec une valeur $N_c = 12$.

Les courbes correspondantes sont représentées sur la figure IV-5.

Comme il a déjà été souligné, le modèle de détermination du nombre de coordination de Suzuki et Oshima respecte bien la condition $N_{21,SO}^{\text{dense}}(1) = 12$, correspondant au « Kissing Number Problem » en dimension 3.

4.2.2. Modèle du nombre de coordination de Egami (1997).

Rappelons que Egami considère que le nombre de coordination de l'empilement mono-modulaire N_c vaut 4π . La fraction de surface S_1 correspondant à la projection d'une grosse particule sur le contour d'une petite vaut (sur le principe de

la figure III-7), dans un cas général, $S_1 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{x(x+2)}}{1+x} \right)$.

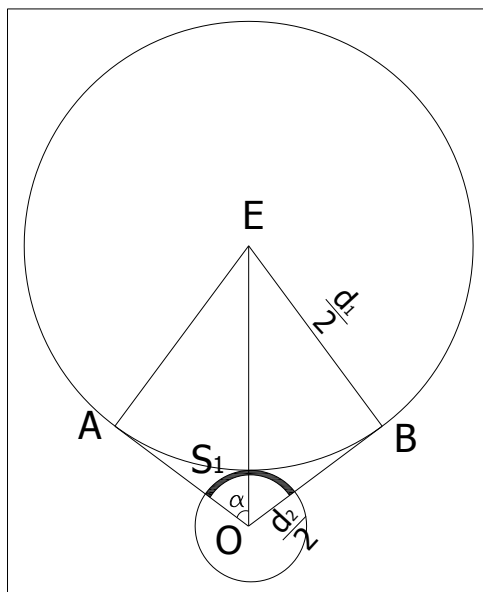


Figure IV-4 : géométrie de contact entre une petite et une grosse particule.

Il est aisé d'en déduire le nombre de coordination:

$$IV-4 \quad N_{21,E}^{dense}(x) = \frac{2\pi(2-\sqrt{3})}{\left(1 - \frac{\sqrt{x(x+2)}}{1+x}\right)}$$

$N_{21,E}^{dense}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Egami, pour un empilement dense.

La courbe correspondante est représentée sur la figure IV-5. Nous avons déjà établi

$$\text{que : } \frac{N_{21,E}^{dense}(x)}{N_{21,SO}^{dense}(x)} = \frac{\pi}{3} \approx 1,047.$$

4.2.3. Modèle du nombre de coordination de Miracle, Sanders et Senkov (2003).

Pour comprendre ce qui va suivre, il convient de se reporter au paragraphe 3.2.4. Les indices **1** et **2** sont inversés. Cette fois-ci, il s'agit d'une sphère centrale **2** qui est associée à une sphère **1** de référence en contact avec elle, 1_{ref} . Le nombre de coordination de surface **q**, défini comme étant le nombre de sphères **1** en contact à la fois avec 1_{ref} et avec l'élément central **2**, est réintroduit. Il évolue en fonction du rapport des diamètres comme l'indique le tableau ci-dessous, déjà présenté mais avec une inversion des indices.

$\frac{d_2}{d_1}$	q
$\geq 0,902$	5
compris entre 0,414 et 0,902	4
compris entre 0,225 et 0,414	3

Tableau IV-2 : nombre q de sphères 1 en contact à la fois avec 1_{ref} et avec l'élément central 2 en fonction du rapport des diamètres d_2/d_1 d'après Miracle, Sanders et Senkov [MIRA03].

Pour $x \geq 0,902$ et à condition que ce rapport ne tende pas vers l'infini, les sphères **1** appartenant à la 1^{ère} couche de voisinage et pouvant être en contact à la fois avec 1_{ref} et avec **2** sont au nombre de **5**. Mais, elles sont, en général, séparées les unes des autres et peuvent l'être de 1_{ref} .

Si x décroît davantage, elles deviendront de plus en plus proches les unes des autres jusqu'à ce qu'un rapport critique $x = 0,902$ soit atteint. Pour celui-ci, elles se touchent toutes, formant un anneau continu en contact à la fois avec 1_{ref} et avec 2 . Si x diminue par rapport à cette limite, la valeur maximale de q passe à 4 . Le même processus se reproduit jusqu'au ratio critique $x = 0,414$, en deçà duquel q devient égal à 3 , ce résultat restant valable jusqu'à $x = 0,225$ pour lequel un tétraèdre est obtenu.

Le nombre de coordination finalement obtenu est :

$$IV-5 \quad N_{21,MSS}^{dense}(x) = \frac{4\pi}{\pi(2-q) + 2q \arccos \left[\left(\sin \frac{\pi}{q} \right) \sqrt{1 - \frac{1}{(1+x)^2}} \right]}$$

$N_{21,MSS}^{dense}(x)$: nombre de coordination, d'après la théorie de Miracle, Sanders et Senkov, pour un empilement dense.

Les auteurs en déduisent :

$$IV-6 \quad N_{21,MSS}^{dense}(x) = \begin{cases} \frac{4\pi}{6 \arccos \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{1 - \frac{1}{(1+x)^2}} \right] - \pi} & \text{pour } 0,225 \leq x < 0,414 \\ \frac{4\pi}{8 \arccos \left[\frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{1 - \frac{1}{(1+x)^2}} \right] - 2\pi} & \text{pour } 0,414 \leq x < 0,902 \\ \frac{4\pi}{10 \arccos \left[\left(\sin \frac{\pi}{5} \right) \sqrt{1 - \frac{1}{(1+x)^2}} \right] - 3\pi} & \text{pour } 0,902 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

Les résultats des expressions IV-6 sont présentés sur la figure IV-5 pour $q = 3, 4$ et 5 .

Des discontinuités apparaissent à chaque transition $q \rightarrow q-1$. Elles valent environ **0,8** lorsque q passe de **5** à **4** et **0,6** lorsque q décroît de **4** à **3**. Les estimations de Egami concordent avec celles de Miracle, Sanders et Senkov pour $x \leq 0,902$ mais sont plus faibles au-delà de cette limite. Les derniers chercheurs cités insistent sur l'exactitude de leur méthode de calcul pour les nombres de coordination obtenus à chaque transition, chacune d'entre elles correspondant à l'apparition d'une nouvelle structure géométrique : tétraèdre pour $N_{21} = 4$ et $x = 0,225$, octaèdre pour $N_{21} = 6$ et $x = 0,414$, et icosaèdre pour $N_{21} = 12$ et $x = 0,902$.

Le rapport x détermine le plus grand nombre de coordination possible. Pour une valeur de N_{21} donnée, l'efficacité maximale d'empilement, déjà définie, correspond aux plus petites valeurs de x susceptibles d'être atteintes. Les frontières absolues les plus basses, notées x^* , obtenues pour n'importe quel N_{21} entier fixé, sont répertoriées dans le tableau suivant. La valeur absolue de la pente de $\frac{dN_{21}(x)}{dx}$ augmentant lorsque x croît, la séparation entre les valeurs de x^* décroît.

N_{21}	x^*	N_{21}	x^*
4	0,225	9	0,710
5	0,362	10	0,799
6	0,414	11	0,884
7	0,518	12	0,902
8	0,617		

Tableau IV-3 : valeurs de x^* et valeurs correspondantes de N_{21} d'après Miracle, Sanders et Senkov [MIRA03].

Les analyses effectuées par les auteurs du modèle montrent que les ratios x de diamètres soluté/solvant obtenus dans une large gamme de verres métalliques sont proches des ratios spécifiques x^* prédits par leur théorie. Celle-ci présente le grand intérêt de prendre en compte différentes configurations géométriques d'empilement local possibles (tétraèdre, octaèdre, icosaèdre) qui correspondent aux états de densité les plus importants possibles. C'est pourquoi son domaine de prédilection semble plutôt concerner les sphères dites « molles ». En d'autres termes, elle constitue une limite supérieure pratiquement hors d'atteinte dans le cadre des sphères dures.

4.2.4. Bilan des différents modèles présentés permettant le calcul du nombre de coordination.

Proposons tout d'abord une représentation graphique des différents modèles recensés.

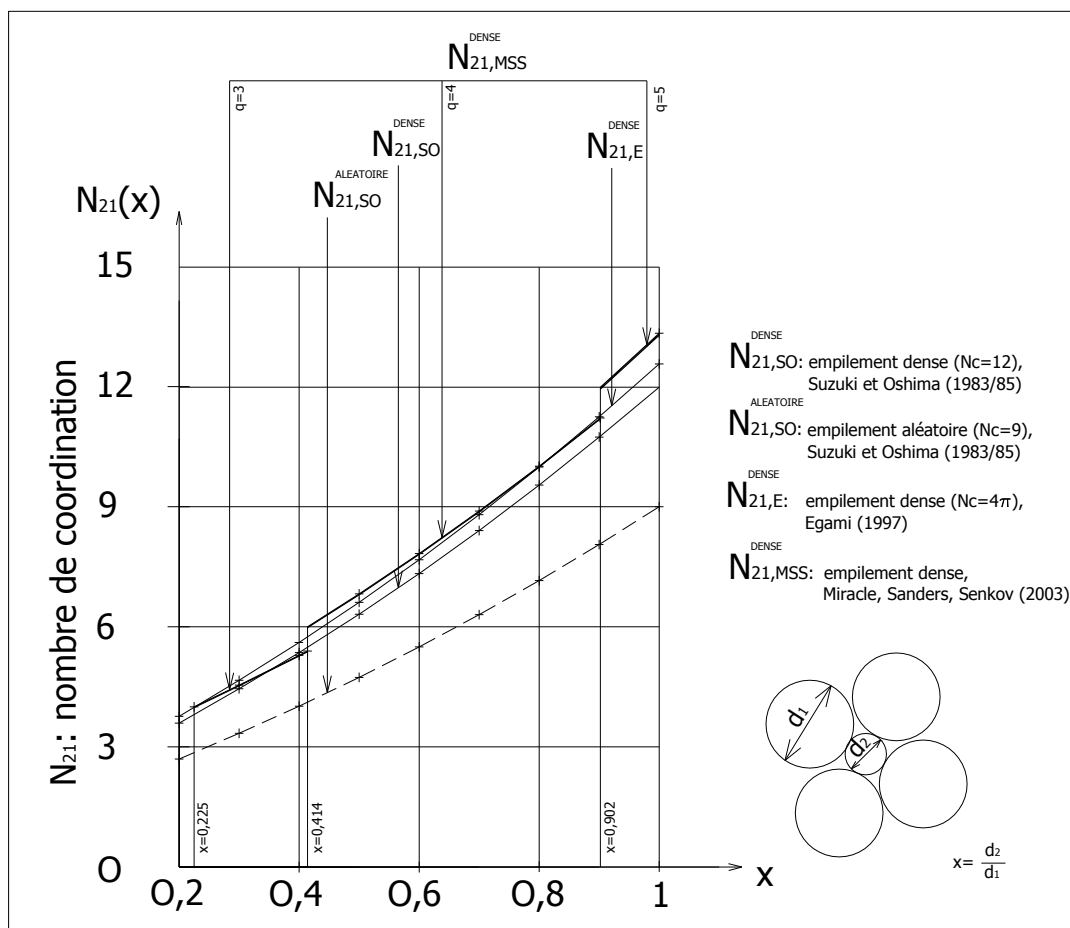


Figure IV-5 : nombre de coordination N_{21} en fonction du rapport de tailles $x=d_2/d_1$ d'après Suzuki et Oshima (1983/85), Egami (1997), Miracle, Sanders, Senkov (2003).

Les hypothèses de constitution, avantages et inconvénients de chaque théorie ont été recensés dans le tableau III-4.

Le modèle de Miracle, Sanders, Senkov constitue une limite supérieure difficilement accessible pour des sphères représentant les grains solides d'un granulat. Il représente néanmoins un outil remarquable pour la communauté mathématique dans le but de décrire l'empilement optimal de N sphères d'égale dimension autour d'une sphère centrale de taille différente. Plusieurs configurations d'amas atomiques bien connues des scientifiques sont prises en considération : tétraèdre puis octaèdre, puis icosaèdre.

Pour chacune d'entre elles, la courbe représentative du nombre de coordination en fonction du rapport des tailles x présente des discontinuités, le nombre de coordination de surface q subissant une variation d'une unité. C'est pourquoi Miracle, Sanders, Senkov proposent 3 expressions différentes : la première pour $0,225 \leq x < 0,414$, la seconde pour $0,414 \leq x < 0,902$, la troisième pour $0,902 \leq x$. Cette dernière abscisse se révèle être celle où la rupture est la plus importante puisque l'ordonnée varie de **0,8**.

Pour les abscisses inférieures, le modèle continu de Egami présente des valeurs très proches. Pour les abscisses supérieures, les courbes issues des deux théories sont légèrement éloignées l'une de l'autre en raison de la discontinuité précédemment évoquée.

Le modèle de Suzuki et Oshima, quant à lui, fournit des résultats comparables à ceux de Miracle, Sanders, Senkov dans l'intervalle $0,225 \leq x < 0,414$ et inférieurs aux deux autres modèles pour les valeurs supérieures de x .

Comme nous l'avons déjà exposé, chaque théorie du nombre de coordination proposée présente un intérêt certain. Deux d'entre elles sont plutôt destinées aux empilements de sphères molles (« soft spheres ») à l'échelle atomique et sont, par conséquent, moins adaptées à l'étude de grains rigides à des échelles plus importantes. Suzuki et Oshima, pour leur part, proposent l'introduction d'un paramètre ω permettant de caler leurs résultats en fonction du nombre de coordination obtenu dans le cas mono-modulaire. Mais cette insertion pose la question de savoir si elle a été effectuée à bon escient ou si elle aurait pu être envisagée sous une autre forme. C'est pourquoi nous avons envisagé une approche légèrement différente, dite des carrés sphériques, déjà présentée dans le cadre de l'effet de paroi, alliant simplicité et bonnes capacités prédictives. Nous allons la reprendre maintenant.

4.2.5. Modèle des carrés sphériques proposé pour calculer le nombre de coordination.

La démarche entreprise a déjà été exposée au paragraphe 3.2.6 dans le cas de petits éléments en entourant un gros.

Ici, le modèle des carrés sphériques va permettre le calcul du nombre de coordination de grosses sphères contre une petite. Il adopte les hypothèses suivantes :

- le milieu est considéré particulièrement dense ;
- seules les grosses particules appartenant au 1^{er} cercle de voisinage sont prises en compte.

Soit un arrangement de grosses sphères **1** de diamètre d_1 juxtaposées contre une petite sphère centrale **2** de diamètre d_2 . Le rapport des diamètres s'écrit : $x = \frac{d_2}{d_1}$. La densité des sphères **1** est telle que chacune d'entre elles est susceptible de pouvoir être coincée par ses voisines. Soit la sphère de diamètre $d_2\sqrt{1 + \frac{2}{x}}$ concentrique à **2** dont le contour passe par les points de contact de toutes les sphères **1** plaquées contre **2**. On appelle \vec{n} l'axe passant par les centres respectifs de la sphère **2** et d'une sphère **1_{ref}** qui l'entoure, prise comme référence. Soit **p** le plan perpendiculaire à \vec{n} passant par les points de contact de **1_{ref}** avec d'autres sphères **1** situées contre **2**. L'intersection de **p** avec la sphère **1_{ref}** forme un cercle **c** de diamètre d_c .

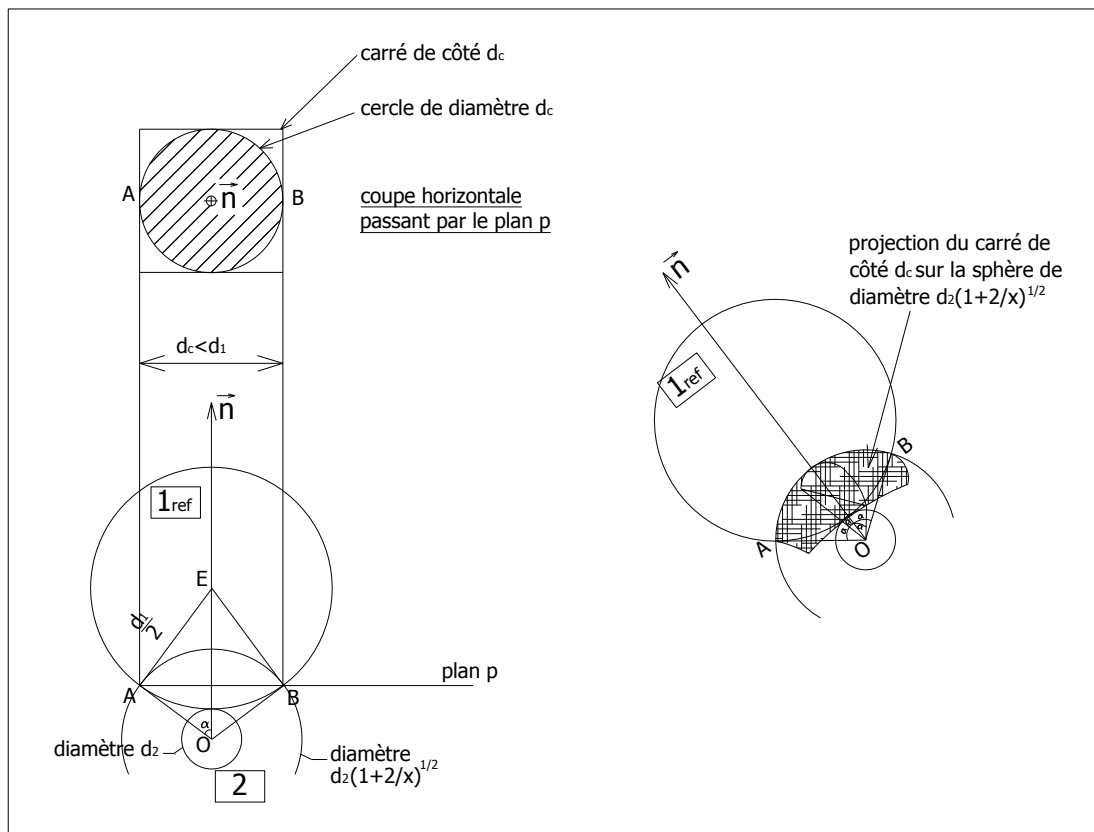


Figure IV-6 : surface d'emprise d'une sphère de diamètre d_1 caractérisée par un carré sphérique sur la sphère de diamètre $d_2(1+2/x)^{1/2}$.

Considérons un carré de côté d_c dont le centre coïncide avec celui du cercle **c**. La projection de ce carré sur la sphère de diamètre $d_2\sqrt{1 + \frac{2}{x}}$ crée un carré sphérique convexe dont l'aire peut être calculée de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 \text{IV-7} \quad A_{\text{sphérique}}^{\text{carré}} &= \int_{-\alpha}^{\alpha} \int_{-\alpha}^{\alpha} \left(\frac{d_2}{2} \sqrt{1 + \frac{2}{x}} \right)^2 \cos \phi \, d\phi \, d\theta = d_2^2 \left(1 + \frac{2}{x} \right) \alpha \sin \alpha \\
 A_{\text{sphérique}}^{\text{carré}} &= d_2^2 \left(1 + \frac{2}{x} \right) \frac{1}{1+x} \arcsin \left(\frac{1}{1+x} \right) \text{ car } \sin \alpha = \frac{1}{1+x}
 \end{aligned}$$

Les carrés sphériques liés à chaque sphère **1** se juxtaposent et créent un pavage de la sphère de diamètre $d_2 \sqrt{1 + \frac{2}{x}}$ qu'il convient de rendre le plus dense possible. Le problème consiste à déterminer leur nombre. Si la densité de juxtaposition d_j se définit comme étant la somme des aires des carrés sphériques divisée par l'aire de la sphère de diamètre $d_2 \sqrt{1 + \frac{2}{x}}$, on obtient :

$$\text{IV-8} \quad d_j(x) = \frac{N_{21,CS}^{\text{dense}}(x) A_{\text{sphérique}}^{\text{carré}}}{\pi d_2^2 \left(1 + \frac{2}{x} \right)} = \frac{N_{21,CS}^{\text{dense}}(x)}{\pi(1+x)} \arcsin \left(\frac{1}{1+x} \right)$$

$N_{21,CS}^{\text{dense}}(x)$: nombre de coordination, d'après le modèle des carrés sphériques, pour un empilement dense.

Si nous visons une densité de juxtaposition d_j égale à **1**, nous pouvons en déduire le nombre de coordination suivant $x = \frac{d_2}{d_1} \in [0,1]$:

$$\text{IV-9} \quad \boxed{N_{21,CS}^{\text{dense}}(x) = \frac{\pi(1+x)}{\arcsin \left(\frac{1}{1+x} \right)}}$$

Nous obtenons, pour un empilement mono-modulaire :

$$\text{IV-10} \quad \boxed{N_{21,CS}^{\text{dense}}(1) = 12}$$

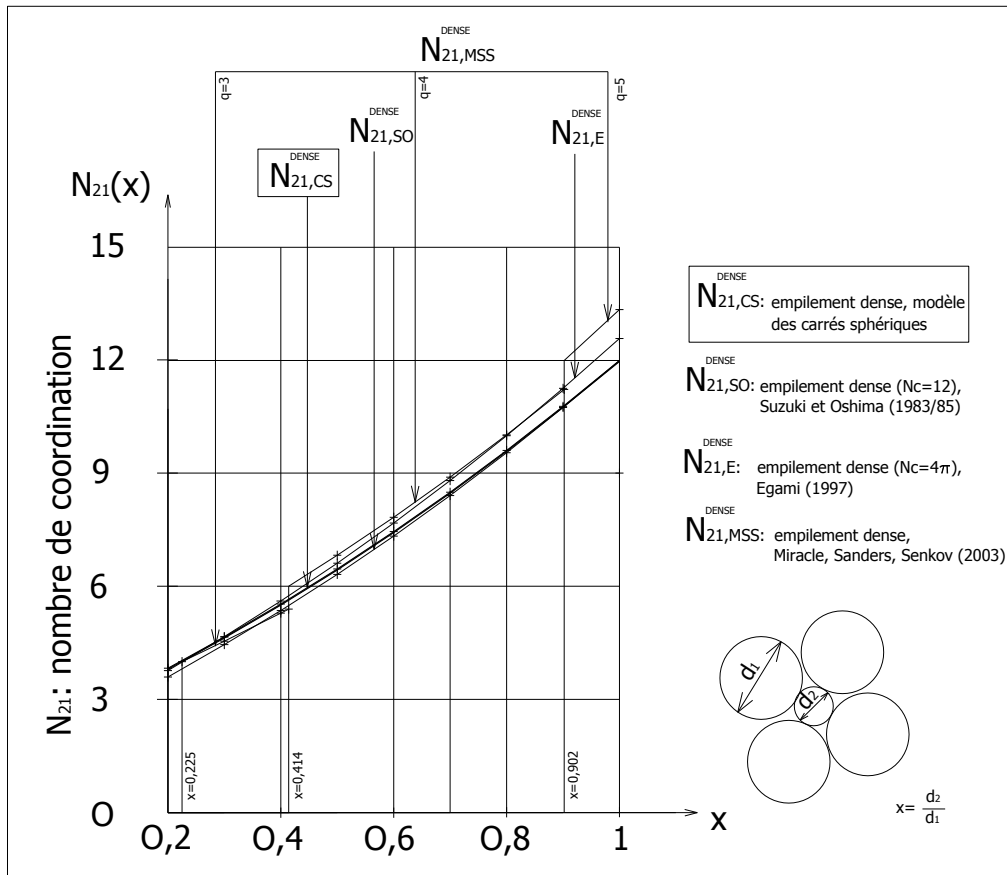


Figure IV-7 : nombre de coordination N_{21} d'après le modèle des carrés sphériques en fonction du rapport de tailles $x=d_2/d_1$. Comparaison avec les modèles de Suzuki et Oshima (1983/85), Egami (1997), Miracle, Sanders, Senkov (2003).

Par rapport aux résultats fournis par les autres théories, la courbe obtenue par la méthode des carrés sphériques se situe plutôt :

- dans la fourchette haute pour x compris entre 0,2 et 0,4 ;
- dans la fourchette intermédiaire située entre les modèles destinés aux sphères molles (Egami et Miracle, Sanders, Senkov) et aux sphères dures (Suzuki et Oshima) avec un net rapprochement de la courbe représentative de ce dernier au fur et à mesure que x croît entre 0,4 et 0,9 ;
- dans la fourchette basse pour x compris entre 0,9 et 1 étant donné les options choisies par les différents auteurs dans cet intervalle de rapport de tailles : $N_{21,MSS}^{dense}(0,902) = 12$ pour Miracle, Sanders, Senkov qui adoptent la structure de l'icosaèdre, $N_{21,E}^{dense}(1) = 4\pi$ (angle solide sous lequel on voit la surface totale d'une sphère depuis le centre de cette dernière) pour Egami, $N_{21,SO}^{dense}(1) = 12$ d'après Suzuki et Oshima puisque nous avons choisi d'appliquer leur théorie avec $N_c = 12$, $N_{21,CS}^{dense}(1) = 12$ d'après le modèle des carrés sphériques.

Examinons les valeurs spécifiques de x , notées x^* , qui engendrent des valeurs de N_{21} entières, notées N_{21}^* , dans l'intervalle $[4; 12]$ et répertorions les dans le tableau suivant. Elles sont plus importantes que celles fournies par [MIRA03] excepté pour $N_{21}^* = 4$ et 5.

N_{21}^*	x^*	N_{21}^*	x^*
4	0,222	9	0,747
5	0,341	10	0,835
6	0,452	11	0,920
7	0,556	12	1
8	0,654		

Tableau IV-4 : valeurs de x^* et valeurs correspondantes de N_{21}^* d'après le modèle des carrés sphériques.

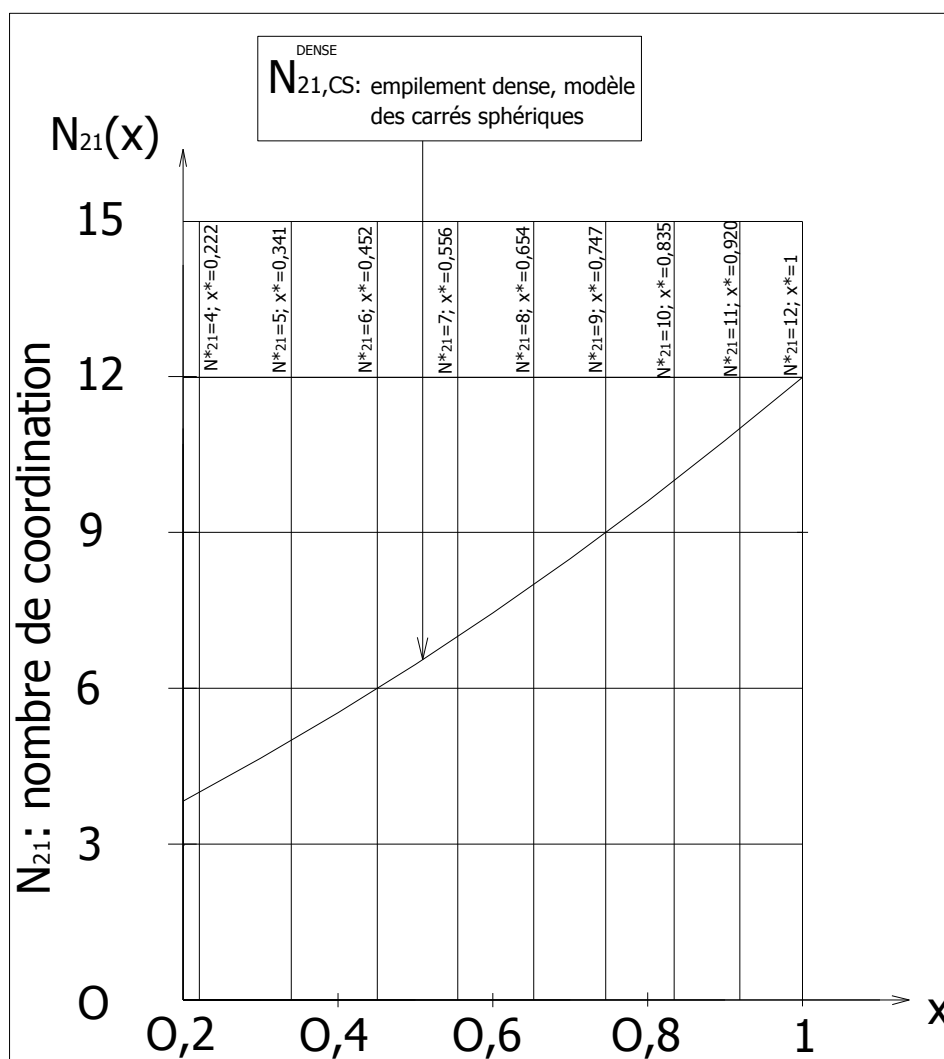


Figure IV-8 : valeurs de x^* pour lesquelles le nombre de coordination N_{21}^* est un entier, d'après le modèle des carrés sphériques.

Selon que l'on conserve la valeur exacte (1^{er} cas : en gardant les chiffres après la virgule) ou au contraire la partie entière (2^{ème} cas : entier naturel) de $N_{21,CS}^{dense}(x)$ pour calculer la compacité des gros grains dans la cellule de référence, la densité de juxtaposition d_j en fonction de x se détermine de la façon suivante.

Dans le premier cas, d_j vaut **1** puisque $N_{21,CS}^{dense}(x)$ est déduit de l'expression IV-8 en posant précisément $d_j = 1$.

Dans le second cas, d_j se calcule avec la formule IV-11 :

$$IV-11 \quad d_j(x) = \frac{\text{INT}\{N_{21,CS}^{dense}(x)\}}{\pi(1+x)} \arcsin\left(\frac{1}{1+x}\right) = \frac{\text{INT}\{N_{21,CS}^{dense}(x)\}}{N_{21,CS}^{dense}(x)}$$

INT $\{N_{21,CS}^{dense}(x)\}$ désignant la partie entière (entier naturel) de $N_{21,CS}^{dense}(x)$.

d_j est strictement inférieure à **1** sauf si le rapport des diamètres x vaut x^* . En d'autres termes, la valeur maximale susceptible d'être atteinte par d_j vaut l'unité lorsque $N_{21,CS}^{dense}(x) = N_{21}^*$, ce qui se produit quand $x = x^*$.

A partir d'une valeur donnée de x^* , la densité de juxtaposition diminue progressivement au fur et à mesure que x croît, $N_{21,CS}^{dense}(x)$ augmentant graduellement tandis que N_{21}^* , correspondant à la partie entière de $N_{21,CS}^{dense}(x)$, reste constante.

Prenons un exemple :

Valeurs données de départ :

$$\text{ex : } x^* = 0,835 \rightarrow N_{21,CS}^{dense}(0,835) = N_{21}^* = 10 ; d_j(0,835) = 1.$$

x croît au-delà de **0,835** :

$$\text{ex : } x = 0,900 \rightarrow N_{21,CS}^{dense}(0,9) = 10,77 ; d_j(0,9) = 0,928.$$

$$\text{ex : } x = 0,919 \rightarrow N_{21,CS}^{dense}(0,919) = 10,99 ; d_j(0,919) = 0,909.$$

Mais si x continue à croître jusqu'à la valeur suivante de x^* , N_{21}^* augmente d'une unité et une discontinuité apparaît dans les valeurs de d_j qui subit une croissance brutale et reprend une valeur de **1**.

$$\text{ex : } x = x^* = 0,920 \rightarrow N_{21,CS}^{dense}(0,920) = N_{21}^* = 11 ; d_j(0,920) = 1.$$

Puis l'évolution décrite ci-dessus reprend. Réciproquement, si x décroît et passe légèrement en dessous la valeur précédente de x^* , une grosse sphère est exclue du voisinage d'une petite, N_{21}^* diminue d'une unité et une discontinuité apparaît dans les valeurs de d_j qui subit une décroissance brutale juste après avoir pris une valeur de 1 : c'est l'effet d'exclusion.

La valeur absolue de la pente de $\frac{dN_{21}^{dense}(x)}{dx}$ s'accroît lorsque x augmente, la séparation entre les valeurs de x^* décroît. Pour x compris entre 0,222 et 1, la plus petite valeur de d_j s'obtient pour un rapport de tailles légèrement inférieur à celui permettant de mettre en place une 5^{ème} sphère autour de la sphère centrale : $d_{j\text{mini}} = d_j(0,340) = 0,8$.

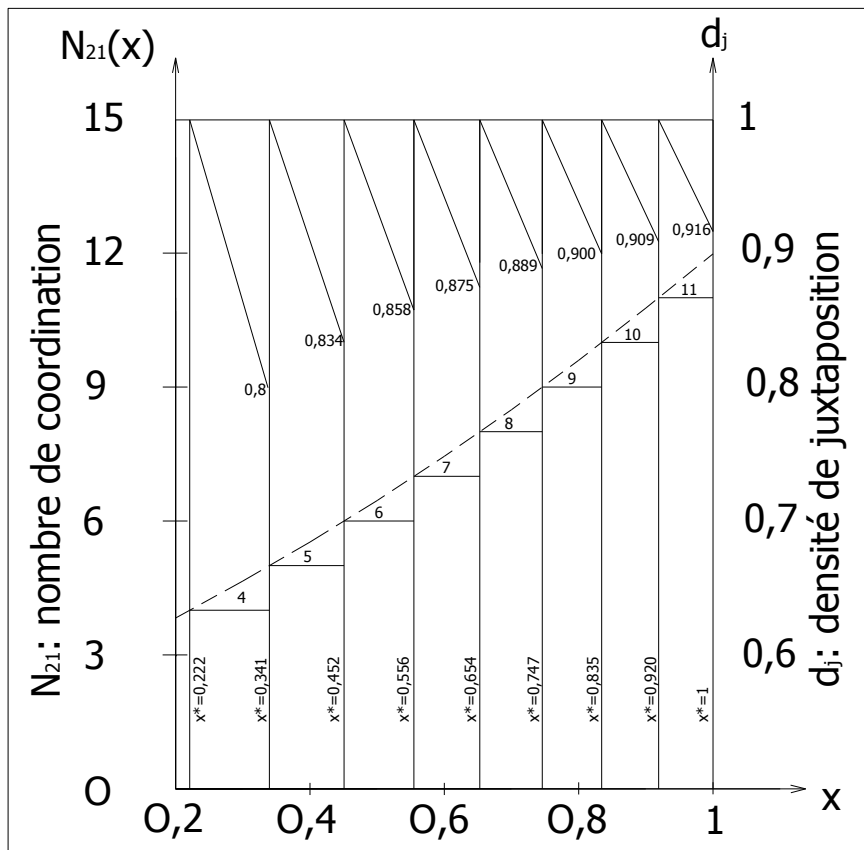


Figure IV-9 : nombre de coordination N_{21} et densité de juxtaposition d_j en fonction de x , d'après le modèle des carrés sphériques, dans l'hypothèse où la partie entière (entier naturel) du nombre de coordination est retenue.

L'écart maximal entre la valeur exacte (1^{er} cas) de $N_{21}^{dense}(x)$ et sa valeur entière (2^{ème} cas) est donc au maximum de 20%. Il est logiquement plus important que dans le cas où ce sont des petites sphères qui entourent une grosse.

Nous conserverons néanmoins la valeur exacte afin de privilégier la version continue de la fonction caractérisant l'effet de desserrement $\alpha(\mathbf{x})$ (1^{er} cas) au détriment de sa version discontinue en escalier (2^{ème} cas) pour 3 raisons déjà énoncées au moment de l'étude de l'effet de paroi :

- les grains ne sont pas réellement des sphères ;
- ils se présentent sous la forme de particules multi-tailles ;
- la fonction $\alpha(\mathbf{x})$ est déterminée à partir d'une étude locale mais possède une utilité à l'échelle globale du mélange avec intervention d'évènements aléatoires.

Nous avons utilisé dans ce paragraphe le modèle des carrés sphériques avantageusement comparé à d'autres théories dans le domaine de l'effet de paroi. Il confirme tout son potentiel lorsqu'il s'agit de déterminer le nombre de grosses sphères susceptibles de se trouver en contact avec une petite sphère centrale et va nous permettre de déterminer la compacité des premières dans la cellule de référence. La méthode de calcul a déjà été résumée. Nous ne reviendrons pas dessus. Dans un milieu particulièrement dense, elle permet de retrouver deux valeurs singulières remarquables aux deux extrémités du spectre de rapports de tailles pris en compte :

- $N_{21,CS}^{dense}(\mathbf{1}) = 12$ du côté des faibles contrastes de diamètres, qui constitue la solution du fameux KNP en dimension 3 ;
- $N_{21,CS}^{dense}(\mathbf{0,222}) = 4$ du côté des forts contrastes de tailles. La description du mécanisme d'insertion dans le paragraphe 1.1. avait en effet permis de mettre en évidence un rapport de tailles limite égal à $x_{3D} = \frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{\sqrt{2}} \approx 0,224$ (expression I-2) afin de permettre à une petite sphère de s'insérer entre 4 grosses.

Là où Miracle, Sanders, Senkov prennent en compte deux discontinuités liées aux passages à des structures en octaèdre et en icosaèdre pour leur modèle de sphères molles, nous considérons une fonction continue, établissant ainsi une jonction entre la cellule tétraédrique comportant 4 grosses sphères à ses sommets et la cellule sphérique comportant 12 sphères en contact avec une sphère centrale de même diamètre.

4.3. COMPACITÉ β'_1 DES GROSSES SPHÈRES DANS LA CELLULE DE RÉFÉRENCE ET DÉDUCTION DE LEUR COMPACITÉ β_1 DANS LA ZONE PLUS GLOBALE SUBISSANT L'EFFET D'INTERFÉRENCE.

Pour calculer la compacité β'_1 des gros grains dans la cellule de référence, on commence par déterminer la partie de volume de l'un d'entre eux comprise dans cet espace. Rappelons que le volume concerné est délimité extérieurement par une sphère de diamètre $d_2\sqrt{1+\frac{2k_p}{x}}$ concentrique à une sphère de diamètre d_2 .

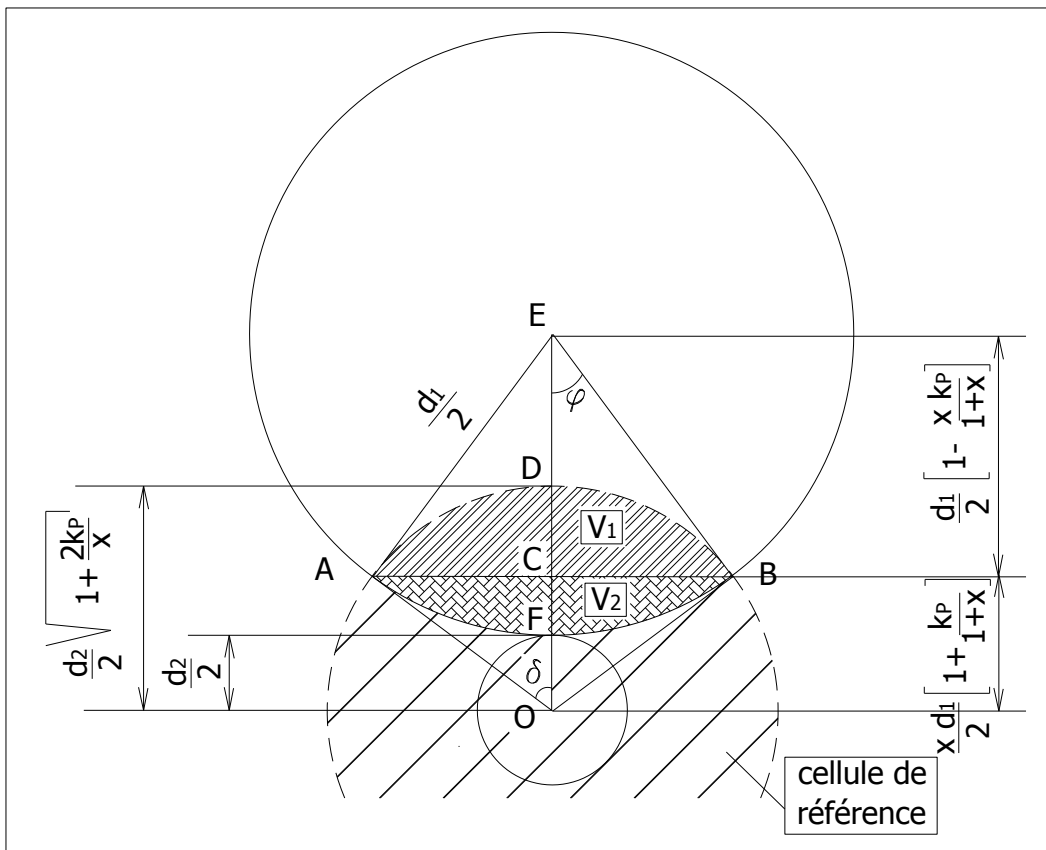


Figure IV-10 : présentation des différentes cotes nécessaires au calcul de la compacité des gros grains dans la cellule de référence.

On obtient également :

$$\delta = \arccos \left[\left(1 + \frac{2k_p}{x} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{k_p}{1+x} \right) \right]$$

$$\varphi = \arccos \left(1 - \frac{x k_p}{1+x} \right)$$

Le volume de la sphère de diamètre d_1 compris dans la cellule de référence vaut :

$$V_{12}(x) = V_1(x) + V_2(x).$$

$V_1(x)$ représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et OD.

$$V_1(x) = \frac{\pi}{24} (x d_1)^3 \left(2 \left(1 + \frac{2k_p}{x} \right)^{\frac{3}{2}} - 3 \left(1 + \frac{2k_p}{x} \right) \left(1 + \frac{k_p}{1+x} \right) + \left(1 + \frac{k_p}{1+x} \right)^3 \right)$$

$V_2(x)$ représente le volume d'une calotte sphérique dont le diamètre et le rayon de courbure sont respectivement AB et EF.

$$V_2(x) = \frac{\pi}{24} d_1^3 \left(-1 + \frac{3k_p x}{1+x} + \left(1 - \frac{k_p x}{1+x} \right)^3 \right)$$

On en déduit $V_{12}(x)$:

IV-12

$$V_{12}(x) = \frac{\pi}{24} d_1^3 \left(2x^3 \left(1 + \frac{2k_p}{x} \right)^{\frac{3}{2}} - 3x^3 \left(1 + \frac{2k_p}{x} \right) \left(1 + \frac{k_p}{1+x} \right) + x^3 \left(1 + \frac{k_p}{1+x} \right)^3 - 1 + \frac{3k_p x}{1+x} + \left(1 - \frac{k_p x}{1+x} \right)^3 \right)$$

Le volume de la cellule de référence est délimité par une sphère de diamètre

$$d_2 \sqrt{1 + \frac{2k_p}{x}} :$$

IV-13

$$V_{CR}(x) = \frac{\pi (x d_1)^3}{6} \left(1 + \frac{2k_p}{x} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Le nombre de grosses sphères entourant une petite, enfin, est déterminé grâce à la fonction continue du nombre de coordination obtenue à partir du modèle des carrés sphériques développé dans le paragraphe précédent :

IV-9

$$N_{21,CS}^{dense}(x) = \frac{\pi(1+x)}{\arcsin\left(\frac{1}{1+x}\right)}$$

La compacité $\beta''_1(x)$ des gros grains dans la cellule de référence s'écrit, par conséquent :

IV-14

$$\beta''_1(x) = \frac{N_{21,CS}^{dense}(x) V_{12}(x)}{V_{CR}(x)}$$

$$\beta''_1(x) = \frac{\pi(1+x)}{4 \left(1 + \frac{2k_p}{x}\right)^{\frac{3}{2}} \arcsin\left(\frac{1}{1+x}\right)} \times \left(2 \left(1 + \frac{2k_p}{x}\right)^{\frac{3}{2}} - 3 \left(1 + \frac{2k_p}{x}\right) \left(1 + \frac{k_p}{1+x}\right) + \left(1 + \frac{k_p}{1+x}\right)^3 - \frac{1}{x^3} + \frac{3k_p}{x^2(1+x)} + \left(\frac{1}{x} - \frac{k_p}{1+x}\right)^3 \right)$$

Il reste maintenant à déterminer la compacité $\beta'_1(x)$ des grosses sphères dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence en tenant compte de la taille de la cavité. Nous savons que pour un rapport de tailles x égal à x_0 correspondant à la valeur critique en deçà de laquelle un petit grain peut s'insérer parfaitement dans la cavité disponible entre les grosses particules, aucun desserrement ne se produit. Nous devons donc vérifier :

IV-15

$$\beta'_1(x_0) = \beta_1$$

Si l'on suppose maintenant que deux classes de sphères possédant la même compacité mono-modulaire $\beta_1 = \beta_2 = \beta$ sont introduites dans le mélange avec le même titre volumique égal à 0,5, les compacités de l'empilement obtenu sont, dans le cadre des « petits dominants » et dans celui des « gros dominants » (d'après les expressions II-2 et II-24) :

$$\gamma_2 = \frac{\beta}{1 - \frac{1}{2}(1-\beta)(1-b(x))}$$

$$\gamma_1 = \frac{\beta}{1 - \frac{1}{2}(1-a(x))}$$

Lorsque $x \rightarrow 1$ et $\gamma_1 = \gamma_2 = \frac{1}{2}$, les particules deviennent identiques et γ_1 doit être égal à γ_2 pour assurer la continuité entre grains fins dominants et gros grains dominants.

Si l'on introduit le coefficient $k_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$, on doit donc vérifier $k_L(x=1) = \frac{\beta'_1(x=1)}{\beta_1} = \frac{1}{2}$

quelle que soit la taille de la cavité.

Par ailleurs, on doit respecter la condition $\beta'_1(x_0) = \beta_1$, c'est-à-dire

$k_L(x=x_0) = \frac{\beta'_1(x=x_0)}{\beta_1} = 1$, pour s'assurer qu'aucun desserrement ne se produit

lorsque le rapport de tailles correspond à la valeur critique.

En conservant le concept de dilatation isotrope locale du squelette des gros grains autour d'un petit insuffisamment fin pour s'insérer dans une cavité, on aboutit finalement à :

IV-16

$$\beta'_1(x) = \frac{\beta''_1(x)}{\beta''_1(x_0) \left(1 + \frac{(x-x_0)}{(1-x_0)} \left(\sqrt[3]{\frac{2\beta''_1(1)}{\beta''_1(x_0)}} - 1 \right) \right)^3} \beta_1$$

Toutes les courbes $k_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$ vont donc converger vers $\frac{1}{2}$ quand $x \rightarrow 1$.

4.4. ÉVOLUTION DU RAPPORT $k_L = \beta'_1/\beta_1$ EN FONCTION DE x , DE LA TAILLE DE LA CAVERNE, POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE β_1 .

Reportons, sur la figure suivante, le rapport des compacités en zone subissant l'effet de desserrement/interférence et en zone courante $k_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$ en fonction du rapport des diamètres x , de la taille de la caverne x_0 pour les valeurs extrêmes de la compacité virtuelle des gros grains seuls β_1 .

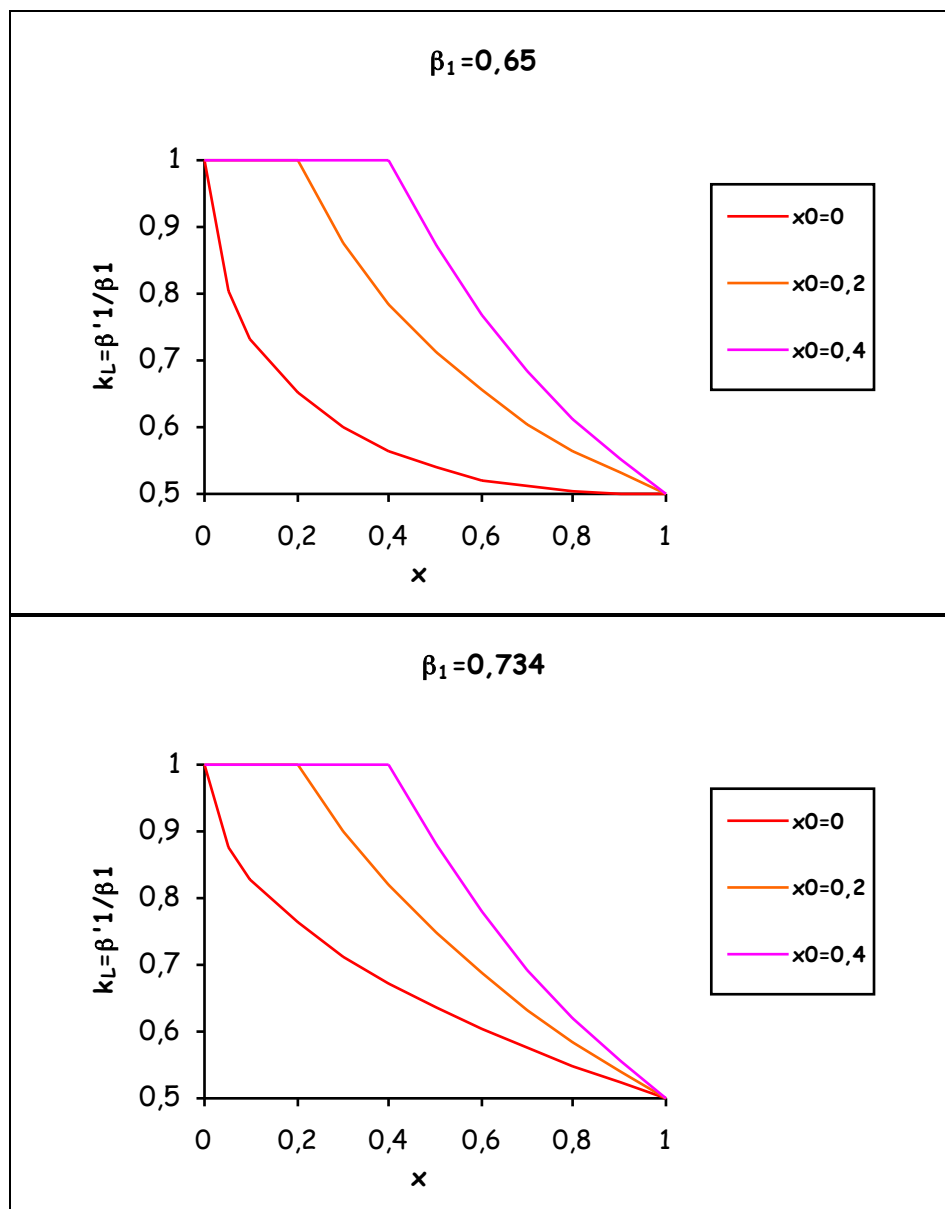


Figure IV-11 : évolution du rapport des compacités en zone subissant l'effet de desserrement/interférence et en zone courante k_L en fonction du rapport des diamètres x , pour 3 tailles de caverne différentes et pour les valeurs extrêmes de β_1 , d'après l'hypothèse de dilatation isotrope associée à la cellule sphérique de la théorie ROAD.

Dans le domaine d'étude de k_p ($k_p \in [0,4466; 1,4729]$), les résultats fournis par le concept de dilatation isotrope associé à la cellule sphérique de la théorie ROAD ADjustable cell (ROAD) amènent les commentaires suivants concernant $k_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$.

Celui-ci est d'autant plus élevé :

- que la taille de la caverne est importante ;
- que le rapport des tailles x est faible pour une taille de caverne x_0 et pour un arrangement des gros grains en pleine masse donnés (β_1 constante) ;
- que l'empilement de ces derniers est compact (β_1 forte) pour x et x_0 fixés. Un resserrement des courbes correspondant aux différentes tailles de cavernes se produit alors.

Pour x_0 et β_1 fixés, les évolutions de k_L sont plus marquées pour les faibles rapports de tailles pour s'atténuer lorsque le diamètre des éléments fins se rapproche de celui des gros éléments. Cette dernière tendance se manifeste d'autant plus que la taille de la caverne est petite.

Comparons nos résultats avec ceux issus du concept de dilatation isotrope associé à une cellule de référence tétraédrique initialement présenté dans la thèse de de Larrard [DELA88]. L'expression proposée est la suivante (II-30) :

$$k_{L_{br}} = \frac{1}{(1 + \nu(x - x_0))^3}$$

Rappelons que le paramètre ν est utilisé pour tenir compte du fait que la dilatation dans la cellule de référence tétraédrique est différente de celle obtenue en moyenne dans la zone perturbée. Concrètement, il est déterminé de la façon suivante [DELA88] :

$\nu = \frac{\sqrt[3]{2} - 1}{1 - x_0}$. Toutes les courbes issues de cette théorie convergent elles-aussi vers $\frac{1}{2}$ quand $x \rightarrow 1$.

On remarque (figure IV-12) que le concept de dilatation isotrope associé à la cellule sphérique de la théorie ROAD et le concept de dilatation isotrope associé à une cellule de référence tétraédrique [DELA88] fournissent des coefficients k_L relativement similaires pour des rapports de tailles de caverne $x_0 \geq 0,2$. Lorsque ces derniers sont inférieurs à cette valeur critique, le premier fournit des valeurs sensiblement plus faibles que le second : l'effet d'interférence qu'il prédira sera alors plus marqué. L'écart sera d'autant plus important que la compacité virtuelle des grosses particules β_1 sera faible.

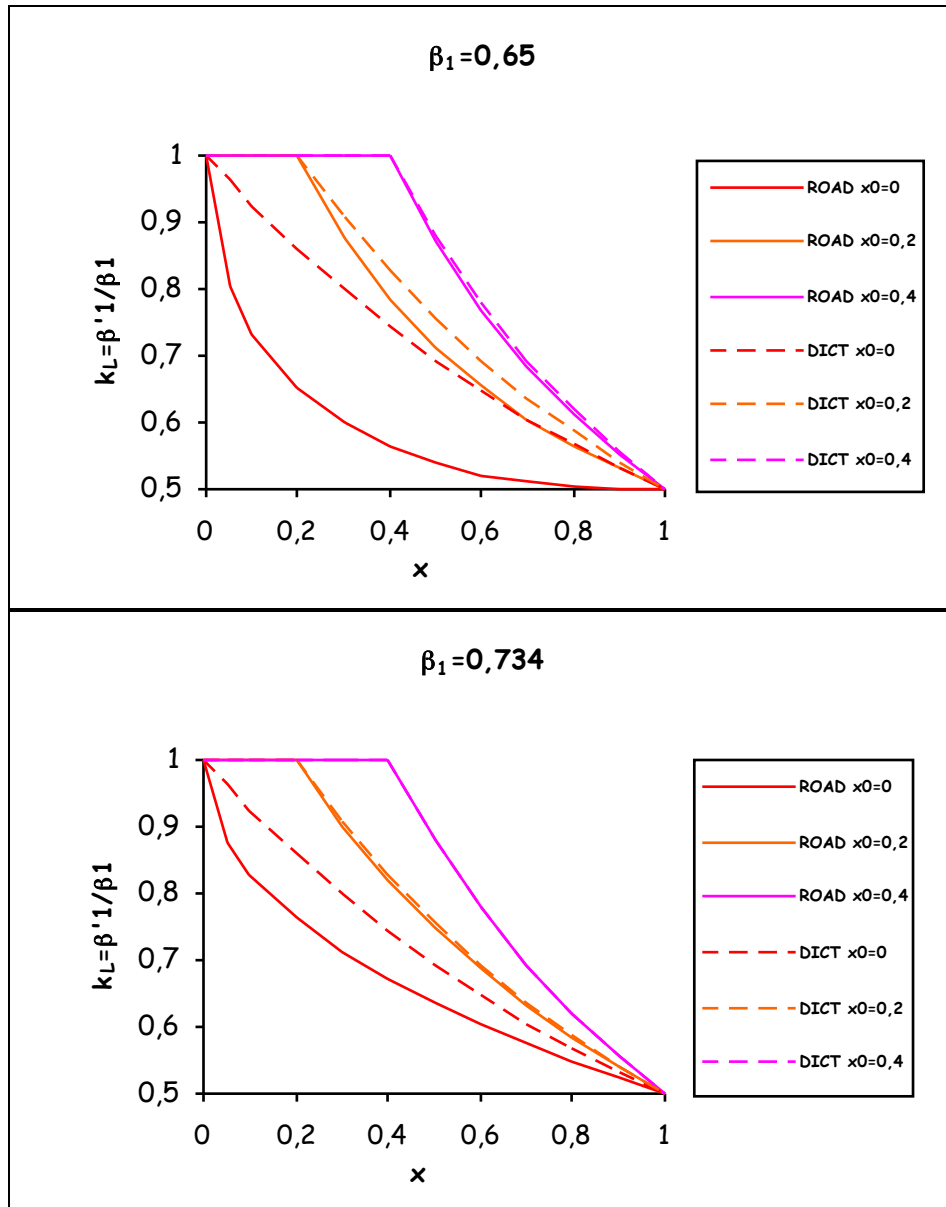


Figure IV-12 : comparaison du coefficient $k_L = \beta'_1 / \beta_1$ obtenu à partir du concept de dilatation isotrope associé à la cellule sphérique de la théorie ROAD et à partir du concept de Dilatation Isotrope associé à une Cellule de référence Tétraédrique (DICT) pour 3 tailles de cavité différentes.

Nous allons maintenant déterminer le coefficient d'effet de desserrement en reprenant les différentes étapes du modèle de décompaction locale, déjà présenté au paragraphe 2.2.2, dans lequel va intervenir la compacité β'_1 issue de la théorie ROAD.

4.5. COEFFICIENT D'INTERACTION CARACTÉRISANT L'EFFET DE DESSERREMENT a_{ROAD} DÉDUIT DU MODÈLE DE DÉCOMPACTION LOCALE.

Le modèle de décompaction locale n'est pas de notre cru car il figurait dans la thèse de de Larrard de 1988 [DELA88]. Nous l'avons déjà développé dans le paragraphe 2.2.2 donc nous n'en présenterons que les grandes lignes. Les 2 premières étapes exposées résultent de la modélisation ROAD. Les étapes suivantes sont vraiment spécifiques au modèle de décompaction locale.

On commence par déterminer la compacité des gros grains dans la cellule de référence :

IV-14

$$\beta'_1(x) = \frac{\pi(1+x)}{4\left(1 + \frac{2k_p}{x}\right)^{\frac{3}{2}} \arcsin\left(\frac{1}{1+x}\right)} \times \left(2\left(1 + \frac{2k_p}{x}\right)^{\frac{3}{2}} - 3\left(1 + \frac{2k_p}{x}\right)\left(1 + \frac{k_p}{1+x}\right) + \left(1 + \frac{k_p}{1+x}\right)^3 - \frac{1}{x^3} + \frac{3k_p}{x^2(1+x)} + \left(\frac{1}{x} - \frac{k_p}{1+x}\right)^3 \right)$$

On en déduit la compacité dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence grâce à l'hypothèse de dilatation isotrope :

IV-16

$$\beta'_1(x) = \frac{\beta''_1(x)}{\beta''_1(x_0) \left(1 + \frac{(x-x_0)}{(1-x_0)} \left(\sqrt[3]{\frac{2\beta''_1(1)}{\beta''_1(x_0)} - 1} \right) \right)^3} \beta_1$$

Puis, on effectue un raisonnement à l'eutectique correspondant au passage des gros dominants aux petits dominants lorsque l'on introduit progressivement des grains fins dans une matrice constituée au départ d'éléments grossiers uniquement. Ces derniers se décompactent alors jusqu'à l'obtention de la compacité maximale du mélange.

Le titre volumique des gros grains à l'eutectique s'écrit :

IV-17

$$\phi_1^* = \beta'_1(x, x_0)$$

Dans le cas où $\beta_2 = \beta_1$, la compacité du mélange binaire qui en résulte se calcule grâce à la formule :

$$\text{IV-18} \quad \gamma_2^* = \beta_2 + (1 - \beta_2)(1 - b_{21})\phi_1^*$$

de laquelle on déduit le titre volumique des petits grains correspondant :

$$\phi_2^* = \gamma_2^* - \phi_1^* = \beta_2 + ((1 - \beta_2)(1 - b_{21}) - 1)\phi_1^*$$

IV-19

$$\phi_2^* = \beta_2 + ((1 - \beta_2)(1 - b_{21}) - 1)\beta'_1$$

On détermine ensuite le volume partiel des grosses particules dominantes, en tenant compte de la dilatation isotrope de leur squelette, comme une fonction linéaire du volume partiel des petites particules relativement à l'espace que ces dernières occupent à l'eutectique :

IV-20

$$\phi_1 = \left(1 - \frac{\phi_2}{\phi_2^*}\right)\beta_1 + \frac{\phi_2}{\phi_2^*}\beta'_1$$

La compacité du mélange s'écrit alors :

$$\gamma_1 = \phi_1 + \phi_2 = \beta_1 + \left(1 - \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*}\right)\phi_2$$

IV-21

$$\gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*}\right)\gamma_2}$$

On en déduit :

IV-22

$$a_{\text{ROAD}}(\mathbf{x}) = \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*} \quad \text{pour } \mathbf{x} \geq \mathbf{x}_0$$

$$a_{\text{ROAD}}(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{pour } \mathbf{x} < \mathbf{x}_0$$

$a_{\text{ROAD}}(\mathbf{x})$ représente le coefficient d'effet de desserrement selon la théorie « ROund ADjustable cell » consistant à ajuster le diamètre de la cellule de référence sphérique en fonction de la compacité des grains en pleine masse.

4.6. REPRÉSENTATION GRAPHIQUE DE LA FONCTION a_{ROAD} DÉCRIVANT L'EFFET DE DESSERREMENT EN FONCTION DE x , DE LA TAILLE DE LA CAVERNE, POUR DIFFÉRENTES VALEURS DE β_1 .

On a traduit les résultats de plusieurs simulations sur la figure suivante. Elles donnent le coefficient d'effet de desserrement a_{ROAD} , selon la théorie ROund ADjustable cell, en fonction du rapport x des diamètres, pour différentes tailles de cavernes x_0 et pour différentes valeurs β_1 de la compacité des gros grains en pleine masse.

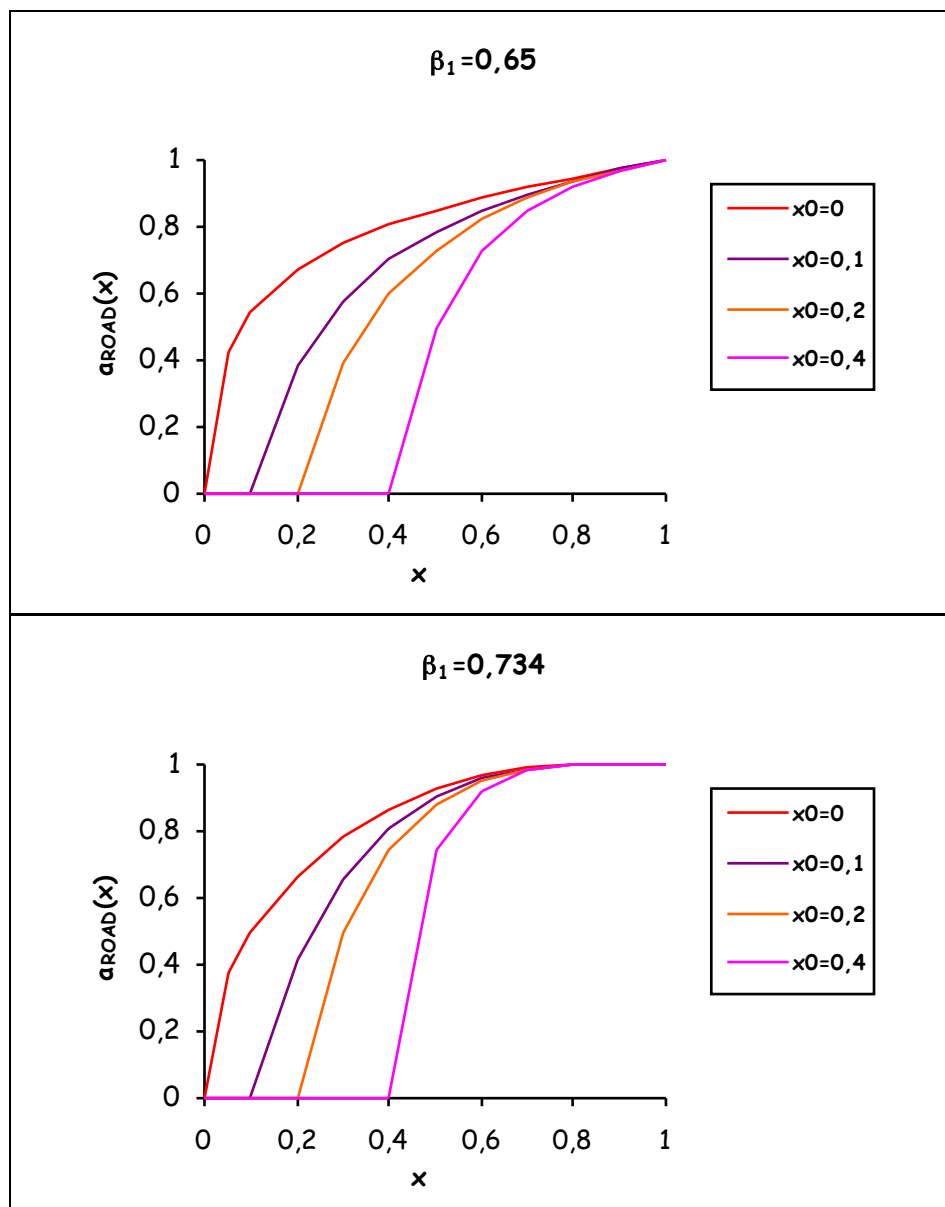


Figure IV-13 : représentation de la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » en fonction du rapport x des grosseurs fins/gros pour différentes tailles de cavernes x_0 et pour différentes valeurs de β_1 d'après le concept de dilatation isotrope associé à la cellule sphérique de la théorie ROund ADjustable cell (ROAD).

Les courbes obtenues à partir du modèle ROund ADjustable cell (ROAD) amènent les commentaires suivants :

- dès que le rapport de tailles x dépasse la taille de la caverne x_0 , on note une évolution du coefficient d'effet de desserrement relativement indépendante, dans un premier temps, de la compacité des grosses particules en pleine masse. On observe toutefois un accroissement légèrement plus marqué pour $\beta_1 = 0,65$ lorsque la taille de la caverne tend vers zéro.
- Puis, lorsque x est suffisamment important par rapport à x_0 , la tendance se modifie. Pour les faibles valeurs de β_1 situées aux alentours de $0,65$, la progression du coefficient α_{ROAD} s'atténue mais continue pour converger vers 1 en $x = 1$ quelle que soit la taille de la caverne. Pour les très fortes compacités β_1 , elle se poursuit assez nettement pour converger vers 1 dès que le rapport des tailles atteint $x = 0,8$, puis dépasse légèrement l'unité en $x = 0,9$ avant de décroître pour revenir à 1 en $x = 1$.

La structuration mathématique du modèle amène les éléments de réponse suivants concernant l'allure des courbes. Effectuons notre raisonnement à partir des expressions IV-19 et IV-22 :

$$\alpha_{ROAD}(x) = \frac{\beta_1 - \beta'_1}{\phi_2^*} \text{ pour } x \geq x_0$$

$$\phi_2^* = \beta_2 + \left((1 - \beta_2)(1 - b_{21}) - 1 \right) \beta'_1$$

Pour $\beta_1 = \beta_2 = \beta$, nous obtenons :

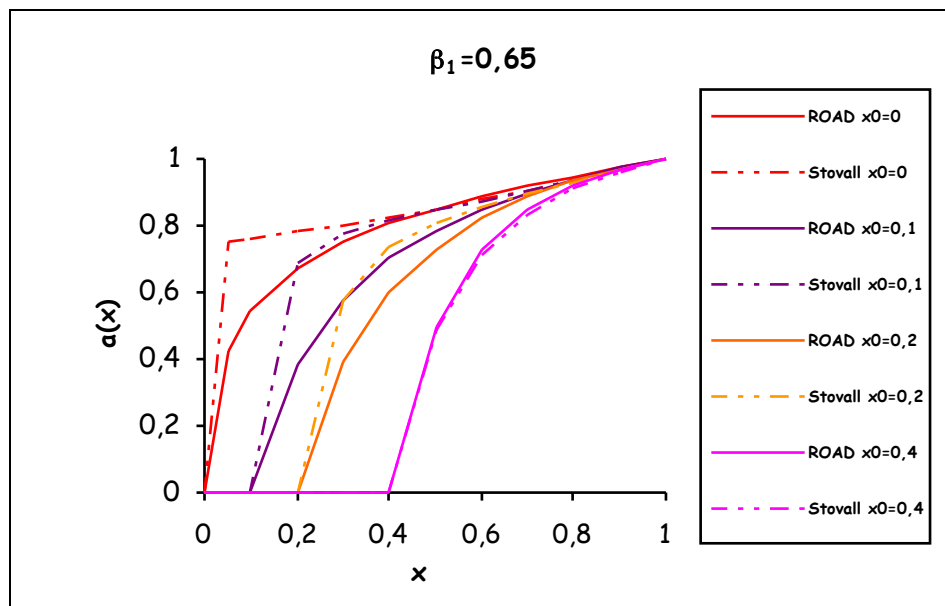
$$\begin{aligned} \alpha_{ROAD}(x) &= \frac{\beta - \beta'_1}{\beta + \left((1 - \beta)(1 - b_{ROAD}(x)) - 1 \right) \beta'_1} \\ &= \frac{\beta - \beta'_1}{\beta - \beta'_1 + (1 - \beta)(1 - b_{ROAD}(x)) \beta'_1} \\ &= \frac{1}{1 + (1 - b_{ROAD}(x))(1 - \beta) \frac{\beta'_1}{\beta}} \end{aligned}$$

IV-23

$$\alpha_{ROAD}(x) = \frac{1}{1 + (1 - b_{ROAD}(x))(1 - \beta) \frac{k_{L_{ROAD}}}{1 - k_{L_{ROAD}}}}$$

Pour les fortes compacités résiduelles ($\beta_1 = \beta_2 = \beta$) et pour les faibles contrastes de tailles (x se rapprochant de 1), le coefficient d'effet de paroi peut, selon notre modèle, être légèrement supérieur à 1 (paragraphe 3.7). C'est le cas, par exemple, lorsque $x \geq 0,8$ pour $\beta_2 = 0,734$. Seulement, $b_{ROAD}(x)$ ne dépasse que très faiblement l'unité si bien que la différence $(1 - b_{ROAD}(x))$, même négative, reste toujours très faible. Dans cette situation, le dénominateur de l'expression IV-23 peut être inférieur à 1 et $a_{ROAD}(x)$ plus grand que l'unité, mais d'une très faible quantité dans la gamme de tailles de cavernes testées ($0 \leq x_0 \leq 0,4$) car la variation du rapport $\frac{k_{L_{ROAD}}}{1 - k_{L_{ROAD}}}$ est « annihilée » par la différence $(1 - b_{ROAD}(x))$ qui tend vers 0. C'est ce qui explique la convergence vers 1 des courbes représentatives du coefficient d'effet de desserrement dès que le rapport des tailles atteint $x = 0,8$ et leur quasi-superposition jusqu'à $x = 1$ pour la fourchette de valeurs de x_0 énoncée plus haut lorsque $\beta_1 = 0,734$.

Nous avons représenté sur la figure suivante les courbes issues du modèle « linéaire » de Stovall (voir 2.2.1.). Pour celui-ci, les petites sphères, insuffisamment fines pour se glisser dans les cavernes existantes, sont à l'origine d'une augmentation de la porosité de l'assemblée granulaire des gros grains qu'elles comblent partiellement dans une proportion supposée varier linéairement en fonction du rapport de taille x (d'où la dénomination de modèle linéaire).



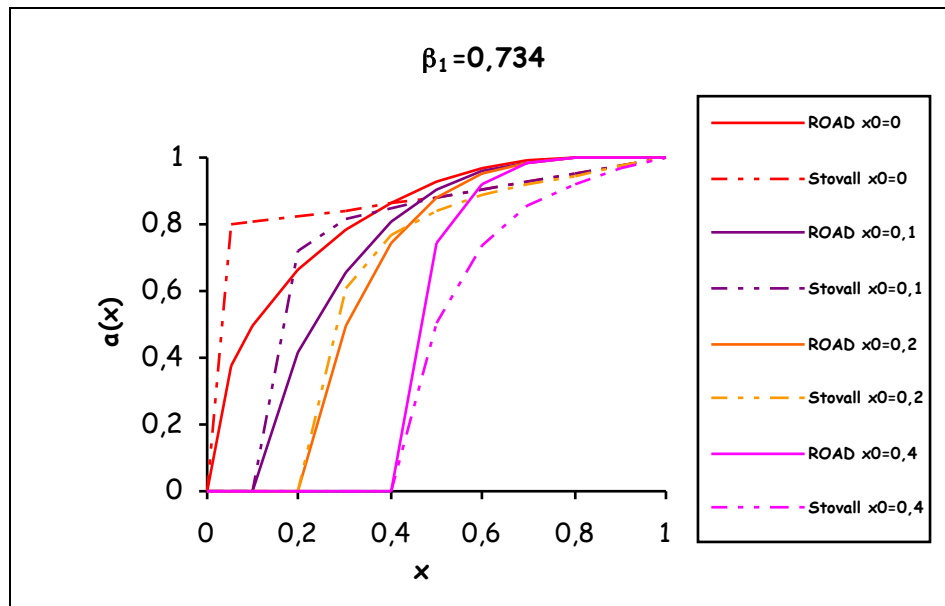


Figure IV-14 : comparaison du coefficient d'effet de desserrement obtenu d'une part grâce au concept de dilatation isotrope associé à la cellule sphérique de la théorie ROAD ADjustable cell (ROAD) et d'autre part grâce au modèle « linéaire » de Stovall avec le coefficient d'effet de paroi de Caquot.

Le modèle de Stovall fournit des coefficients d'effet de desserrement présentant des croissances plus fortes que celles données par le modèle ROAD dès que le rapport des tailles x dépasse, de façon infime, la taille de la cavité x_0 lorsque cette dernière reste faible ($x_0 \leq 0,2$). Nous en avons apporté une explication théorique dans le paragraphe 2.2.1. A taille de cavité égale mais suffisamment petite, il en résulte que les valeurs a_s de Stovall restent supérieures à a_{ROAD} pour les contrastes de tailles plutôt forts (x plutôt faible). A l'autre extrémité de l'axe des abscisses, la théorie ROAD conduit à des coefficients de desserrement plus importants pour les fortes valeurs de β_1 . Stovall, en revanche, obtient des résultats qui plafonnent aux alentours d'une droite d'équation $a(x) = \frac{1}{2-\beta} [(1-\beta)x + 1]$ d'ordonnées $\frac{1}{2-\beta}$ en $x = 0$ (soit 0,74 pour $\beta = 0,65$ et 0,79 pour $\beta = 0,734$) et 1 en $x = 1$. L'explication réside dans son choix de respecter la condition $\lim_{x \rightarrow 1} (1-\beta)(1-b(x)) = \lim_{x \rightarrow 1} (1-a(x))$ en faisant appel à une expression du coefficient d'effet de paroi relativement éloignée de la notre puisque obtenue à partir du modèle de Caquot : $b_c(x) = x$.

Nous avons enfin fait figurer ci-dessous les courbes issues du modèle de décompaction locale, que nous utilisons également, mais obtenues grâce au concept de dilatation isotrope dans une cellule tétraédrique (voir 2.2.2.).

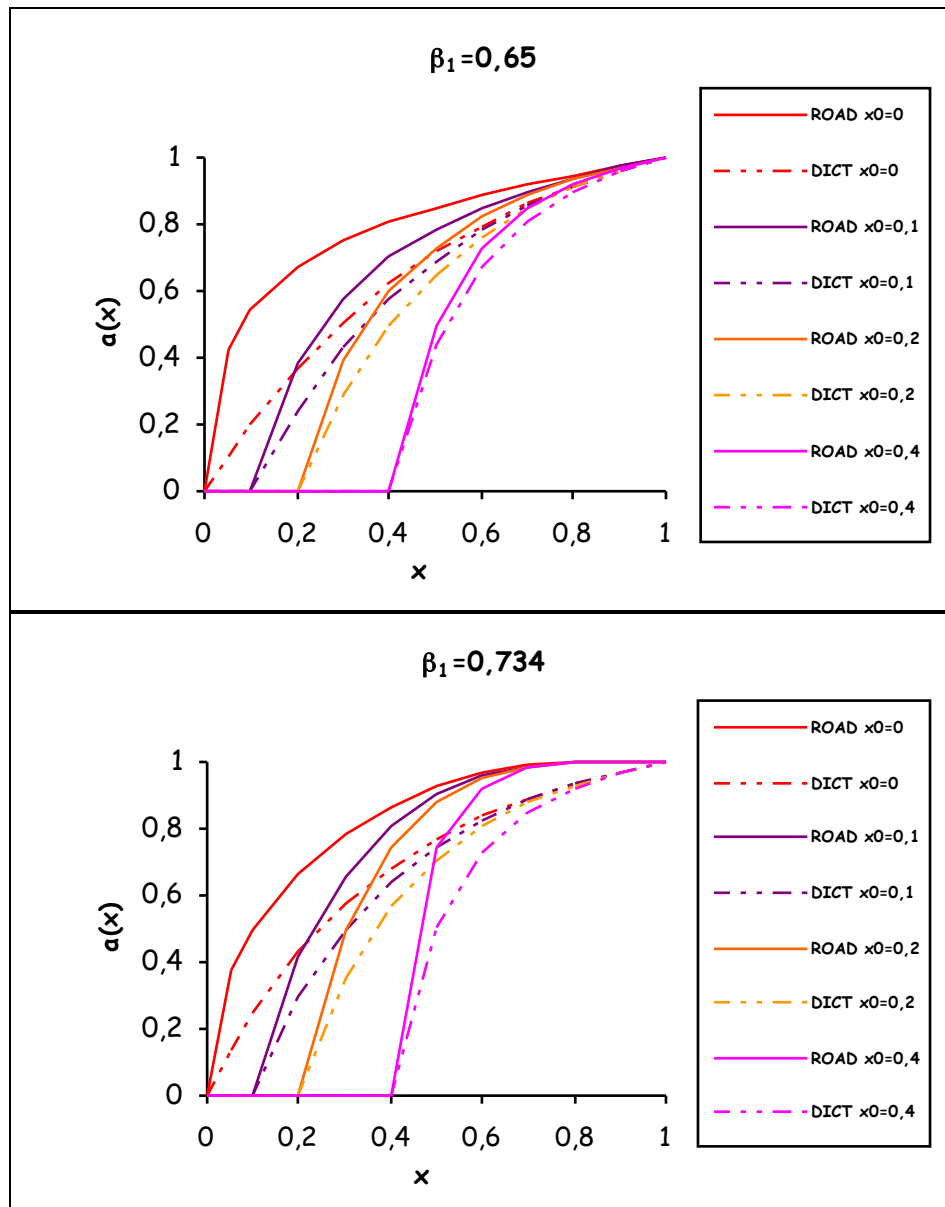


Figure IV-15 : comparaison du coefficient d'effet de desserrement obtenu d'une part grâce au concept de dilatation isotrope associé à la cellule sphérique de la théorie ROund ADjustable cell (ROAD) et d'autre part grâce au concept de Dilatation Isotrope associé à une Cellule Tétraédrique (DICT) avec le coefficient d'effet de paroi de Caquot.

Le modèle de dilatation isotrope dans une cellule tétraédrique fournit des coefficients d'effet de desserrement globalement plus faibles que ceux du modèle ROAD dans la gamme de tailles de cavernes prises en compte. Ce constat est particulièrement marqué lorsque cette dernière vaut $x_0 = 0$ et pour une compacité des gros grains en pleine masse $\beta_1 = 0,65$. Si les écarts sont plus importants dans ce dernier cas de figure, c'est en raison de la plus grande sensibilité du modèle ROAD aux variations de β_1 .

L'autre théorie présente en effet des changements peu perceptibles vis-à-vis de l'arrangement des grosses particules en zone courante. Pour le comprendre, il suffit d'observer l'évolution du coefficient $k_L = \frac{\beta_1'}{\beta_1}$ qui lui correspond sur la figure IV-12.

Les comparaisons établies entre le modèle ROAD et le modèle linéaire de Stovall d'une part et le modèle de décompaction locale associé à une dilatation isotrope des gros grains dans une cellule tétraédrique d'autre part laissent apparaître que les courbes fournies par le premier ont tendance à se situer entre celles données par le second et celles obtenues à partir du troisième (pour x et x_0 restant petits). Toutefois, pour les faibles contrastes de tailles (x plutôt élevé), l'effet de paroi prend une part non négligeable. Par rapport aux deux autres qui font appel au modèle de Caquot, la théorie ROAD est celle qui en fournit la quantification la plus élevée pour les fortes valeurs de β . C'est pourquoi elle engendre également, dans ces conditions, l'obtention des coefficients de desserrement les plus forts dans cette zone.

4.7. RÉSUMÉ ET CONCLUSIONS.

Nous avons présenté, dans ce chapitre, les différentes étapes de l'élaboration d'un modèle permettant la détermination du coefficient d'effet de desserrement α , entre sphères exclusivement. Cette interaction se traduit par une diminution locale du volume des gros grains causée par l'insertion d'un petit élément insuffisamment fin pour se glisser dans une cavité disponible dans l'empilement de la classe dominante.

Avec son congénère le coefficient d'effet de paroi β , le coefficient d'effet de desserrement α a pour but d'évaluer la compacité virtuelle d'un mélange qui représente la compacité maximale susceptible d'être atteinte si l'on positionnait chaque grain un par un à son emplacement idéal.

Pour élaborer cette théorie, nous avons choisi d'une part de faire appel aux atouts des deux modèles théoriques existants permettant de quantifier l'effet de desserrement/d'interférence (Stovall et décompaction locale) et d'autre part de tirer profit de nos travaux sur la mise au point d'une cellule de référence sphérique à diamètre variable existant autour d'une sphère intruse :

- le modèle linéaire de Stovall présente l'intérêt de considérer une taille de cavité critique ;
- le modèle de décompaction locale introduit la notion de dilatation du squelette des gros grains autour d'un petit insuffisamment fin pour se glisser dans un interstice disponible. Il établit par ailleurs un lien avec le coefficient d'effet de paroi ;
- le modèle **ROAD** (ROund ADjustable cell), enfin, a montré son efficacité pour étudier la compacité dans l'environnement d'une particule isolée d'un diamètre différent par rapport à celles qui l'entourent. Efficace dans le domaine des petits dominants, nous avons envisagé qu'il pouvait l'être dans le domaine des gros dominants. Le modèle des carrés sphériques, qui lui est associé, permet par ailleurs de déterminer le nombre de coordination en assurant la continuité entre plusieurs structures topologiques de disposition des grosses sphères contre une petite.

Reprenons, de façon plus détaillée, les 3 points qui viennent d'être évoqués.

Le modèle linéaire de Stovall est le premier, à notre connaissance, à considérer le paramètre « taille de cavernes » pour étudier l'effet de desserrement. Pour lui, il existe un diamètre critique de petit grain lui permettant de se nicher dans l'interstice disponible entre 4 plus gros sans les écarter. Il s'agit, plus précisément, de la notion de rapport de tailles critique x_0 qui est introduite. Lorsque $d_2 \leq x_0 d_1$, l'insertion d'une faible proportion de petites sphères ne perturbe pas l'empilement des grosses sphères. Lorsque $d_2 > x_0 d_1$ au contraire, une désorganisation dans l'agencement de ces dernières apparaît. Stovall fixe la valeur de x_0 à 0,2. Nous avons choisi, pour notre part, de faire varier x_0 . Nous verrons ultérieurement comment fixer ce paramètre en fonction du type de matériau étudié. Or, si le modèle de Stovall a donné satisfaction à son auteur pour la valeur unique qui vient d'être citée, il prévoit un net desserrement des gros grains dès que le rapport de tailles critique est dépassé, le phénomène s'amplifiant à l'infini pour une dimension de cavité tendant vers zéro. C'est pourquoi nous avons abandonné l'idée d'utiliser cette théorie tout en conservant le principe de l'existence de ce fameux rapport x_0 .

Le modèle de décompaction locale l'intègre également. Il propose le principe d'une augmentation de la porosité du squelette des gros grains au fur et à mesure de l'introduction des éléments fins, cette dernière se poursuivant jusqu'au basculement dans la zone des « petits dominants », à un point dénommé l'eutectique. D'un point de vue mathématique, la compacité du mélange à l'intérieur de la zone des « gros dominants » est obtenue en exprimant la décompaction progressive du squelette de ces derniers en fonction du volume partiel des petites particules relativement au volume partiel que ces dernières occupent à l'eutectique.

Deux termes revêtent une importance considérable dans cette définition : « volume partiel des petits grains à l'eutectique » et « décompaction progressive des gros grains ».

Le premier nécessitant, pour être obtenu, de faire appel à la compacité du mélange dans le domaine des « petits dominants », le coefficient d'effet de paroi apparaît dans les calculs : le coefficient d'effet de desserrement en dépend.

Le second implique la détermination de la différence des compacités des grosses particules en « zone courante » et en « zone perturbée ». Dans le modèle original, cette dernière est évaluée grâce à l'hypothèse de dilatation isotrope des grosses sphères autour d'une petite dans une cellule tétraédrique puis transposée à la zone plus globale subissant l'effet d'interférence grâce à l'insertion d'un paramètre ν , analogue à un coefficient de dilatation thermique linéaire.

Si le modèle de décompaction locale nous est apparu adapté dans l'optique de déterminer le coefficient d'effet de desserrement, nous nous sommes interrogés sur l'opportunité de faire appel à une cellule de référence tétraédrique pour calculer la compacité des grosses particules dilatées. Au cours de nos recherches, nous avons référencé deux autres géométries de cellule possibles : celle cubique de Dewar et celle sphérique de Suzuki et Oshima. La première conduit à des résultats similaires à ceux obtenus à partir de la cellule tétraédrique, le paramètre v s'avérant équivalent au facteur d'espacement m de Dewar dans le cas limite où la taille de la caverne est nulle. La seconde fournit des valeurs nécessairement liées à la délimitation de son contour extérieur dont nous avons montré l'inadéquation lors de l'étude de l'effet de paroi malgré son intérêt sur le plan géométrique. Aussi, puisque aucun type de cellule ne s'imposait vraiment et dans un souci de cohérence et de continuité avec notre étude sur l'autre interaction granulaire, avons-nous choisi d'opter pour une géométrie de cellule de référence sphérique de type ROAD pour délimiter la zone dans laquelle s'effectue le calcul de compacité des gros éléments.

Si nous récapitulons ce qui vient d'être énoncé, le coefficient d'effet de desserrement est déterminé à partir du modèle de décompaction locale et la compacité des grosses particules dilatées à partir de la théorie ROAD, la taille de la caverne x_0 intervenant au cours de cette étape.

Le modèle ROAD consiste donc à délimiter une zone d'étude dans laquelle va être calculée la compacité des grosses sphères partiellement contenues à l'intérieur. Son centre est confondu avec celui de la petite particule autour de laquelle se manifeste le desserrement. Son contour extérieur est délimité par une sphère dont le diamètre est choisi pour assurer la continuité avec la cellule utilisée pour étudier l'effet de paroi lorsque $x = 1$. Le coefficient de perturbation k_p y figure donc.

Pour déterminer leur compacité dans la cellule de référence, les grosses sphères doivent y être dénombrées. La méthode dite des carrés sphériques, déjà présentée, est à nouveau utilisée dans son formalisme continu en raison de sa simplicité et de ses bonnes capacités prédictives. Elle permet de retrouver deux valeurs singulières remarquables aux deux extrémités du spectre de rapports de tailles pris en compte :

- 4 grosses sphères (dont les centres forment les sommets d'un tétraèdre) en contact avec une petite sphère centrale pour un rapport de tailles de 0,222;

- 12 sphères (dont les centres forment les sommets d'un polyèdre) en contact avec une sphère centrale de même diamètre.

De cette façon, elle assure la continuité entre plusieurs structures topologiques de disposition des centres des grosses sphères contre une petite, allant du tétraèdre à un polyèdre se rapprochant d'une sphère. C'est pourquoi on peut suggérer qu'elle permet « d'unifier » les différentes théories faisant appel à des cellules de référence différentes (tétraédrique, cubique, sphérique) en une seule plus globale : la théorie ROAD à cellule de référence sphérique (dans laquelle s'effectue le calcul de compacité des grosses particules dilatées) mais à structures topologiques diverses (tétraédrique jusqu'à quasi-sphérique).

La compacité plus globale des gros grains dans la zone perturbée par l'effet d'interférence β'_1 est ensuite déduite de celle calculée dans la cellule de référence β''_1 en écrivant d'une part qu'il ne doit pas y avoir desserrement pour un rapport de tailles x égal à x_0 et d'autre part qu'il doit y avoir continuité entre les domaines des grains fins dominants et des gros grains dominants lorsque x tend vers l'unité et lorsque les proportions volumiques de chacun des constituants s'équilibrent.

On en déduit le rapport des compacités en zone perturbée par l'effet de d'interférence et en zone courante : $k_{L_{ROAD}} = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$. Il augmente avec la dimension de la caverne (plus celle-ci est importante, plus il y a de place pour glisser un petit grain en provoquant le minimum de desserrement) et avec le contraste des tailles des sphères (une petite particule s'insère plus facilement dans une caverne lorsqu'elle possède une dimension beaucoup plus faible que celle des particules qui l'entourent).

Selon notre théorie, le coefficient $k_{L_{ROAD}}$ s'accroît également avec la compacité du milieu mono-modulaire. Si cette remarque était confirmée expérimentalement, l'explication serait la suivante. La cellule de référence présente un diamètre qui évolue dans le même sens que le coefficient de perturbation k_p , lequel s'exprime par une fonction croissante de la compacité résiduelle $\beta_1 = \beta_2 = \beta$. On comprend alors pourquoi l'effet engendré par une hétérogénéité locale (la petite particule) se fait sentir sur une zone dont l'emprise augmente avec la qualité de l'empilement des grosses sphères en pleine masse.

Au fur et à mesure que son diamètre augmente (pour un rapport de tailles x fixé), la cellule de référence englobe des volumes partiels de grosses particules de plus en plus importants. Cela se traduit par un accroissement du rapport des compacités en

zone perturbée et en zone courante $k_{L_{ROAD}} = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$.

Intéressons-nous maintenant aux valeurs du coefficient de desserrement α_{ROAD} et à leurs représentations en fonction de x , pour différentes tailles de cavernes x_0 et pour différentes compacités résiduelles β_1 .

Pour les faibles rapports de tailles x et tailles de cavernes x_0 , les courbes se situent entre celles fournies par le modèle linéaire de Stovall, en partie haute, et par le modèle de décompaction locale associé à une dilatation isotrope des gros grains dans une cellule tétraédrique, en partie basse.

Le premier modèle cité s'oriente en effet vers un desserrement assez marqué des gros grains dès que le rapport de tailles x dépasse légèrement la taille de la cavité x_0 lorsque celle-ci est faible, tandis que le second, au contraire, présente un desserrement beaucoup plus atténué.

Le modèle ROAD indique que l'apparition du desserrement s'effectue relativement indépendamment de la compacité des gros grains en pleine masse.

Puis, lorsque les rapports de tailles se rapprochent de 1, les courbes de la théorie ROAD fournissent des valeurs de α_{ROAD} supérieures à celles données par les deux autres modèles (Stovall, décompaction locale dans une cellule tétraédrique) pour les fortes compacités β_1 . Pour un faible contraste de tailles, l'effet de paroi joue en effet un rôle important. Or c'est précisément la théorie ROAD qui en fournit la quantification la plus importante dans le cadre d'un empilement monodimensionnel fortement compact, les deux autres modèles faisant appel au coefficient d'effet de paroi de Caquot $b_c(x) = x$ qui en donne une limite inférieure.

Les différentes étapes du modèle sont présentées page suivante.

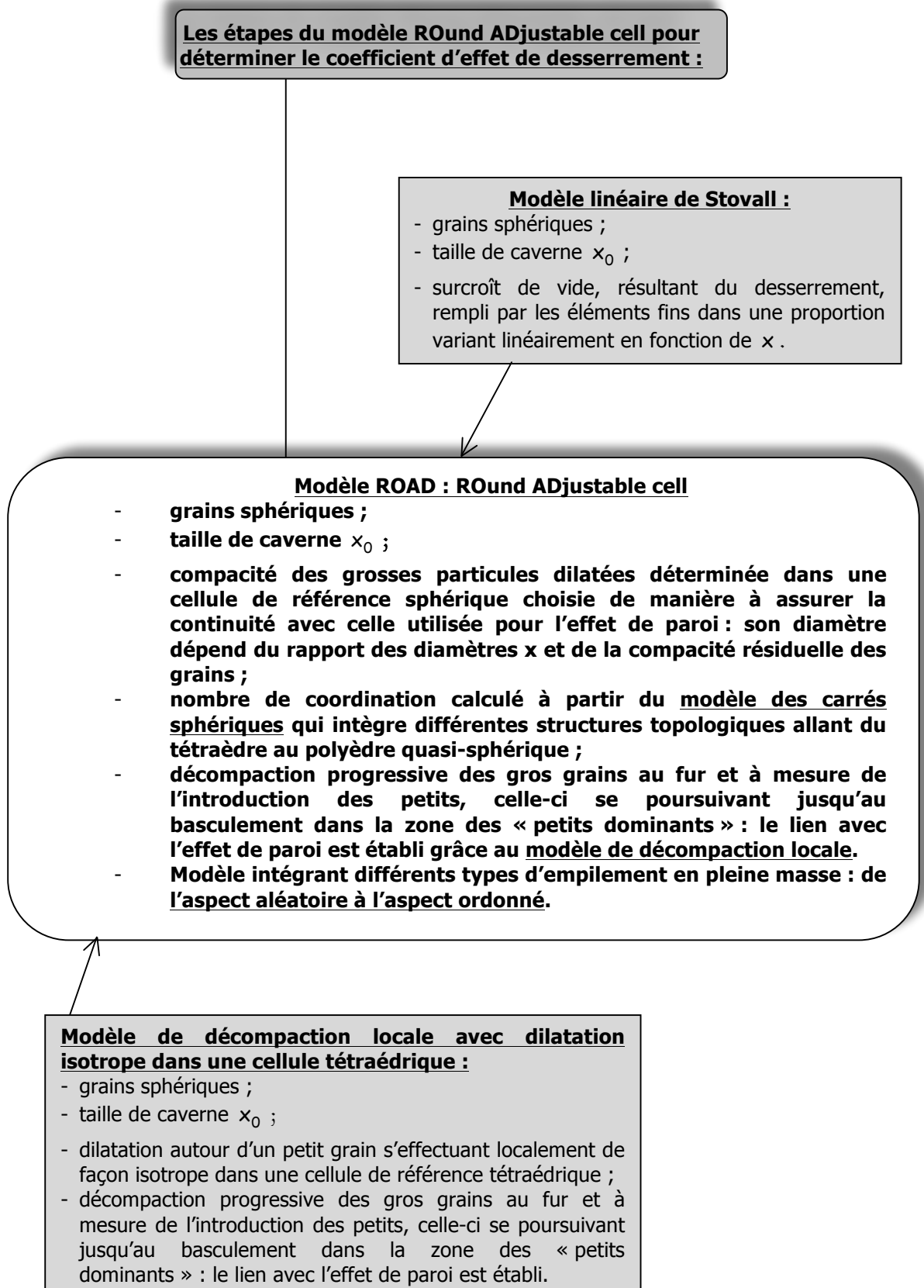


Figure IV-16 : les étapes du modèle ROund ADjustable cell $a_{ROAD}(x)$.

CHAPITRE 5

AJUSTEMENT DES FONCTIONS D'INTERACTION À DIFFERENTS TYPES DE MATÉRIAUX.

Comme nous l'avons déjà souligné, notre étude s'inscrit dans la logique des travaux initiés par un certain nombre de chercheurs (Dodds, Ben-Aïm, Suzuki et Oshima, de Larrard) qui ont montré que l'analyse d'empilements modèles constitués de sphères permettait d'estimer avec une bonne précision la compacité des matériaux granulaires.

Dans le domaine du génie civil, ces derniers sont constitués de granulats, ensemble de grains dont les dimensions sont comprises entre **0** et **125** mm d'après la norme **EN 12-620+A1**. L'étendue du spectre granulaire montre que les substances rencontrées peuvent se présenter sous des formes très diversifiées. Elles peuvent d'une part apparaître comme une matière discontinue composée de particules parfaitement discrètes, identifiables et discernables à l'œil nu. Elles peuvent d'autre part être considérées comme un ensemble continu lorsqu'elles prennent l'aspect de poudres ou sont broyées pour le devenir. Tout dépend, en réalité, de l'échelle d'observation adoptée. C'est pourquoi une classification s'avère particulièrement délicate à établir. **Nous avons, pour notre part, considéré des grains inertes formant un milieu morcelé.**

Contrairement aux sphères que nous avons choisies comme référence jusqu'à présent, et selon une définition déjà ancienne de Tourenq et Denis [TOUR82], « chaque élément d'un granulat est un solide limité par des faces ayant un certain état de surface et faisant entre elles des angles. Les trois dimensions principales définissent sa forme, l'une d'entre elles déterminant son appartenance à une classe granulaire ».

Les caractéristiques d'un granulat dépendent, en grande partie, de son origine : alluviale, éruptive ou calcaire. Suite à l'extraction en carrière ou dans les fonds marins ou lacustres, de multiples opérations vont contribuer à le transformer : le scalpage (tri des indésirables), le concassage et le broyage, le criblage, le lavage, le cyclonage, le débouillage, le stockage, le transport.

La complexité de la définition est telle que les spécifications relatives aux granulats pour bétons hydrauliques font intervenir une vingtaine de paramètres.

Etat de surface, angularité, forme et granularité constituent les quatre caractéristiques géométriques principales que nous allons analyser.

La surface d'une particule provient toujours d'une rupture. Elle est rugueuse si le grain est polycristallin ou lisse s'il est monominéral. De nombreux autres états peuvent la caractériser : vitreux, granuleux, cristallin, caverneux. Les éléments s'ordonnent moins aisément lorsqu'ils sont frottants.

Les angles formés par les faces limitant les particules sont plus ou moins aigus. Ils sont difficiles à estimer du fait que les arêtes sont plus ou moins émoussées, notamment lorsqu'il s'agit de matériaux alluvionnaires et marins. La compactabilité est étroitement liée à l'angularité : le déplacement relatif des grains et leur mise en place sont facilités lorsqu'ils sont arrondis.

La forme peut être caractérisée grâce à la mesure de certaines longueurs. Elle joue un rôle qui s'apparente à celui de l'angularité.

La granularité, enfin, représente la distribution dimensionnelle des particules d'un granulat. La méthode d'essai qui permet de la déterminer est l'analyse granulométrique. La dimension se déduit de la technique utilisée. Elle est souvent définie par l'intermédiaire d'un diamètre équivalent : le diamètre de maille dans le cas d'un tamisage, le diamètre de Stokes ou de chute pour une sédimentation ou pour une élutriation (le fluide est un gaz), le diamètre de diffusion ou de surface projetée stable pour la dispersion d'ondes électromagnétiques, le diamètre en volume pour la méthode de variation de résistance (principe Coulter).

Les trois premières caractéristiques vont influencer la mise en œuvre et la valeur de la compacité réelle maximale dans la mesure où les éléments trouveront d'autant plus difficilement leur position qu'ils seront plus frottants, anguleux, longs et plats. Mais c'est la granularité qui tient le rôle prépondérant dans l'optimisation de la compacité virtuelle, objet de notre étude. Puisqu'il n'est pas envisageable de prendre en compte l'influence de l'ensemble des hétérogénéités de forme sur l'empilement du composant, nous avons cherché à remplacer la géométrie variée des particules par des configurations et des textures régulières sans aspérités.

Nous avons alors choisi d'assimiler la dimension d'un grain à un diamètre avec, comme référence, celui de la sphère équivalente passant à travers la maille d'un tamis donné.

La description du matériau considère donc des éléments infiniment rigides possédant cette géométrie simplifiée. Rappelons qu'elle peut être effectuée à deux échelles : celle du grain et celle de l'édifice granulaire global.

Au premier niveau, chaque sphère appartenant à la classe dominée est entourée d'une zone perturbée dans laquelle les billes appartenant à l'espèce dominante sont décompactées en raison des effets de paroi ou de desserrement.

Au second niveau, cette cellule élémentaire a été étendue à l'ensemble des éléments de la classe dominée régulièrement disséminés dans la matrice des particules de l'espèce dominante de telle façon qu'aucune interpénétration des espaces subissant l'interaction ne se produise. La structure ainsi générée est représentative d'un mélange homogène binaire.

La modélisation établie avec des sphères doit maintenant prouver sa fiabilité avec des grains de forme quelconque. A ce stade, nous sommes confrontés à un choix épistémologique qui peut aboutir à quatre démarches distinctes, les trois premières correspondant à des tentatives destinées à améliorer le processus de prise en compte de l'architecture des particules :

- la première permet de préciser la forme grâce à des facteurs faisant appel à des géométries de référence ;
- la deuxième consiste à apprécier l'effet de non-sphéricité en étendant le domaine de variation du diamètre d'une classe ;
- la troisième, enfin, réside dans la confrontation des prédictions fournies, sans apporter d'améliorations au modèle, avec des valeurs expérimentales pour voir si la précision atteinte est convenable.

Dans la première démarche, la notion de forme serait précisée en faisant intervenir une figure géométrique de référence. Il en existe différents types suivant le degré d'élaboration recherché.

Dans certains cas, on estime qu'une sphère suffit. On définit alors des facteurs de sphéricité ou d'écart de sphéricité qui sont établis en effectuant le rapport entre deux volumes ou deux surfaces : l'un(e) lié(e) à la sphère, l'autre au grain.

Dans d'autres cas, on fait intervenir la mesure des trois dimensions élémentaires universellement admises par les spécialistes : la longueur L et l'épaisseur E qui sont respectivement les distances maximale et minimale séparant deux plans parallèles enserrant la particule ainsi que la grosseur G qui est la cote du plus petit tamis la laissant passer. On définit ainsi un parallélépipède dans lequel s'inscrit l'élément et on détermine des indices d'allongement ou d'aplatissement.

C'est ainsi que procède Pavillon [PAVI47] qui considère que toutes les formes imaginables peuvent s'inscrire à l'intérieur d'un diagramme qu'il a appelé « carré des formes ». Chaque angle schématise un parallélépipède particulier de longueurs L , G et E . Les trois premiers sont la plaque, le fil et le ruban obtenus à partir du quatrième, le cube, par aplatissement, par allongement ou par l'intermédiaire de ces deux opérations à la fois.

Dans la deuxième démarche, un concept développé en morphologie mathématique consisterait à utiliser un élément structurant facilitant la reconstitution de l'architecture des particules observées. De Larrard [DELA88] suggère la modélisation

d'un grain « moyen » de taille d_i par un ellipsoïde d'axes principaux $\frac{d_i}{\lambda}$, d_i et λd_i .

Un granulats constitué de particules passant à travers un tamis de maille d_i pourrait alors être pris en compte par l'intermédiaire d'une distribution de sphères de diamètres compris entre $\frac{d_i}{\lambda}$ et λd_i .

Dans la troisième démarche enfin, l'ambition est plus modeste : il s'agit d'appliquer le modèle dans sa configuration actuelle et de comparer valeurs théoriques et expérimentales pour voir si des divergences apparaissent et si certaines hypothèses doivent être remises en cause, notamment celle qui consiste à représenter un grain par une sphère. **C'est la voie que nous avons choisie de suivre.**

La première étape va consister à effectuer le bilan des résultats disponibles dans la littérature et à examiner les conditions dans lesquelles ils ont été obtenus pour apprécier leur degré de fiabilité et pour retenir ceux qui satisfont à nos exigences.

La deuxième étape est cruciale car elle concerne la transposition des valeurs obtenues sur le milieu modèle constitué de sphères à différents types de matériaux dont les caractéristiques s'éloignent de cette représentation idéalisée.

Il s'agit tout d'abord de vérifier la validité ou non de l'approche adoptée par de Larrard [DELA00] et Lecomte et Zennir [LECO97] qui quantifient les interactions granulaires en tenant compte uniquement du contraste des tailles et qui aboutissent à des fonctions d'interaction uniques, l'une pour l'effet de paroi, l'autre pour l'effet de desserrement, indépendamment de la nature, de la morphologie, de la grosseur et de l'orientation des éléments.

Il s'agit ensuite d'ajuster un paramètre dont le rôle est particulièrement sensible dans le cas de sphères, le rapport critique de tailles de cavité x_0 , afin que la courbe décrite par l'équation proposée permette une approche optimisée des évolutions expérimentales pour chaque type de matériau rencontré. Les fonctions décrivant les interactions de type effet de paroi et effet de desserrement en fonction du rapport des diamètres $x = \frac{d_2}{d_1}$ sont représentées.

La troisième étape, enfin, apporte un éclairage sur l'intérêt d'une approche mathématique telle qu'elle a été proposée par rapport à des formules empiriques d'interpolation.

5.1. SÉLECTION DES DONNÉES EXPÉRIMENTALES ISSUES DE LA LITTÉRATURE.

Les données concernant les coefficients d'effet de paroi b et de desserrement a proviennent chronologiquement de quatre sources : Ben Aïm en 1970 [BENA70], Sedran, de Larrard, Angot en 1994 [SEDR94], Lecomte et Zennir en 1997 [LECO97], Kechkar et Cherait en 2009 [KECH09].

Dans la première, Ben Aïm utilise, à l'époque, des coefficients s'apparentant aux facteurs d'encombrement introduits par Mooney en 1950 : λ_{21} pour l'effet de paroi et λ_{12} pour l'effet de desserrement. Ce sont respectivement 21 points expérimentaux obtenus sur des sphères pour la première interaction granulaire et 14 pour la seconde qui ont été tirés de sa thèse. Les résultats retenus sont ceux pour lesquels $\alpha_1 = \alpha_2$ qui correspond à une des hypothèses de constitution de notre modèle. Certains concernent ses propres expériences, les autres proviennent de 3 autres sources : celles de Mc Geary, de Naar *et al.* et de Yerazunis *et al.*

Dans la deuxième, Sedran, de Larrard et Angot fournissent un jeu de données qualitativement riches, exploitées pour valider successivement les modèles de suspension solide et d'empilement compressible, le second constituant une version améliorée du premier. Des granulats roulés et concassés ont été testés et permettent d'obtenir 14 points expérimentaux pour b et 14 pour a , la moitié concernant chaque famille de granulat.

Dans la troisième, deux séries de 11 résultats ont été déduites de mesures effectuées sur des granulats calcaires lorrains concassés. Leur nature tendre ayant pu provoquer un phénomène d'attrition, il subsiste cependant un doute sur la précision des résultats obtenus.

Dans la quatrième enfin, 9 valeurs ont été déterminées pour chaque type d'interaction granulaire dans le but de valoriser des granulats de carrière issus de l'est de l'Algérie.

Enfin, nous aborderons un cas particulier concernant les mélanges cimentaires dans le but d'apporter un élément de réponse concernant la possibilité d'obtenir des coefficients d'effet de paroi supérieurs à 1.

5.1.1. Matériaux.

Dans la première source, Ben Aïm [BENA70] fait appel aux résultats publiés par différents auteurs avec des sphères pour compléter les siens. Les rapports de diamètres testés s'échelonnent entre **0,014** et **0,71**.

Dans la deuxième source, Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94] utilisent des résultats d'essais effectués au LRPC de Blois. Deux familles de granulats ont été retenues :

- des granulats roulés de la Loire (carrière Decize) de forme plutôt arrondie ;
- des granulats concassés anguleux de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc.

Contrairement aux données de la première source qui concernent des sphères choisies comme matériau modèle en raison de leurs caractéristiques « idéales », la volonté exprimée ici par les auteurs était de recueillir des informations qui prennent en compte la diversité des formes susceptibles d'être rencontrées dans le domaine du génie civil : anguleuses dans le cas d'un broyage, arrondies dans le cas d'un charriage fluvial.

Pour chacune des deux familles de granulats, cinq classes, mono-modulaires en théorie, ont été sélectionnées. Chaque fraction contient des grains compris entre

deux limites spécifiques $\frac{d_{\min}}{d_{\max}}$ correspondant à l'ouverture des mailles de deux tamis

successifs appartenant à la série de Renard ($d_{\max} = \sqrt[10]{10} d_{\min} \approx 1,25 d_{\min}$). Les auteurs de l'étude ont choisi ces granulats élémentaires de façon à étudier des rapports de

tailles $\frac{1}{k^p}$ avec $k = 2$ et p variant de 1 à 4.

Si l'on considère les tranches granulaires suivantes :

- gravillons de dimension moyenne **10 mm** ;
- sable de dimension moyenne **1 mm** ;
- ciment de dimension moyenne **15 μm** ;
- ultrafine de dimension moyenne **1 μm** ;

les rapports des tailles sable/gravillons et ultrafine/ciment, qui présentent un intérêt tout particulier dans la détermination des interactions entre constituants du béton et

donc sur le dosage de ces derniers, valent respectivement $\frac{1}{10}$ et $\frac{1}{15}$. Ils sont donc relativement proches de deux rapports ayant fait l'objet d'expérimentations, à savoir $\frac{1}{2^3} = \frac{1}{8}$ et $\frac{1}{2^4} = \frac{1}{16}$. Les chercheurs ont cependant tendance à s'orienter habituellement vers des dimensions en progression géométrique car elles facilitent généralement les interprétations théoriques.

Il restait alors à fixer les grosseurs extrêmes. L'article de Sedran, de Larrard, Angot indique que « *les diamètres extrêmes ont été limités vers le haut par des considérations de taille d'échantillon, et vers le bas afin d'éviter des mélanges trop sensibles à l'humidité et peu sensibles à la vibration* ».

Intéressons-nous, dans un premier temps, à la limite supérieure. Aucune information particulière n'est fournie dans l'article excepté la masse de l'échantillon fixée à **7 kg**. Aussi avons-nous tenté de reconstituer la démarche adoptée. Pour déterminer cette grandeur, il faut savoir que la masse d'un échantillon dépend du diamètre des plus grosses particules. Réciproquement, si la quantité du prélèvement est limitée par la capacité du conteneur, il convient d'adapter la dimension des plus gros grains. D'après les travaux de Beitzel cités dans [ROBI88] et pour une masse de **7 kg**, une certitude statistique de **95%** (niveau de confiance) et une erreur relative de **5%** (erreur absolue / étendue de la classe granulaire) conduisent à une dimension supérieure fixée à **10 mm** correspondant précisément à celle qui a été retenue. Il est donc envisageable que ce sont ces critères statistiques qui aient été retenus.

Concernant la limite inférieure, celle-ci doit être déterminée de façon à ce que les phénomènes de surface soient pratiquement inexistantes et que les forces de liaison puissent être négligées par rapport à celles de gravité. Ce critère pourrait être satisfait avec des grains secs de dimension supérieure à **100 μm** . Seulement, sauf à les passer en permanence à l'étuve, ceux-ci auraient pu s'avérer sensibles à l'humidité de l'air ambiant, facteur de cohésion. Pour s'affranchir de tous ces risques et pour permettre une vibration efficace, il a été décidé de limiter inférieurement la grosseur, du côté des petites tailles, à **500 μm** .

Finalement, les classes élémentaires retenues dans la source [SEDR94] pour réaliser une série de mélanges binaires destinés à l'étalonnage des coefficients d'effet de paroi et de desserrement sont les suivantes : **0,5 mm**, **1 mm**, **2 mm**, **4 mm** et **8 mm**. Leurs caractéristiques sont précisées dans les deux tableaux suivants.

Nom	d_{\min}	d_{\max}	Compacité α	Compacité régressée
R<05 _{SLA}	0,08	0,5	0,593	-
R05 _{SLA}	0,5	0,63	0,592	0,594
R1 _{SLA}	1	1,25	0,609	0,613
R2 _{SLA}	2	2,5	0,616	0,620
R4 _{SLA}	4	5	0,6195	0,629
R8 _{SLA}	8	10	0,628	0,632

Tableau V-1 : caractéristiques des classes granulaires élémentaires. Granulats roulés de la Loire de la carrière Decize. Les compacités « régressées » correspondent aux moyennes des valeurs obtenues par régression linéaire, pour chaque mélange binaire utilisant la classe considérée d'après Sedran, de Larrard, Angot [SEDR94].

Nom	d_{\min}	d_{\max}	Compacité α	Compacité régressée
C<05 _{SLA}	0,08	0,5	0,630	-
C05 _{SLA}	0,5	0,63	0,516	0,523
C1 _{SLA}	1	1,25	0,507	0,528
C2 _{SLA}	2	2,5	0,529	0,525
C4 _{SLA}	4	5	0,537	0,557
C8 _{SLA}	8	10	0,572	0,585

Tableau V-2 : caractéristiques des classes granulaires élémentaires. Granulats concassés de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc d'après Sedran, de Larrard, Angot [SEDR94].

Dans la troisième source, Lecomte et Zennir [LECO97] font appel exclusivement à un calcaire concassé 0 / 31,5 du Bajocien (côtes de Moselle) dans le but de vérifier s'il peut être utilisé comme granulat de substitution dans les bétons fabriqués en Lorraine, face à la raréfaction des granulats alluvionnaires des vallées de la Meurthe et de la Moselle. Dans un premier temps, vingt-cinq classes élémentaires comprises entre 0,04 et 31,5 mm ont été extraites de l'échantillon prélevé. Dans un deuxième temps, dix classes élémentaires ont été sélectionnées de façon à tester les interactions granulaires sur onze rapports de tailles couvrant une large étendue, deux rapports successifs appartenant à la série de Renard à une exception près : 0,063 ; 0,1 ; 0,125 ; 0,16 ; 0,2 ; 0,25 ; 0,315 ; 0,4 ; 0,5 ; 0,63 ; 0,8 .

Nom	d_{\min}	d_{\max}	Compacité α
C04 _{LZ}	0,4	0,5	0,567
C05 _{LZ}	0,5	0,63	0,554
C06 _{LZ}	0,63	0,8	0,555
C1 _{LZ}	1	1,25	0,555
C1.2 _{LZ}	1,25	1,6	0,554
C1.6 _{LZ}	1,6	2	0,554
C2.5 _{LZ}	2,5	3,15	0,548
C3.1 _{LZ}	3,15	4	0,552
C4 _{LZ}	4	5	0,565
C6.3 _{LZ}	6,3	8	0,565

Tableau V-3 : caractéristiques des classes granulaires élémentaires. Granulats concassés du Bajocien lorrain d'après Lecomte et Zennir [LECO97].

Dans la quatrième source, Kechkar et Cherait [KECH09] utilisent des granulats concassés de la région de Bendjerah (Wilaya de Guelma) située dans l'Est de l'Algérie :

- un sable de carrière 0 / 5 ;
- des graviers de carrière 3 / 8 , 5 / 15 , 15 / 25 .

Sept classes élémentaires ont été extraites. Elles ont permis l'étude des interactions granulaires pour 9 rapports de tailles différents : 0,135 ; 0,213 ; 0,322 ; 0,38 ; 0,47 ; 0,559 ; 0,595 ; 0,64 ; 0,74 .

Nom	d_{\min}	d_{\max}	d_{moy}	Compacité α
C03 _{KC}	0,3	0,425	0,36	0,55
C05 _{KC}	0,425	0,6	0,51	0,55
C08 _{KC}	0,6	1,18	0,89	0,56
C1.5 _{KC}	1,18	2	1,59	0,57
C2.6 _{KC}	2	3,35	2,67	0,60
C4.1 _{KC}	3,35	5	4,17	0,57
C5.6 _{KC}	5	6,63	5,65	0,53

Tableau V-4 : caractéristiques des classes granulaires élémentaires. Granulats concassés de Wilaya de Guelma (Algérie) [KECH09].

5.1.2. Protocole opératoire.

Dans la première source, Ben Aïm [BENA70] décrit seulement deux modes opératoires relatifs à deux des quatre études auxquelles nous allons faire référence. Naar *et al.*, tout d'abord, effectuent un mélange grossier à la main, contenu dans un réservoir. Entre ce dernier et la colonne de mesure de la porosité, est ensuite intercalée une « chambre de mélangeage » constituée par une série de 5 tamis espacés de 5 cm environ dont la maille dépend de la taille des particules. Ben Aïm utilise un dispositif s'apparentant à ce dernier. Sa « chambre de mélangeage » est formée par un « quinconce à 3 dimensions » de grosses billes, ce « tamis » étant surmonté de deux alimentateurs vibrants assurant un débit régulier de chacune des fractions constituant le mélange. En revanche, il ne fournit aucune indication concernant les techniques utilisées par Mc Geary et par Yerazunis *et al.*.

Dans la deuxième source, Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94] font appel à des résultats obtenus par Muriel Cintré, stagiaire CNRS, qui a mis au point la technique de réalisation des mélanges et de mesure de compacité.

Pour les rapports de tailles $\frac{1}{2}$ et $\frac{1}{4}$, le risque de ségrégation était limité si bien qu'un appareil fonctionnant suivant le même principe qu'une bétonnière a été sélectionné : il s'agit d'une machine Deval. Celle-ci était équipée d'un premier cylindre (diamètre 160 mm ; longueur 320 mm) associé avec un second (diamètre et longueur 160 mm). C'est dans ce dernier que sont effectuées, après démontage, les mesures de compacité du mélange binaire, lequel aurait inévitablement subi une déstructuration si un changement de conteneur avait été opéré.

Les deux paramètres de fonctionnement du mélangeur à axe oblique ainsi constitué ont été fixés pour assurer la meilleure homogénéité possible :

- la vitesse de rotation, qui doit être grande pour favoriser le mouvement de recirculation de l'ensemble des grains, sans toutefois provoquer d'effets inertiels correspondant à la vitesse de centrifugation, a été établie à **33 tours / minute**.
- La durée de malaxage, ne devant être ni trop courte car le mélange serait hétérogène, ni trop longue car un phénomène d'attrition pourrait se produire, a été prise égale à **2 minutes**.

Pour les mélanges binaires de rapport de taille $\frac{1}{8}$ et $\frac{1}{16}$, qui présentent un risque de ségrégation par filtration, le processus opératoire peut être décomposé en trois phases principales. La première consiste à effectuer un brassage manuel. Les deux suivantes pourraient constituer, d'après notre compréhension de l'article [SEDR94], ce que l'on appelle une « transformation du boulanger ». Le mélange est « étiré » horizontalement dans un bac plat en couches horizontales (2^{ème} phase) puis repris grâce à un découpage en tranches verticales que l'on superpose ensuite dans le cylindre d'essai pour le remplir (3^{ème} phase).

Les manipulations ont ensuite consisté à mesurer les compacités des classes monomodulaires et des mélanges binaires. Pour obtenir le meilleur serrage possible, Muriel Cintré a choisi de combiner simultanément deux techniques jusqu'à une relative stabilisation, dans le cylindre d'essai, de la hauteur du granulat mesurée continûment avec un télémètre à ultrasons d'une précision de 0,001 mm.

La première consiste à appliquer une masse de 20 kg, correspondant à une pression de 10 kPa, sur la partie supérieure de l'échantillon par l'intermédiaire d'un piston guidé verticalement qui ferme le cylindre d'essai.

La seconde réside en l'utilisation de la vibration au moyen d'une machine à tamiser de laboratoire sur laquelle est fixé le matériel d'expérimentation précédemment constitué. Elle s'effectue en trois paliers sélectionnés avec des durées définies expérimentalement et des amplitudes qui diminuent : 2 minutes à 0,4 mm, 40 secondes à 0,2 mm et 1 minute à 0,08 mm.

Selon nous, l'intérêt de cette décroissance est le suivant. Pour l'expliquer, effectuons notre raisonnement à partir d'une vibration sinusoïdale définie à partir de deux paramètres seulement, par exemple la fréquence et l'amplitude. Ceux-ci évoluant en sens contraire pour une puissance donnée, il convient de les adapter judicieusement en fonction des caractéristiques dimensionnelles du milieu granulaire.

Initialement, il faut veiller à ce que l'amplitude soit supérieure à une certaine valeur critique de façon à assurer un déplacement mutuel des grains suffisant pour les réagencer. Il faut y parvenir d'autant plus que l'expansion est bridée par la présence du piston au sommet de l'échantillon. Parallèlement, la fréquence du vibreur est ajustée sur celle plutôt basse des particules grossières.

Puis, au fur et mesure qu'un tassement partiel se produit, elle est augmentée avec, pour corollaire, la baisse de l'amplitude, présentant ainsi un double intérêt. D'une part, elle permet d'intéresser des grains de dimensions faibles qui tiennent alors le rôle de billes dont le roulement favorise un serrage de l'ensemble du milieu granulaire. D'autre part, elle autorise un grand nombre d'ajustements dans une période de temps donnée car le mouvement des éléments devient de plus en plus restreint du fait de la réduction de l'amplitude.

Celle-ci est alors compatible avec la distance séparant les grains et le serrage s'effectue efficacement.

Il est à noter que le processus de vibration a été conservé pour toutes les classes granulaires afin d'obtenir des réponses comparables dans le temps limité du cycle total [DELA00]. Toujours selon de Larrard, aucune stabilisation nette de la hauteur de l'échantillon n'a été obtenue à l'issue de chaque expérience. Cela montre bien que la compacité dépend non seulement de la nature de l'empilement mais aussi des conditions de serrage.

Ce résultat a d'ailleurs été confirmé expérimentalement par Knight, Fandrich, Lau, Jaeger et Nagel [KNIG95] qui ont étudié la vibro-compaction d'empilements granulaires secs à l'aide d'un vibreur produisant des chocs (les « taps »). Ils ont abouti à une cinétique de densification de forme logarithmique en fonction du nombre de cycles de sollicitation appliqué. Théoriquement, Boutreux et de Gennes [BOUT97] sont parvenus à la même conclusion avec leur modèle de volume libre qui s'appuie sur l'occupation progressive de sites interstitiels dont les tailles se répartissent selon une loi de Poisson.

Revenons maintenant à la méthode mise au point par Muriel Cintré. Par définition, une compacité est obtenue en divisant le volume absolu des grains par le volume total qu'ils occupent. Le premier est déterminé par le quotient de la masse de l'échantillon et de sa masse volumique absolue (calculée comme combinaison linéaire des masses volumiques élémentaires). Le second est le résultat du produit de la section du cylindre d'essai par la hauteur de matériau lorsque celle-ci s'est stabilisée. Chaque compacité retenue est en fait la moyenne de deux mesures effectuées successivement. Entre les deux, le matériel est nettoyé, conditionné de nouveau et le mélange préparé avec la même méticulosité que la première fois.

Dans la troisième source, Lecomte et Zennir [LECO97] font appel à deux types de conteneur selon la taille du granulat soumis aux essais :

- si celle-ci est inférieure à 4 mm de grosseur : une éprouvette cylindrique graduée de 2 litres en verre ;
- si elle est supérieure à 4 mm de grosseur : un moule métallique 16 x 32 cm.

L'homogénéisation de chaque mélange s'effectue par brassage manuel avant introduction dans le conteneur approprié. Le procédé utilisé pour cette opération ne fait l'objet d'aucune description particulière. L'échantillon étant surmonté d'un piston sur lequel s'exerce une pression manuelle, le récipient est ensuite soumis à une vibration sur une machine à tamiser de laboratoire jusqu'à ce que la hauteur de matériau se stabilise : la fréquence évolue entre 10 et 60 Hz et la durée de vibration se situe entre une et trois minutes.

Pour les classes mono-modulaires, le serrage maximum est atteint :

- pour les grains fins : à des fréquences élevées, ce qui est conforme aux prévisions, et après un temps de vibration assez long. Selon nous, la multiplicité des contacts entre particules développe des frictions. Une durée prolongée doit permettre aux grains de tourner, de se déplacer, de se réarranger en une configuration plus dense.
- pour les gros grains : à des fréquences plutôt basses, ce qui est attendu, et après un temps plutôt court. Toujours selon nous, la réduction du nombre de contacts permettrait un agencement plus rapide.

Pour les mélanges binaires et d'après les auteurs de l'article, il n'existe aucune corrélation franche entre les caractéristiques de la vibration et la grosseur ou les proportions des constituants. L'explication résiderait dans la nature tendre des calcaires lorrains qui les rendrait particulièrement friables et qui provoquerait un certain polissage de leur surface, influençant ainsi leur mise en place.

Dans la quatrième source, Kechkar et Cherait [KECH09] utilisent le mode opératoire suivant :

- remplissage d'un moule cylindrique de diamètre 20 cm et longueur 15 cm en trois couches égales ;
- pour chaque couche, compactage de l'échantillon sur une tamiseuse électrique avec 10 chocs successifs ;
- arasage du moule avec une tige rigide ;
- pesage du moule pour déterminer la masse de granulat qu'il contient.

Aucune autre information n'est communiquée ce qui ne permet pas de savoir précisément si la hauteur des échantillons était réellement stabilisée après les 10 chocs provoqués par la tamiseuse électrique.

5.1.3. Compacité des classes mono-modulaires.

Dans la première source, Ben Aïm [BENA70] indique les compacités suivantes des classes mono-modulaires constituées de sphères.

Auteurs	Compacité α
Mc Geary	$\approx 0,625$
Naar, Wygal, Henderson	0,638
Yerazunis, Cornell, Wintner	0,639
Ben Aïm	$\approx 0,648$

Tableau V-5 : compacités des classes mono-modulaires de grains sphériques utilisés par différents auteurs. Elles sont citées dans la thèse de Ben Aïm [BENA70].

Dans la deuxième source, Sedran, de Larrard et Angot [SEDR94] obtiennent les résultats communiqués dans les tableaux V-1 et V-2.

On peut constater, qu'à taille égale, les granulats roulés sont plus compacts que les concassés. Les conditions d'empilement sont donc liées aux propriétés morphologiques et d'état de surface des granulats.

Commençons par ceux issus de la Loire, carrière Decize. L'observation détaillée de leur aspect sur les photos exposées dans [SEDR94] montre que les grains ont une forme arrondie mais présentent néanmoins quelques surfaces planes. Les valeurs de compacité propre obtenues (entre 0,59 et 0,63) se situent pratiquement dans l'intervalle fourni pour les sphères de la première source sans atteindre toutefois 0,64 qui en constitue la limite haute.

Les granulats concassés de la carrière de Pont de Colonne, quant à eux, comportent des arêtes vives qui résultent de leur broyage. Le frottement qui se manifeste à chacun de leur point de contact est probablement relativement intense en raison de la désorganisation de leur surface. A l'échelle macroscopique, cela se traduit par un seuil de cisaillement plus important que dans le cas de particules arrondies plus ou moins polies. La vibration appliquée ne permet donc probablement pas de rompre efficacement l'ensemble des liaisons inter-granulaires. Elle affecte, par conséquent, la structure du matériau sans pour autant libérer complètement chaque grain de l'influence des autres, les forces subsistant entre eux les empêchant de se placer dans une configuration plus dense (compacités propres comprises entre 0,50 et 0,58).

Concernant l'influence de la dimension des granulats, on constate que les classes mono-modulaires possédant le diamètre le plus élevé présentent les compacités les plus fortes. La contrainte de cisaillement, que la vibration doit réduire au maximum, est fonction à la fois de la possibilité de contacts inter-granulaires par unité de volume et de l'intensité des forces de frottement propres à chacun de ceux-ci. Plus le diamètre des grains augmente, plus leur quantité par unité de volume diminue, donc plus le nombre de contacts entre eux est faible. En revanche, l'intensité des forces nécessaires au désenchevêtrement est plus élevée. Les deux paramètres variant en sens inverse, le premier est manifestement prépondérant pour ce type de granulats et pour la gamme de dimensions de grains étudiée (entre 0,5 et 8 mm).

Dans la troisième source, Lecomte et Zennir [LECO97] obtiennent des compacités propres légèrement plus élevées et plus resserrées pour leur calcaire concassé du Bajocien lorrain (tableau V-3 : de 0,54 à 0,57) que celles correspondant aux concassés de la source précédente. Les auteurs l'attribuent à la forme trapue des grains calcaires. Mais il est possible que leur caractère friable et l'évolution de leur état de surface aient également pu jouer un rôle non négligeable.

Dans la quatrième source enfin, Kechkar et Cheraït [KECH09] font état de compacités propres évoluant de façon assez modeste en fonction des diamètres pour les concassés issus de la carrière de Wilaya de Guelma en Algérie (tableau V-4 : de 0,53 à 0,60).

Il est assez difficile de synthétiser les résultats obtenus à partir de ces quatre sources, notamment car nous n'avons pas manipulé ces granulats et observé les détails les caractérisant. Lecomte et Mechling [LECO99] ont montré, dans un article très intéressant, qu'il est parfois possible de remonter aux origines génétiques du matériau granulaire pour trouver des explications concernant certaines spécificités constatées sur des mesures de compacités propres.

5.1.4. Obtention de points expérimentaux pour les coefficients d'interaction.

La méthode est basée sur des mesures de l'indice des vides de mélanges binaires obtenus en faisant varier le titre volumique des petits grains γ_2 .

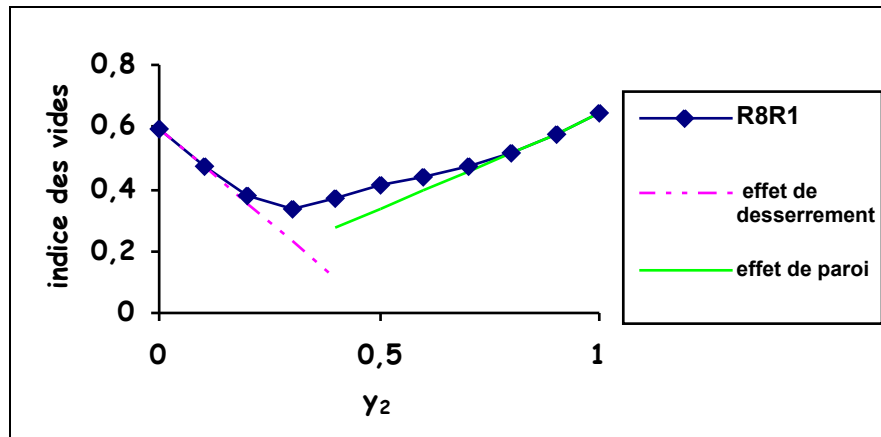


Figure V-1 : indice des vides en fonction de la proportion de grains fins (mélange R8R1 provenant de l'étude de Sedran, de Larrard, Angot [SEDR94]).

Deux parties quasi-rectilignes raccordées par une courbe apparaissent (se reporter au paragraphe 1.1.).

La première, située du côté où les grosses particules sont présentes en très grande quantité, ne s'accorde pas complètement aux faits. Le desserrement, qui apparaît lorsque les éléments fins ont une taille qui ne leur permet plus de s'infiltrer dans les interstices disponibles à l'intérieur de la classe dominante, présente un effet dont la linéarité est sujette à caution au fur et à mesure que le volume de la classe étrangère augmente. Dans ce domaine d'étude et jusqu'à une proportion seuil de γ_2 , les petits grains sont de moins en moins dispersés dans le mélange ce qui rend l'hypothèse de disjonction des zones subissant cette forme d'interaction de plus en plus difficile à justifier. Il est alors envisageable que l'édifice granulaire soit caractérisé par une porosité comportant une composante non additive. La simplification est néanmoins tolérée et constitue une approche déjà adoptée par Powers. La pente de cette droite exprime alors directement l'effet de desserrement. Elle permet de le quantifier. Il est désigné par α_{12} .

La seconde, obtenue du côté où le mélange est riche en éléments fins, fait l'objet d'un consensus beaucoup plus large. Elle est validée dans la mesure où les grosses particules, dont la paroi oblige les petits grains à se ranger contre elle provoquant un surcroît de vides dans cette zone, peuvent être distribuées de différentes façons pourvu que l'aire totale de l'interface reste identique. Dans ces conditions, l'effet de paroi résultant de la présence d'un gros élément n'interfère pas avec ses congénères : il satisfait au principe de superposition justifiant par conséquent la linéarité. La pente de la droite correspondante permet de le quantifier. Il est désigné par le coefficient b_{21} .

Pour calculer a_{12} et b_{21} , il est également nécessaire de connaître les compacités propres de chaque classe. Dans cette optique, reprenons les équations de la compacité dans le cas des gros dominants puis dans le cas des petits dominants :

$$\text{I-65} \quad \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} a_{12}\right) \gamma_2}$$

$$\text{I-66} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left[1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right] \gamma_1}$$

L'indice des vides correspondant s'écrit :

$$e_1 = \frac{1}{\beta_1} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} a_{12} \right] \gamma_2 \right\} - 1$$

$$e_2 = \frac{1}{\beta_2} \left\{ 1 - \left[1 - \beta_2 + b_{21} \beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right] (1 - \gamma_2) \right\} - 1$$

Conformément aux explications fournies, les coefficients a_{12} et b_{21} vont être déterminés grâce à la mesure des pentes « à chaque extrémité » de la courbe figurant l'évolution de e en fonction de γ_2 , suivant la méthode initiée par de Larrard dans sa thèse [DELA88] :

$$\text{V-1} \quad a_{12} = \beta_2 \left(\left. \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=0} + \frac{1}{\beta_1} \right), \quad \left. \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=0} \text{ étant négative.}$$

V-2

$$b_{21} = \frac{\frac{1}{\beta_2} - 1 - \left| \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=1}}{\frac{1}{\beta_1} - 1 - \left| \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=1}}, \quad \left| \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=1} \text{ étant positive.}$$

Chaque mélange binaire de classes pures caractérisées par leur grosseur d_2 et d_1 aboutissant à un tracé différent dans le repère (e, γ_2) , on obtient pour chacun d'entre eux un point expérimental de la fonction décrivant l'interaction de type « effet de paroi » et un point expérimental de la fonction décrivant l'interaction de type « effet de desserrement » en fonction du rapport $\frac{d_2}{d_1}$.

Seulement, les compacités propres prises en compte dans cette équation sont virtuelles, c'est-à-dire accessibles à l'expérience uniquement si les grains étaient déposés un par un à leur emplacement idéal à la manière d'oranges disposées sur un étal pour occuper le moins de place possible par un épicier habile possédant un minimum d'intuition spatiale. Puisqu'il est utopique de vouloir procéder ainsi, la technique définie par Cintré dans la deuxième source [SEDR94] et par Lecomte et Zennir dans la troisième source [LEC097] consiste à optimiser le serrage en combinant vibration et mise sous pression de l'échantillon. Ce faisant, la compacité réelle se rapproche de la compacité virtuelle et les courbes d'indices des vides obtenues à partir de ce protocole opératoire deviennent colinéaires, « en leurs extrémités », à celles qui résulteraient d'un niveau de compaction infini. Dans ce cas, l'équation ci-dessus est applicable en remplaçant β_i par α_i .

Les hypothèses sur lesquelles est basée la procédure de détermination des interactions granulaires peuvent susciter des discussions notamment celle concernant le parallélisme des tangentes pour les courbes des compacités réelle et virtuelle lorsque l'indice de serrage est suffisamment élevé.

La simplification proposée devrait conduire à de légères sous-estimations des valeurs

absolues de $\left| \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=1}$ et $\left| \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=0}$ et surévaluations de b_{21} et a_{12} . Néanmoins, il semble

que les méthodes mises au point dans les deuxième et troisième source permettent de se placer dans des conditions telles que l'approximation de de Larrard soit valide grâce aux moyens de compaction mis en œuvre. La méthodologie utilisée par Kechkar et Cheraït [KECH09] dans la quatrième source soulève cependant quelques interrogations en raison du mode de vibration utilisé et de l'absence de serrage supplémentaire à l'aide d'un piston.

5.1.5. Données issues de la littérature.

La validation du modèle consiste à le confronter à des résultats expérimentaux. Comme il a déjà été précisé, nous avons retenu de la littérature les résultats présentés dans la thèse de Ben Aim [BENA70] et dans les articles de Sedran, de Larrard, Angot [SEDR94], de Lecomte et Zennir [LECO97] et de Kechkar et Cheraït [KECH09].

5.1.5.1. Billes de verre [BENA70] (1970).

Les données extraites de la première source [BENA70] concernent 21 points expérimentaux obtenus pour le facteur d'encombrement lié à l'effet de paroi λ_{21} et 14 pour le facteur d'encombrement lié à l'effet de desserrement λ_{12} utilisés dans le modèle d'empilement contenu dans le modèle de viscosité de Mooney. Les résultats retenus sont ceux pour lesquels $\alpha_1 = \alpha_2$ qui correspond à une des hypothèses de constitution de notre modèle. Les mesures ont été effectuées sur des sphères dont la compacité propre varie entre 0,625 et 0,648. Pour passer des facteurs λ_{12} et λ_{21} aux coefficients d'interaction **a** et **b** figurant dans le modèle d'empilement compressible (MEC), nous avons fait appel aux expressions I-63 et I-67 :

I-63

$$a_{12MEC} = \alpha_2 \lambda_{12Mooney}$$

I-67

$$b_{21MEC} = \frac{\lambda_{21Mooney} - 1}{\frac{1}{\alpha_1} - 1}$$

Auteurs	$x = \frac{d_2}{d_1}$	$\alpha_1 = \alpha_2$	λ_{21}	λ_{12}	b_{21}	a_{12}
Mc Geary	0,014	0,625	1	0,01	0	0,006
	0,06		1,04	0,01	0,067	0,006
	0,089		1,075	?	0,125	?
	0,153		1,13	0,05	0,217	0,031
	0,209		1,20	0,25	0,333	0,156
	0,29		1,26	0,7	0,433	0,437
Naar <i>et al.</i>	0,062	0,638	1,06	?	0,106	?
	0,085		1,09	?	0,159	?
	0,209		1,21	0,15	0,370	0,096
	0,353		1,32	0,8	0,564	0,510
	0,419		1,38	0,95	0,670	0,606
	0,595		1,49	1,25	0,864	0,797
	0,710		1,53	1,43	0,934	0,912

Auteurs	$x = \frac{d_2}{d_1}$	$\alpha_1 = \alpha_2$	λ_{21}	λ_{12}	b_{21}	a_{12}
Yerazunis <i>et al.</i>	0,083	0,639	1,08	?	0,142	?
	0,174		1,15	?	0,266	?
	0,293		1,23	?	0,407	?
	0,388		1,33	?	0,584	?
Ben Aim	0,115	$\approx 0,648$	1,12	0	0,220	0
	0,213		1,205	0,06	0,377	0,039
	0,326		1,30	0,7	0,552	0,453
	0,536		1,47	1,15	0,865	0,745

Tableau V-6 : Valeurs du coefficient d'effet de paroi b_{21} et du coefficient d'effet de desserrement a_{12} mesurées sur des sphères. Données extraites de Ben Aim [BENA70].

Intéressons-nous dans un premier temps au coefficient d'effet de paroi.

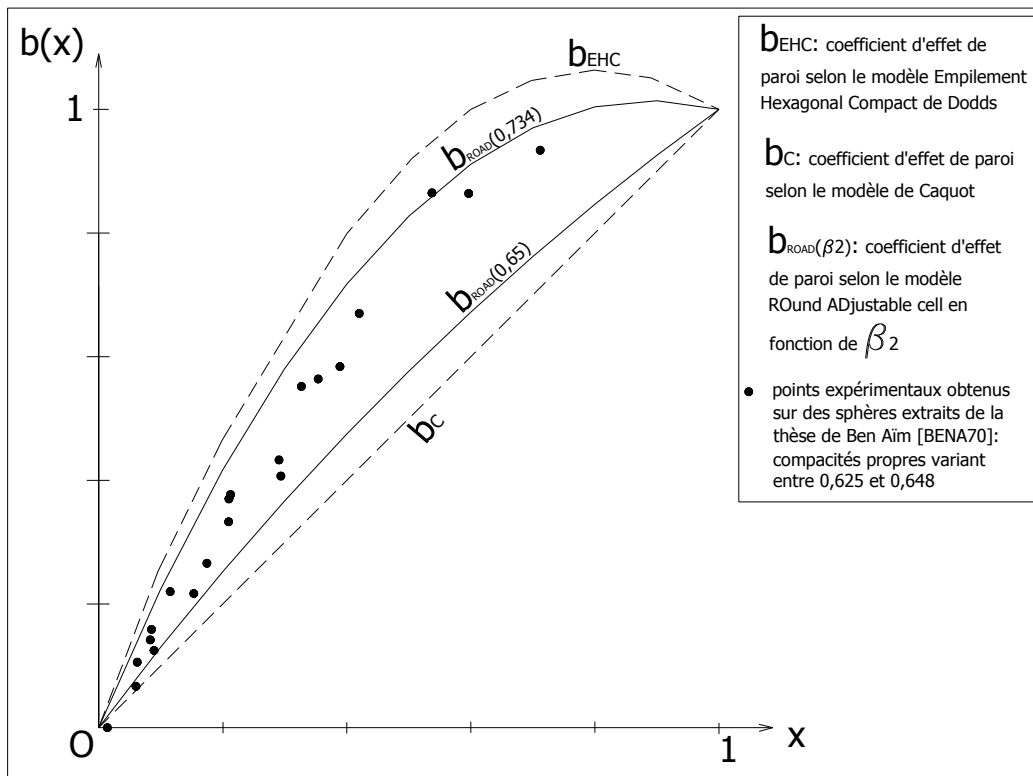


Figure V-2 : points expérimentaux du coefficient d'effet de paroi obtenus sur des billes de verre possédant des compacités propres comprises entre 0,625 et 0,648, données extraites de la thèse de Ben Aim [BENA70].

On remarque que le fuseau du coefficient d'effet de paroi, constitué à partie de la théorie Round ADjustable cell (théorie ROAD), encadre une grande partie des points expérimentaux obtenus sur des billes de verre, extraits de la thèse de Ben Aim.

Il ne faut pas chercher, ici, à comparer les compacités propres des billes ayant servi à l'expérimentation (entre 0,625 et 0,648) avec les compacités propres correspondant à la limite inférieure (0,65) et à la limite supérieure (0,734) de notre fuseau car les premières constituent des compacités RÉELLES alors que les secondes sont des compacités VIRTUELLES, par définition inaccessibles à l'expérience. A procédé de remplissage équivalent (indice de serrage constant dans la théorie du MEC), seules doivent compter leurs positions relatives : sphères possédant une compacité propre réelle « élevée » dans la partie haute du fuseau, sphères possédant une compacité propre réelle « faible » dans la partie basse du fuseau. C'est précisément la vérification qui va être conduite à présent. Nous allons distinguer les coefficients d'effet de paroi en fonction de la compacité propre des petites sphères en pleine masse : $\alpha_2 = 0,625$ pour les données de Mc Geary, $\alpha_2 = 0,639$ pour Naar *et al.* d'une part et pour Yerazunis *et al.* d'autre part (les premiers considérant en réalité, et pour être exact, une valeur de 0,638) et $\alpha_2 \approx 0,648$ pour Ben Aïm.

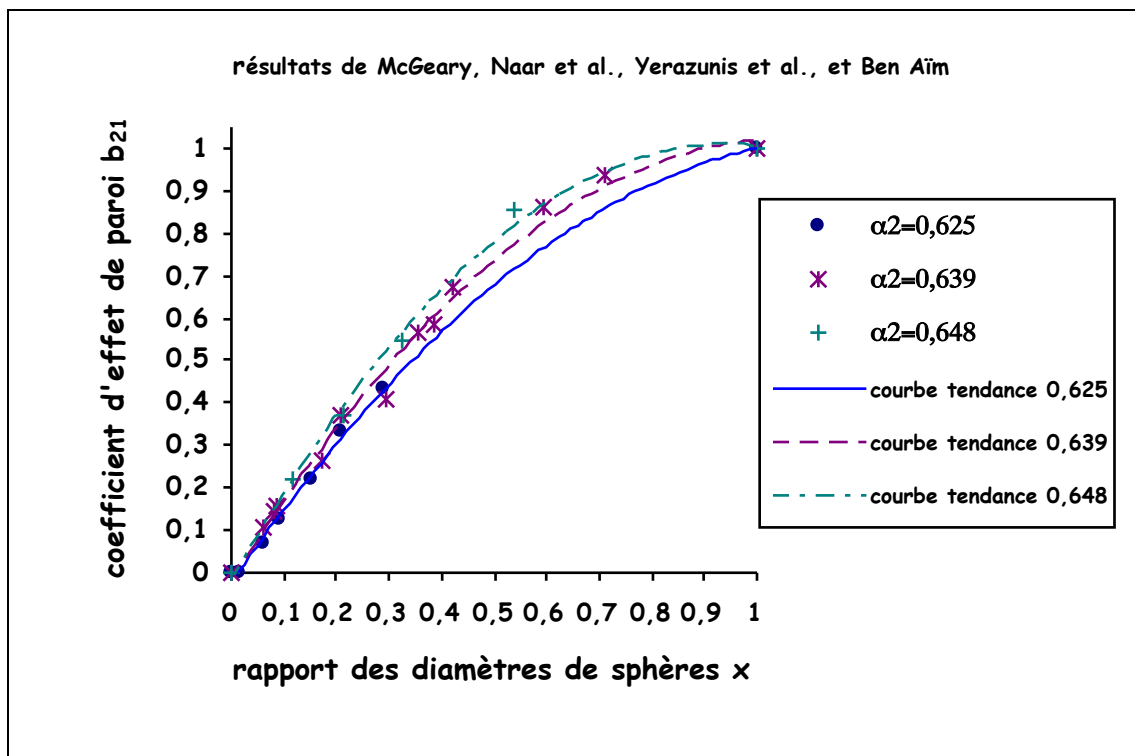


Figure V-3 : Coefficients d'effet de paroi b_{21} pour différentes compacités propres de la classe fine α_2 : 0,625 ; 0,639 et 0,648 avec courbes de tendance (polynômes degré 2) fournies par Excel. Mesures effectuées sur des billes de verre. Données extraites de la thèse de Ben Aïm [BENA70].

D'après les expériences menées sur des billes de verre par Mc Geary, Naar *et al.*, Yerazunis *et al.* et Ben Aïm, on peut noter que, à rapport de taille constant et à procédé de remplissage équivalent, la tendance est à l'augmentation du coefficient d'effet de paroi au fur et à mesure que la compacité des petits grains en pleine masse croît, conformément aux prévisions de la théorie ROAD.

Intéressons-nous dans un deuxième temps au coefficient d'effet de desserrement.

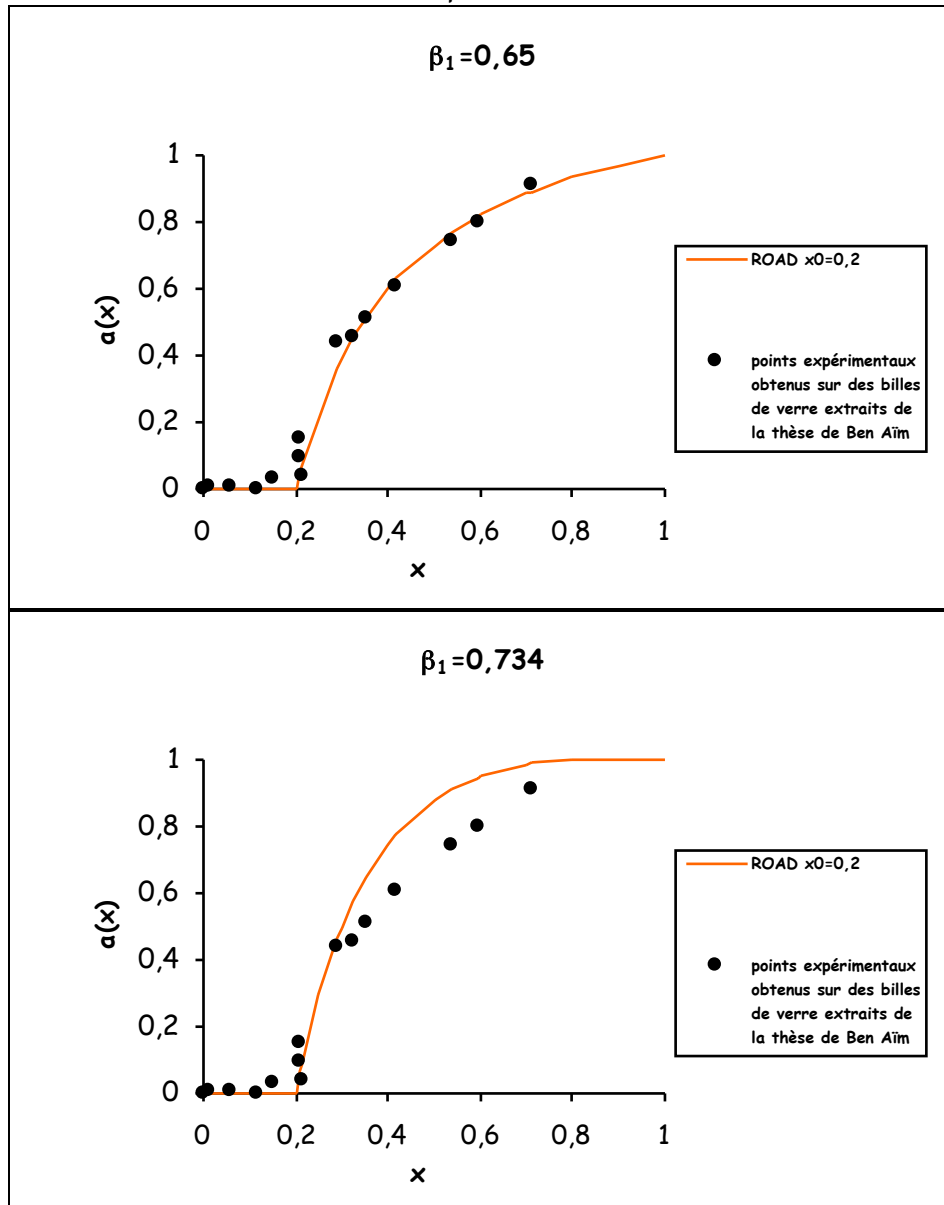


Figure V-4 : points expérimentaux du coefficient d'effet de desserrement obtenus sur des billes de verre possédant des compacités propres réelles comprises entre 0,625 et 0,648, données extraites de la thèse de Ben Aïm [BENA70]. Comparaison avec les prévisions de la théorie ROAD pour une taille de caverne $x_0 = 0,2$ et pour les compacités propres virtuelles extrêmes $\beta_1 = 0,65$ et $\beta_1 = 0,734$.

Les courbes théoriques correspondant à une taille de cavité $x_0 = 0,2$ ont été représentés sur la figure précédente, l'une pour une compacité propre virtuelle des grosses particules en pleine masse faible ($\beta_1 = 0,65$), l'autre pour une compacité propre virtuelle élevée ($\beta_1 = 0,734$).

Les points expérimentaux du coefficient d'effet de desserrement extraits de la thèse de Ben Aïm et obtenus sur des billes de verre sont relativement bien répartis autour de la courbe $x_0 = 0,2$, très proche de $x_0 = 0,224$, qui représente la taille de cavité théorique permettant l'insertion d'une petite sphère dans l'espace laissé libre entre 4 grosses en contact sans les desserrer.

5.1.5.2. Granulat roulé de la Loire et granulat concassé de Arnay-le-Duc [SEDR94] (1994).

Les résultats de la deuxième source [SEDR94] sont relativement complets en raison du double objectif que se sont assignés les auteurs. D'une part, il s'agissait pour eux de savoir si les coefficients d'interaction granulaires dépendaient des tailles de grains ou uniquement de leur contraste. C'est pourquoi chaque rapport (excepté $\frac{1}{16}$) a fait l'objet de séries de mélanges binaires aux deux extrêmes du spectre des dimensions, respectivement avec des grosses puis des fines particules (exemple : pour $x = \frac{d_2}{d_1} = 0,25$, le premier test concernait les tranches granulaires caractérisées par les dimensions $d_2 = 2 \text{ mm}$ et $d_1 = 8 \text{ mm}$; le second utilisait les classes de grosseur $d_2 = 0,5 \text{ mm}$ et $d_1 = 2 \text{ mm}$). D'autre part, il s'avérait nécessaire d'affiner suffisamment les mesures de compacité particulièrement du côté des gros dominants où une variation plus rapide était attendue en vue d'obtenir des résultats à la fois précis et fiables. En conséquence, le titre volumique des petits éléments a subi des accroissements de 5% entre 0 et 30% puis de 10% ensuite.

Au total, pour chacun des deux types de grains (roulés arrondis et concassés), on dispose de 98 valeurs expérimentales (fournies dans les tableaux V-7 et V-8) permettant, dans un premier temps, de suivre l'évolution de la compacité et de l'indice des vides en fonction de la proportion des particules fines pour 7 mélanges binaires (3 seulement sont représentés sur les figures V-5 à V-8) et, dans un deuxième temps, d'en déduire 7 coefficients d'effet de paroi b_{21} et 7 coefficients d'effet de desserrement a_{12} (tableau V-9).

Quatre contrastes de tailles sont concernés couvrant un domaine $x = \frac{d_2}{d_1}$ s'échelonnant entre 0,0625 et 0,5. Même si la fourchette comprise entre 0,5 et 1 n'est pas couverte, cette banque de données est très intéressante pour un travail de validation.

%fins	R8R05 _{SLA}	R8R1 _{SLA}	R4R05 _{SLA}	R8R2 _{SLA}	R2R05 _{SLA}	R8R4 _{SLA}	R1R05 _{SLA}
0	0,628	0,628	0,6195	0,628	0,616	0,628	0,609
5	0,657	0,6545	0,645	0,653	0,635	0,6375	0,624
10	0,6865	0,6795	0,6715	0,682	0,663	0,643	0,633
15	0,710	0,707	0,689	0,697	0,678	0,654	0,640
20	0,729	0,724	0,706	0,714	0,692	0,660	0,656
25	0,754	0,742	0,7265	0,7235	0,708	0,663	0,666
30	0,758	0,748	0,7485	0,728	0,718	0,6595	0,6705
40	0,753	0,7285	0,736	0,723	0,708	0,6565	0,6635
50	0,7385	0,7095	0,725	0,705	0,693	0,6535	0,6545
60	0,7165	0,6965	0,700	0,689	0,670	0,649	0,644
70	0,680	0,677	0,6745	0,671	0,656	0,6445	0,636
80	0,652	0,6585	0,648	0,646	0,633	0,638	0,6215
90	0,6195	0,635	0,614	0,632	0,613	0,629	0,610
100	0,592	0,609	0,592	0,616	0,592	0,6195	0,592

Tableau V-7 : Compacités expérimentales des mélanges binaires. Grains roulés de la Loire de la carrière Decize. Données issues de [SEDR94].

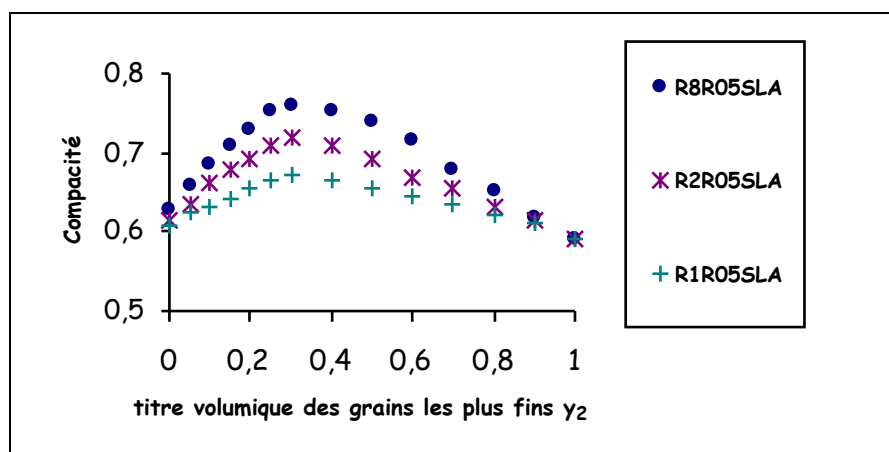


Figure V-5 : Compacité pour des mélanges binaires de grains roulés de la Loire de la carrière Decize en fonction de la proportion d'éléments fins. Données issues de [SEDR94].

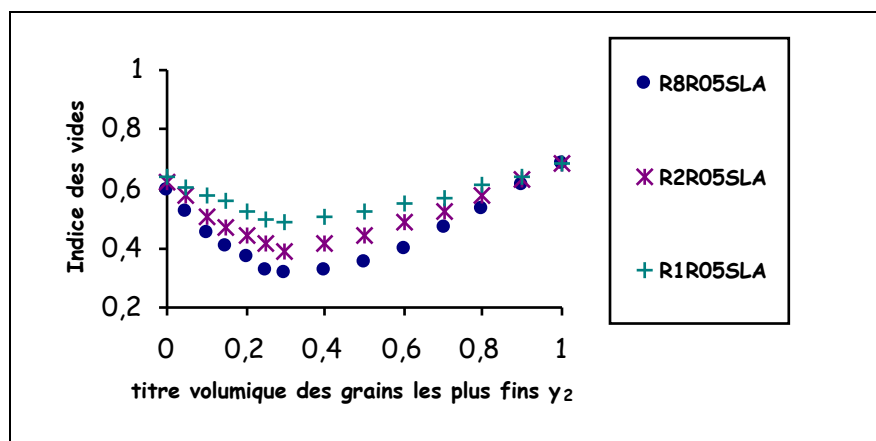


Figure V-6 : Indice des vides correspondant à la compacité précédente pour des mélanges binaires de grains roulés de la Loire de la carrière Decize en fonction de la proportion d'éléments fins. Données issues de [SEDR94].

%fins	C8C05 _{SLA}	C8C1 _{SLA}	C4C05 _{SLA}	C8C2 _{SLA}	C2C05 _{SLA}	C8C4 _{SLA}	C1C05 _{SLA}
0	0,572	0,572	0,537	0,572	0,529	0,572	0,507
5	0,620	0,613	0,591	0,597	0,540	0,5825	0,527
10	0,642	0,646	0,6185	0,611	0,552	0,5875	0,532
15	0,676	0,6755	0,638	0,625	0,5515	0,588	0,545
20	0,705	0,699	0,669	0,634	0,566	0,592	0,552
25	0,731	0,7215	0,693	0,643	0,573	0,5955	0,5485
30	0,7365	0,7245	0,711	0,651	0,594	0,594	0,555
40	0,723	0,7025	0,691	0,643	0,588	0,5875	0,556
50	0,6941	0,6705	0,667	0,6335	0,582	0,587	0,549
60	0,6585	0,638	0,640	0,6245	0,579	0,587	0,546
70	0,616	0,611	0,603	0,5975	0,568	0,572	0,5425
80	0,583	0,5965	0,571	0,5695	0,5555	0,564	0,537
90	0,5655	0,5435	0,545	0,5435	0,534	0,553	0,530
100	0,516	0,507	0,516	0,529	0,516	0,537	0,516

Tableau V-8 : Compacités expérimentales des mélanges binaires. Grains concassés de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc. Données issues de [SEDR94].

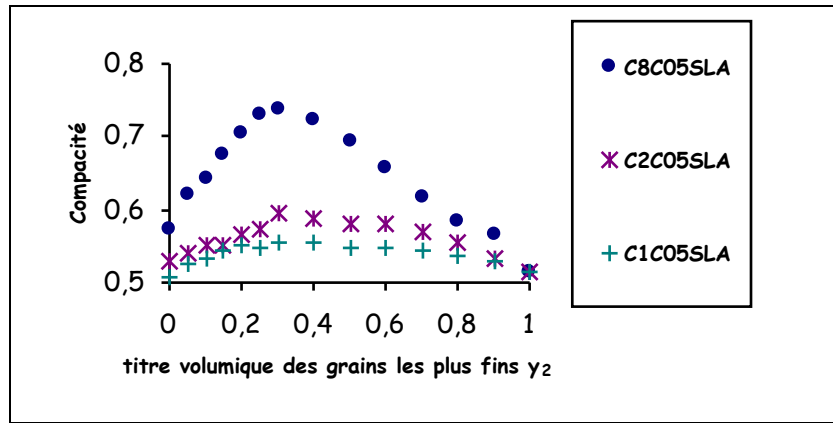


Figure V-7 : Compacité pour des mélanges binaires de grains concassés de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc en fonction de la proportion d'éléments fins. Données issues de [SEDR94].

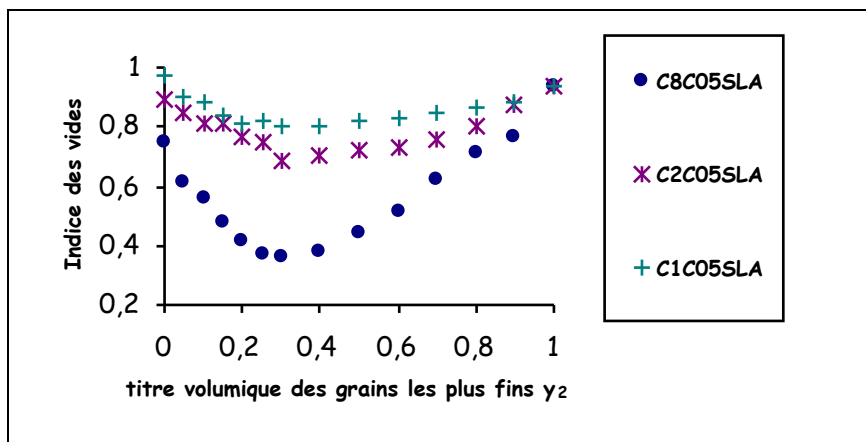


Figure V-8 : Indice des vides correspondant à la compacité précédente pour des mélanges binaires de grains concassés de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc en fonction de la proportion d'éléments fins. Données issues de [SEDR94].

$x = \frac{d_2}{d_1}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
ROULÉS	R8R05_{SLA}	R8R1_{SLA}	R4R05_{SLA}	R8R2_{SLA}	R2R05_{SLA}	R8R4_{SLA}	R1R05_{SLA}
Compacité de la classe la plus fine α_2	0,592	0,609	0,592	0,616	0,592	0,6195	0,592
b_{21}	-0,05	0,30	0,08	0,33	0,33	0,65	0,56
Compacité de la classe la plus grosse α_1	0,628	0,628	0,6195	0,628	0,616	0,628	0,609
a_{12}	0,26	0,31	0,50	0,63	0,46	0,71	0,66
CONCASSÉS	C8C05_{SLA}	C8C1_{SLA}	C4C05_{SLA}	C8C2_{SLA}	C2C05_{SLA}	C8C4_{SLA}	C1C05_{SLA}
α_2	0,516	0,507	0,516	0,529	0,516	0,537	0,516
b_{21}	-0,03	0,28	0,05	0,11	0,47	0,68	0,70
α_1	0,572	0,572	0,537	0,572	0,529	0,572	0,507
a_{12}	0,21	0,14	0,31	0,50	0,67	0,77	0,72

Tableau V-9 : coefficients d'effet de paroi b_{21} et coefficients d'effet de desserrement a_{12} déduits des mélanges binaires expérimentaux. Données issues de [SEDR94].

Intéressons-nous dans un premier temps au coefficient d'effet de paroi.

Les points expérimentaux correspondant à b_{21} sont reportés sur la figure suivante en fonction du rapport des tailles.

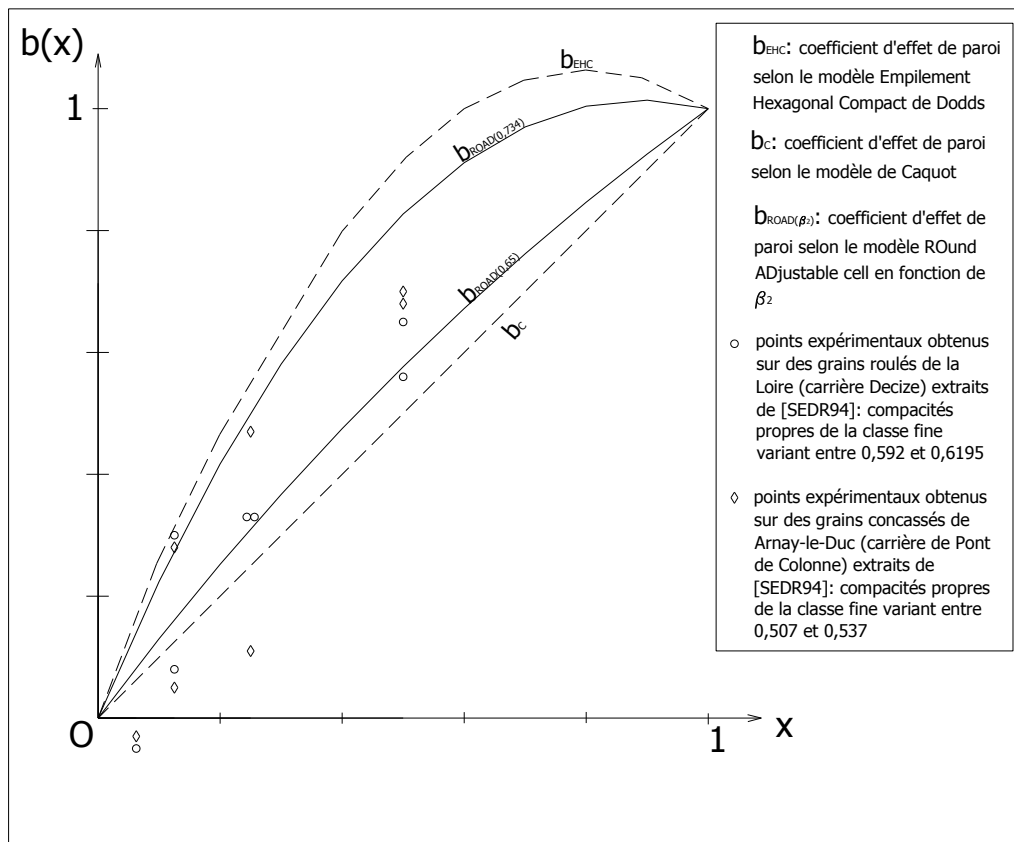


Figure V-9 : Coefficients d'effet de paroi b_{21} obtenus sur des grains roulés de la Loire et des grains concassés de Arnay-le-Duc en fonction du rapport des tailles [SEDR94].

Globalement, les points expérimentaux du coefficient d'effet de paroi obtenus sur un granulat roulé et sur un granulat concassé sont correctement encadrés par les limites basse et haute de la théorie ROAD. Toutefois, cinq d'entre eux se situent en dessous. Mieux, ils sont positionnés plus bas que la borne inférieure de Caquot. Ils concernent des mélanges présentant un fort contraste de tailles $x = \frac{d_2}{d_1} = \frac{1}{16}$: R8R05_{SLA}, C8C05_{SLA} pour lesquels des valeurs négatives de b_{21} ont été obtenues, $x = \frac{1}{8}$: R4R05_{SLA}, C4C05_{SLA} ou $x = \frac{1}{4}$: C8C2_{SLA}. On constate que quatre des cinq combinaisons évoquées l'ont été avec des classes granulaires présentant un diamètre minimal de 0,5 mm.

Pour les mélanges R8R05_{SLA}, C8C05_{SLA}, R4R05_{SLA}, C4C05_{SLA}, il est possible que les gros grains isolés aient servi de vibrateurs internes à l'égard des éléments fins empilés isolément, provoquant même un « anti-effet de paroi » pour les deux premiers cités ([SEDR94]).

Abordons maintenant une série de questions susceptibles d'être posées par les spécialistes des empilements granulaires concernant l'effet de paroi et auxquelles nous allons tenter de répondre à partir des données recueillies dans [SEDR94].

1/ Les gros grains de forme arrondie provenant de la Loire (Decize) engendrent-ils un effet de paroi d'autant plus important que leur environnement mono-modulaire constitué de fines particules est compact ?

Examinons l'évolution de b_{21} en fonction de α_2 lorsque $x = \frac{d_2}{d_1}$ reste constant.

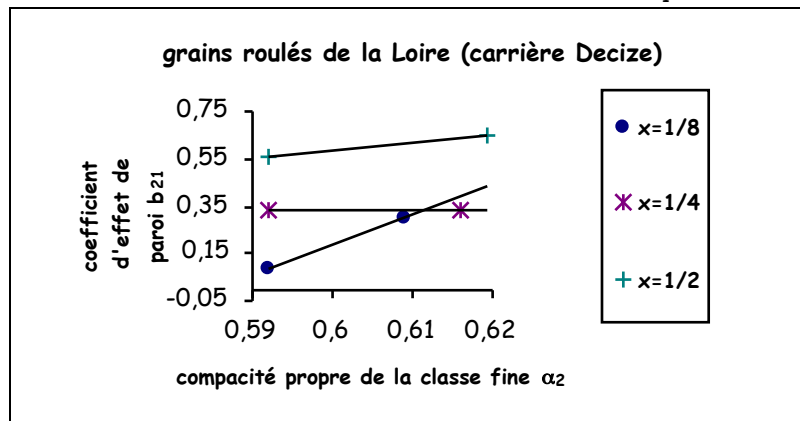


Figure V-10 : Coefficient d'effet de paroi b_{21} en fonction de la compacité propre de la classe fine α_2 pour les grains roulés de la Loire de la carrière Decize [SEDR94].

Pour les grains arrondis de la Loire dont la forme se rapproche de celle d'une sphère, on peut noter que, à rapport de taille constant, la tendance est à l'augmentation du coefficient d'effet de paroi au fur et à mesure que la compacité des petits grains en pleine masse croît, conformément aux prévisions de la théorie ROAD.

2/ Les gros grains concassés de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc engendrent-ils le même effet ?

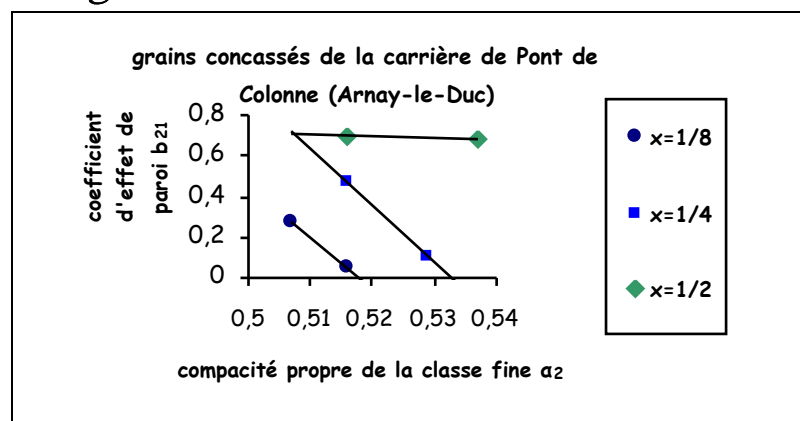


Figure V-11 : Coefficient d'effet de paroi b_{21} en fonction de la compacité propre de la classe fine α_2 pour les grains concassés de Arnay-le-Duc [SEDR94].

Pour les grains concassés de la carrière de Pont de Colonne à Arnay-le-Duc, le coefficient d'effet de paroi ne présente pas d'accroissement avec la compacité propre de la classe fine, pour un contraste de taille donné : le domaine de prédilection de la théorie ROAD est bien celui des grains présentant une forme se rapprochant de celle d'une sphère.

3/ Les valeurs de b_{21} font-elles apparaître des divergences notables entre granulats roulés de la Loire (Decize) et concassés de Arnay-le-Duc (Pont de Colonne) ?

Les interactions granulaires se développent avec une intensité quasiment équivalente pour les quatre couples de mélanges binaires suivants, constitués des tranches élémentaires de mêmes dimensions : R8R05_{SLA} et C8C05_{SLA} ($b_{21} = -0,05$ et $-0,03$), R8R1_{SLA} et C8C1_{SLA} ($b_{21} = 0,30$ et $0,28$), R4R05_{SLA} et C4C05_{SLA} ($b_{21} = 0,08$ et $0,05$), R8R4_{SLA} et C8C4_{SLA} ($b_{21} = 0,65$ et $0,68$). Elles sont plus fortes :

- pour les concassés dans les deux cas suivants : C2C05_{SLA}, C1C05_{SLA} par rapport à respectivement R2R05_{SLA}, R1R05_{SLA} ;
- pour les roulés dans le cas : R8R2_{SLA} par rapport à C8C2_{SLA}.

Pour plus de la moitié des combinaisons binaires testées avec des classes élémentaires de mêmes dimensions, il n'existe pas de divergences notables entre grains roulés et concassés.

4/ Le coefficient d'effet de paroi b_{21} dépend-il des grosseurs de particules dans la gamme étudiée pour les granulats roulés de la Loire et les concassés de Arnay-le-Duc ?

Sur la figure V-12 sont représentés les résultats obtenus à partir des mélanges binaires réalisés aux deux extrêmes du spectre des tailles (grains fins d'une part et gros d'autre part). Pour chaque rapport (excepté $\frac{1}{16}$), les mesures ont ainsi été dédoublées. Par exemple, le contraste $\frac{1}{8}$ peut être obtenu avec $d_2 = 0,5$ mm et $d_1 = 4$ mm (séries R4R05_{SLA} ou C4C05_{SLA}) du côté des petites particules ou bien avec $d_2 = 1$ mm et $d_1 = 8$ mm (séries R8R1_{SLA} ou C8C1_{SLA}) du côté des éléments plus volumineux. L'examen des résultats obtenus sur chaque couple permet de constater que les mélanges de constituants de faibles dimensions présentent des réactions granulaires tantôt plus intenses (C2C05_{SLA} par rapport à C8C2_{SLA}), tantôt plus modérées (C4C05_{SLA}, R4R05_{SLA}, R1R05_{SLA} par rapport à respectivement C8C1_{SLA}, R8R1_{SLA}, R8R4_{SLA}), tantôt équivalentes (R2R05_{SLA}, C1C05_{SLA} avec respectivement R8R2_{SLA}, C8C4_{SLA}) aux séries binaires de grandes tailles et qu'il n'est donc pas possible d'établir un ordonnancement systématique.

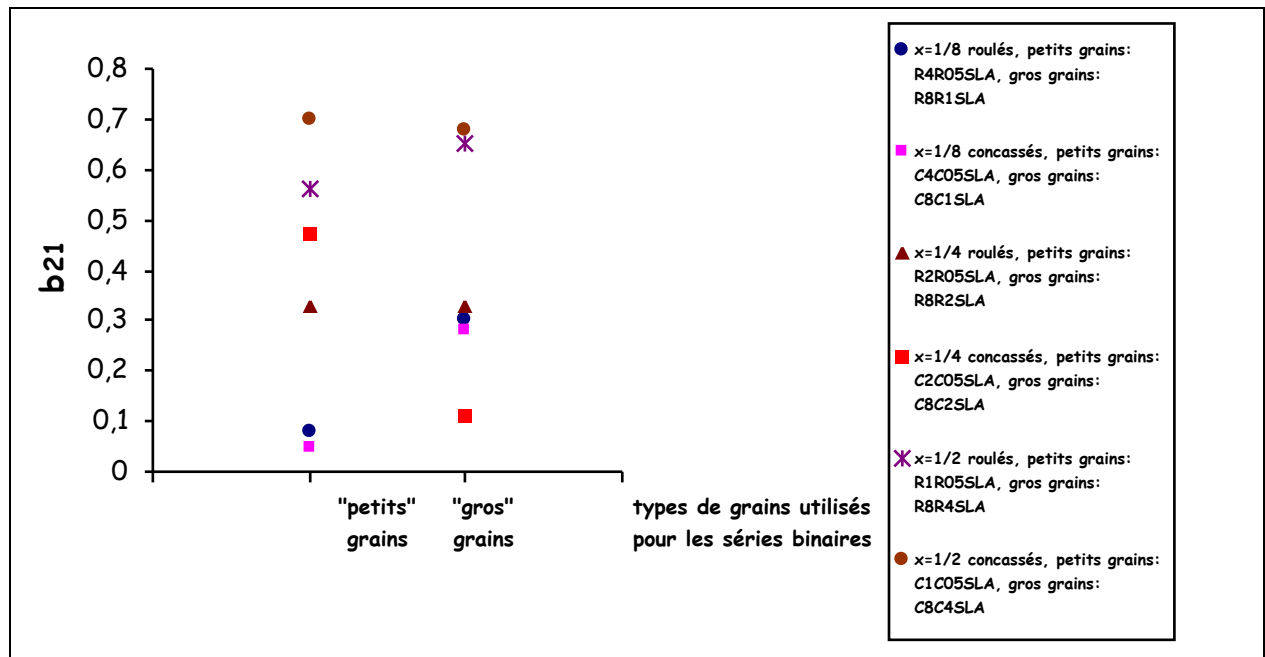


Figure V-12 : Coefficient d'effet de paroi en fonction de la grosseur de grains utilisés pour les séries binaires. Données issues de [SEDR94].

Pour les granulats roulés de la Loire et les concassés de Arnay-le-Duc et pour la gamme de dimensions testées, le coefficient d'effet de paroi ne dépend pas de la grosseur des particules. Toutefois, nous avons déjà évoqué la possibilité que les grains fins C05 ou R05 aient pu bénéficier de la vibration interne des particules beaucoup plus grosses qui leur étaient associées dans le cadre des mélanges binaires.

Ainsi, si l'étendue granulaire avait été plus importante, les résultats auraient pu s'avérer différents. Des césures peuvent en effet apparaître dans l'évolution de certaines propriétés physiques et avoir une influence sur le coefficient d'effet de paroi. Nous reviendrons sur ce point ultérieurement.

5/ Le coefficient d'effet de paroi b_{21} s'accroît-il avec le rapport des tailles x ?

Le coefficient d'effet de paroi b_{21} augmente au fur et à mesure que le contraste des tailles diminue. Ce résultat est cohérent par rapport aux estimations de notre modèle même si celui-ci prévoit, de façon purement théorique, qu'une décroissance de b_{21} peut se produire pour les très fortes compacités propres virtuelles lorsque le rapport des diamètres se rapproche de 1.

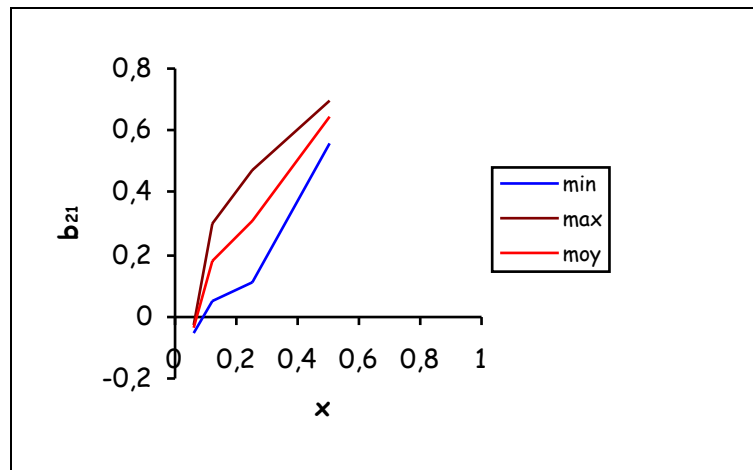


Figure V-13 : évolution du coefficient d'effet de paroi b_{21} en fonction de x [SEDR94].

6/ Conclusions sur l'efficacité de la théorie ROAD pour prédire le coefficient d'effet de paroi b_{21} d'après les données de [SEDR94].

Nous avons montré que la théorie ROAD, grâce à la prise en compte de la compacité des petits grains en pleine masse, encadre correctement les points expérimentaux du coefficient d'effet de paroi présentés dans [SEDR94]. Globalement, ce dernier augmente bien avec le rapport de tailles x dans l'intervalle faisant l'objet de l'étude ($x \leq 0,5$). Le seul cas où le modèle perd de sa précision est celui où des grosses particules isolées jouent le rôle de vibrateurs internes à l'égard de particules beaucoup plus fines provoquant ainsi un anti-effet de paroi. Les points concernés se situent alors non seulement en dessous de la limite inférieure de notre théorie mais également plus bas que la borne inférieure de Caquot. Les dimensions absolues des grains ne sont pas prises en compte dans la théorie ROAD : les données expérimentales recueillies dans [SEDR94] montrent qu'elles ne produisent pas un effet significatif sur les interactions granulaires du type effet de paroi, du moins dans le spectre de tailles étudié. Aucune divergence notable n'est en effet enregistrée entre mélanges de « grains fins » et mélanges de « gros grains », à rapport de tailles constant. Les fondements théoriques de notre modèle pourraient laisser penser qu'il est mieux adapté aux granulats de forme quasi-sphérique. C'est en partie vrai dans la mesure où l'effet de paroi semble s'accroître avec la compacité des petits grains en pleine masse uniquement dans le cas où les particules sont arrondies. Mais nous aurons confirmation, chapitre 7, de son intérêt pratique et de sa polyvalence pour tous types de particules.

Intéressons-nous dans un deuxième temps au coefficient d'effet de desserrement.

Les points expérimentaux correspondant à a_{12} sont reportés sur la figure suivante en fonction du rapport des tailles x . Deux tailles de caverne sont présentées : $x_0 = 0$ et $x_0 = 0,4$. Enfin, deux compacités propres virtuelles de grosses particules en pleine masse sont considérées : l'une faible ($\beta_1 = 0,65$), l'autre élevée ($\beta_1 = 0,734$).

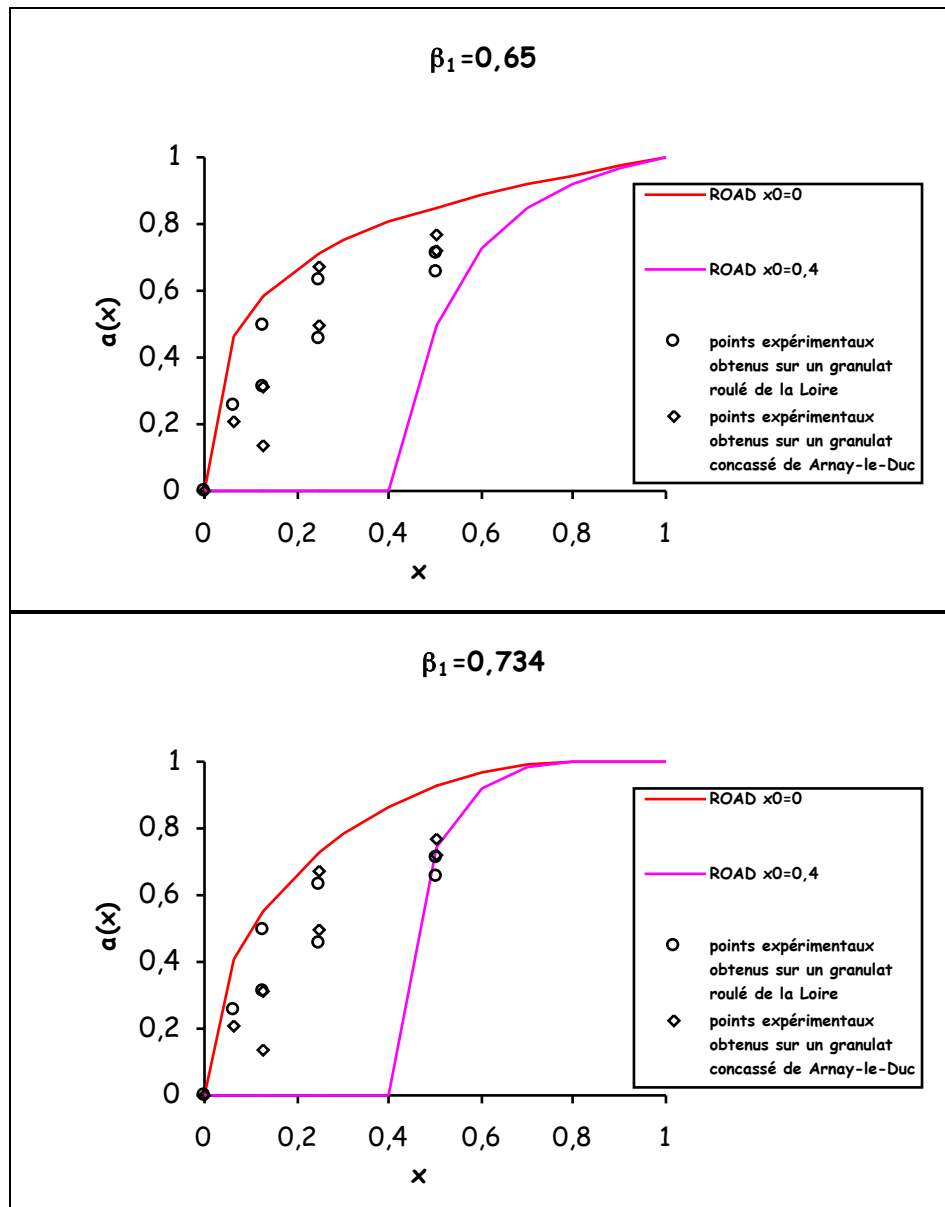


Figure V-14 : Coefficients d'effet de desserrement a_{12} obtenus sur des grains roulés de la Loire (carrière Decize) et des grains concassés de Arnay-le-Duc (carrière de Pont de Colonne) en fonction du rapport des tailles. Données issues de [SEDR94].

Les deux fuseaux délimités par les tailles de cavernes $x_0 = 0$ et $x_0 = 0,4$, le premier pour une « basse compacité propre virtuelle » ($\beta_1 = 0,65$), le second pour une « haute compacité propre virtuelle » ($\beta_1 = 0,734$) encadrent correctement les points référencés dans [SEDR94]. La position relative de ceux-ci, obtenus sur des granulats roulés et concassés, par rapport à ceux extraits de [BENA70] sur des billes de verre (figure V-4), montre que les premiers subissent un desserrement plus prononcé que les secondes lorsque le rapport de tailles x reste inférieur à 0,5. L'hypothèse envisagée et qui peut être visualisée sur la figure suivante est que, du moins pour les faibles rapports de tailles, les cavernes présenteraient une taille x_0 plus réduite pour accueillir les fines particules dans le cas des roulés et concassés par rapport aux éléments sphériques.

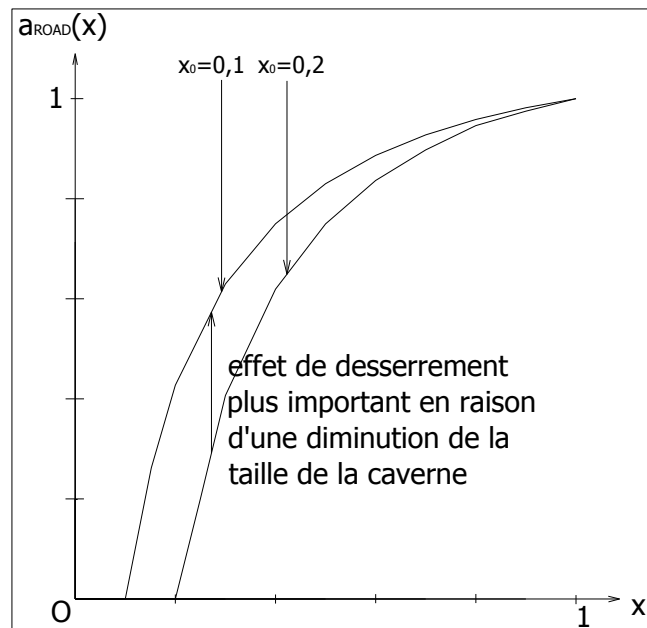


Figure V-15 : hypothèse envisagée pour expliquer un effet de desserrement plus important pour les roulés et concassés par rapport aux sphères.

Abordons maintenant une série de questions susceptibles d'être posées par rapport à l'effet de desserrement et auxquelles nous allons tenter de répondre à partir des données recueillies dans [SEDR94].

1/ Les valeurs de a_{12} font-elles apparaître des divergences notables entre granulats roulés de la Loire (Decize) et concassés de Arnay-le-Duc (Pont de Colonne) ?

Les interactions granulaires du type « effet de desserrement » sont plus fortes :

- pour les concassés dans les 3 cas suivants : C2C05_{SLA}, C8C4_{SLA}, C1C05_{SLA} par rapport à respectivement R2R05_{SLA}, R8R4_{SLA}, R1R05_{SLA} ;
- pour les roulés dans les 4 cas suivants : R8R05_{SLA}, R8R1_{SLA}, R4R05_{SLA}, R8R2_{SLA} par rapport à respectivement C8C05_{SLA}, C8C1_{SLA}, C4C05_{SLA}, C8C2_{SLA}.

L'effet de desserrement est davantage prononcé tantôt pour les grains roulés, tantôt pour les concassés. Cependant, il n'existe pas de classement systématique entre les premiers et les seconds.

2/ Le coefficient d'effet de desserrement a_{12} dépend-il des grosseurs de particules dans la gamme étudiée pour les granulats roulés de la Loire et les concassés de Arnay-le-Duc ?

A rapport de tailles constant, les mesures sur les mélanges binaires ont été conduites d'une part en associant des grains « fins » et d'autre part en combinant des « gros » grains. En distinguant roulés et concassés, l'analyse des résultats obtenus sur chaque couple permet d'observer que l'effet de desserrement se manifeste de façon plus intense pour les mélanges de constituants de faibles dimensions dans la moitié des cas environ (R4R05_{SLA} et C4C05_{SLA} par rapport à respectivement R8R1_{SLA} et C8C1_{SLA} pour $x = \frac{1}{8}$ et C2C05_{SLA} par rapport à C8C2_{SLA} pour $x = \frac{1}{4}$) et pour les mélanges des particules les plus grosses dans l'autre moitié (R8R2_{SLA} par rapport à R2R05_{SLA} pour $x = \frac{1}{4}$ et R8R4_{SLA} et C8C4_{SLA} par rapport à respectivement R1R05_{SLA} et C1C05_{SLA} pour $x = \frac{1}{2}$) : il n'est pas possible de dégager une tendance en fonction de la grosseur des grains.

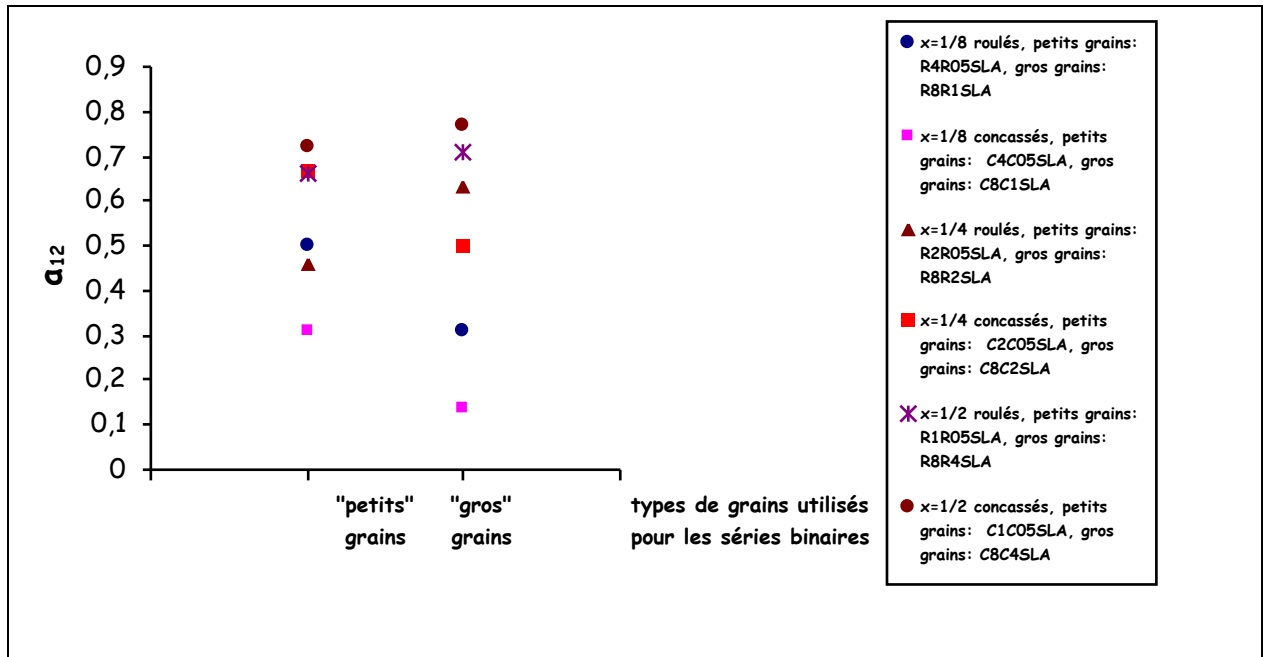


Figure V-16 : Coefficient d'effet de desserrement en fonction de la grosseur de grains utilisés pour les séries binaires. Données issues de [SEDR94].

Pour les granulats roulés de la Loire et les concassés de Arnay-le-Duc et pour la gamme de dimensions testées, le coefficient d'effet de desserrement ne dépend pas de la grosseur des particules.

3/ Le coefficient d'effet de desserrement a_{12} s'accroît-il avec le rapport des tailles x ?

Pour répondre à cette question, il faudra auparavant déterminer l'évolution de la taille de la caverne x_0 en fonction du rapport de tailles x .

4/ Conclusions sur l'efficacité de la théorie ROAD pour prédire le coefficient d'effet de desserrement a_{12} d'après les données de [SEDR94] sur des granulats roulés de la Loire (Decize) et des concassés de Arnay-le-Duc (Pont de Colonne).

La théorie ROAD, appliquée à l'effet de desserrement, encadre complètement les points expérimentaux présentés dans [SEDR94].

Comme pour l'effet de paroi, il ne semble pas que les dimensions absolues (dans la gamme testée) des constituants sélectionnés ne tiennent un rôle suffisamment important pour devoir distinguer grosses et fines particules (mais $\geq 0,5$ mm toutefois).

En revanche, l'effet de desserrement pour les deux granulats testés semble plus important que pour les billes de verre présentées dans [BENA70] en raison d'une possible diminution des tailles de cavernes qui pourrait être liée à leur forme.

En prenant en compte la variable principale liée au problème, le rapport des diamètres de grains x , et en y intégrant la compacité des grosses particules en pleine masse β_1 et la dimension de la caverne x_0 (qu'il conviendra de caler ultérieurement), il semble que la théorie ROAD soit en mesure de permettre de franchir un palier supplémentaire en terme de capacités prédictives.

5.1.5.3. Concassés calcaires lorrains [LECO97] (1997).

Les résultats de la troisième source [LECO97] concernent des calcaires lorrains concassés. Ils sont intéressants dans la mesure où les rapports de tailles étudiés couvrent une large étendue allant de 0,063 à 0,8. Onze points expérimentaux ont été obtenus pour chaque type d'interaction granulaire.

$x = \frac{d_2}{d_1}$	0,063	0,1	0,125	0,16	0,2	0,25
CONCASSÉS LORRAINS	C6.3C04_{LZ}	C4C04_{LZ}	C3.1C04_{LZ}	C2.5C04_{LZ}	C2.5C05_{LZ}	C1.6C04_{LZ}
Compacité de la classe la plus fine α_2	0,567	0,567	0,567	0,567	0,554	0,567
b_{21}	-0,032	0,049	0,095	0,155	0,213	0,299
Compacité de la classe la plus grosse α_1	0,565	0,565	0,552	0,548	0,548	0,554
a_{12}	0,330	0,464	0,497	0,527	0,548	0,641

x	0,315	0,4	0,5	0,63	0,8	
CONCASSÉS LORRAINS	C1.6C05_{LZ}	C1.2C05_{LZ}	C1C05_{LZ}	C1C06_{LZ}	C05C04_{LZ}	
α_2	0,554	0,554	0,554	0,555	0,567	
b_{21}	0,416	0,551	0,673	0,831	0,914	
α_1	0,554	0,554	0,555	0,555	0,554	
a_{12}	0,698	0,732	0,772	0,901	0,914	

Tableau V-10 : coefficients d'effet de paroi b_{21} et coefficients d'effet de desserrement a_{12} déduits des mélanges binaires expérimentaux obtenus avec des calcaires lorrains concassés. Données issues de [LECO97].

Intéressons-nous dans un premier temps au coefficient d'effet de paroi. Les points expérimentaux correspondant à b_{21} sont reportés sur la figure suivante en fonction du rapport des tailles.

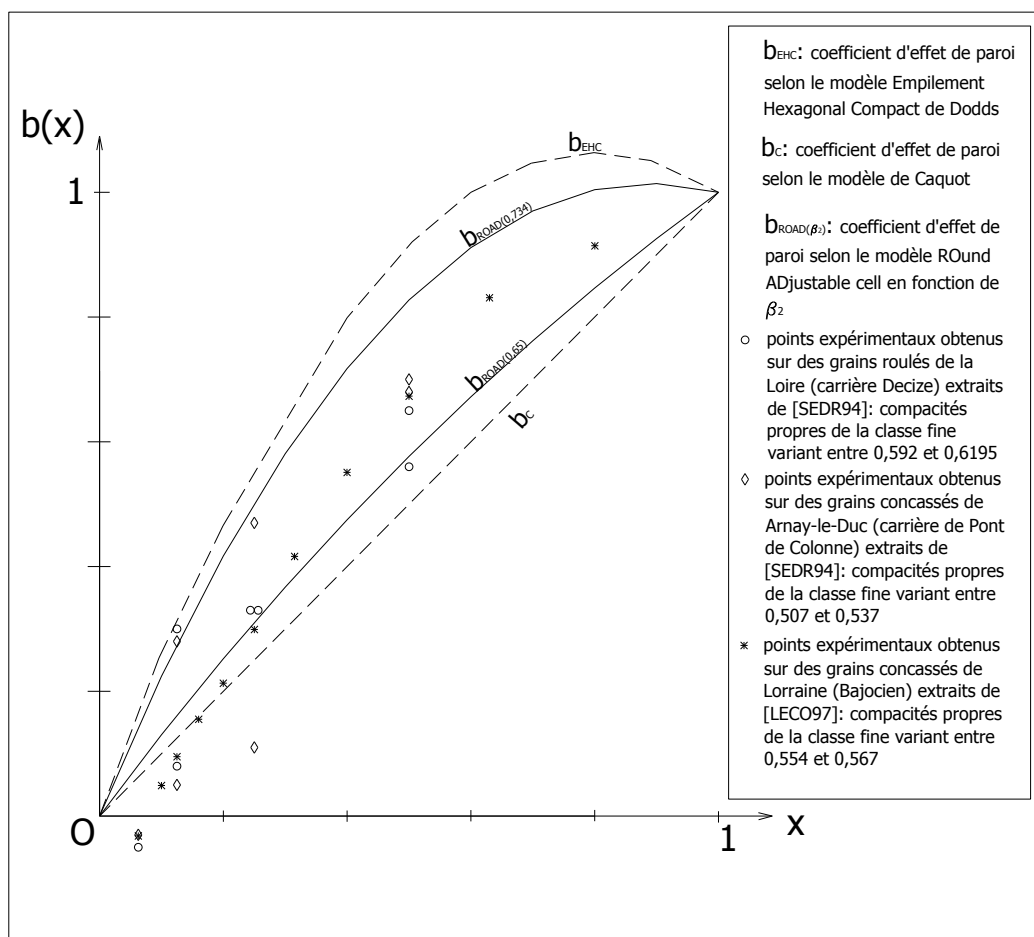


Figure V-17 : Coefficients d'effet de paroi b_{21} obtenus sur des concassés lorrains en fonction du rapport des tailles. Données issues de [LECO97] comparées avec [SEDR94].

Les valeurs du coefficient d'effet de paroi, obtenues sur un calcaire lorrain concassé [LECO97], augmentent bien avec le rapport des tailles x .

Elles se situent dans le fuseau de la théorie ROAD à condition que le contraste entre les tailles des constituants du mélange binaire ne soit pas trop important. Dans le cas contraire, les grosses particules, en vibrant, participent au serrage des éléments fins provoquant une baisse significative de b_{21} .

Intéressons-nous dans un deuxième temps au coefficient d'effet de desserrement.

Les points expérimentaux correspondant à a_{12} sont reportés sur la figure suivante en fonction du rapport des tailles x . Deux tailles de caverne, $x_0 = 0$ et $x_0 = 0,4$, et deux compacités propres virtuelles de grosses particules en pleine masse, $\beta_1 = 0,65$ et $\beta_1 = 0,734$, sont considérées.

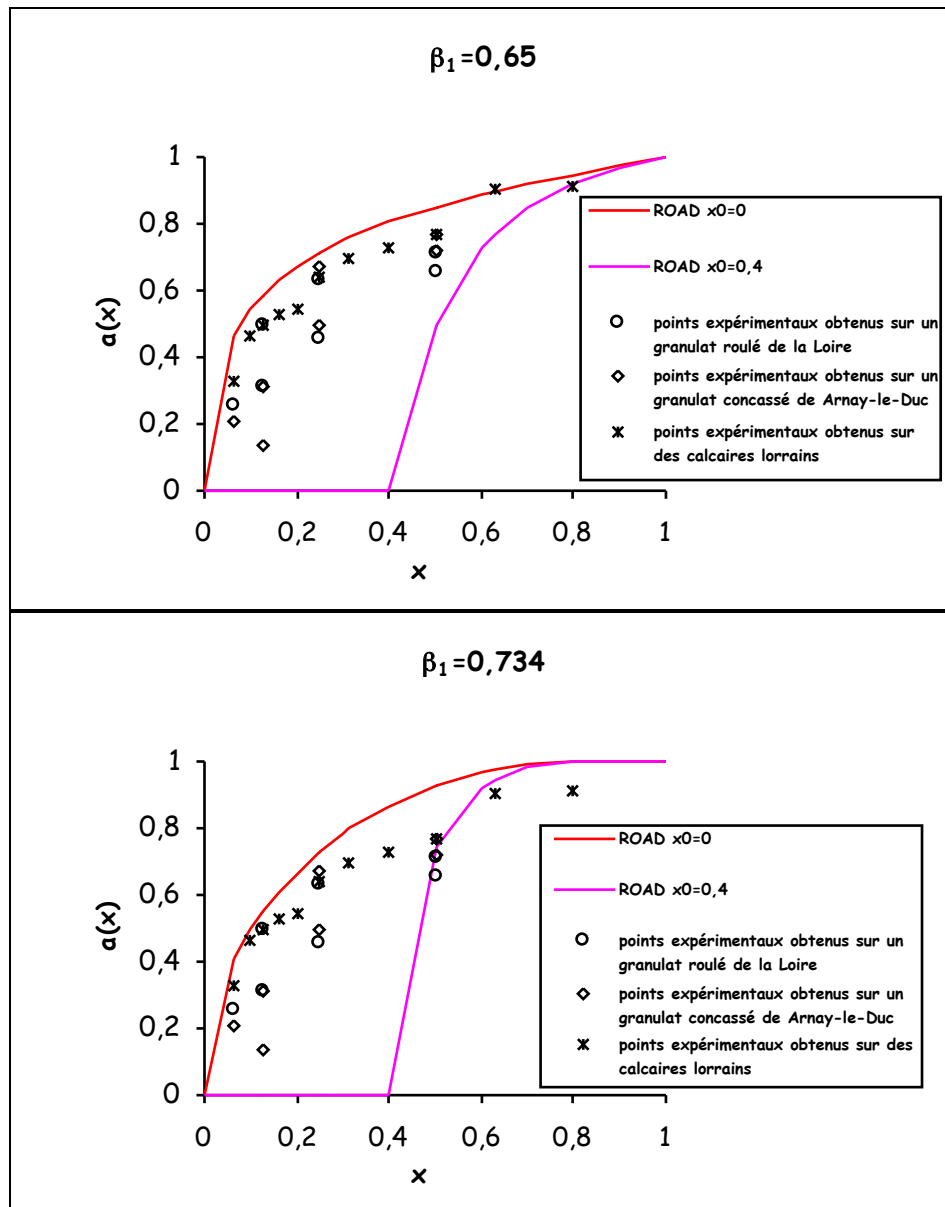


Figure V-18 : Coefficients d'effet de desserrement a_{12} obtenus sur des concassés lorrains (Bajocien) d'après [LECO97]. Comparaison avec les données issues de [SEDR94].

Les concassés lorrains développent des interactions liées à l'effet de desserrement légèrement plus fortes que les grains roulés de la Loire (Decize) et les concassés de Arnay-le-Duc, du moins vers les forts contrastes de tailles (x faible). Il se peut que ce soit en raison de tailles de cavernes plus faibles. Celles-ci pourraient en effet présenter des formes quelques peu torturées qui engendreraient un rapprochement des points représentatifs vers la limite supérieure du fuseau délimité par $x_0 = 0$.

5.1.5.4. Granulat concassé de Bendjerah (Algérie) [KECH09] (2009).

Les résultats de la quatrième source [KECH09] concernent des granulats concassés de carrière issus de la région de Bendjerah située dans l'Est de l'Algérie. Neuf points expérimentaux couvrant des rapports de tailles compris entre 0,135 et 0,74 ont été obtenus pour la fonction d'effet de paroi g et pour la fonction de desserrement f utilisées dans la première génération de modèles mis au point pour calculer la compacité d'un mélange granulaire : le modèle linéaire de compacité.

Pour passer des fonctions f et g utilisées dans le modèle linéaire de compacité (MLC) aux coefficients d'interaction a et b figurant dans le modèle d'empilement compressible (MEC), nous avons fait appel aux expressions I-64 et I-68 :

$$\text{I-64} \quad a_{12\text{MEC}} = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} (1 - f_{12\text{MLC}})$$

$$\text{I-68} \quad b_{21\text{MEC}} = \frac{\left(\frac{1}{\alpha_2} - 1\right)}{\left(\frac{1}{\alpha_1} - 1\right)} (1 - g_{21\text{MLC}})$$

$x = \frac{d_2}{d_1}$	0,135	0,213	0,322	0,380	0,470
CONCASSÉS DE BENDJERAH	C2.6C03_{KC}	C4.1C08_{KC}	C1.5C05_{KC}	C4.1C1.5_{KC}	C5.6C2.6_{KC}
Compacité de la classe la plus fine α_2	0,550	0,560	0,550	0,570	0,600
b_{21}	-0,039	0,313	0,336	0,333	0,254
Compacité de la classe la plus grosse α_1	0,600	0,570	0,570	0,570	0,530
a_{12}	0,590	0,645	0,725	0,773	0,843

x	0,559	0,595	0,64	0,74	
CONCASSÉS DE BENDJERAH	C1.5C08_{KC}	C2.6C1.5_{KC}	C4.1C2.6_{KC}	C5.6C4.1_{KC}	
α_2	0,560	0,570	0,600	0,570	
b_{21}	0,700	0,739	0,614	0,429	
α_1	0,570	0,600	0,570	0,530	
a_{12}	0,724	0,791	0,874	0,931	

Tableau V-11 : coefficients d'effet de paroi b_{21} et coefficients d'effet de desserrement a_{12} déduits des mélanges binaires expérimentaux obtenus avec des concassés de Bendjerah (Algérie). Données issues de [KECH09].

Intéressons-nous dans un premier temps au coefficient d'effet de paroi.

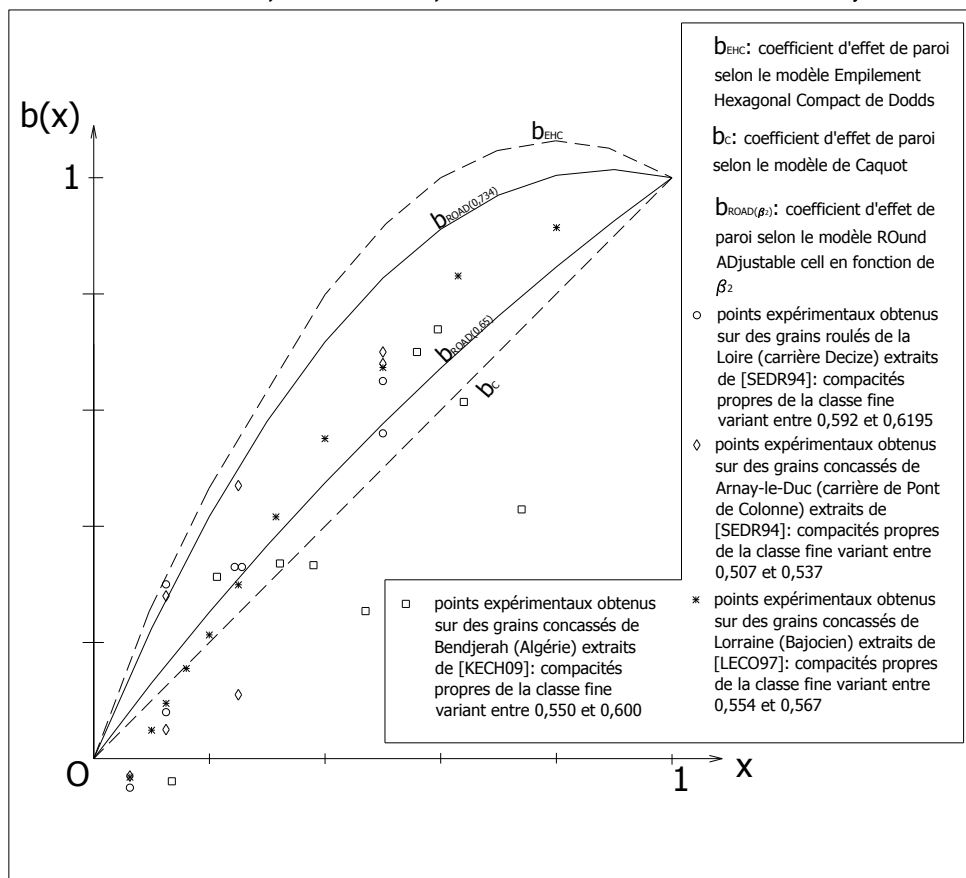


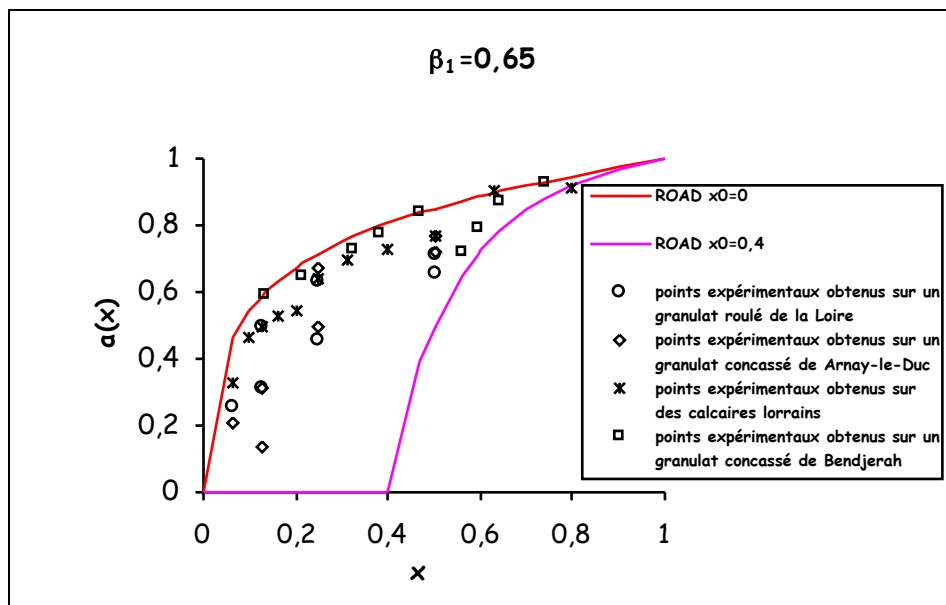
Figure V-19 : Coefficients d'effet de paroi b_{21} obtenus sur des concassés de Bendjerah (Algérie) en fonction du rapport des tailles. Données issues de [KECH09]. Comparaison avec les données provenant de [SEDR94] et de [LECO97].

Les coefficients d'effet de paroi b_{21} obtenus sur les calcaires de Bendjerah (Algérie) sont relativement faibles. Deux mélanges binaires attirent particulièrement notre attention. Il s'agit de C5.6C2.6_{KC} et C5.6C4.1_{KC} qui se situent largement en dessous de la droite de Caquot.

Plusieurs pistes peuvent être avancées pour tenter de les justifier :

- les compacités propres des classes fine α_2 et grosse α_1 sont relativement distinctes l'une de l'autre, la seconde étant sensiblement plus faible que la première dans les deux cas. Or, la théorie ROAD, présentée dans ce mémoire, considère que les deux tranches granulaires prises en compte ont des compacités égales. Quand on sait que b_{21} s'obtient à partir de la formule $\frac{\left(\frac{1}{\alpha_2} - 1\right)}{\left(\frac{1}{\alpha_1} - 1\right)}(1 - g_{21MLC})$, on comprend mieux l'influence que peut engendrer la différence entre α_2 et α_1 .
- les deux mélanges présentant cette « anomalie » sont les seuls à avoir été réalisés avec la classe élémentaire C5.6KC de diamètre moyen 5,65 mm. Puisqu'il s'agit de la tranche granulaire la plus grosse, peut-être les grains la constituant ont-ils joué le rôle de vibrateurs internes à l'intérieur du mélange ?

Intéressons-nous dans un deuxième temps au coefficient d'effet de desserrement.



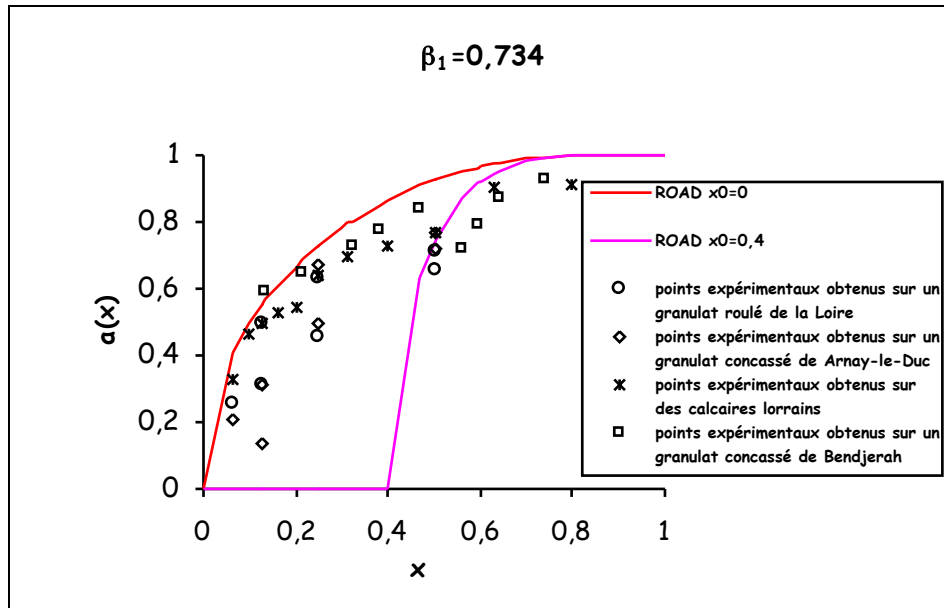


Figure V-20 : Coefficients d'effet de desserrement a_{12} obtenus sur des concassés de Bendjelah (Algérie) d'après [KECH09]. Comparaison avec les données issues de [LECO97] et de [SEDR94].

Les calcaires de Bendjelah (Algérie) développent une forte réaction granulaire liée à l'effet de desserrement. Les coefficients a_{12} obtenus se rapprochent fortement de la courbe correspondant à une taille de caverne $x_0 = 0$. Ils sont parfaitement encadrés par le « fuseau basse compacité propre virtuelle » ($\beta_1 = 0,65$).

5.1.5.5. Conclusions concernant la validation des modèles d'effet de paroi et de desserrement élaborés à partir de la théorie ROAD (ROund ADjustable cell) à partir des sources [BENA70], [SEDR94], [LECO97], [KECH09].

Commençons par le modèle d'effet de paroi.

La théorie ROAD relative à l'effet de paroi, en tenant compte du rapport des tailles x et de la compacité des petits grains en pleine masse β_2 , définit une limite haute se rapprochant de la borne supérieure de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC) de Dodds et une limite basse se rapprochant de la borne inférieure de Caquot. Elle permet d'encadrer de façon particulièrement efficace les points expérimentaux du coefficient d'effet de paroi particulièrement lorsqu'il s'agit de sphères.

La théorie ROAD s'avère moins performante dans deux circonstances : premièrement lorsque les grosses particules jouent le rôle de vibrateurs internes envers les éléments fins, entraînant une baisse de b_{21} pouvant aller jusqu'à un « anti-effet de paroi » lorsque le contraste des tailles est particulièrement important, deuxièmement, dans le cas où les grains présentent une certaine rugosité et/ou angularité.

Continuons par le modèle d'effet de desserrement.

La théorie ROAD relative à l'effet de desserrement, en tenant compte du rapport des tailles x , de la compacité des gros grains en pleine masse β_1 et de la taille des cavernes x_0 , permet d'englober pratiquement tous les points expérimentaux entre les courbes $x_0 = 0$ et $x_0 = 0,4$, que ce soit avec le « fuseau basse compacité propre virtuelle » ($\beta_1 = 0,65$) ou le « fuseau haute compacité propre virtuelle » ($\beta_1 = 0,734$).

Les points obtenus sur des sphères sont plutôt bien répartis autour de la courbe $x_0 = 0,2$ qui correspond approximativement au rapport de tailles théorique ($x_0 = 0,224$) permettant l'insertion d'un petit grain au milieu de 4 plus gros sans les desserrer.

Il semble que le desserrement soit davantage prononcé pour les concassés, du moins en ce qui concerne les calcaires lorrains et ceux de Bendjerah, par rapport aux roulés et aux éléments sphériques en raison de tailles de cavernes plus faibles. Leur morphologie plus accidentée pourrait en effet se traduire par une rugosité et/ou une angularité plus importante(s) qui se répercuterait sur une réduction de l'espace disponible pour l'insertion d'éléments plus fins.

5.1.6. Cas particulier des mélanges cimentaires. Le coefficient d'effet de paroi b_{21} peut-il être supérieur à 1 ?

Le problème consiste à savoir si les données issues des expériences précédemment décrites sont encore valables lorsque les éléments considérés sont des fines aux dimensions extrêmement réduites (\leq à quelques microns) qui peuvent s'agglomérer entre elles en raison des forces de surface devenues prépondérantes.

Nous allons pour cela utiliser les résultats de Gallias et Bigas [GALL00]. Leur étude concerne des mélanges binaires dont le premier composant est un ciment courant et le second un des minéraux fins suivants : calcite arrondie (carbonate d'origine naturelle), calcite irrégulière (carbonate précipité), ou fumée de silice.

Gallias et Bigas opèrent sur des matériaux intermédiaires entre les « crèmes » et les « pâtes molles » dont les propriétés rhéologiques sont maintenues constantes grâce à un ajustement de la quantité d'eau pour obtenir une consistance normalisée mesurée avec la sonde de Vicat selon la norme NF EN 196-3.

Les étapes texturales qui viennent d'être évoquées (crème, pâtes molles) ont été reliées à trois familles d'eau suivant leur mobilité dans la pâte par Mansoutre, Van Damme et Colombet [MANS00] : une eau labile très fortement mobile, une eau de suspension de mobilité intermédiaire et une eau captive de très faible mobilité qui correspond au remplissage des pores de l'empilement granulaire. Elles sont présentées dans le tableau suivant.

Fraction volumique de solide <i>croissante</i>				
Rapport massique eau/solide <i>décroissant</i>				
Eau captive + eau de suspension + eau labile		Eau captive + eau de suspension		Eau captive
liquide	crème	Pâte molle	Pâte dure	Poudre humide

Limite de liquidité

Point de consistance normale :
essais de Gallias et Bigas

Tableau V-12 : Etapes texturales en fonction des mobilités d'eau en présence d'après Mansoutre, Van Damme, Colombet [MANS00].

Gallias et Bigas ont opéré sans incorporation de fluidifiant. L'introduction de ciment en faible quantité (entre 2 et 10%) dans le matériau fin ou ultra-fin, conduit alors à une variation significativement défavorable de la compacité du mélange. Il est probable que les composants actifs du liant, en interagissant fortement avec les particules de la matrice minérale, provoquent une floculation de ces dernières et une complète désorganisation de leur ordonnancement. Ainsi, les forces interparticulaires, en devenant prépondérantes, bouleversent-elles le schéma habituel de l'empilement granulaire décrit précédemment. Ce cas n'est pas isolé : il a été constaté sur des coulis d'injection et avec plusieurs types de ciment.

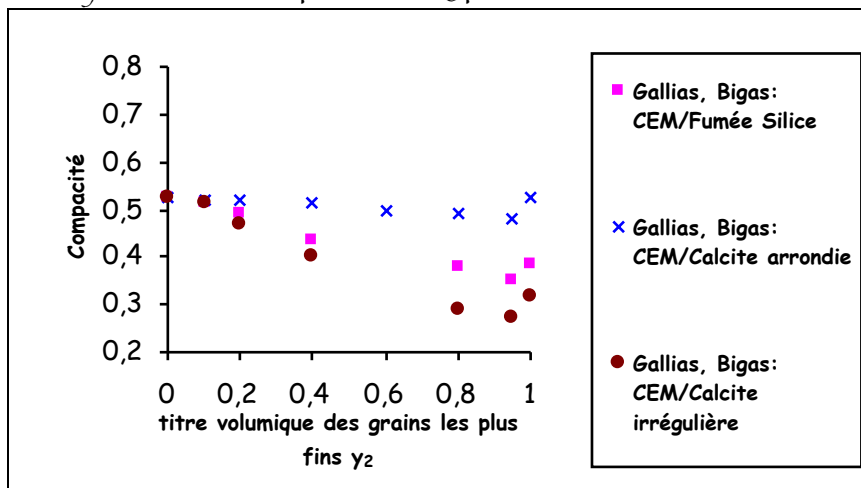


Figure V-21 : Compacité pour des mélanges binaires de poudres. Données issues de Gallias et Bigas [GALL00] sur des pâtes de consistance normalisée.

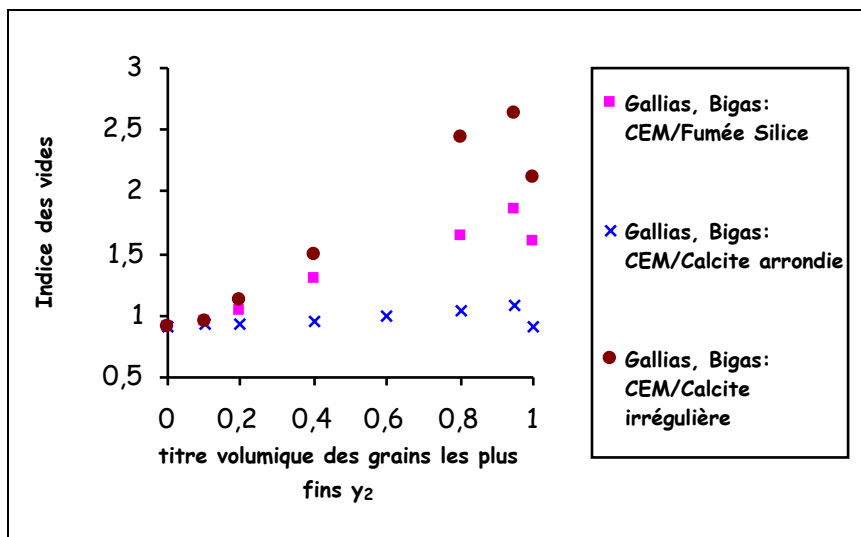


Figure V-22 : Indice des vides correspondant à la compacité précédente pour des mélanges binaires de poudres.

Les résultats obtenus par Gallias et Bigas sur des mélanges binaires constitués d'une part de ciment et d'autre part de minéraux fins (calcite irrégulière ou arrondie, fumée de silice) en l'absence de fluidifiant soulèvent la question suivante : b_{21} peut-il être supérieur à 1 ?

Pour étayer notre explication, rappelons que le coefficient d'effet de paroi est déterminé grâce à la connaissance :

- des compacités mono-modulaires du ciment et du minéral fin, respectivement α_1 et α_2 . En fonction des modes opératoires et de la nature des matériaux, la première est estimée à 0,52 et la seconde s'échelonne entre 0,32 (calcite irrégulière) et 0,52 (calcite arrondie) ;
- de la pente « à l'extrémité » $\left| \frac{\partial e}{\partial y_2} \right|_{y_2=1}$ de la courbe figurant l'évolution de

l'indice des vides e du mélange binaire en fonction du titre volumique des petits éléments y_2 . L'examen des résultats obtenus par Gallias et Bigas montre que le coefficient directeur peut être négatif.

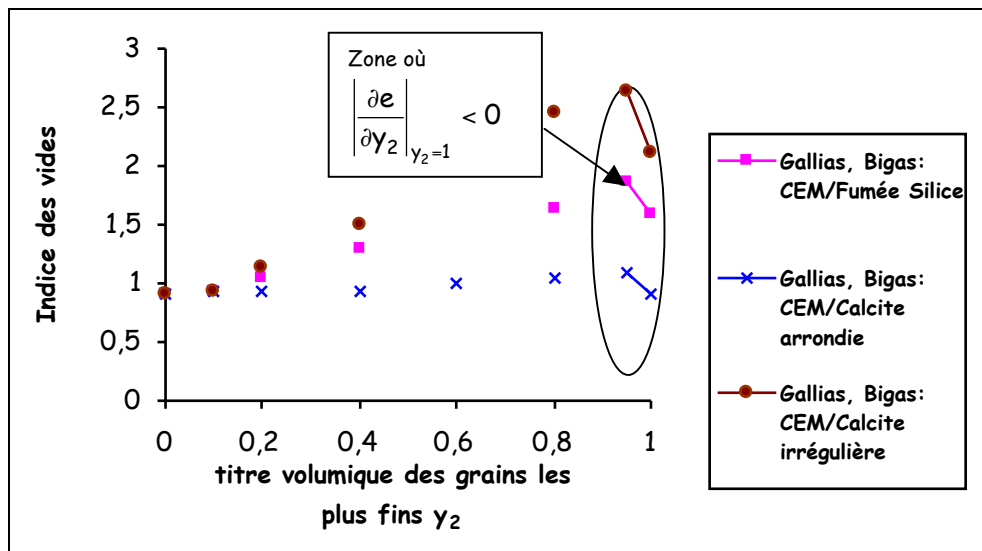


Figure V-23 : Exemples de mélanges binaires de poudres ciment/minéral fin sans fluidifiant représentant l'évolution de l'indice des vides en fonction du titre volumique des petits éléments avec une pente négative du côté où ces derniers sont fortement dominants.

La relation permettant le calcul de b_{21} s'écrit :

$$b_{21} = \frac{\frac{1}{\alpha_2} - 1 - \left| \frac{\partial e}{\partial y_2} \right|_{y_2=1}}{\frac{1}{\alpha_1} - 1}$$

Nous allons estimer une valeur minimale de b_{21} de la façon suivante. Pour les 3 mélanges considérés, $\left. \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=1}$ est négative. Cependant, il est très difficile d'en fournir une évaluation précise dans la mesure où 2 expériences seulement ont été menées dans la zone de décroissance de l'indice des vides, aux abscisses $\gamma_2 = 0,95$ et $\gamma_2 = 1$. Il aurait en effet été nécessaire de disposer d'un nombre beaucoup plus important de données du côté des minéraux fins dominants en incrémentant, par exemple, leur proportion par pas réduits de 2% entre 90 et 100%: le tracé des tangentes aurait gagné en précision et les valeurs des dérivées en fiabilité. Ne disposant pas de ces éléments numériques, nous préférons proposer une borne inférieure de b_{21} en fixant une limite supérieure à $\left. \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right|_{\gamma_2=1}$: celle-ci sera considérée nulle et non pas négative en raison de notre incapacité à la quantifier avec exactitude.

Mélange ciment / minéral fin	Nature		Compacité mono-modulaire		Diamètre médian des grains (μm)		Surface spécifique BET (m^2/g)		$\left. \frac{\partial e}{\partial \gamma_2} \right _{\gamma_2=1}$	b_{21}
	du ciment :	du minéral fin :	du ciment : α_1	du minéral fin : α_2	de ciment : d_1	du minéral fin : d_2	du ciment :	du minéral fin :		
CEM/Fumée Silice FS	CEM I	Silice amorphe quasi-sphérique	0,525	0,385	15	0,15	de 0,3 à 0,4	15	< 0	> 1,765
CEM/Calcite arrondie CA		Origine naturelle		0,525		3		3,3		> 1
CEM/Calcite précipitée CP		Calcite irrégulière		0,320		0,07		20		> 2,348

Tableau V-13 : Bornes inférieures du coefficient d'effet de paroi b_{21} pour des mélanges binaires de poudres ciment/minéral fin sans fluidifiant estimées à partir de données de Gallias et Bigas [GALL00].

Les produits utilisés sont : un ciment Portland CEM I et trois additions minérales de propriétés texturales et granulaires, et de nature ou de composition minéralogique différentes. La calcite CA, composée de grains microniques, présente une surface spécifique significativement plus faible que celles de la calcite précipitée CP et de la fumée de silice FS, constituées de particules submicroniques.

Les résultats présentés dans le tableau précédent appellent des commentaires concernant, d'une part, les compacités mono-modulaires α_2 des matériaux associés au ciment et, d'autre part, les coefficients d'effet de paroi b_{21} . Ils doivent être manipulés avec précaution et ne sont pas nécessairement généralisables à d'autres fines.

La compacité des pâtes pures de minéraux fins à consistance normalisée α_2 peut faire l'objet de trois remarques :

- Elle est fortement influencée par les différences de taille entre les divers produits et évolue dans le même sens que le diamètre médian des particules qui les composent. Plus les dimensions s'accroissent, moins les forces de surface sont prépondérantes : l'arrangement des grains s'en trouve facilité.
- Elle est plus élevée pour les deux matériaux aux formes arrondies, CA et FS, que pour la calcite irrégulière, CP. Outre la raison fournie dans la 1^{ère} remarque, ce résultat est lié à la morphologie des grains : la surface des deux premiers produits cités est relativement lisse et non poreuse alors que celle du troisième est caractérisée par une forte désorganisation. Les aspérités présentes constituent autant d'obstacles géométriques à une mise en place structurée. Il en résulte la formation d'agglomérats d'une très grande porosité et rugosité de surface. En simplifiant, il est possible de résumer la situation de la façon suivante : plus la forme des particules s'écarte de la forme convexe et lisse, moins l'empilement granulaire dans les pâtes est dense. Toutefois, il serait probablement plus judicieux de relier la compacité de ces dernières non pas au diamètre médian des grains mais plutôt à la surface spécifique des minéraux. En effet, celle-ci est, en général, déterminée par la méthode B.E.T. qui intègre une partie des variables morphologiques : rugosité et porosité intra-particulaire notamment.
- Malgré leur quasi-sphéricité, les éléments constituant la fumée de silice présentent une capacité d'empilement moindre que ceux de la calcite arrondie. Leur compacité reste même significativement inférieure à celle mesurée avec des sphères rigides mono-modulaires aléatoirement disposées dans un milieu aqueux (0,60). L'explication résiderait dans le processus de fabrication de ce sous-produit de l'industrie du silicium : au cours de celle-ci, les grains sont soumis à une opération de trempe qui favoriserait la formation d'amas peu compacts.

Les coefficients d'effet de paroi résultant des trois mélanges testés sont, dans tous les cas, supérieurs à 1.

Pour commenter ces résultats, il nous a semblé opportun d'analyser comment l'incorporation des **additions minérales** pouvait agir sur l'arrangement granulaire d'un mélange **cimentaire** encore **frais** en faisant ressortir **4 effets** :

- un **effet granulaire** résultant de leurs caractéristiques dimensionnelles et morphologiques ;
- un **effet « colloïdal »** en raison de leur finesse : les particules sont sensibles aux interactions de nature essentiellement électrostatique ;
- un **effet physico-chimique** engendré par leur présence dans la matrice cimentaire modifiant le processus d'hydratation du ciment ;
- un **effet chimique** généré par leur réactivité dans ce genre de milieu en raison de leurs propriétés pouzzolaniques (*les constituants forment, en présence d'eau et par combinaison avec la chaux, des composés hydratés stables*) ou hydrauliques (*les constituants forment, par réaction avec l'eau, des composés hydratés stables peu solubles*).

Le premier effet, qui constitue l'objet principal de notre étude, est interdépendant des trois suivants en vertu de l'explication suivante.

L'**effet « colloïdal »** n'est pas spécifique au milieu cimentaire car il intervient dans les sols argileux par exemple. Les particules présentent, sur leur surface, des charges électriques de signes opposés qui vont provoquer, une fois plongées dans un milieu aqueux, une dissolution de certains constituants dont les ions saturent la solution. Ces forces électrostatiques, ajoutées à celles de Van der Waals, sont à l'origine de la formation d'une couche de liquide lié de forte viscosité autour des grains. Elles sont également responsables de l'attraction de ces derniers. Ils ont alors tendance à s'agglomérer pour les concentrations usuelles des pâtes, conduisant au phénomène de **floculation**, que l'action mécanique des malaxeurs ne parvient pas à éliminer complètement.

Les **effets physico-chimique et chimique** sont indissociables car ils sont étroitement intriqués et se manifestent simultanément. Ils interviennent sur la mise en œuvre du mélange frais car la cinétique qui engendre la constitution des premiers hydrates s'enclenche dès la mise en contact du ciment et de l'eau. Or, les additions minérales présentent une activité liante qui se manifeste d'autant plus rapidement qu'elles sont fines. L'écoulement du matériau lors de sa mise en place va donc être perturbé par l'existence des liens inter-particulaires qui se sont créés précocement.

Les **effets « colloïdal », physico-chimique et chimique** affectent directement **l'empilement granulaire** des additions minérales microniques et submicroniques en le bouleversant. Non seulement la formation de floccs empêche une dispersion uniforme des particules dans le mélange, mais elle emprisonne également un certain volume de liquide qui n'est alors plus disponible pour lubrifier la suspension. La **quantité d'eau** nécessaire à la dispersion des grains doit alors être **augmentée** ce qui est **préjudiciable à la compacité** du mélange. Analyser et quantifier l'influence des additions sur cette dernière se présente donc comme un sujet particulièrement complexe.

L'objectif du tableau suivant va être de fournir des éléments relatifs à la contribution combinée des **effets granulaire, « colloïdal », physico-chimique et chimique** des minéraux fins sur l'aptitude des particules des mélanges cimentaires à former ou non un empilement compact.

		Ciment	Fines / Ultrafines			
			Fumée de silice FS Particules submicroniques	Calcite arrondie CA Particules microniques	Calcite irrégulière CP Particules submicroniques	
Caractéristiques des différents constituants en l'absence d'eau	Caractéristiques dimensionnelles et morphologiques	Le ciment est obtenu par broyage. Ce fractionnement de la matière provoque une extrême variété dans les tailles et dans les formes : faces planes, arêtes, etc.	La fumée de silice FS est un sous-produit de fabrication du silicium et de ses alliages qui contient plus de 90% de silice amorphe. Elle constitue une poudre dont les grains sont quasi-sphériques. Elle peut être partiellement agrégée lors de sa formation, un phénomène de « frittage » se manifestant en fonction des conditions de refroidissement.	La calcite est un carbonate de calcium CaCO ₃ extrêmement répandu. En général, elle se rencontre en rhomboédres ou en cristaux. Gallias et Bigas [GALL00] ne fournissant pas d'informations quant à l'origine des deux matériaux, les éléments qui vont suivre sont donnés comme des pistes à explorer susceptibles d'expliquer certains phénomènes.	La calcite arrondie CA est un carbonate naturel. Sa surface spécifique est significativement plus faible que celle des deux autres additions minérales testées. D'après les éléments à disposition, il pourrait s'agir d'une calcite magnésienne. Dans cette hypothèse, la forme des cristaux serait sub-sphérique avec une surface lisse.	La calcite irrégulière CP est probablement obtenue selon la méthode suivante : on dissout du CaCO ₃ dans une eau saturée en CO ₂ . En laissant ce dernier s'échapper, le carbonate précipite. D'après notre interprétation, le matériau pourrait être qualifié de calcite cryptocristalline ou submicrocristalline (compléments de pétrologie sédimentaire).
	Caractéristiques de surface	Les grains de ciment présentent : - une altération de leur état de surface ; - des charges électriques qui restent non saturées à l'air libre.	La fumée de silice FS possède une surface qui favorise les attractions électrostatiques. En cas de conditionnement par granulation, la vapeur d'eau contenue dans l'air insufflé peut provoquer l'apparition de ponts capillaires entre particules et engendrer une dégradation chimique qui va à son tour donner naissance à des ponts solides. Si ces derniers sont rompus, un aspect cryptocristallin peut subsister en surface.	La calcite arrondie CA est caractérisée par une surface : - relativement lisse ; - non poreuse.	La calcite irrégulière CP présente un comportement singulier, avec des aspérités superficielles formant une texture rugueuse.	
Caractéristiques des différents constituants en présence d'eau dans les mélanges cimentaires	Présentation	Mélange ciment / eau Le mélange ciment / eau se présente sous la forme d'une suspension de distribution granulaire comprise entre 1 et 60 µm, réactive chimiquement grâce au clinker, régie par les forces colloïdales et de pesanteur.	Mélange ciment / eau / additions minérales L'incorporation d'additions minérales dans un mélange ciment / eau se traduit par une extension du spectre granulaire grâce à l'apport de matériaux fins, moins réactifs que le clinker, accentuant la prépondérance des forces colloïdales par rapport à la force de pesanteur.			
	Caractéristiques colloïdales	Les particules de ciment ont des tailles assez petites pour qu'on ne puisse pas « oublier » que le fluide qui les entoure possède une structure moléculaire et suffisamment grosses pour être sensibles à la gravité. En raison de leur broyage qui provoque la rupture des liaisons entre cations et anions, elles présentent un grand nombre de sites non saturés électriquement. En contact avec l'eau, elles se dissolvent en surface et libèrent en solution des ions (Ca ²⁺ , Na ⁺ , SO ₄ ²⁻ , etc.). Le processus enclenché conduit à leur floculation. Les concernant, on parlera d'un couplage agrégation - sédimentation.	Mélange ciment / eau / fumée de silice FS	Mélange ciment / eau / calcite arrondie CA	Mélange ciment / eau / calcite irrégulière CP	
			Le terme « colloïdal » s'applique en général à des objets dont la taille caractéristique est inférieure au micron. Sur cette base, les mélanges contenant de la calcite irrégulière CP (0,07 µm), de la fumée de silice FS (0,15 µm), et, à un degré moindre, de la calcite arrondie CA (3 µm), ont des caractéristiques colloïdales. Les particules concernées sont sensibles aux interactions de nature essentiellement dipolaire et électrostatique. Leur organisation varie en fonction de nombreux paramètres : type de fines, concentrations en solide et en électrolyte, pH, etc.	Les grains de calcite, en milieu aqueux, subissent une dissolution de certains constituants d'autant plus rapidement que la surface spécifique est importante et que la zone superficielle comporte des failles et des fractures.	La calcite arrondie CA est composée de grains à la limite du domaine colloïdal. Elle présente probablement un comportement intermédiaire par comparaison à ceux enregistrés pour le ciment et la calcite irrégulière CP.	La calcite irrégulière CP est composée de particules dont la taille est si faible qu'elle forme un milieu intermédiaire entre un « sol » et un « gel ». Il s'agit de systèmes colloïdaux constitués, dans le 1 ^{er} cas, de solides dispersés dans un liquide et dans le 2 ^{ème} cas, d'un liquide dispersé dans un solide. Le phénomène de sédimentation dans le champ de gravitation est alors pratiquement inexistant. La phase liquide se trouve immobilisée à l'intérieur de la phase dispersée. La structure qui se crée est constituée de particules adhérentes. La formation d'un réseau continu empêche l'écoulement de se produire.
	Réactivité chimique avec le ciment en milieu aqueux	Pendant le gâchage, on assiste au passage en solution des ions provenant des constituants du ciment. Dès les premières minutes, deux hydrates se forment : le CSH et l'ettringite. Au cours de la période dormante, l'élévation rapide du pH et de la teneur en calcium de l'eau de gâchage ralentissent la dissolution des constituants du clinker. La phase aqueuse se sursature en chaux. Au fur et à mesure, les particules s'agglomèrent par floculation.	La silice FS, sous forme de verre (amorphe), est très réactive. En effet, elle est capable de fixer rapidement, en raison de la petitesse de ses particules, une quantité importante d'hydroxyde de calcium produite lors de l'hydratation du ciment. Ce processus pouzzolanique est meilleur pour une silice pure et pourrait dépendre de la teneur en alcalins (Na ₂ O, K ₂ O) qui doit être aussi faible que possible.	Du fait de leur structure cristalline, les calcites sont moins performantes que la silice. Néanmoins, elles sont réactives avec l'aluminate tricalcique du ciment C ₃ A et forment des composés carbo-aluminates ayant un certain pouvoir liant.		
	Bilan : éléments contribuant à une floculation importante	- formes variées des grains de ciment ; - charges électriques non saturées en surface ; - sédimentation des particules qui finissent par s'attirer du fait des forces de liaison intergranulaires ; - cinétique d'hydratation conduisant à la formation très rapide de deux types d'hydrates.	- phénomène de frittage pouvant provoquer une agglomération des particules de silice dès leur formation ; - taille des particules submicronique qui favorise les attractions électriques et la formation d'amas ; - en cas de conditionnement par granulation, possibilité d'apparitions très localisées de zones superficielles cryptocristallines ; - prépondérance des forces colloïdales ; - forte réaction pouzzolanique.	- Dimensions des grains de calcite arrondie à la frontière du domaine colloïdal ; - Surface spécifique suffisamment grande pour que l'on puisse suggérer qu'elle n'est pas complètement inerte.		- Finesse extrême des particules de calcite précipitée contribuant à accentuer l'effet physico-chimique et à complexifier la microstructure. Pour que celle-ci s'écoule, il faut parvenir à briser un nombre gigantesque de liens qui forment le réseau. - Zone superficielle irrégulière comportant des failles et des fractures accélérant le phénomène de dissolution.
- Réactivité de la calcite avec le C ₃ A qui est le minéral du ciment qui s'hydrate le plus vite.						

Tableau V-14 : Éléments d'analyse pour les mélanges ciment / eau / additions minérales.

Les bornes inférieures de b_{21} amènent les commentaires suivants :

- elles font tout d'abord apparaître l'ampleur et le sens de l'effet des additions : très défavorables pour les additions submicroniques (FS : $b_{21} > 1,765$; CP : $b_{21} > 2,348$), nettement moins pénalisants pour les additions microniques (CA : $b_{21} > 1$) ;
- elles apportent un éclairage sur la tendance des composants ultrafins à former une structure composée de flocons jointifs renfermant une quantité importante de vides en présence de ciment. Leur agglomération est notamment due à leurs caractéristiques colloïdales liées essentiellement aux forces de Van der Waals.

Mais d'autres facteurs interviennent.

Concernant la fumée de silice (FS), l'explication pourrait résider, tout d'abord dans sa propension à s'agréger en raison d'un phénomène de frittage survenant au moment de sa fabrication, ensuite dans l'apparition de ponts capillaires inter particulaires lorsque le matériau n'est pas entièrement saturé en liquide conduisant à la formation d'agrégats peu denses et, enfin dans sa forte réactivité avec le ciment qui provoquerait très rapidement la création des premières adhésions et l'apparition de frottement.

Concernant la calcite irrégulière (CP), ses caractéristiques de surface très irrégulières et sa finesse extrême engendreraient chez elle la création d'un nombre gigantesque de liens entre particules accentuée par la forme anguleuse de ces dernières ;

- elles indiquent que la calcite arrondie (CA) est, parmi les additions testées, celle qui remplit le mieux l'espace situé entre les grains de ciment. Sa taille indique néanmoins qu'elle se situe à la limite du domaine colloïdal et sa surface spécifique est suffisamment grande pour suggérer qu'elle n'est pas complètement inerte.

Pour conclure, le coefficient d'effet de paroi est bien susceptible d'être supérieur à 1 : l'introduction de quelques grains de ciment dans un environnement mono-modulaire de minéraux fins sans fluidifiant peut donc être à l'origine d'une désorganisation de ces derniers telle que la compacité du mélange binaire est inférieure à celle de la matrice hôte.

Seulement, les phénomènes mis en jeu sont essentiellement d'ordre chimique et colloïdal alors que notre modèle est basé sur des considérations purement géométriques. Par conséquent, même si les prédictions théoriques concernant l'obtention de valeurs supérieures à l'unité correspondent bien à une réalité physique, la désorganisation de l'empilement liée aux forces de surface et à la création de flocculats est telle que les hypothèses de constitution du modèle ne sont plus valables : nous ne nous situons plus du tout dans le cadre d'un état de densité maximum. La notion de compacité virtuelle est alors complètement dépassée. L'expérience permet de répondre par l'affirmative à la question posée en tête de ce paragraphe. Par contre, à l'interrogation : « dans le cadre des empilements virtuels de sphères, est-il possible que des considérations uniquement géométriques conduisent à des valeurs de $b_{21} > 1$? », aucun argument empirique ne permet d'apporter des éléments susceptibles de faire pencher la balance dans un sens ou dans l'autre.

5.2. AJUSTEMENT DES MODÈLES À DIFFÉRENTS TYPES DE MATÉRIAUX.

L'application des modèles de la théorie ROAD dans le cadre de sphères montre que, outre le rapport de tailles x qui est déterminant, la valeur de la compacité en pleine masse de la classe dominante β_2 ou β_1 a une incidence sur la quantification des coefficients d'effet de paroi b_{21} et de desserrement a_{12} , et que ce dernier est correctement estimé avec une taille de caverne $x_0 = 0,2$.

Le passage aux granulats réels indique qu'il existe une distinction entre résultats obtenus sur roulés et certains concassés (calcaires lorrains, concassés de Bendjerah). Les tailles de cavernes x_0 qui ont une incidence sur le coefficient d'effet de desserrement, vont pouvoir s'exprimer soit par une constante, soit en fonction de x selon les cas.

A partir des observations qui viennent d'être effectuées, nous allons proposer des fonctions d'interaction qui peuvent convenir aux différents types de matériaux rencontrés. Pour le moment, les compacités propres virtuelles ne sont qu'estimées. Nous affinerons davantage l'analyse lors de la validation du modèle d'empilement compressible à 4 paramètres (MEC 4-paramètres : coefficient d'effet de paroi b_{21} , coefficient d'effet de desserrement a_{12} , indice de serrage K , rapport critique de tailles de caverne x_0) dans le chapitre 7. Nous pourrions en effet nous adapter aux compacités propres réelles α_i de chaque tranche granulaire et à chaque procédé de remplissage auquel est associée une valeur de K .

5.2.1. Billes de verre.

Nous allons adopter une compacité propre virtuelle égale à $\beta = 0,68$, proche de celle que nous utiliserons dans le chapitre 7. Concernant l'effet de desserrement, nous ferons appel à une taille de caverne $x_0 = 0,2$, très proche de la valeur théorique $x_0 = 0,224$.

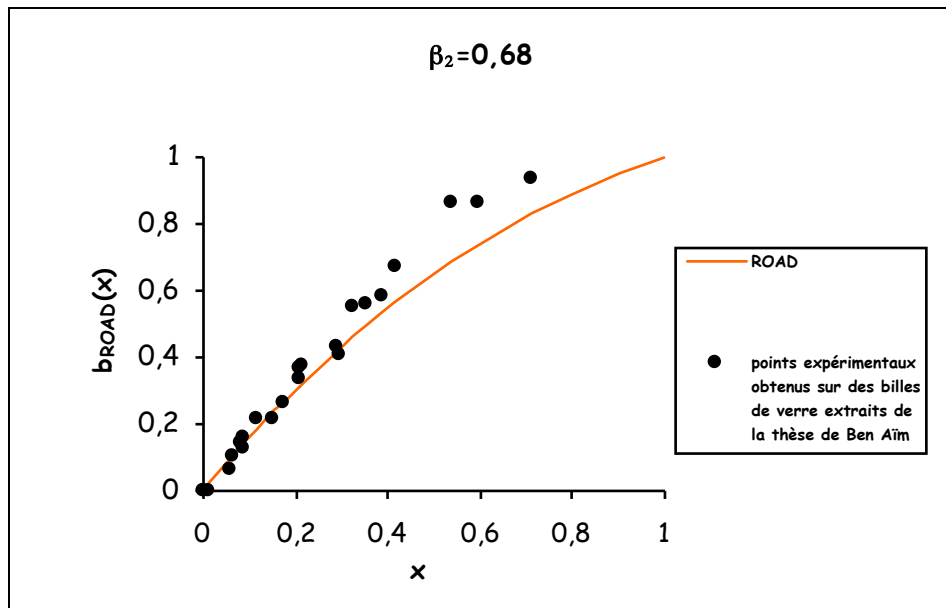


Figure V-24 : représentation de la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » pour des billes de verre en fonction du rapport x des grosseurs fins/gros pour $\beta_2=0,68$ d'après le modèle ROAD.

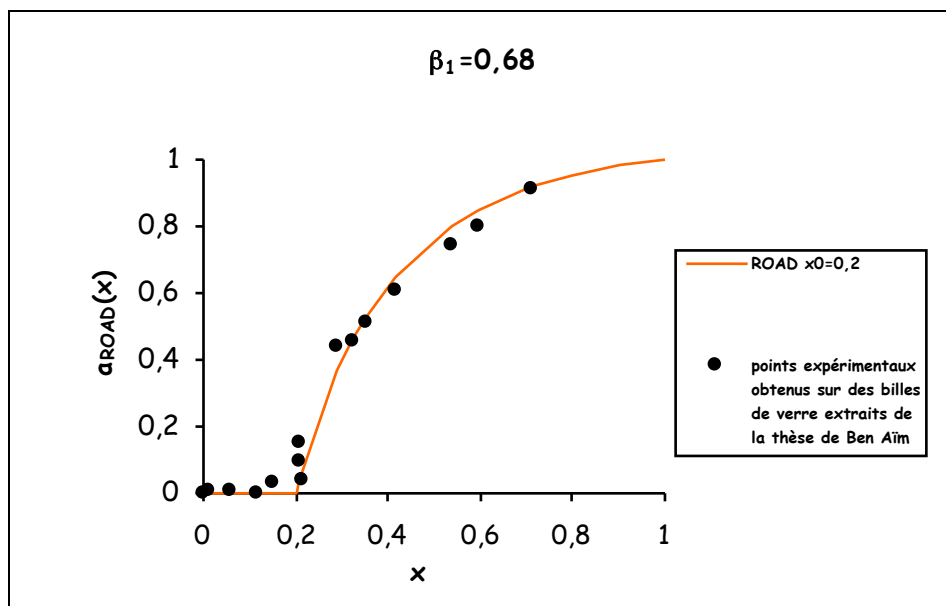


Figure V-25 : représentation de la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » pour des billes de verre en fonction du rapport x pour $\beta_1=0,68$ et pour une taille de cavaine $x_0=0,2$ d'après le modèle ROAD.

On observe une très bonne adéquation des valeurs fournies par la théorie ROAD avec les résultats expérimentaux obtenus sur des billes de verre pour le coefficient d'effet de desserrement : un rapport critique de tailles de cavaine $x_0 = 0,2$ semble parfaitement adapté.

Les prévisions sont également de bonne qualité pour l'effet de paroi pour les rapports de diamètres $x \leq 0,4$. Seules 3 valeurs concernant les faibles contrastes de tailles s'écartent de la courbe théorique.

5.2.2. Granulat roulé de la Loire.

Nous continuons à adopter une compacité propre virtuelle égale à $\beta = 0,68$, proche de celle que nous aurons dans le chapitre 7. L'optimisation du MEC 4-paramètres qui y sera menée va nous conduire à un rapport critique de taille de caverne x_0 proportionnel au rapport des tailles x : $x_0 = \frac{2x}{5}$.

Nous allons tout d'abord représenter la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » en fonction du rapport x des grosseurs fins/gros pour $\beta_2 = 0,68$.

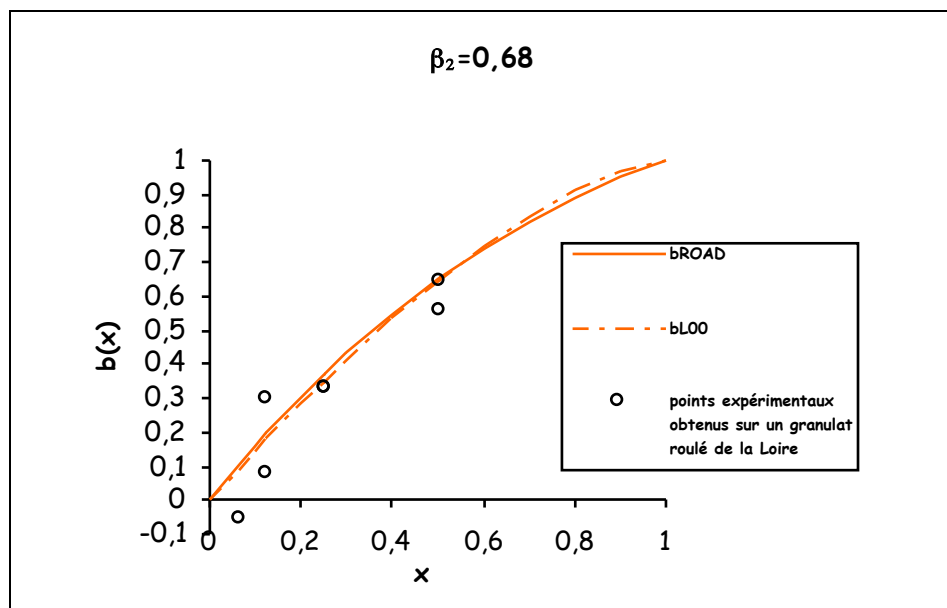


Figure V-26 : représentation de la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » pour un granulat roulé de la Loire en fonction du rapport x pour $\beta_2 = 0,68$ d'après le modèle ROAD. Comparaison avec la fonction b_{L00} de de Larrard présentée dans son ouvrage de référence « structures granulaires et formulation des bétons ».

On observe une très bonne concordance entre les courbes b_{ROAD} et b_{L00} . Rappelons que cette dernière, proposée par de Larrard, résulte en réalité d'une évolution. La première version figure dans sa thèse de 1988 (b_{L88} , expression II-16) dans le cadre du modèle linéaire de compacité (MLC). La seconde, qui correspond à celle de Caquot (b_{SLA} , expression II-17), a été introduite lors de la conception du modèle de suspension solide en 1994. La troisième, enfin, qui figure ici et qui nous sert de référence (b_{L00} , expression II-19) est celle qui est utilisée depuis la création du modèle d'empilement compressible (MEC). Plus de 10 années de maturation ont donc été nécessaires pour aboutir à son expression. Trois conditions aux limites ont été prises en compte pour l'établir. Il s'agit d'une version purement empirique.

Nous allons maintenant représenter la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » en fonction du rapport x des grosseurs fins/gros pour une taille de cavité $x_0 = \frac{2x}{5}$ et pour $\beta_1 = 0,68$.

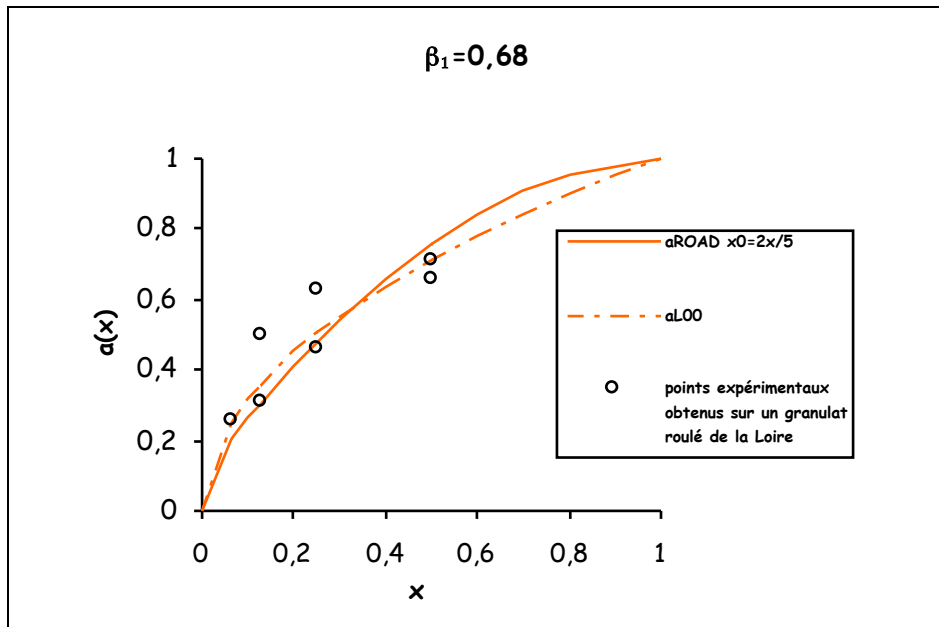


Figure V-27 : représentation de la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » pour un granulat roulé de la Loire en fonction de x pour une taille de cavité $x_0 = 2x/5$ et pour $\beta_1 = 0,68$ d'après le modèle ROAD. Comparaison avec la fonction a_{L00} de de Larrard présentée dans « structures granulaires et formulation des bétons ».

Là aussi, la ressemblance entre les courbes a_{ROAD} et a_{L00} est particulièrement frappante. Celle proposée par de Larrard a suivi la même évolution chronologique que celle concernant l'effet de paroi : a_{L88} , expression II-42, en 1988 dans le modèle linéaire de compacité, a_{SLA} , expression II-44, en 1994 dans le modèle de suspension solide et enfin a_{L00} , expression II-46, en 2000 dans le modèle d'empilement compressible. Trois conditions aux limites ont également été prises en compte pour établir ce modèle empirique.

5.2.3. Granulat concassé de Arnay-le-Duc.

Les compacités propres réelles des classes élémentaires du concassé de Arnay-le-Duc associées au mode de remplissage adopté vont conduire, chapitre 7, à choisir une compacité propre virtuelle égale à $\beta = 0,65$. Nous optons, par ailleurs, pour un rapport critique de taille de cavité x_0 constant : $x_0 = 0,1$.

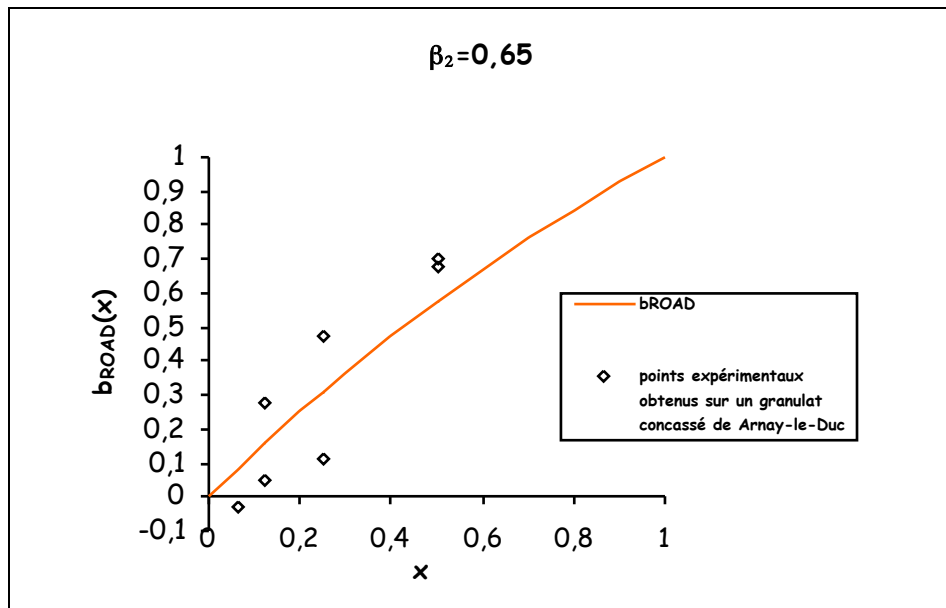


Figure V-28 : représentation de la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » pour un granulat concassé de Arnay-le-Duc en fonction du rapport x pour $\beta_2=0,65$ d'après le modèle ROAD.

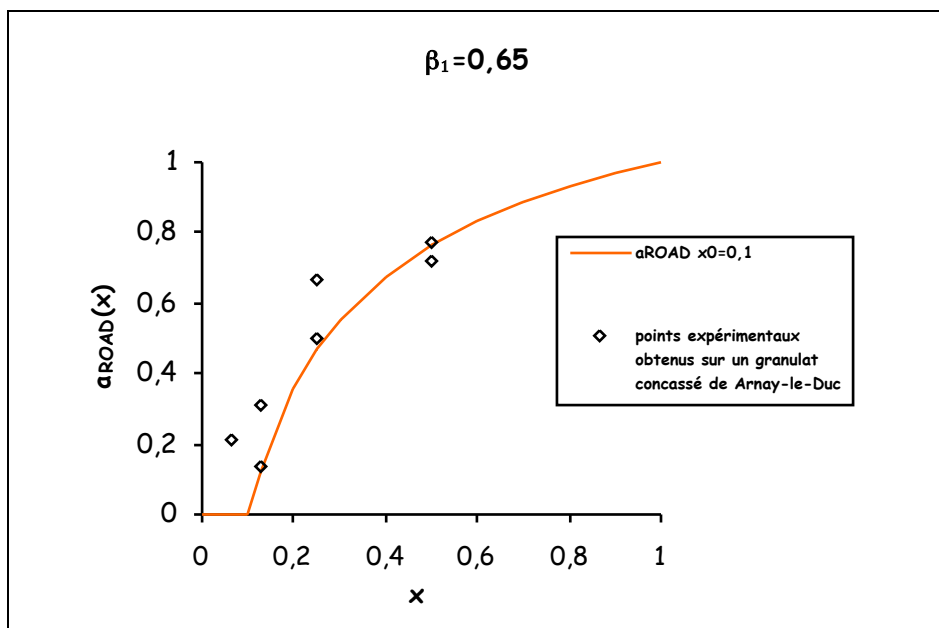


Figure V-29 : représentation de la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » pour un granulat concassé de Arnay-le-Duc en fonction du rapport x pour une taille de cavene $x_0=0,1$ et pour $\beta_1=0,65$ d'après le modèle ROAD.

Pour l'effet de paroi, la courbe obtenue se rapproche de la droite du modèle de Caquot : $b_c(x) = x$.

Pour l'effet de desserrement, le choix d'un rapport critique de taille de cavene x_0 constant semble donner satisfaction. Il va se poursuivre pour les autres concassés mais la valeur numérique va continuer à être adaptée à leur plus ou moins grande angularité et/ou rugosité.

5.2.4. Concassé du Bajocien Lorrain.

Les calcaires lorrains ont fait l'objet d'une étude très poussée par Lecomte et Zennir [LECO97]. Nous continuons avec une compacité propre virtuelle $\beta = 0,65$. En revanche, le rapport critique de taille de cavene évolue vers une valeur $x_0 = 0,02$ car le granulat développe des réactions légèrement plus fortes que le concassé de Arnay-le-Duc vers les forts contrastes de tailles pour l'effet de desserrement. Voici les courbes obtenues.

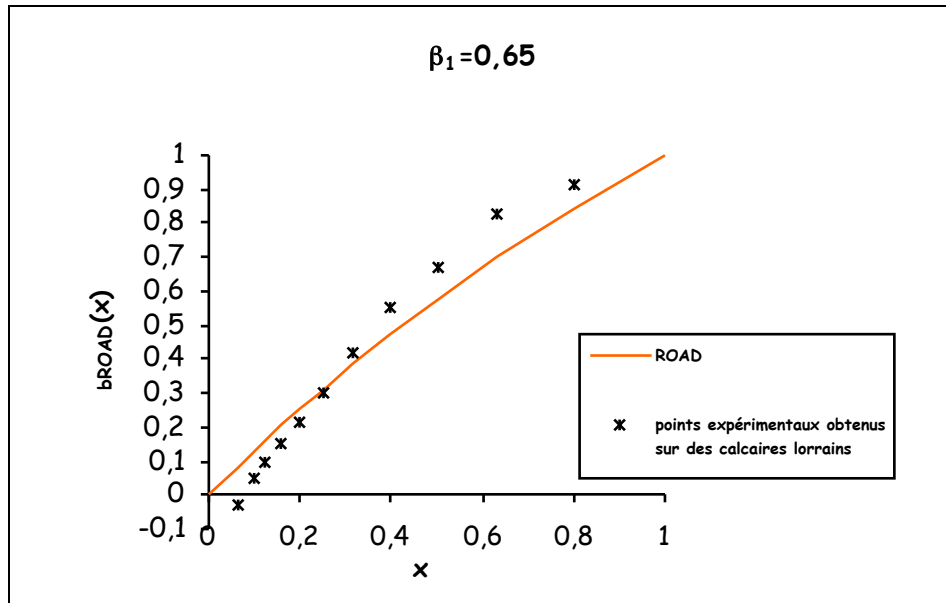


Figure V-30 : représentation de la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » pour un calcaire concassé du Bajocien Lorrain en fonction du rapport x pour $\beta_2=0,65$ d'après le modèle ROAD.

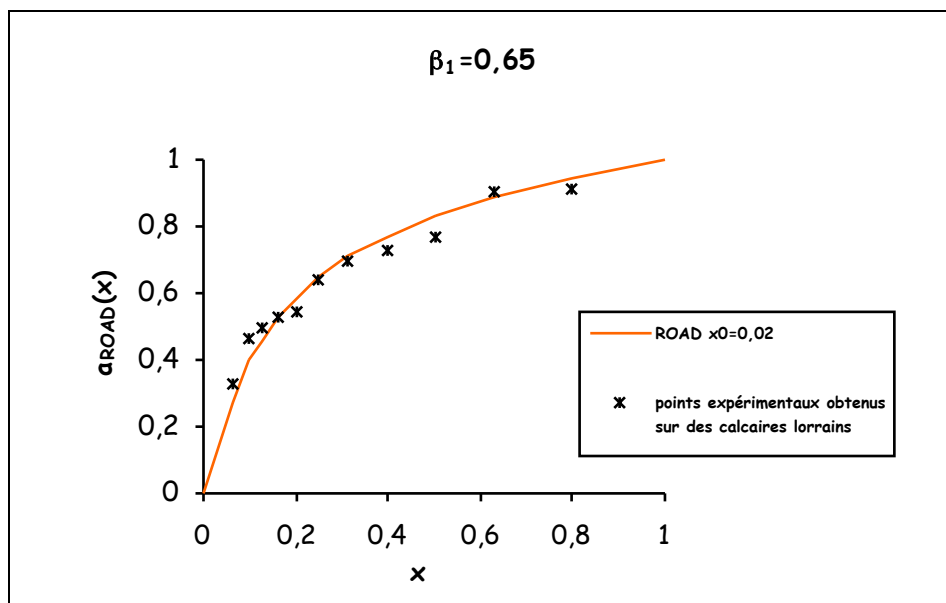


Figure V-31 : représentation de la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » pour un calcaire concassé du Bajocien Lorrain en fonction du rapport x pour une taille de cavene $x_0=0,02$ et pour $\beta_1=0,65$ d'après le modèle ROAD.

On note une très bonne adéquation de la courbe concernant l'effet de desserrement. Les fortes valeurs obtenues pour le coefficient le caractérisant sont probablement dues à une assez forte rugosité des grains [LEC097].

5.2.5. Granulat concassé de Bendjerah (Algérie).

La valeur de $\beta = 0,65$ est conservée. Le rapport critique de taille de caverne est porté à sa plus faible valeur : $x_0 = 0$.

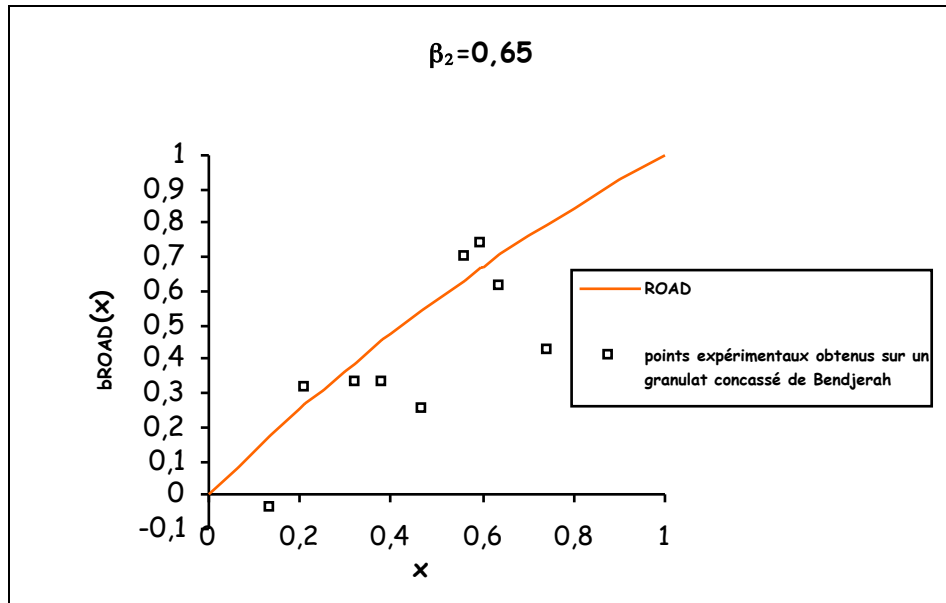


Figure V-32 : représentation de la fonction b_{ROAD} « effet de paroi » pour un granulat concassé de Bendjerah en fonction du rapport x pour $\beta_2=0,65$ d'après le modèle ROAD.

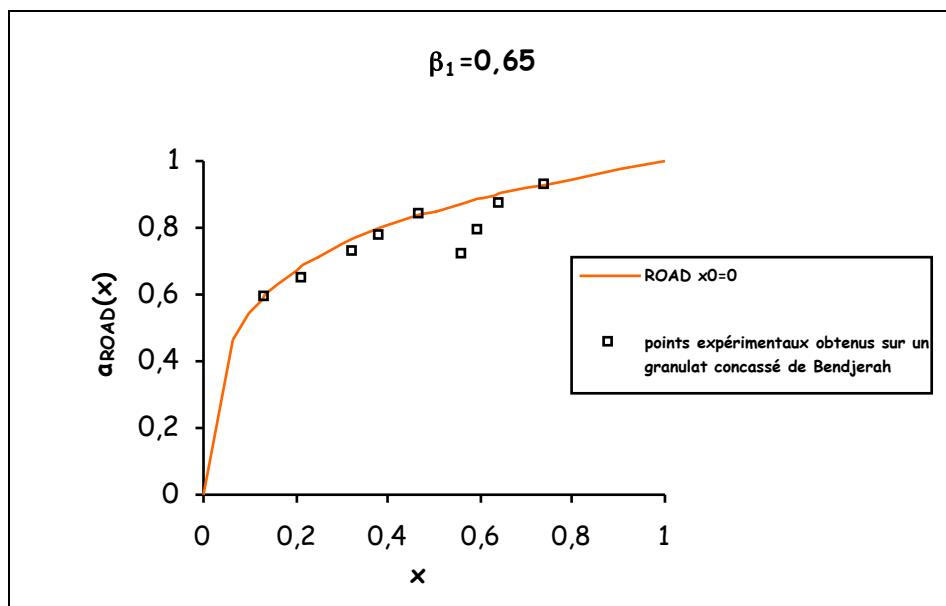


Figure V-33 : représentation de la fonction a_{ROAD} « effet de desserrement » pour un calcaire concassé de Bendjerah (Algérie) en fonction du rapport x pour une taille de caverne $x_0=0$ et pour $\beta_1=0,65$ d'après le modèle ROAD.

Les points expérimentaux correspondant à l'effet de paroi sont tellement dispersés qu'il est difficile de pouvoir affirmer que la courbe théorique convient. Mais elle est cohérente avec celle utilisée pour les autres granulats concassés.

La courbe prévue pour l'effet de desserrement, quant à elle, est plutôt bien calibrée avec une taille de cavene nulle. Cela signifie que les grains sont particulièrement rugueux et/ou anguleux et qu'ils sont arrangés de telle manière qu'aucun interstice suffisant n'est disponible entre les gros grains pour accueillir les grains fins sans provoquer un desserrement de la structure des premiers.

5.2.6. Récapitulatif.

Voici le récapitulatif des choix des rapports de tailles de cavernes critiques x_0 en fonction du type de granulat, de sa forme et de son état de surface.

Type de granulats	Concassés			Roulés arrondis (Loire)	Billes sphériques lisses
	Anguleux très rugueux (carrière de Sidi Abdelli (Algérie))	Anguleux rugueux (carrière du Bajocien lorrain)	Anguleux (carrière de Arnay-le-Duc)		
x_0	$x_0 = 0$	$x_0 = 0,02$	$x_0 = 0,1$	$x_0 = \frac{2x}{5}$	$x_0 = 0,2$

Tableau V-15 : rapports de tailles de cavernes critiques x_0 en fonction du type de granulat, de sa forme et de son état de surface.

5.3. CONCLUSIONS. LIMITES DU MODÈLE.

Les fonctions d'interaction sont bien connues des physiciens des milieux granulaires qui ont travaillé sur les empilements. Elles ont fait l'objet de multiples interrogations depuis les travaux précurseurs de Weymouth, de Westman, de Caquot ou de Mooney. La variété des études réalisées sur ce sujet, les calages satisfaisants réalisés à partir de lissages de données expérimentales auraient dû faire abandonner l'idée d'une nouvelle recherche sur l'effet de paroi et l'effet de desserrement.

Et pourtant, depuis la découverte un jour de 1990 de la thèse de François de Larrard [DELA88] et du modèle linéaire de compacité, entreprendre ce travail s'est avéré absolument passionnant. Après une étude bibliographique plus générale sur les modèles d'empilement, ces fameuses fonctions d'interaction sont devenues objets de tous les efforts. Les résultats obtenus laissent à penser qu'ils n'ont pas été vains et que le créneau trouvé pour mener à bien cette étude était intéressant.

La théorie permettant le calcul du coefficient d'effet de paroi b_{ROAD} est établie en considérant des particules sphériques et se situe entre la borne inférieure de Caquot et la borne supérieure de l'Empilement Hexagonal Compact. La cellule sphérique permettant de délimiter le contour extérieur de la zone perturbée par l'effet de paroi autour d'une grosse particule est issue des travaux de Ben-Aïm en 1970 et a ensuite été reprise par Suzuki et Oshima. La nouveauté introduite ici est que son diamètre dépend non seulement du rapport de tailles x mais également de la compacité résiduelle des petites sphères β_2 grâce à l'introduction d'un coefficient de perturbation k_p . Celui-ci est déterminé en écrivant que l'interaction est totale lorsque $x = 1$ ($b(1) = 1$) en résolvant une équation du 3^{ème} degré. C'est pourquoi nous avons dénommé cette théorie, théorie ROAD, pour ROund ADjustable cell (cellule sphérique à diamètre ajustable). Pour calculer la compacité des petites sphères dans la zone perturbée, il a été nécessaire de déterminer le nombre de celles-ci en contact avec une grosse particule. Nous avons proposé pour cela un modèle de calcul inédit à notre connaissance, le modèle des carrés sphériques, baptisé ainsi car chacun d'entre eux, convexe, matérialise l'emprise, sur le contour de la cellule de Ben-Aïm, de chacune des petites sphères plaquées contre la paroi d'une grosse, le pavage ainsi obtenu devant être le plus dense possible.

La méthode que nous proposons pour déterminer le coefficient d'effet de desserrement α_{ROAD} est théorique de par sa conception mais nécessite un calage des tailles de caverne x_0 . Imaginé à partir de sphères, notre modèle a puisé son inspiration dans deux théories présentées dans [DELA88] : le modèle linéaire de Stovall qui introduit la notion de taille de caverne et le modèle de décompaction locale. Ce dernier considère une dilatation du squelette des gros grains autour d'un petit insuffisamment fin pour s'insérer dans l'espace disponible. Il se produit alors une augmentation de la porosité du squelette des grosses particules au fur et à mesure de l'introduction des éléments fins, cette dernière se poursuivant jusqu'au basculement dans la zone des « petits dominants », à un point dénommé l'**eutectique**. Cette étape nécessite de déterminer le volume partiel des petits grains au moment de cette transition. **Ce faisant, le coefficient d'effet de desserrement dépend du coefficient d'effet de paroi. En reprenant cette idée, nous établissons un 1^{er} lien entre les deux types d'interaction granulaire.** Mais là où le modèle de décompaction locale fait appel à une cellule de référence tétraédrique pour déterminer la compacité des grosses sphères dilatées, nous avons choisi d'opter pour une **géométrie sphérique de type ROAD (ROund ADjustable cell : cellule sphérique à diamètre ajustable)** dans un souci de cohérence avec celle utilisée pour l'effet de paroi : le coefficient de perturbation k_p , qui dépend de la compacité résiduelle des grosses sphères $\beta_1 (= \beta_2)$, et le rapport de tailles x interviennent dans la définition de son diamètre. **Lorsque $\beta_1 = \beta_2$ et que $d_1 = d_2$, les cellules de référence utilisées pour l'effet de paroi et pour l'effet de desserrement sont identiques : la continuité des études concernant les effets de paroi et de desserrement est assurée par ce 2^{ème} lien. Elle est garantie par un 3^{ème} lien** grâce à la méthode utilisée pour dénombrer le nombre de grosses particules en contact avec une petite. **Le modèle des carrés sphériques fait à nouveau preuve de son efficacité** en permettant de retrouver deux valeurs singulières remarquables : 4 grosses sphères (dont les centres forment les sommets d'un tétraèdre) en contact avec une petite pour un rapport de tailles de 0,222 ($\frac{\sqrt{3} - \sqrt{2}}{\sqrt{2}} \approx 0,224$ étant la valeur exacte) et 12 sphères (dont les centres forment les sommets d'un polyèdre) en contact avec une sphère centrale de même diamètre (solution du fameux « Kissing Number Problem » (KNP) en dimension 3). Il assure ainsi la continuité entre plusieurs structures topologiques de disposition des centres des grosses sphères contre une petite qui va du tétraèdre à un polyèdre se rapprochant d'une sphère.

C'est pourquoi, selon nous, il permet d'unifier les différentes théories de l'effet de desserrement faisant appel à des cellules de référence diverses (tétraédrique ou cubique selon Dewar) en une seule plus globale : **la théorie ROAD** à cellule de référence sphérique, dans laquelle s'effectue le calcul de compacité des grosses particules dilatées, mais à structures topologiques diversifiées de disposition des centres des gros grains contre un petit, allant du tétraèdre jusqu'au polyèdre quasi-sphérique.

Terminons ce paragraphe par les limites du modèle. Elles sont de quatre ordres nous semble t'il :

- l'effet de desserrement apparaît à partir d'une proportion seuil. Il n'est donc pas, en toute rigueur, linéaire par rapport au volume de la classe granulaire fine à l'intérieur du domaine où les grosses particules constituent la classe dominante. Procéder à sa modélisation dans ces circonstances constitue donc une opération délicate. Le résultat obtenu laisse néanmoins penser que l'entreprise était possible.
- l'intégralité de l'étude proposée est menée sur des mélanges binaires en considérant que les deux tranches granulaires prises en compte (granulats fin et gros) présentent des compacités égales.
- les conditions aux limites $\left. \frac{\partial \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=1} = \mathbf{0}$ et $\left. \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=1} = \mathbf{0}$ ne sont pas parfaitement respectées avec les fonctions $\mathbf{b}_{\text{ROAD}}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{a}_{\text{ROAD}}(\mathbf{x})$. Mais cela n'altère en rien les capacités prédictives de la théorie ROAD si l'on tient compte de sa validation par rapport aux résultats expérimentaux.
- la modélisation est d'autant meilleure lorsqu'elle prend bien en compte les variables principales liées au matériau et que celui-ci respecte le mieux possible les hypothèses du modèle. Une de celles-ci est la forme sphérique des particules. Elle est, bien entendu, impossible à respecter pour un granulat concassé. C'est pourquoi, à notre sens, nous n'avons pas constaté d'accroissement du coefficient d'effet de paroi avec la compacité propre de la classe fine (pour un contraste de taille donné) pour les concassés de Arnay-le-Duc.

CHAPITRE 6

ÉTUDE DES COEFFICIENTS D'INTERACTION PAR SIMULATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE.

L'objectif de ce chapitre va consister à déterminer les coefficients d'interaction liés à l'effet de paroi et à l'effet de desserrement en utilisant les outils de la simulation numérique discrète. Il va donc être nécessaire de déterminer des compacités d'empilements de billes monodispersées ou de mélanges binaires pour différents rapports de tailles de grains.

Cette méthodologie implique de définir d'une part l'état de compacité que l'on souhaite atteindre et d'autre part les outils de simulation numérique discrète à mettre en œuvre pour y accéder.

Ces derniers connaissent, à l'heure actuelle, un développement considérable lié, d'une part, aux progrès enregistrés en terme de rapidité de calcul et, d'autre part, grâce aux résultats particulièrement encourageants obtenus dans le domaine des assemblages de grains. Ces succès sont notamment dus à l'incorporation, dans les algorithmes, de paramètres liés aux actions existant entre particules que l'on peut faire fluctuer indéfiniment alors qu'ils sont expérimentalement peu accessibles et souvent de façon bien limitée. Citons notamment le coefficient de frottement et le coefficient de restitution élastique. La simulation numérique devient alors un véritable banc de tests permettant de mettre le mélange granulaire en situation d'observation et d'étudier son comportement en fonction des forces extérieurement appliquées ou des déplacements imposés. Il est alors possible de mieux appréhender les phénomènes à l'origine de certains dysfonctionnements rencontrés dans le traitement de la matière granulaire (ségrégation, effets de voûte, éboulements, etc), les secteurs concernés étant multiples (minier, matériaux de construction) et parfois à haute valeur ajoutée (industrie pharmaceutique, chimie fine, alimentation).

6.1. L'ÉTAT DE COMPACITÉ MAXIMALE.

Notre objectif initial consistait à étudier les effets de paroi et de desserrement dans le cas des empilements virtuels susceptibles d'être atteints si l'on pouvait déposer chaque grain à son emplacement idéal, manuellement, tel un maçon édifiant son mur de pierres sèches. Il s'agissait en effet de se placer dans le cadre des hypothèses de constitution du modèle d'empilement compressible. Notre première idée fut donc de faire appel à la simulation numérique pour faire « cristalliser » les mélanges testés. Seulement, nos premiers tests ont rapidement montré que si ce but pouvait être atteint dans le cas monodisperse, le cas bidisperse, au contraire, ne favorise pas une telle apparition. Cette tendance a notamment été constatée par Hermes et Dijkstra [HERM10] pour lesquels la polydispersité fait obstacle à la cristallisation. Par ailleurs, il s'est avéré que certains algorithmes, qui partent d'une configuration initialement désordonnée, sont dans l'impossibilité « entropique » d'accéder à un état cristallisé.

Dès lors, il s'est avéré indispensable de répondre à deux questions intimement liées :

- quel type d'empilement étudié ?
- comment définir la compacité maximale ?

La réponse à ces questions est délicate dans la mesure où les empilements de sphères étudiés sont susceptibles de présenter des structures très diversifiées. Dès 1970, Ben Aïm [BENA70], qui fut l'un des premiers à modéliser l'effet de paroi, se réfère à la cristallographie des édifices moléculaires et à la notion de solide polycristallin en considérant qu'un empilement désordonné de grains sphériques est, en réalité, un empilement désordonné d'agrégats de grains au sein desquels ces derniers se trouvent régulièrement disposés. Dans cette optique, il imagine deux cas limites. D'une part, l'agrégat présente une dimension moyenne égale à celle du récipient qui le contient : il s'agit d'un empilement ordonné. D'autre part, il se limite à une sphère centrale et à la première couche qui l'entoure : dans ce cas, le désordre est maximal. Plus généralement, il est possible de faire référence à un ordre à grande distance et à un ordre à courte distance.

L'ordre à grande distance concerne les cristaux périodiques et les cristaux aperiodiques. Les premiers sont constitués de motifs, formés par des groupements d'atomes, qui se répètent périodiquement. Les seconds, au contraire, ne présentent pas de périodicité de translation.

L'ordre à courte distance est révélateur d'un état désordonné.

Les travaux pionniers de Westman et Hugill, de Rice, de Bernal et de Scott ont permis d'aboutir à l'état d'empilement amorphe aléatoire (RCP « Random Close Packing » en anglais) [MARI11]. Celui-ci est traditionnellement associé à la compacité maximale de l'assemblage aléatoire avec une valeur $\phi_{RCP} \approx 0,64$ pour des sphères de taille unique sans frottement. Ces recherches ont conduit, par la suite, à de nouvelles découvertes dont celle dite de la transition de blocage. Elles ont notamment contribué à s'interroger sur la pertinence de l'existence de l'état RCP et d'une valeur universelle de sa densité pour plusieurs raisons :

- dans quel cadre théorique définir précisément cet état ?
- prétendre qu'un empilement aléatoire atteint une compacité maximale est-il significatif dans la mesure où la variation infinitésimale d'un paramètre peut conduire à une augmentation infime de la densité de ce supposé état RCP ?
- celui-ci n'est-il pas tributaire du protocole opératoire de génération de l'empilement ?

C'est pourquoi au concept RCP a été opposé l'état aléatoire bloqué maximum. Plutôt que de parler d'empilement désordonné le plus dense, certains chercheurs proposent d'utiliser l'acception d'empilement bloqué le plus désordonné (empilement MRJ : maximally random jammed state). Dans cette optique, un scalaire d'ordre métrique ψ a été introduit pour mesurer la quantité d'ordre dans le mélange. Mais sa définition pose elle-même problème et le concept introduit doit encore être précisé. Finalement, il reste à répondre aux deux questions suivantes : comment définir un système bloqué ? Comment définir un état de compacité maximale ?

6.1.1. Comment définir un système bloqué ?

En 2003, O'Hern, Silbert, Liu, Nagel (OSLN) [OHER03] proposent un concept unificateur du terme « blocage » pour une gamme variée de systèmes physiques, incluant les empilements de sphères dures. Pour cela, ils font appel à la notion de « point J » (Jaming point) dans un espace de paramètres : Densité / Température / Taux de cisaillement qui permet de distinguer une densité critique pour un cisaillement et une température nuls. En dessous de celle-ci, un système à interactions répulsives se comporterait comme un liquide. Au-dessus, il serait considéré solide. Quelques années auparavant, Torquato et Stillinger avaient introduit une hiérarchie du blocage comprenant trois niveaux : localement, collectivement et strictement bloqué, susceptibles d'être reliés à des définitions utilisées dans la littérature mathématique consacrée aux empilements, ces derniers pouvant être qualifiés par exemple de « rigide » ou de « stable ».

Ces différentes approches montrent bien que la notion de système bloqué peut être abordée sous différents angles. Nous allons l'examiner :

- du point de vue **pseudo-énergétique** tout d'abord pour fournir un cadre à la définition ;
- du point de vue de la **statique**, intimement lié au précédent, afin de mettre en évidence le nombre nécessaire de contacts entre particules pour bloquer l'empilement ;
- du point de vue des **modes normaux de vibration**.

La notion de paysage **pseudo-énergétique** a été introduite par Krzakala et Kurchan [KRZA07] et reprise par Romain Mari [MARI11]. Considérons des sphères dures suffisamment petites de diamètre d , disposées aléatoirement dans un récipient. Faisons les grossir de façon continue sans qu'elles ne se superposent, en les déplaçant un minimum si nécessaire. La contrainte à satisfaire par le système concerne le diamètre d qui doit atteindre un maximum sans créer de recouvrement entre particules. Appelons le d_{\max} . L'opposé de ce dernier constitue la « pseudo-énergie » d'un point de l'espace des configurations représentatif de la procédure Point J. En supposant l'obtention d'une fonction continue, le processus consiste à se positionner continuellement à la bordure d'une des « cavités » de l'espace des configurations possibles qui représentent les parois du paysage pseudo-énergétique. A chaque fois que les sphères subissent un gonflement, la « cavité » se rétrécit, une « descente » se produit dans l'algorithme. L'image inversée correspond à celle du naufragé, isolé sur une île et confronté à une montée des eaux, qui doit monter par paliers minimaux vers l'un des sommets pour survivre. Le paysage pseudo-énergétique ainsi formé est très accidenté et présente bon nombre de minima locaux.

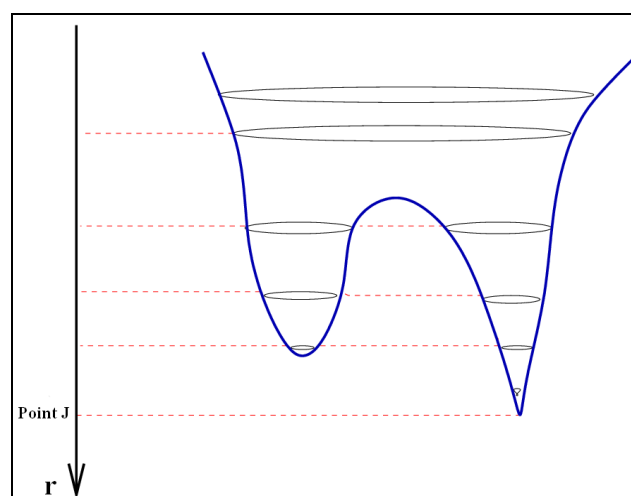


Figure VI-1 : paysage de pseudo-énergie d'après [KRZA07]. Le point J correspond au minimum local.

D'un point de vue pseudo-énergétique, une configuration est considérée bloquée s'il est impossible d'en trouver une autre qui puisse fournir une fraction volumique supérieure sans enfreindre la contrainte de non-chevauchement des particules. Elle constitue alors un minimum du paysage.

Le point de vue de la **statique** présente un intérêt certain dans la mesure où cette science très ancienne à laquelle ont contribué des personnalités aussi brillantes que Galilée, Newton, Leonard de Vinci, n'a été réellement appliquée pour étudier la stabilité des empilements granulaires qu'à la fin du 20^{ème} siècle.

Le problème est le suivant : dans un espace de dimension 3, combien de contacts entre N particules doivent-ils être recensés pour que le système soit bloqué en l'absence de frottement ? En d'autres termes, comment définir un état d'équilibre stable dans un milieu granulaire constitué de billes qui interagissent par des contacts quasiment ponctuels ? Les lois caractérisant ces derniers doivent alors nécessairement relier des efforts et certains mouvements relatifs entre particules. Pour de faibles incréments, il est possible de linéariser ces relations et de mettre en évidence certaines matrices, dont celle de rigidité, en adéquation avec celle de la théorie du même nom. Puisqu'il s'agit d'associer ici des histoires de géométrie et de mécanique, nous allons étendre aux assemblées granulaires des notions que l'on rencontre habituellement lors de l'étude de la stabilité d'ouvrages du génie civil, comme des treillis par exemple.

Chacune des N sphères de l'assemblée présente un nombre de degrés de liberté $n_i = 3$ (translations) en l'absence de frottement. Toutes les rotations sont en effet considérées comme des mécanismes : leur retrait de la série des degrés de liberté est possible dans la mesure où la géométrie du système n'est pas affectée et qu'elles n'engendrent aucun déplacement relatif au niveau des contacts [ROUX10]. Contenues dans une cellule parallélépipédique, certaines particules sont susceptibles de se retrouver en contact avec les parois. Il est alors utile de faire appel à des conditions aux limites périodiques et d'avoir recours à une pression de confinement comme paramètre de contrôle. Les longueurs L_1, L_2, L_3 des côtés de la boîte subissent ainsi de légères variations.

Le nombre de degrés de liberté associés aux parois vaut, dans ce cas, $n_g = 3$, alors que celui associé au système est porté à: $N_\ell = n_\ell \times N + n_g = 3N + 3$.

Intéressons-nous maintenant à la mécanique de l'assemblage granulaire. Définissons pour cela un binôme de grains sphériques i et j en contact ou qui pourraient l'être dans un avenir très proche [AGNO07]. Le premier est considéré comme l'élément origine, le second comme l'élément extrémité. Toujours en l'absence de frottement et de rotation des particules, le déplacement relatif $\overrightarrow{\delta u_{ij}}$ de leur point de contact correspond à l'incrément de déflexion normale des surfaces en contact. Il s'obtient en déterminant la différence entre les déplacements des centres de chacune d'entre elles $\overrightarrow{\tilde{u}_i}$ et $\overrightarrow{\tilde{u}_j}$, exprimées de manière à satisfaire aux conditions de périodicité, et en ajoutant un terme destiné à prendre en compte les variations de dimensions de la cellule.

$$\text{VI-1} \quad \overrightarrow{\delta u_{ij}} = \overrightarrow{\tilde{u}_i} - \overrightarrow{\tilde{u}_j} + \underline{\underline{\varepsilon}} \cdot \overrightarrow{r_{ij}}$$

$\overrightarrow{r_{ij}}$ désigne le vecteur dont l'origine correspond au centre de la 1^{ère} sphère i et l'extrémité au centre de la plus proche image de la 2^{ème} sphère j compte tenu des conditions de périodicité adoptées.

$\underline{\underline{\varepsilon}}$ représente le tenseur de déformation qui s'exprime sous la forme diagonale suivante :

$$\text{VI-2} \quad \underline{\underline{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} -\frac{\delta L_1}{L_1} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\delta L_2}{L_2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta L_3}{L_3} \end{pmatrix}$$

δL_1 , δL_2 , δL_3 sont les variations infinitésimales des longueurs des côtés de la boîte parallélépipédique. Elles correspondent aux $n_g = 3$ degrés de liberté liés aux conditions aux limites. Les conventions utilisées ici correspondent à celles de la mécanique des sols, à savoir que les raccourcissements s'expriment de façon positive.

Une technique particulièrement intéressante consiste alors à exprimer le vecteur des déplacements relatifs liés aux contacts $\vec{\delta u}$ à partir d'un vecteur déplacement unique \vec{U} regroupant les coordonnées des déplacements de l'ensemble des particules, de 1 à N , et les n_g degrés de liberté liés aux conditions aux limites. La dimension de $\vec{\delta u}$ étant de $3N_c$, N_c représentant le nombre de contacts intergranulaires, et celle de \vec{U} étant égale au nombre total de degrés de liberté $N_\ell = 3N + 3$ en l'absence de frottement, le passage de \vec{U} à $\vec{\delta u}$ s'effectue par l'intermédiaire d'une matrice \underline{G} de dimensions $3N_c \times N_\ell$, permettant d'aboutir à une application linéaire $\vec{U} \mapsto \vec{\delta u}$:

$$\text{VI-3} \quad \vec{\delta u} = \underline{G} \cdot \vec{U}$$

Il est évidemment possible d'établir un lien avec la mécanique des structures et de dénommer la matrice \underline{G} , matrice de rigidité, que l'on associe aux particules et à leurs contacts. Dans ce cadre, il est approprié de parler de mécanique des structures granulaires. Le noyau de \underline{G} représente le degré d'indétermination des déplacements relatifs ou degré d'hypostaticité k . Il correspond à l'espace des vecteurs déplacements \vec{U} pour lesquels aucun déplacement relatif ne se produit [ROUX10]. De tels déplacements se nomment des mécanismes.

En chaque contact, une force \vec{F}_{ij} est transmise de i vers j . Elle comprend uniquement une composante normale puisque les particules ne frottent pas l'une sur l'autre. De manière quelque peu similaire à la méthode utilisée pour les vecteurs déplacements, il est possible de relier le vecteur des forces liées aux contacts \vec{f} à un vecteur des efforts extérieurs unique \vec{F}^{ext} regroupant un effort externe sur chacun des grains, de 1 à N , et une force extérieure associée à chacun des n_g degrés de liberté liés à la cellule de simulation. La dimension de \vec{f} étant de $3N_c$, et celle de \vec{F}^{ext} étant égale au nombre total de degrés de liberté $N_\ell = 3N + 3$ en l'absence de frottement, le passage de \vec{f} à \vec{F}^{ext} s'effectue par l'intermédiaire d'une matrice \underline{H} de dimensions $N_\ell \times 3N_c$, permettant d'aboutir à une application linéaire $\vec{f} \mapsto \vec{F}^{\text{ext}}$:

$$\text{VI-4} \quad \vec{F}^{\text{ext}} = \underline{H} \cdot \vec{f}$$

La matrice \underline{H} ne constitue en réalité que la matrice transposée de \underline{G} , d'après le théorème des travaux virtuels :

$$\text{VI-5} \quad \underline{H} = {}^T \underline{G}$$

Le degré d'indétermination des forces, que nous appellerons par la suite degré d'hyperstaticité, correspond à la dimension du noyau de ${}^T \underline{G}$. Il est noté h . Si les coordonnées de $\bar{\mathbf{f}}$ représentent les inconnues dans le système d'équations VI-4, et si le chargement $\bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}$ est équilibré, alors les forces intérieures constituent un espace de solutions affine de dimension h .

A partir de théorèmes élémentaires d'algèbre linéaire [AGNO07], il est possible d'en déduire une relation générale faisant intervenir le nombre total de degrés de liberté, le nombre de contacts intergranulaires, le degré d'indétermination des déplacements relatifs ou degré d'hypostaticité, et le degré d'indétermination des forces ou degré d'hyperstaticité, dans le cas de sphères sans frottement:

$$\text{VI-6} \quad N_c + h = N_c + k$$

Un empilement isostatique sera par conséquent défini comme un système dépourvu de forces et de déplacements relatifs indéterminés. Excepté dans le cas de mécanismes triviaux, la matrice de rigidité obtenue est alors carrée et inversible. En d'autres termes, à chaque chargement correspond un ensemble unique de forces de contact en équilibre. De la même façon, à chaque vecteur des déplacements relatifs liés aux contacts correspond un vecteur déplacement unique. Excepté dans le cas où il se déplacerait comme un corps rigide, le squelette granulaire présente une isostaticité pouvant s'exprimer comme une absence simultanée d'hyperstaticité et d'hypostaticité. Cependant, les deux propriétés n'ont pas du tout la même origine. L'absence d'hyperstaticité ($h = 0$) s'explique par le désordre générique régnant dans la géométrie de l'empilement [AGNO07], à condition toutefois que la pression de confinement exercée sur la boîte reste suffisamment faible ou que les contacts entre particules soient suffisamment rigides [ROUX10]. A cet égard, l'exemple d'une chaise à 4 pieds est évocateur : elle est généralement bancal en raison de la rigidité de ses contacts avec le sol. Ce dernier étant caractérisé par de petites irrégularités, les pieds présentant de légers défauts et des longueurs légèrement différentes, l'obtention d'un système hyperstatique à 4 contacts est impossible. Il s'agit ici d'un problème de géométrie.

L'absence d'hypostaticité, quant à elle, est réservée aux particules parfaitement sphériques, des grains avec des formes très diverses pouvant en effet se mettre en place suivant des mécanismes pourtant stables. Une autre condition est liée au fait que les forces régnant au niveau des contacts et s'exerçant sur les particules doivent correspondre à des efforts de compression. Enfin, elle s'applique au seul squelette granulaire.

Dans les assemblées de particules en effet, certaines d'entre elles ne transmettent aucun effort : il s'agit des « **particules flottantes** ». Non bloquées, elles ont la possibilité de se mouvoir à l'intérieur d'enceintes constituées par leurs congénères immobiles et ne sont pas en contact permanent avec ces dernières. Soit N_0 leur nombre et p_0 leur proportion. L'équilibre ne peut être atteint que si l'on fait intervenir dans les calculs les particules capables de porter des forces. Elles sont au nombre de $N^* = N - N_0$ et leur nombre de coordination égal à : $NC^* = \frac{NC}{1 - p_0}$. Ce dernier s'obtient

alors en écrivant que les degrés de liberté doivent être contraints par les $N_c = \frac{NC^* N^*}{2}$ contacts. On utilise la relation VI-6 dans la limite des grands systèmes pour lesquels k peut être négligé (excepté pour les mécanismes triviaux pour lesquels $k = k_0$). Comme par ailleurs $h \geq 0$, l'expression $N_c + h = N_c + k$ conduit, pour un nombre important de particules, à l'inégalité:

$$3N^* \leq \frac{NC^* N^*}{2}, \text{ soit :}$$

$$\text{VI-7} \quad NC^* \geq 6 \text{ pour un empilement stable.}$$

S'il s'agit d'une inégalité stricte, le système est hyperstatique. C'est le cas, par exemple, du réseau cubique à faces centrées pour lequel $NC^* = 12$. Cette situation n'est en réalité possible que si les sphères présentent exactement le même diamètre.

S'il s'agit d'une égalité :

$$\text{VI-8} \quad NC^* = NC_{iso}^* = 6$$

le nombre de contraintes est juste suffisant pour que la structure de l'empilement soit rigide, capable dans ce cas de supporter une contrainte mécanique.

Du point de vue de la statique, une configuration est considérée stable lorsque les degrés de liberté recensés sont contraints par un nombre suffisant de contacts. Dans un grand système constitué de billes non frottantes, c'est le cas lorsque le nombre de coordination est supérieur ou égal à 6 à condition, toutefois, de laisser de côté les particules « flottantes ». S'il s'agit d'une inégalité stricte, le système est hyperstatique. S'il s'agit d'une égalité, il est isostatique. Pour être stable, il devra être dépourvu d'hypostaticité. On définit pour cela un degré d'hypostaticité qui doit être nul et qui s'exprime comme étant le degré d'indétermination des déplacements relatifs liés aux contacts entre particules. Il est représenté par le noyau d'une matrice \underline{G} analogue à une matrice de rigidité utilisée en mécanique des structures. Dans ce cadre, il est approprié de parler de mécanique des structures granulaires. L'absence d'hypostaticité est donc garantie pour les particules parfaitement sphériques appartenant au squelette granulaire et soumises à des forces de compression au niveau de leurs 6 contacts, dans la limite rigide.

Le point de vue des **modes normaux de vibration** est un concept particulièrement utilisé dans le domaine de la matière condensée, qui correspond, pour des basses températures, aux modes de vibration du système. Les mouvements des particules d'une assemblée granulaire peuvent être classés en trois catégories : les translations, les rotations mais également les vibrations. Un mode normal de vibration peut être présenté comme un mode où toutes les particules vibrent, à la même fréquence mais avec des amplitudes ou des directions différentes, en passant simultanément par leur position d'équilibre.

Dans les milieux granulaires, les lois de contact entre particules peuvent s'exprimer sous forme incrémentale. Des paramètres de raideur sont alors mis en évidence.

En chaque contact, une force \vec{F}_{ij} est transmise de i vers j . En l'absence de frottement, elle comprend uniquement une composante normale : $\vec{F}_{ij} = N_{ij} \vec{n}_{ij} + 0 \vec{t}_{ij}$. On fait alors appel à une matrice des raideurs locales qui permet de relier le vecteur incrément des forces de contact $\vec{\Delta f}$ au vecteur des déplacements relatifs liés aux contacts $\vec{\delta u}$:

$$\text{VI-9} \quad \vec{\Delta f} = \underline{\underline{K}} \cdot \vec{\delta u}$$

La matrice $\underline{\underline{K}}$, de dimensions $3N_c \times 3N_c$, est une matrice partitionnée car elle ne permet pas de coupler les différents contacts. Il est commode de l'écrire en utilisant $\underline{\underline{n}}_{ij}$ comme premier vecteur de base unitaire [AGNO07]. Dans les cas simples, la partition 3×3 de $\underline{\underline{K}}$ correspondant au contact i, j , considéré comme élastique linéaire et sans frottement, permet d'aboutir à la matrice $\underline{\underline{K}}_{ij}^e$ ($\underline{\underline{K}}_{ij}^e$ pour un contact élastique). Celle-ci s'exprime en fonction des raideurs normale K_N^{ij} et tangentielle K_T^{ij} , cette dernière étant nulle $K_T^{ij} = 0$:

$$\text{VI-10} \quad \underline{\underline{K}}_{ij}^e = \begin{pmatrix} K_N^{ij} & 0 & 0 \\ 0 & K_T^{ij} = 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_T^{ij} = 0 \end{pmatrix}$$

La matrice $\underline{\underline{K}}$ est une matrice des raideurs de contact et ne doit, en aucun cas, être confondue avec la matrice de rigidité $\underline{\underline{G}}$.

Reprenons maintenant le vecteur des efforts extérieurs $\overline{\underline{\underline{F}}^{ext}} = \underline{\underline{H}} \cdot \vec{f} = \underline{\underline{G}}^T \cdot \vec{f}$. Dans le cas de petits déplacements associés à un incrément de charge $\overline{\underline{\underline{\Delta F}}^{ext}}$, il est admissible d'écrire, en se limitant au premier ordre de $\overline{\underline{\underline{U}}}$, que :

$$\text{VI-11} \quad \overline{\underline{\underline{\Delta F}}^{ext}} = \underline{\underline{K}} \cdot \overline{\underline{\underline{U}}}$$

La matrice des raideurs totales $\underline{\underline{K}}$ peut se décomposer en deux parties, $\underline{\underline{K}}^{(1)}$ et $\underline{\underline{K}}^{(2)}$, que l'on peut dénommer respectivement matrices dynamique et géométrique, la seconde étant liée à l'évolution de la géométrie de l'empilement.

A partir des équations VI-3, VI-9, VI-4 et VI-5, il est possible d'établir l'expression suivante de $\underline{\underline{K}}^{(1)}$:

$$\text{VI-12} \quad \underline{\underline{K}}^{(1)} = \underline{\underline{G}}^T \cdot \underline{\underline{K}} \cdot \underline{\underline{G}}$$

L'intérêt de cette décomposition est de séparer les effets de la loi caractérisant le contact, contenus dans $\underline{\underline{K}}$, et ceux liés au réseau des contacts, contenus dans $\underline{\underline{G}}$.

Au fur et à mesure qu'il se rapproche de son état d'équilibre final, le milieu granulaire est soumis à divers modes normaux de vibration qui se traduisent par une oscillation erratique des forces de contact \vec{f} [ROUX10]. Lorsque la stabilité est atteinte, le réseau de contacts portant les forces est dépourvu de mécanismes, excepté celui, trivial, consistant au mouvement de translation de l'ensemble des grains considéré comme un corps rigide.

Les mécanismes coïncident avec les **modes mous** de la matrice dynamique des raideurs $\underline{\underline{K}}^{(1)}$ (c'est-à-dire les éléments de son noyau). La matrice géométrique $\underline{\underline{K}}^{(2)}$, quant à elle, présente une influence négligeable par rapport à la précédente.

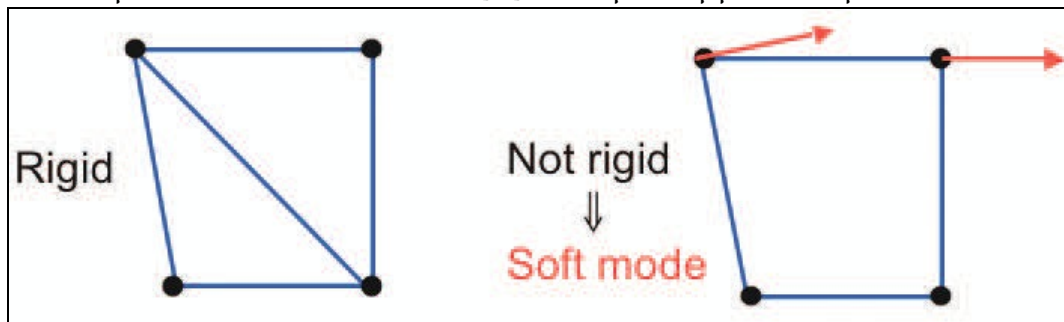


Figure VI-2 : illustration d'un réseau rigide et d'un réseau flottant d'après [WYAR05]. Les flèches indiquent l'apparition d'un mode mou.

Le concept des modes normaux a été appliqué aux empilements se situant près du Point J par O'Hern et ses collaborateurs qui ont fait appel à la notion de densité des états $D(\omega)$. $D(\omega)d\omega$ est proportionnel au nombre d'états avec des pulsations comprises entre ω et $\omega + d\omega$. Ici, ω fait référence aux pulsations des modes normaux de vibration des éléments constitutifs du réseau. Pour les plus basses d'entre elles, à condition d'être dans un milieu élastique, la distribution spectrale $D(\omega)$ devrait présenter une dépendance en ω^2 en dimension d'espace 3 d'après la loi de Debye. C'est effectivement le constat effectué pour les empilements dont la fraction volumique est bien supérieure à celle correspondant à la transition de blocage (on mesure pour cela la « distance » des densités par rapport au Point J $(\phi - \phi_c)$). Or, ce comportement se modifie notablement lorsqu'on se rapproche de ce dernier. Dans un premier temps, la région en ω^2 n'est plus perceptible (lorsque $(\phi - \phi_c) \leq 0,1$ sur l'exemple étudié). Dans un deuxième temps $((\phi - \phi_c) = 10^{-6})$, $D(\omega)$ ne tend plus vers zéro mais vers une constante et présente un plateau.

En résumé, le scénario de Debye est vérifié seulement pour les plus grandes fractions volumiques. Puis, au fur et à mesure que les empilements sont décomprimés et se rapprochent de la fraction volumique de blocage ϕ_c , l'émergence d'un plateau se produit de plus en plus nettement et s'étend vers des fréquences de plus en plus basses. On constate alors l'apparition d'un excédent de « modes quasi-mous » qui ne sont pas assimilables à des phonons (quantum d'énergie de vibration considéré comme une quasi-particule) mais révèlent au contraire une disposition collective, se traduisant par l'apparition de « rouleaux » caractéristiques, d'autant plus marquée que leur fréquence propre est faible.

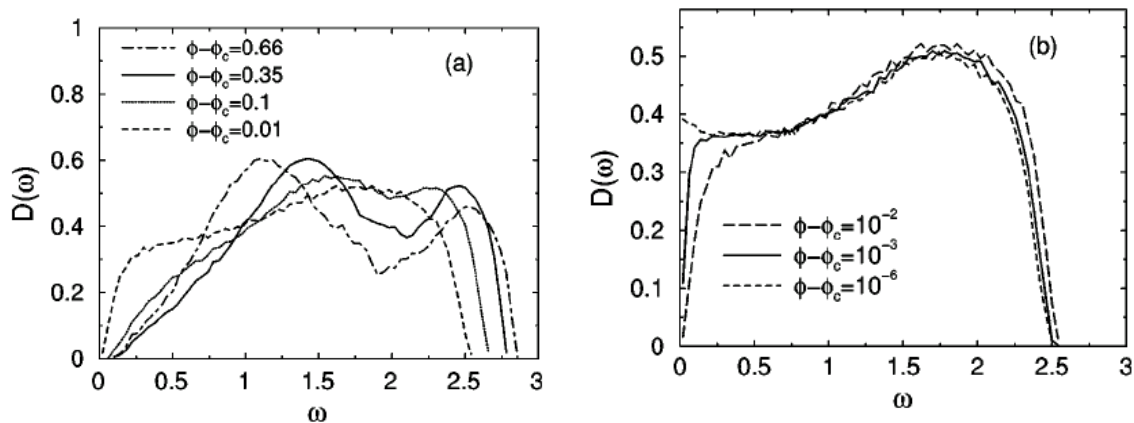


Figure VI-3 : représentation de la densité des états en fonction de la pulsation des modes normaux de vibration pour un système de 1024 particules en fonction de la « distance » au Point J (densité ϕ_c). A droite, mise en évidence d'un plateau représentatif d'un excès de modes quasi-mous pour les basses fréquences à $(\phi - \phi_c) = 10^{-6}$ d'après [OHER03].

Si la fraction volumique est inférieure à celle correspondant au blocage, les modes mous à pulsation nulle sont présents car le système ne possède pas suffisamment de connexions. En d'autres termes, l'empilement n'est pas rigide lorsque le nombre de coordination moyen est trop faible.

Finalement, il n'y a que lorsque celui-ci atteint une valeur seuil que la structure peut devenir stable atteignant un état isostatique. Dans ce cas, on dénombre un excès de modes quasi-mous ($\omega \sim 0^+$) à $\phi = \phi_c^+$ mais aucun mode de pulsation $\omega = 0$ n'est recensé excepté ceux, triviaux, liés au système dans sa globalité.

Du point de vue des modes normaux de vibration, la construction d'une matrice des raideurs totales permet d'apporter un éclairage intéressant sur l'équilibre d'une assemblée granulaire. Sa décomposition permet de faire apparaître une matrice dynamique dans laquelle on peut séparer les effets de la loi caractérisant le contact et ceux liés au réseau des contacts. Les éléments de son noyau permettent de détecter les mécanismes présents dans l'assemblée. Ils représentent les modes mous. L'apparition de l'un d'entre eux, de pulsation $\omega = 0$, indique la suppression d'une contrainte : le blocage de l'empilement n'est plus assuré. Au contraire, le système est isostatique si un excédent de modes quasi-mous ($\omega \sim 0^+$) est recensé.

6.1.2. Comment définir un état de compacité maximale ?

Face à l'impossibilité d'accéder numériquement à des empilements binaires parfaitement ordonnés à partir de configurations initialement désordonnées, notre choix s'est porté sur l'étude des mélanges ne présentant pas d'arrangement cristallin : les empilements amorphes.

D'après ce qui a été énoncé dans le paragraphe précédent, un état de compacité maximale correspond à la fraction volumique maximale susceptible d'être atteinte, en l'absence de frottement, sans chevauchement des particules : on parlera alors de contraintes d'impenétrabilité.

Sous celles-ci, l'empilement amorphe doit présenter un équilibre stable.

Au point de blocage, l'analyse du spectre des modes normaux nous informe qu'à chaque libération de contact, se traduisant par la suppression d'une contrainte, est associé un mode mou de pulsation nulle : le système est susceptible de se mettre à « couler ».

A l'inverse, l'apparition du blocage permet de mettre en évidence un excédent de modes quasi-mous. Il se produit lorsque le nombre moyen de contacts devient suffisant : en moyenne 6 par sphère en laissant de côté les particules « flottantes ». Il est également possible d'attribuer à ce nombre, qui correspond à la valeur isostatique, un sens mécanique puisque c'est celui à partir duquel des forces normales vont apparaître entre les grains : les contraintes d'impenétrabilité sont alors activées.

Puisqu'il est question ici de contraintes se développant aux zones de contact intergranulaires, il est naturellement envisageable de parvenir aux états recherchés en appliquant aux particules parfaitement lisses une pression isotrope.

Mais avant d'appliquer cette procédure, il semble opportun que les particules soient suffisamment proches les unes des autres. Il est, par exemple, possible de les faire gonfler de façon continue à partir d'un diamètre peu important et d'une disposition aléatoire dans l'espace disponible, tout en évitant les superpositions. Cependant, le facteur de gonflement doit être choisi suffisamment faible pour laisser le temps au système de relaxer.

En effet, s'il est trop important, l'analyse du paysage pseudo-énergétique nous indique que la configuration testée est moins apte à s'échapper du bassin d'énergie visité et que la fraction volumique atteinte sera moins importante car obtenue sans avoir exploré un maximum de « cavités » possibles.

Par ailleurs, il faudra veiller à ce qu'aucun germe de cristallisation ne fasse son apparition. En pratique, il est possible d'éviter ce phénomène au cours des calculs si l'on se place à $\phi \geq 0,55$ [VOLK02].

Nous définirons donc un état désordonné de compacité maximale de la façon suivante :

Un état désordonné de compacité maximale correspond à un état bloqué d'une assemblée de particules sphériques parfaitement lisses ayant subi un double traitement. Initialement, le système est « liquide » : les particules sont de petit diamètre et sont disséminées aléatoirement dans l'espace disponible. Dans un premier temps, elles sont à la fois mélangées et compactées en se dilatant avec une vitesse suffisamment faible pour permettre au système d'explorer un maximum de configurations possibles. Dans un deuxième temps, elles sont soumises à une pression isotrope. L'apparition de germes cristallins devra rester négligeable.

6.2. LA MODÉLISATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE D'UN MATÉRIAU GRANULAIRE.

Avant d'aborder les méthodes numériques, il convient de préciser la notion de simulation numérique discrète d'un matériau granulaire.

Qu'appelle-t-on un matériau granulaire modèle ? Il s'agit d'un milieu constitué de grains dont le diamètre est grand relativement aux zones de contact recensées entre eux.

Quelle est la conséquence de cette définition ? Le mouvement de cette assemblée d'éléments plus ou moins rigides peut être décrit avec un nombre fini de degrés de liberté. C'est pourquoi le qualificatif « discrète » est utilisé.

Pourquoi la simulation numérique est-elle efficace pour traiter les matériaux granulaires ? Une fois les interactions micromécaniques modélisées et les sollicitations appliquées définies, la simulation numérique est un outil convenant parfaitement au traitement d'un problème à n-particules.

De quoi dépendent principalement les durées de calcul ? Elles sont essentiellement liées à la complexité des lois d'interaction retenues, de la rapidité du phénomène étudié et du nombre de grains composant le système testé.

6.3. LA MODÉLISATION DU CONTACT ENTRE GRAINS.

Etant donné la difficulté liée à cette appréhension du contact inter-granulaire, il est tentant de faire appel à un concept de sphères *dures*. On entend par là qu'il ne se produit aucune déformation ni interpénétration au moment du choc, tellement celui-ci est rapide et instantané. C'est pourquoi cette modélisation semble plutôt convenir aux systèmes subissant une agitation prononcée. Il suffit alors de prendre en compte la déperdition de quantité de mouvement par l'intermédiaire de coefficients de restitution normal et tangentiel découplés.

Le concept de sphères *molles*, quant à lui, fait appel à une notion complètement différente puisque c'est l'interpénétration des particules qui déclenche les mécanismes de restitution et les interactions de frottement. Cependant, la raideur du contact ne doit pas être trop faible pour que les grains restent suffisamment représentatifs de ceux rencontrés dans le domaine du génie civil.

Le contact peut être modélisé en tenant compte, d'une part, de l'élasticité du matériau constituant les grains et, d'autre part, de la dissipation survenant au cours du choc en rajoutant une composante visqueuse.

L'élasticité du contact des sphères est bien maîtrisée si l'on fait référence à la force normale F_N , mais beaucoup moins en ce qui concerne la force tangentielle F_T .

La force normale est couramment reliée à la déflexion normale h des surfaces en contact de 2 façons. Le premier choix, que l'on rencontre souvent dans la littérature dédiée à la compression de billes élastiques, fait appel à la loi non linéaire de Hertz faisant intervenir le diamètre des grains d , le module d'Young E et le coefficient de Poisson ν du matériau.

$$\text{VI-13} \quad F_N^e = \frac{E \sqrt{d}}{3(1-\nu^2)} h^{\frac{3}{2}}$$

Il est possible d'en déduire une raideur normale de contact k_N :

$$\text{VI-14} \quad k_N = \frac{dF_N^e}{dh} = \frac{E \sqrt{d}}{2(1-\nu^2)} h^{\frac{1}{2}}$$

Le deuxième choix, particulièrement pratique pour les modèles informatiques, consiste à ne pas rechercher une description précise de l'élasticité du contact mais, au contraire, à considérer une loi très simple : la force normale augmente linéairement avec la déflexion :

$$\text{VI-15} \quad F_N^e = K_N h$$

Il ne s'agit, ni plus, ni moins, que de l'équation de déformation d'un ressort de rigidité K_N . Même si elle est irréaliste car incompatible avec le modèle de pénétration de Hertz qui implique une dépendance en puissance $3/2$ de la force pressante avec la déflexion, elle est souvent utilisée.

La force tangentielle, quant à elle, présente une partie élastique dont la variation avec le déplacement relatif tangentiel nécessite l'écriture d'une loi incrémentale bien compliquée. C'est une des raisons pour laquelle nous ne la prendrons pas en compte.

La viscosité du contact, quant à elle, ne constitue qu'une expression simplifiée d'une réalité plus complexe. Elle peut se traduire par une force normale proportionnelle à la vitesse avec laquelle se produit la déflexion :

$$\text{VI-16} \quad F_N^v = \xi_N \frac{dh}{dt} = \xi_N \dot{h}$$

ξ_N est un coefficient d'amortissement normal.

Les équations précédentes peuvent être imagées afin de donner une signification aux paramètres introduits. En tenant compte à la fois de l'impact normal élastique et de la dissipation visqueuse par l'intermédiaire de leurs lois linéaires (relations VI-15 et VI-16), on définit un modèle constitué d'un ressort monté en parallèle avec un amortisseur pour former un modèle viscoélastique linéaire. C'est finalement comme si le paramètre ξ_N traduisait l'amortissement produit par un petit conteneur, couplé à l'une des deux billes, qui contiendrait un liquide visqueux dans lequel se mouvrait un piston entraîné par l'autre bille [DURA97].

Dans ce cadre, considérons le cas d'une collision frontale entre deux particules. L'équation différentielle gérant la variable représentant la distance entre leur surface, une fois le contact établi, fait intervenir le coefficient décrivant le terme de

dissipation $\frac{\xi_N}{m_{\text{eff}}}$ et la pulsation propre $\omega_0 = \sqrt{\frac{2K_N}{m_{\text{eff}}}}$ où $m_{\text{eff}} = \frac{2m_i m_j}{m_i + m_j}$ représente la masse effective d'une paire de grains de masses m_i et m_j . Il s'agit d'une équation d'oscillateur harmonique amorti linéairement dont la solution fait intervenir la vitesse relative avant la collision, le coefficient $\frac{\xi_N}{m_{\text{eff}}}$ et la pulsation de l'oscillation amortie qui

vaut $\varpi = \sqrt{\omega_0^2 - \left(\frac{\xi_N}{m_{\text{eff}}}\right)^2}$. Le temps de collision s'écrit :

$$\text{VI-17} \quad t_c = \frac{\pi}{\varpi} = \frac{\pi}{\sqrt{\frac{2K_N}{m_{\text{eff}}} - \left(\frac{\xi_N}{m_{\text{eff}}}\right)^2}}$$

Il est à noter que l'expression de t_c ne fait pas intervenir la vitesse relative des particules.

Définissons maintenant le coefficient de restitution normal : il représente le rapport de la vitesse relative normale après le choc et de la vitesse antérieure à celui-ci. Il est fourni par :

$$\text{VI-18} \quad e_N = \exp\left(-\frac{\xi_N}{m_{\text{eff}}} t_c\right) = \exp\left(-\frac{\frac{\pi \xi_N}{m_{\text{eff}}}}{\sqrt{\frac{2 K_N}{m_{\text{eff}}} - \left(\frac{\xi_N}{m_{\text{eff}}}\right)^2}}\right)$$

A travers cette expression, il apparaît bien que la perte de quantité de mouvement est prise en compte grâce à l'introduction du terme dissipatif ξ_N .

Celui-ci ne présentant pas d'interprétation physique clairement exprimable, il est commode de le prendre égal à une proportion fixée α_N de l'amortissement critique de l'oscillateur harmonique :

$$\text{VI-19} \quad \xi_N = \alpha_N \sqrt{2 K_N m_{\text{eff}}}$$

Le modèle à ressort couplé à un amortisseur linéaire présente trois inconvénients majeurs :

- au début de l'impact, la force normale obtenue n'est pas nulle alors que la déflexion, elle, est égale à 0 [LEQU09] ;
- la vitesse d'impact n'intervient ni dans l'expression du temps de collision, ni dans celle du coefficient de restitution normal ;
- dans le cas d'un système peu dissipatif (par exemple si $e_N \geq 0,9$), il fait apparaître une variation linéaire de la profondeur de pénétration maximale avec la vitesse relative des particules [DURA97]. Il s'agit d'un résultat très différent de celui de Hertz qui prévoit, quant à lui, une faible dépendance entre les deux.

Le modèle à ressort couplé à un amortisseur linéaire présente donc une divergence assez nette par rapport à la physique des chocs. On pourrait en déduire, à tort, qu'il est trop simple et inadapté. Cependant, il est possible de montrer qu'à partir de l'instant où le temps de collision t_c introduit est suffisamment réaliste compte tenu de la physique des matériaux utilisés, il peut fournir des résultats plutôt satisfaisants [DURA97]. C'est pourquoi nous l'utiliserons comme base pour la détermination du pas de temps dans l'algorithme de simulation numérique employé. En revanche, la force normale de contact sera établie en associant la composante élastique non linéaire de Hertz avec la composante visqueuse linéaire.

6.4. MÉTHODES DE SIMULATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE.

L'existence d'une multitude d'approches est probablement liée à la complexité du milieu étudié et aux objectifs que se sont fixés leurs auteurs. Chacune présente certains avantages et inconvénients que nous allons recenser dans le tableau suivant.

Méthode	Principes	Avantages	Inconvénients
Méthodes pilotées par évènements	Paramètres : coefficients de restitution normal, tangential et de frottement. Séquences de collisions entraînant une modification des vitesses des particules, par ailleurs constantes entre chacun des chocs.	Méthode adaptée aux milieux fortement agités.	Méthode incapable de traiter les contacts maintenus et, donc, inadaptée aux systèmes denses proches d'un état d'équilibre.
Dynamique des contacts	Paramètres : inertie des grains, coefficients de restitution et de frottement. Traitement des contacts maintenus et des collisions multiples grâce à une formulation unifiant loi de contact et loi de choc pendant un pas de temps à durée fixée. Description de chocs binaires et multiples. Description de la modification du statut d'un contact.	Méthode adaptée aussi bien aux milieux denses qu'aux états fortement agités. Possibilité de temps de calculs plus courts car pas de temps plus important que celui d'autres méthodes.	Traitement de l'impénétrabilité parfois légèrement imprécis. Processus itératif de détermination des percussions parfois un peu long à l'approche de l'équilibre.
Méthodes statiques	Réseau de contacts par ressorts et patins. Résolution de systèmes linéaires s'apparentant au calcul aux éléments finis.	Nombre de paramètres réduit. Etude aboutie de la stabilité de configurations d'équilibre.	Nécessité de faire appel à de nombreuses matrices. Méthodes ne fonctionnant plus lors d'un réarrangement brutal du réseau de contacts et ne traitant que le régime des petites déformations.
Dynamique moléculaire ou méthode aux éléments discrets	Simulation des solides et des liquides. Particules = atomes ou molécules. Déformations élastique et visqueuse des contacts et prise en compte d'une loi de frottement. A chaque pas de temps : détection des grains en contact, calcul des forces de contact, intégration des relations fondamentales de la dynamique pour modifier la vitesse et la position des grains.	Simulation efficace des fluides, des systèmes colloïdaux, moléculaires et macromoléculaires. Grande souplesse d'utilisation.	Grand nombre d'itérations mais chacune d'entre elles est brève. Les échelles de temps et d'espace doivent être adéquates.

Tableau VI-1 : comparaison des méthodes de simulation numérique discrète d'après [ROUX05].

Bilan : la méthode de **dynamique moléculaire (DM)**, dite encore **méthode aux éléments discrets**, est basée sur l'utilisation des équations du mouvement, fournies par le principe fondamental de la dynamique, que l'on intègre. Elle a fait l'objet d'un grand nombre d'algorithmes basés sur un mode de calcul séquentiel. Ceux-ci ont maintenant été suffisamment testés pour affirmer qu'ils sont désormais devenus un outil incontournable et polyvalent pour l'étude de la dynamique des matériaux granulaires. Ces derniers sont soit sollicités par l'intermédiaire de forces extérieures que l'on impose, soit soumis à des déplacements obtenus en jouant sur les conditions aux limites. Il faut néanmoins veiller à choisir des échelles de temps et de distance adaptées.

Seulement, le recours à la dynamique moléculaire doit s'effectuer avec une compacité qui ne soit pas trop faible. C'est pourquoi il peut être opportun de l'utiliser seulement dans un second temps en faisant intervenir, au préalable, une **méthode pilotée par évènements** qui permette d'amener le mélange dans un état de densité suffisant. C'est ce que permet l'**algorithme de Lubachevsky et Stillinger** (noté **LS** dans ce qui suit).

Les résultats qui seront présentés par la suite font appel à la méthode **LS** dans un premier temps et à une méthode **DM** ensuite.

6.5. L'ALGORITHME DE LUBACHEVSKY ET STILLINGER (LS).

L'algorithme de Lubachevsky-Stillinger suit la dynamique et les interactions d'une assemblée de billes contenues dans un volume avec des conditions aux limites périodiques. La génération de l'échantillon est effectuée en disposant des particules dans un espace créé à cet effet. Celui-ci doit être suffisamment volumineux afin que les billes n'entrent pas en contact lors de leur mise en place, sans l'être exagérément, car l'efficacité de la simulation en serait affectée. C'est pourquoi Lubachevsky a recours, au début de la simulation, à des particules dont le diamètre est réduit intentionnellement. Puis l'empilement est densifié progressivement grâce à une expansion du volume des billes jusqu'à ce que la densité requise soit atteinte. Cette croissance s'effectue de telle manière que le rapport des diamètres demeure constant dans le cas d'un mélange binaire.

Il s'agit d'un algorithme basé sur une succession d'évènements (Event Driven en anglais), c'est-à-dire qu'il permet une analyse de ces derniers, par séquences, selon leur ordre d'arrivée. Il est particulièrement bien adapté dans le cas où les collisions sont instantanées et concernent seulement deux particules à la fois.

Le principe d'une « méthode pilotée par évènements » est le suivant [DURA97]. En partant d'une durée donnée, il est possible de compléter une matrice comportant la succession de toutes les durées prévisibles auxquelles un nouvel évènement, une collision entre deux particules ou entre l'une d'entre elles et une paroi, est susceptible de se produire. On retient la plus faible de ces durées qui permet de déterminer la date de l'évènement suivant. Lorsque ce dernier est réalisé, on calcule les nouveaux éléments de la matrice et le séquençage est renouvelé. Cette méthode prévoit de déterminer les positions et vitesses de toutes les particules à chaque étape du calcul.

Lubachevsky [LUBA91] a apporté une amélioration à cet algorithme en incluant la notion clé de « valeurs de temps » (qui ne correspond pas à la durée de collision), rendant ainsi la résolution plus rapide. Plutôt que de chercher à actualiser l'état global du système en permanence, l'algorithme passe en revue uniquement les évènements essentiels, c'est-à-dire les collisions susceptibles de survenir le plus rapidement. Il s'agit d'actualiser uniquement les positions et vitesses des particules impliquées, mais pas de toutes celles contenues dans l'assemblée granulaire.

Comment préciser alors la notion de « particules impliquées » ? L'une des astuces utilisées par son auteur consiste à diviser l'espace en volumes réduits, des secteurs cubiques, qui servent de cadre à l'apparition d'évènements. Ces derniers caractérisent des collisions qui peuvent alors non seulement survenir entre une bille et l'une de ses voisines, mais également avec l'une des frontières du secteur. Les temps de calcul pour chacune d'entre elles sont alors sensiblement réduits, passant d'une échelle de temps en $O(\log N)$ en faisant appel à une sectorisation, à $O(N)$ sans elle, N représentant un nombre de disques dans l'application de Lubachevsky [LUBA91].

Pour chaque particule et à n'importe quelle étape des calculs, l'algorithme ne nécessite l'enregistrement que de deux séries d'évènements :

- un vieux, déjà survenu, comprenant la « valeur de temps », l'état de la particule incluant sa vitesse et sa position, et, le cas échéant, un partenaire éventuel qui peut être soit une autre particule, soit une frontière identifiée, avec lequel s'est produite la collision passée.
- un nouveau, proposé pour un futur processus, comprenant le même jeu de paramètres.

La particule suivante, devant faire l'objet d'une étude par l'algorithme, est celle qui présente la « valeur de temps » la plus faible. En l'examinant, ce qui n'était alors qu'un nouvel évènement prend le statut d'ancien, tandis qu'un nouveau est programmé, avec une nouvelle « valeur de temps », un nouvel état et un nouveau partenaire, s'il en existe un. Puisque l'évènement suivant susceptible de se produire pour une particule est pris en considération, ses voisines doivent actualiser le leur, bien que non survenu, pour tenir compte des dernières informations recueillies.

Au fur et à mesure que l'algorithme progresse, les taux de collision des particules augmentent pour devenir comparables lorsque le système évolue vers une situation de blocage.

Cependant, ils peuvent s'avérer plus faibles ou devenir beaucoup plus forts dans deux circonstances bien particulières :

- le premier cas survient lorsque des « **particules flottantes** » sont présentes dans le système, en l'absence de pesanteur. Elles ne résultent en aucun cas d'une situation artificielle engendrée par l'algorithme mais constituent un phénomène bien réel que les travaux de Lubachevsky ont permis de mettre en évidence.

- le deuxième cas, lorsqu'il survient, entraîne un enlèvement de la simulation qui n'est plus en mesure de progresser vers une situation d'équilibre. Un chevauchement des particules se produit. Idéalement, les calculs devraient être menés avec une précision infinie ce qui n'est pas le cas en pratique. De plus, lorsque des coefficients de restitution trop faibles sont utilisés, le système peut subir un nombre infini de collisions dans un temps fini. Ce phénomène porte le nom « **d'effondrement élastique** ». Lubachevsky lui-même fait référence aux possibilités de chevauchement et prévoit que si des durées de collision négatives sont obtenues, elles devront être remplacées par une valeur nulle. Drozd [DROZ04], quant à lui, considère un coefficient de restitution fonction de la vitesse.

En résumé, la méthode d'expansion de Lubachevsky est astucieuse et permet des gains importants en termes de durées de calculs grâce à une sectorisation de l'assemblée granulaire et à un gonflement des particules. Cependant, elle peut fournir un nombre de contacts par bille relativement faible pour des mélanges binaires. C'est pourquoi elle doit être utilisée comme phase d'agitation lors du processus d'assemblage en veillant à opérer un réglage correct des paramètres de l'algorithme.

6.6. L'ALGORITHME DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE (DM).

Les simulations de dynamique moléculaire sont apparues avec les premiers ordinateurs pour étudier les liquides au début des années 1950 [ALLE87]. Elles se sont progressivement enrichies à tel point qu'elles permettent maintenant d'analyser des matériaux complexes [ROUX03]. Initialement conçues pour des grains indéformables, elles se sont adaptées aux billes pouvant subir une légère déformation. Des lois de contact, déjà présentées, sont alors prises en compte.

La procédure commence par une phase d'initialisations et se poursuit par la lecture des données récoltées après le passage du mélange dans l'algorithme LS. Ensuite, à chaque pas de temps, les grains en contact sont détectés, les forces de contact binaires sont calculées et les équations de la dynamique sont intégrées pour chaque grain, dans le but de déterminer sa nouvelle vitesse et sa nouvelle position. Cette opération ne peut s'effectuer qu'en discrétisant, en temps, le système d'équations différentielles. Diverses approches aux différences finies sont alors applicables [ALLE87] : l'algorithme de Verlet, le prédicteur-correcteur de Gear, la méthode de Runge-Kutta.

La dynamique moléculaire impliquant un nombre élevé d'itérations dû à la nécessité de détecter les contacts parmi tous les binômes possibles, des techniques de recherche des voisins et de découpage en cellules sont applicables. Elles permettent de traiter le problème avec un nombre d'opérations réduit.

Afin de bien préciser l'ensemble de la démarche, l'algorithme va être détaillé phase par phase. Mais avant, nous allons lister les paramètres décrivant le matériau.

6.6.1. Paramètres décrivant le matériau.

Concernant le matériau, on trouve :

- sa forme : des sphères seront considérées ;
- sa nature : du verre ;
- le diamètre des grains d ;
- le module d'Young $E = 70000 \text{ MPa}$;
- le coefficient de Poisson $\nu = 0,3$;
- un paramètre de raideur des contacts : $\frac{2 E}{3(1 - \nu^2)}$.

6.6.2. Description de l'algorithme DM utilisé.

Etape 1 : initialisations.

Au cours de cette étape, l'utilisateur doit affecter des valeurs à des paramètres d'entrée tels que :

- le nom de la configuration à sauvegarder ;
- le nom de la configuration de départ ;
- la fréquence d'affichage ;
- la fréquence de calcul des voisins ;
- la distance de voisinage entre surfaces des billes ;
- la fréquence des sauvegardes ;
- la fréquence des tests permettant de savoir si l'équilibre est atteint ;
- le nombre maximum d'itérations ;
- la tolérance acceptée vis-à-vis de l'équilibre ;
- la tolérance liée à l'énergie cinétique ;
- les contraintes principales de compression appliquées sur la boîte parallélépipédique contenant l'assemblée granulaire ;
- la vitesse de déformation maximale (consigne).

Etape 2 : calculs préliminaires.

Les données initiales sont lues dans un fichier sauvegardé à la fin de l'algorithme LS. On y trouve le nombre de particules, leurs positions et la dimension de la boîte parallélépipédique qui les contient. Les côtés de cette dernière, même s'ils vont rester deux à deux orthogonaux, présentent des longueurs L_1, L_2, L_3 qui ne sont pas fixes mais qui vont, au contraire, subir des variations au cours du temps en raison de la sollicitation externe qui va être appliquée.

La masse des particules est ensuite déterminée, permettant de déduire une « masse » associée à l'inertie de la boîte, M , dont nous reparlerons ultérieurement.

Puis, un paramètre d'amortissement est défini. Il s'agit de α_N (expression VI-19), supposé invariable même si, en réalité, il évolue dans le temps. L'hypothèse forte choisie dans l'algorithme est qu'il reste continuellement égal à une fraction constante du coefficient d'amortissement critique que l'on obtiendrait en présence d'une paire de grains de masse effective m_{eff} reliés par un ressort linéaire de raideur K_N (expression VI-15).

Le pas de temps est alors calculé en conservant cette modélisation du contact.

Il représente une petite portion du temps de collision exprimé à partir de la relation VI-17, en laissant toutefois de côté le coefficient ξ_N décrivant le terme de dissipation, pour simplifier la programmation :

$$\text{VI-20} \quad \Delta t = \delta \pi \sqrt{\frac{m_{\text{eff}}}{2 K_N}} \text{ avec } \delta \ll 1$$

Puis sont fixés les coefficients du prédicteur-correcteur dont on reparlera à l'étape 3.

Les vitesses et accélérations sont ensuite initialisées.

On entre ensuite dans une boucle qui permet d'effectuer les calculs jusqu'au nombre maximum d'itérations.

Étape 3 : étape « prédicteur ».

Pour comprendre en quoi consiste cette étape, il convient auparavant de bien s'imprégner de la façon dont sont simulées les trajectoires.

Ce sont les équations du mouvement qui sont utilisées comme base de départ. Mais depuis Newton, mettre en équations les trajectoires implique de résoudre des équations aux dérivées partielles. Or, jusqu'à maintenant, aucun spécialiste n'a pu mener à bien cette opération pour des systèmes comprenant plus de 3 corps. La trajectoire ne peut pas être connue précisément : il est seulement possible d'aboutir à une probabilité de trajectoires. Une des alternatives possibles pourrait être d'avoir recours à la méthode de Hamilton mais il reste nécessaire de résoudre des équations aux dérivées partielles.

Il est donc indispensable de faire appel à des techniques basées sur des approximations comme la série de Taylor : elle consiste ici à déterminer des valeurs correspondant à la trajectoire des particules à intervalles de temps réguliers mais suffisamment faibles δt . Il s'agit alors de trouver un compromis entre durée de calcul et précision souhaitée.

Pour y parvenir, la méthode la plus simple est celle d'Euler : la courbe est remplacée par une suite de rectangles. Si l'on en considère deux successifs, leur différence de hauteur est proportionnelle à la multiplication du pas de temps par la dérivée. Cela revient à s'appuyer sur un développement limité d'ordre 1.

Une autre possibilité consiste à utiliser la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2, plus précise. Cette fois-ci, la courbe est approximée par une suite de triangles. Pour chaque pas de temps, deux dérivées sont évaluées : l'une au début, l'autre à la fin. Leur moyenne multipliée par δt permet d'accéder à la valeur approchée de la courbe au pas de temps qui suit. Cette méthode peut encore être complétée à des ordres de rang supérieur afin d'accroître sa précision mais la quantité de calculs à effectuer s'en ressent. D'autres techniques plus abouties ont ainsi vu le jour : elles présentent l'avantage de pouvoir assurer le suivi de nombreuses trajectoires concomitamment.

C'est le cas de l'algorithme de Verlet. Il utilise la procédure du développement limité pas à pas d'ordre 2 en considérant un potentiel d'interaction entre les atomes, le gaz d'argon constituant son support d'étude. Pour déterminer la position au temps $t + \delta t$, il est nécessaire de connaître celles aux temps t et $t - \delta t$. Mais pour cette opération, l'algorithme présente l'énorme intérêt de ne pas faire appel aux vitesses des particules, ce qui nécessiterait de déterminer la dérivée des trajectoires. Elles peuvent cependant être obtenues à posteriori. C'est pourquoi la procédure proposée par Verlet est relativement compacte. Elle présente les avantages d'être rapide et de conserver une bonne stabilité de l'énergie totale sur les longues durées ce qui rend son terme d'erreur petit. C'est pourquoi elle connaît un succès relativement important en dynamique moléculaire, là où il s'agit de suivre simultanément les trajectoires d'atomes se comptant par milliers.

Une variante de l'algorithme de Verlet est l'algorithme « Leap frog » (saute grenouille). La situation des particules est calculée pour des temps entiers : $t = 0, \delta t, 2\delta t, \text{etc}$ de même que leur accélération. En revanche, les vitesses sont obtenues pour des temps demi-entiers : $t = \frac{\delta t}{2}, \frac{3\delta t}{2}, \text{etc}$. Chaque position de grain est alors déterminée avec une erreur d'ordre $O(\delta t^4)$. L'algorithme « Leap frog » est peu différent de celui de Verlet car l'étape décrite précédemment se rapportant aux vitesses ne concerne en réalité que des calculs intermédiaires. Il n'y a, en fin de compte, que pour l'estimation de certaines grandeurs thermodynamiques que des écarts peuvent apparaître : l'énergie cinétique faisant appel aux vitesses est déterminée aux temps demi-entiers alors que l'énergie potentielle qui fait intervenir les positions est calculée aux temps entiers.

D'autres spécialistes de la simulation ont une prédilection pour l'algorithme prédicteur-correcteur de Gear. C'est celui qui a été retenu pour notre étude (ordre 3).

Il possède une très grande stabilité et ne nécessite qu'un calcul des forces (et non plusieurs) pour chaque pas de temps. Or, il est question précisément de l'étape qui consomme le plus de temps. C'est pourquoi cette méthode est très prisée.

Il s'agit dans un premier temps de déterminer, par une approche aux différences finies, les positions, vitesses, et autres informations relatives aux particules au temps $t + \delta t$ connaissant les mêmes caractéristiques au temps t , avec une précision suffisante : c'est l'étape de prédiction. C'est pourquoi l'exposant p va être utilisé pour caractériser cette phase. La situation des particules ne peut être que prédite car la résolution de l'équation de la dynamique n'est pas encore effectuée : les forces de contact ne peuvent pas être prises en compte.

Un développement de Taylor d'ordre 2 permet d'obtenir le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \text{VI-21} \quad \overrightarrow{r_{ki}^p}(t + \delta t) &= \overrightarrow{r_{ki}}(t) + \delta t \overrightarrow{\dot{r}_{ki}}(t) + \frac{(\delta t)^2}{2} \overrightarrow{\ddot{r}_{ki}}(t) \\ \overrightarrow{\dot{r}_{ki}^p}(t + \delta t) &= \overrightarrow{\dot{r}_{ki}}(t) + \delta t \overrightarrow{\ddot{r}_{ki}}(t) \\ \overrightarrow{\ddot{r}_{ki}^p}(t + \delta t) &= \overrightarrow{\ddot{r}_{ki}}(t) \end{aligned}$$

L'étape de prédiction s'applique également aux dimensions de la boîte contenant les particules. Pourquoi cela ? La mise en place de ces dernières implique que certaines d'entre elles vont se retrouver en contact avec les parois du récipient. Les mesures de compacité vont donc s'en trouver affectées à moins que le nombre de grains considéré ne soit particulièrement élevé. Or, les simulations numériques discrètes impliquent un nombre restreint de particules. C'est pourquoi une approche couramment utilisée consiste à faire appel à des conditions aux limites périodiques afin de s'affranchir des effets liés aux parois du contenant. Le domaine de simulation est alors formé par une boîte, la seule représentée dans le programme, dupliquée dans les différentes directions cartésiennes grâce à une translation rigide. Une particule est susceptible d'interagir non seulement avec ses congénères se trouvant dans le même espace qu'elle, mais également avec des particules « images » positionnées dans une réplique voisine de ce domaine. Les effets de surface sont ainsi supprimés car il n'existe plus vraiment de bords. Le domaine de simulation se résume finalement à un système d'axes dont le rôle est de permettre le repérage des particules. Son origine étant immatérielle, le système est rendu homogène par invariance de translation.

Faire appel à des conditions aux limites périodiques nécessite de gérer correctement le chargement appliqué sur le domaine simulé [RADJ10].

Puisqu'il n'existe pas de parois, cette mission est assumée par les degrés de liberté collectifs rattachés au repère et par les contraintes associées. Le domaine de simulation et ses répliques déterminent un réseau défini par ses vecteurs de base qui sont, tout simplement, les trois côtés de la boîte choisie pour assurer le pavage régulier de l'espace.

Les coordonnées d'une particule i s'expriment sous la forme :

$$\text{VI-22} \quad \vec{r}_i = \underline{\underline{L}} \vec{s}_i$$

Les composantes de \vec{r}_i définissent des coordonnées absolues, celles de \vec{s}_i des coordonnées réduites (comprises entre $-0,5$ et $+0,5$). La matrice $\underline{\underline{L}}$ est appelée matrice de passage des secondes aux premières. Ses trois colonnes sont les composantes L_{ki} des trois vecteurs de base. Autrement dit, la matrice $\underline{\underline{L}}^{-1}$ permet de transformer la boîte de simulation parallélépipédique de côtés L_1, L_2, L_3 en une boîte cubique de côté unité.

Pour les degrés de liberté collectifs, l'étape de prédiction concernant les dimensions de la boîte se traduit par le système d'équations suivant :

$$\begin{aligned} \text{VI-23} \quad \overrightarrow{L_{ki}^p(t + \delta t)} &= \overrightarrow{L_{ki}(t)} + \delta t \overrightarrow{\dot{L}_{ki}(t)} + \frac{(\delta t)^2}{2} \overrightarrow{\ddot{L}_{ki}(t)} \\ \overrightarrow{L_{ki}^p(t + \delta t)} &= \overrightarrow{L_{ki}(t)} + \delta t \overrightarrow{\dot{L}_{ki}(t)} \\ \overrightarrow{L_{ki}^p(t + \delta t)} &= \overrightarrow{L_{ki}(t)} \end{aligned}$$

Etape 4 : recherche des voisins.

Cette étape n'est effectuée que si le reste de la division euclidienne du nombre d'itérations par la fréquence de calcul des voisins choisie dans l'étape 1 est nul.

Dès que le système devient trop important (de l'ordre de 1000 particules), la recherche des voisins ne peut plus s'effectuer en testant chaque paire possible [ALLE87]. La méthode utilisée dans notre étude se dénomme « méthode des cellules indexées ». La boîte de simulation est divisée en un treillis régulier composé de cellules. Les voisins de n'importe quelle particule située dans l'une d'entre elles peuvent se trouver dans la cellule concernée bien sûr mais également et seulement dans l'une des cellules adjacentes. Le nombre de paires à examiner est alors considérablement réduit.

La structure en cellules peut être configurée et résolue par la méthode des listes chaînées. Il s'agit tout d'abord de trier et de répartir les particules dans la cellule appropriée. Cette affectation doit s'effectuer rapidement à chaque pas du calcul.

Deux tableaux sont créés lors du processus de tri. Le tableau « tête de chaîne » (HEAD) contient un élément pour chaque cellule. Il s'agit du numéro d'identification de l'une des particules située à l'intérieur. Celui-ci est relié à un tableau « liste chaînée » (LIST) qui contient des numéros de particules dont certains sont détectés, à tour de rôle, comme appartenant à la même cellule. En poursuivant cette démarche de référencement, il est possible d'atteindre un élément de LIST qui soit zéro. Cela signifie que la cellule examinée ne contient pas d'éléments supplémentaires. On bascule alors vers une autre particule référencée dans le tableau « tête de chaîne » pour reproduire le même scénario dans la cellule suivante.

Etape 5 : étape « détection ».

On passe en revue les paires de voisins et on fabrique la liste des contacts. Cette opération s'effectue en utilisant les coordonnées réduites des particules définies à partir des composantes du vecteur \vec{s}_i . On fait ensuite appel à la matrice de passage \underline{L} pour obtenir les coordonnées absolues, définies à partir des composantes du vecteur \vec{r}_i . La distance séparant les centres des particules i et j est ensuite calculée. Elle est comparée à la somme de leur rayon. Si elle est strictement inférieure, la déflexion normale s'obtient par différence des deux longueurs précédentes.

Etape 6 : calcul des forces.

Les vitesses et positions prédites au cours de l'étape précédente vont successivement permettre le calcul des forces de contact en faisant appel aux lois les caractérisant, la définition du tenseur de contrainte interne et l'estimation des forces résultantes pour les particules.

Dans un premier temps, les actions de contact entre particules sont déterminées par l'intermédiaire de la loi élastique de Hertz, reliant la force normale à la déflexion, à laquelle s'ajoute une composante normale visqueuse (équations VI-13 et VI-16). Aucune force tangentielle n'est prise en compte : les billes ne subiront donc pas de rotation.

Les relations établies font appel :

- aux composantes du vecteur branche reliant les centres des particules i et j ;
- à la déflexion normale définie comme étant la différence entre la distance séparant les particules i et j et la somme de leur rayon ;
- à la masse effective associée au contact ij : $m_{\text{eff}} = \frac{2 m_i m_j}{m_i + m_j}$;

- au diamètre effectif associé au contact ij : $\frac{2 d_i d_j}{d_i + d_j}$;
- au paramètre de raideur des contacts : $\frac{2 E}{3(1-\nu^2)}$;
- au paramètre d'amortissement visqueux normal : α_N ;
- à la vitesse relative entre les particules i et j .

Au cours de ces calculs, il est nécessaire de connaître la variation du vecteur position d'une particule i au cours du temps. Il suffit pour cela de dériver l'équation VI-22 par rapport à ce dernier :

$$\text{VI-24} \quad \dot{\underline{r}}_i = \underline{\underline{L}} \dot{\underline{s}}_i + \underline{\underline{L}} \dot{\underline{s}}_i$$

$\underline{\underline{L}} \dot{\underline{s}}_i$ peut s'interpréter comme le champ des vitesses affines qui correspond à une déformation homogène de l'assemblée de particules.

$\underline{\underline{L}} \dot{\underline{s}}_i$, quant à lui, peut s'interpréter comme le champ des vitesses non affines qui décrit la fluctuation des vitesses des particules par rapport à la déformation homogène.

Dans un deuxième temps est défini le tenseur des contraintes internes. De quoi s'agit-il précisément ? De la même façon que la matrice $\underline{\underline{L}}$ se substitue aux degrés de liberté des parois, le tenseur de contrainte de Cauchy permet de reproduire les résultantes des forces sur les parois. Il s'obtient en sommant deux termes : un tenseur de contraintes provenant de l'extérieur du système $\underline{\underline{\sigma}}^{\text{ext}}$ et un tenseur de contraintes provenant des efforts internes $\underline{\underline{\sigma}}^{\text{int}}$, celui dont il est question ici.

L'expression de ce dernier comprend deux moyennes.

La première concerne l'ensemble des contacts α . Sous l'effet des actions liées à ces derniers, les particules sont en équilibre mécanique développant ainsi des contraintes dont l'origine est statique.

La seconde concerne l'ensemble des particules i . Il est question ici de contrainte cinétique en lien avec la quantité de mouvement que celles-ci transportent. Seules les vitesses non affines interviennent : ce sont les vitesses relatives des grains par rapport à la vitesse moyenne. Les vitesses affines, quant à elles, n'engendrent pas d'influence dans la dynamique interne du système car elles contribuent à l'advection des particules. En termes de composantes, la contrainte interne s'écrit :

$$\text{VI-25} \quad \sigma_{kl}^{\text{int}} = \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{N_c} \ell_{l\alpha} f_{k\alpha} + \sum_{i=1}^N m_i v_{ki} v_{li} \right\}$$

où V représente le volume du domaine simulé $V = \det(\underline{\underline{L}})$, N_c est le nombre de contacts, $\ell_{i\alpha}$ une composante du vecteur branche $\vec{\ell}$ reliant les centres de deux particules en contact, $f_{k\alpha}$ une composante de la force de contact, N le nombre de particules, v_{ki} une composante de la vitesse non affine de la particule i .

Dans un troisième temps, l'équation de la dynamique régissant l'évolution temporelle des degrés de liberté collectifs est écrite :

$$\text{VI-26} \quad \mathbf{M} \ddot{\mathbf{L}}_{kl} = \mathbf{F}_{L_{kl}}$$

où \mathbf{M} est une masse fictive attribuée aux variables collectives et $\mathbf{F}_{L_{kl}}$ une « force généralisée » associée à L_{kl} . Le paramètre \mathbf{M} a été choisi comme étant égal à la somme des masses de toutes les particules constituant le système. Des simulations [PEYN09] ont apporté la preuve que cette option ne présentait pas d'influence sur la compacité moyenne d'une assemblée granulaire constituée de grains non frottants, cisailée de manière stationnaire, dans la limite quasi-statique.

Plus concrètement, l'équation de mouvement de $\underline{\underline{L}}$ peut s'écrire en faisant notamment intervenir les expressions de la contrainte interne précédemment déterminée $\underline{\underline{\sigma}}^{\text{int}}$ et de la contrainte externe appliquée de l'extérieur sur le système $\underline{\underline{\sigma}}^{\text{ext}}$:

$$\text{VI-27} \quad \mathbf{M} \ddot{\underline{\underline{L}}} = \mathbf{V} \underline{\underline{L}}^{-1} \left(\underline{\underline{\sigma}}^{\text{int}} + \underline{\underline{\sigma}}^{\text{ext}} \right)$$

Dans un quatrième temps, les résultantes des forces \vec{F}_i sur les particules sont calculées. L'équation du mouvement d'une particule doit permettre de décrire celui-là en suivant la trajectoire de celle-ci. Comme en mécanique des fluides, les variations de la vitesse pourraient être obtenues en faisant appel à une dérivée lagrangienne. Mais compte tenu de VI-22, il est plus simple d'établir l'équation du mouvement sous la forme :

$$\text{VI-28} \quad \vec{F}_i = m_i \vec{r}_i - m_i \ddot{\underline{\underline{L}}} \underline{\underline{s}}_i$$

Cette relation présente l'intérêt de mettre en évidence le terme d'accélération $m_i \ddot{\underline{\underline{L}}} \underline{\underline{s}}_i$ rattaché aux degrés de liberté collectifs portés par le repère employé du fait de l'absence de parois. Celui-ci peut alors être explicitement interprété comme une force inertielle s'exerçant sur les particules.

Etape 7 : étape « correcteur ».

Maintenant que les forces de contact, le tenseur de contrainte interne et les forces résultantes pour les particules sont déterminés, il est possible, à l'aide des équations du mouvement, de calculer les accélérations corrigées pour les degrés de liberté collectifs $\overrightarrow{L_{ki}^c}(\mathbf{t} + \delta\mathbf{t})$ d'une part et pour les degrés de liberté non imposés $\overrightarrow{r_{ki}^c}(\mathbf{t} + \delta\mathbf{t})$ d'autre part.

Dans le premier cas, on fait appel à la relation VI-27.

Dans le deuxième cas, on utilise l'expression VI-28 que l'on combine avec la précédente pour aboutir à :

$$\text{VI-29} \quad \ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{1}{m_i} \overrightarrow{\mathbf{F}}_i + \frac{1}{M} \mathbf{V} \underline{\underline{L}}^{-1} \left(\underline{\underline{\sigma}}^{\text{int}} + \underline{\underline{\sigma}}^{\text{ext}} \right) \underline{\underline{L}}^{-1} \mathbf{r}_i$$

A l'examen du deuxième terme de cette relation qui dépend de $\underline{\underline{L}}$, on constate que les degrés de liberté absolus $\vec{\mathbf{r}}_i$ des particules et les degrés de liberté collectifs sont couplés : cette représentation est donc particulièrement bien adaptée dans un processus de simulation numérique.

L'étape de correction de l'algorithme prédicteur-correcteur de Gear va donc permettre de corriger les vitesses en utilisant une correction basée sur la différence entre :

- l'accélération prédite par une série de Taylor car tant que l'équation de la dynamique n'était pas encore résolue, la méconnaissance des forces de contact ne permettait pas de situer avec précision les particules ;
- l'accélération corrigée après détermination des forces de contact, qui permet une actualisation des grandeurs prédites :

$$\text{VI-30} \quad \dot{\mathbf{r}}_{ki}^c = \dot{\mathbf{r}}_{ki}^p + c_{\text{gear}} \delta\mathbf{t} \left\{ \ddot{\mathbf{r}}_{ki}^c - \ddot{\mathbf{r}}_{ki}^p \right\}$$

$$\text{VI-31} \quad \dot{L}_{kl}^c = \dot{L}_{kl}^p + c_{\text{gear}} \delta\mathbf{t} \left\{ \ddot{L}_{kl}^c - \ddot{L}_{kl}^p \right\}$$

c_{gear} est un coefficient de Gear choisi pour améliorer la convergence. Les nouvelles vitesses ainsi calculées sont ensuite réutilisées dans les lois caractérisant les forces afin de déterminer de nouvelles accélérations. Le processus est reproduit de telle manière que les vitesses et accélérations finissent par se stabiliser vers une certaine valeur.

Etape 8 : test de l'équilibre.

La satisfaction des équations d'équilibre pose le problème de savoir avec quelle tolérance. Puisque le système se rapproche d'un état stable, divers modes de vibrations peuvent l'animer : les forces de contact peuvent osciller, l'énergie cinétique par particule peut également légèrement évoluer. C'est pourquoi différents tests sont régulièrement programmés pour savoir si l'équilibre mécanique est atteint.

On considère que c'est le cas lorsque :

- la résultante des seules forces élastiques de contact sur chaque particule est égale à zéro avec une tolérance de 10^{-5} fixée lors de l'étape d'initialisation ;
- les composantes diagonales du tenseur des contraintes de Cauchy sont égales à la pression imposée sur la boîte avec la même tolérance que celle fixée précédemment ;
- l'énergie cinétique par particule est inférieure à une tolérance de 10^{-9} fixée lors de l'étape d'initialisation.

Etape 9 : compacité finale.

La compacité du mélange est enfin déterminée.

6.7. CHOIX DES PARAMÈTRES.

L'objectif du présent chapitre consiste à déterminer les coefficients d'interaction liés à l'effet de paroi et à l'effet de desserrement entre particules en faisant appel à la simulation numérique discrète. Il va donc être nécessaire de déterminer des compacités d'empilements de billes monodispersées ou de mélanges binaires pour différents rapports de tailles de grains. Ces derniers sont secs et parfaitement lisses : aucun frottement n'intervient. Dans ce cadre, seules des forces de contact normales sont considérées. Il n'existe pas de forces tangentiellles qui engendreraient des moments par rapport aux centres des grains et la rotation de ces derniers.

6.7.1. Choix du nombre de particules N .

O'Hern, Silbert, Liu et Nagel [OHER03] ont conduit une étude très complète sur le sujet pour des assemblées de sphères d'une seule taille. Ils ont obtenu une compacité $\Phi^* = 0,639 \pm 0,001$. Il s'agit d'une valeur asymptotique dans la limite des grands systèmes. La moyenne pour des échantillons de N billes ($N \geq 64$), quant à elle, s'obtiendrait, selon ces auteurs, grâce à l'expression :

$$\text{VI-32} \quad \phi(N) = \Phi^* - \delta_0 N^{-\gamma}$$

avec : $\delta_0 = 0,12 \pm 0,03$ et $\gamma = 0,47 \pm 0,05$. Prenons par exemple $N = 4000$ particules, nous obtenons : $\phi(4000) = 0,637$. L'influence reste très légère.

Roux, Chevoir et Toussaint [ROUX07] ont, pour leur part, mené une étude sur des assemblées de particules sphériques bidispersées, le rapport des diamètres étant fixé à trois et la proportion volumique des grosses billes à 0,5 et 0,7. Des échantillons de $N = 700$, $N = 1372$, $N = 2916$, $N = 4000$ particules ont été testés. Aucune dépendance en N n'a été constatée.

Les deux études précédentes prennent appui sur des cas statiques isotropes. Peyneau [PEYN09], quant à lui, est l'un des premiers chercheurs à avoir sondé les propriétés des matériaux granulaires denses, composés de particules non frottantes, en les soumettant à une contrainte déviatorique dans la limite quasi-statique. En conduisant ses tests avec $N = 500$, $N = 1372$, $N = 4000$, il est arrivé à la conclusion que la compacité varie peu avec N .

Notre choix s'est finalement porté sur des systèmes composés de $N = 4000$ particules. Nous souhaitons en effet nous positionner dans le domaine des grands systèmes $N \rightarrow +\infty$ d'une part afin que les résultats obtenus ne soient pas influencés par des effets de taille des échantillons (même si des conditions aux limites

périodiques ont été choisies), par des hétérogénéités locales et par le type de chargement appliqué et d'autre part afin de pouvoir étudier une large gamme de rapports de tailles de grains fins/gros (de $x = 0,1$ à $x = 1$). En effet, pour les plus faibles d'entre eux et lorsque les petites particules sont largement dominantes, l'étude de l'effet de paroi implique que ces dernières soient suffisamment nombreuses non seulement pour entourer une grosse bille isolée mais également pour remplir complètement la boîte de simulation.

6.7.2. Choix du facteur de gonflement des particules lors de l'étape LS et du critère de basculement de l'étape LS vers l'étape DM.

L'algorithme LS utilisé peut se définir comme étant un algorithme « d'agitation + germination ». Initialement, des billes de diamètre réduit $d(0)$ sont disposées sur les sites d'un réseau régulier dans la boîte de simulation à des compacités comprises approximativement entre $\phi_{LS,init} = 0,001$ et $\phi_{LS,init} = 0,30$ selon les mélanges. Celles-ci se situent bien en-dessous de la densité de « gel » (freezing density $\phi \approx 0,49$ [VOLK02] pour une taille unique de particules) correspondant à une phase thermodynamiquement stable liquide. La configuration de départ est alors mélangée. Des vitesses aléatoires sont attribuées aux billes et leur mouvement est suivi au gré de leurs collisions successives. Ces dernières conservent l'énergie cinétique en raison de l'élasticité des chocs, de la même façon que les molécules d'un fluide (sans interaction à distance toutefois). En s'assurant qu'aucun recouvrement ne se produit, les particules subissent, en parallèle, une croissance de leur diamètre $d(t)$ déterminée par un facteur de gonflement. Ce dernier peut se définir de deux façons :

$$VI-33 \quad \Gamma = \frac{1}{t} \left(\frac{d(t)}{d(0)} - 1 \right) \text{ ou } \gamma = \frac{1}{2} \frac{dd}{dt}$$

Pour obtenir des empilements désordonnés qui se rapprochent de la situation de blocage, Γ ou γ doit être suffisamment grand, **au départ**, pour supprimer le réseau régulier initial de disposition des billes. Il s'agit en effet de parvenir à agiter suffisamment ces dernières pour créer des configurations désordonnées.

Cependant, le choix d'une valeur trop importante peut s'avérer, **au final**, néfaste car il conduit à des configurations non bloquées et à des empilements présentant une compacité qui n'est pas optimisée. Il doit en effet être suffisamment petit lorsque le mélange se rapproche de l'état RCP pour permettre une relaxation locale facilitant un réarrangement des particules et l'obtention d'un vrai blocage.

C'est pourquoi certains chercheurs proposent comme options :

- soit l'utilisation d'un facteur de gonflement variable qui décroît arbitrairement en fonction du temps [TORQ10a]. A titre d'exemple, Biazzo, Caltagirone, Parisi et Zamponi [BIAZ09] ont opté pour les valeurs de γ successives suivantes au cours d'une même simulation : 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} et 10^{-5} .
- soit l'usage d'un premier facteur de gonflement constant en prévoyant, lorsque l'empilement se rapproche de sa configuration finale, un rétrécissement ponctuel de la taille des billes d'une petite quantité arbitraire [TORQ10a]. Cette opération est alors suivie d'une nouvelle phase de densification avec un second facteur de gonflement beaucoup plus faible afin qu'un vrai réseau de contacts inter-particulaires puisse s'établir [TORQ10b].
- soit l'utilisation d'un facteur de gonflement constant pendant toute la durée de la simulation, ni trop grand pour permettre au système de relaxer localement, ni trop petit pour empêcher l'apparition de germes cristallins.

C'est la 3^{ème} option que nous avons retenue avec l'utilisation d'un facteur de gonflement Γ (et non γ) constant pendant la durée de la simulation.

La valeur à lui affecter est liée à la durée de la phase de mélange souhaitée et donc à la compacité qui va être choisie pour effectuer le basculement de l'algorithme LS vers l'algorithme DM. Cette densité, que nous souhaitons unique dans un premier temps, ne doit être ni trop proche de ϕ_{RCP} afin d'empêcher la formation d'un arrangement local cristallin, ni trop éloignée car l'objectif de l'étape LS est d'initialiser l'étape DM avec une compacité qui ne soit pas trop faible. Nous avons opté, à deux exceptions près, pour un passage de la première à la seconde à $\phi_{LS \rightarrow DM} = 0,6$.

Concernant le choix de Γ , les simulations préliminaires, que nous avons pu mener, ont montré que pour obtenir la meilleure compacité possible, la phase de mélange avant le recours à la méthode de calcul par dynamique moléculaire devait être suffisante. Nous avons considéré que celle-ci pouvait se mesurer à partir du nombre moyen de collisions par grain n_{coll} et avons estimé sa valeur minimale à environ : $n_{coll,min} = 200$, que nous avons respectée à deux exceptions près. Les facteurs de gonflement choisis qui en résultent sont, selon les simulations : $\Gamma = 0,01$, $\Gamma = 0,005$ et $\Gamma = 0,002$.

6.7.3. Choix des caractéristiques des mélanges binaires à étudier : rapports de tailles de billes et proportions volumiques des constituants.

Avant l'étude des coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement, nous avons entrepris de simuler la compaction isotrope d'échantillons constitués de deux tailles de billes dont le rapport des diamètres vaut : $x = \frac{1}{5}$ et $x = \frac{1}{2,5}$.

Les objectifs sont les suivants :

- obtenir et commenter les courbes de la compacité et de l'indice des vides en fonction de la composition du mélange binaire ;
- vérifier la quasi-linéarité de l'effet de paroi et de l'effet de desserrement en fonction du volume partiel occupé, respectivement, par les grosses et les petites particules dans les domaines respectifs des petits et des gros dominants ;
- accéder aux différents nombres de coordination ;
- mettre en évidence le nombre de particules flottantes (« rattlers ») ;
- apporter des précisions concernant la notion de « classe granulaire dominante ».

L'effet de paroi sera ensuite étudié pour des rapports de tailles compris entre $x = 0,1$ et $x = 0,9$ par pas de $0,1$, avec des proportions volumiques de grosses billes comprises entre 0 et $0,2$.

L'effet de desserrement le sera par pas de $0,05$ entre $x = 0,1$ et $x = 0,3$ et par pas de $0,1$ entre $x = 0,3$ et $x = 0,9$ avec des proportions volumiques de grosses billes comprises entre $0,8$ et 1 . L'incrémentation est réduite pour les faibles rapports de tailles afin de mettre en évidence certains phénomènes pouvant se produire autour de $x_0 = 0,224$. Rappelons qu'il s'agit du rapport de tailles théorique critique en deçà duquel une petite sphère a la possibilité de s'immiscer dans l'espace laissé libre entre 4 grosses sphères en contact sans déstructurer leur organisation.

Les objectifs à atteindre concernant les coefficients d'interactions granulaires seront de comparer les courbes représentatives obtenues avec :

- la borne inférieure de Caquot et la borne supérieure de l'Empilement Hexagonal Compact (EHC) de Dodds pour l'effet de paroi ;
- les résultats expérimentaux concernant des billes provenant des essais de 6 sources : celle de Mc Geary, celle de Naar *et al.*, celle de Yerazunis *et al.*, celle de Westman et Hugill, celle de Tickell *et al.* et celle de Ben Aïm [BENA70] ;
- les courbes issues de modèles empiriques et de notre modélisation (théorie ROAD).

6.7.4. Choix du paramètre d'amortissement et du paramètre permettant de calculer le pas de temps lors de l'étape DM.

Le paramètre d'amortissement visqueux normal α_N est le seul, dans l'algorithme utilisé, qui permet de tenir compte du caractère dissipatif des milieux granulaires secs. En l'absence de frottement et de force tangentielle, il intervient uniquement dans le calcul de la force normale visqueuse en apparaissant dans l'équation VI-19. Précisons que celle-ci n'a pas été établie à partir de considérations physiques rigoureuses mais est plutôt motivée par des raisons de commodité de programmation. C'est pourquoi Peyneau [PEYN09] a étudié l'influence de variations de α_N sur la compacité. Il a montré que cette modélisation simplifiée des processus dissipatifs ne présentait pas de conséquences significatives lorsqu'on se rapproche de la limite quasi-statique.

Nous utiliserons une dissipation relativement forte $\alpha_N = 0,98$ pour approcher de l'équilibre plus rapidement. Il s'agit d'une valeur choisie plutôt de façon arbitraire. La motivation concernant l'adoption de $\alpha_N < 1$ réside dans l'inefficacité, dans les simulations numériques, de l'emploi de contacts sur-amortis avec $\alpha_N > 1$ dans le cas des **contacts élastiques linéaires** [AGNO07], même si aucune information dans ce sens n'a été recensée avec des **contacts Hertiens**.

Le pas de temps, quant à lui, est représentatif de la durée qui va s'écouler entre chaque mouvement des particules. S'il est trop faible, les calculs vont s'éterniser mais on se rapproche de la solution exacte des équations différentielles. S'il est trop grand, il est susceptible d'atteindre des valeurs correspondant aux ordres de grandeur des durées de contact inter-particulaires.

Mais puisqu'il faut bien effectuer un choix, référons-nous à l'étude de Schäfer, Dippel et Wolf [SCHA96]. Selon eux, une simulation précise permettant de reproduire le coefficient de restitution normale avec une erreur relative de l'ordre de 10^{-4} nécessite de faire appel à un pas de temps constant environ égal au $1/100^{\text{ème}}$ de la durée d'une collision. Celle-ci est déterminée à partir de l'équation VI-17 en laissant de côté le coefficient décrivant le terme de dissipation. Le pas de temps ainsi obtenu correspond à la relation VI-20 dans laquelle le paramètre δ vaut $1/100^{\text{ème}}$ d'après [SCHA96] :

$$\text{VI-34} \quad \Delta t = 0,01 \pi \sqrt{\frac{m_{\text{eff}}}{2 K_N}} \approx 0,022 \sqrt{\frac{m_{\text{eff}}}{K_N}}$$

6.7.5. Choix de la pression à appliquer sur la boîte de simulation lors de l'étape DM.

Pour effectuer ce choix, il est utile de faire appel au paramètre de raideur sans dimension :

$$\text{VI-35} \quad \kappa = \left(\frac{E}{(1 - \nu^2)P} \right)^{2/3}$$

P représente la pression isotrope exercée sur l'échantillon.

κ permet de fixer un cadre au rapport de la déflexion normale h de la loi de Hertz et du diamètre des billes d puisque $\frac{h}{d} \sim \frac{1}{\kappa}$. La limite des grains rigides est donc obtenue avec $\kappa \rightarrow \infty$. A l'opposé, un paramètre de raideur beaucoup plus faible de l'ordre de $\kappa \approx 10^2$ entraîne une nette modification des propriétés du réseau de contacts par rapport à la première limite évoquée [PEYN09] en raison de la « mollesse » des billes. Entre ces deux extrêmes, la plupart des spécialistes des matériaux granulaires font appel à des pressions de confinement de l'ordre de $P = 0,1 \text{ MPa}$ correspondant à $\kappa \approx 8400$ pour des billes de verre ($E = 70000 \text{ MPa}$ et $\nu = 0,3$). En effet, les nombreuses applications liées à la mécanique des sols rendent indispensable l'utilisation de niveaux de pressions que l'on retrouve à quelques mètres de profondeur (5 m par exemple).

Notre choix s'est également dirigé vers cette pression $P = 0,1 \text{ MPa}$. Cette valeur correspond à un paramètre de raideur des grains permettant de les qualifier d'« élastiques ». Mais κ est suffisamment élevé pour approcher les propriétés des empilements de sphères rigides avec une bonne précision.

Ce faisant, les résultats de compacité qui vont être obtenus seront suffisamment indépendants du type de sollicitation mécanique appliqué. Or il s'agit précisément du but recherché lorsqu'on souhaite obtenir des coefficients d'effet de paroi et de desserrement caractéristiques des mélanges granulaires utilisés en génie civil.

6.7.6. Récapitulatif des paramètres utilisés lors de l'étape LS.

Lors de l'étape d'initialisation de l'algorithme de Lubachevsky et Stillinger (LS), les paramètres suivants ont été utilisés :

- le nombre de particules : $N = 4000$;
- le facteur de gonflement de ces dernières : $\Gamma = 0,002$ ou $0,005$ ou $0,01$;
- la fréquence d'affichage : 1000 ;
- le critère d'arrêt de l'algorithme LS. Il s'agit de la valeur de la compacité à atteindre avant basculement dans l'algorithme DM : $\phi_{LS \rightarrow DM} = 0,6$ à deux exceptions près ;
- la fréquence des sauvegardes : 10000 .
- les rapports de tailles de grains examinés : de $x = 0,1$ à $x = 1$;
- la proportion volumique de grosses billes : entre 0 et $0,2$ pour l'effet de paroi, entre $0,8$ et 1 pour l'effet de desserrement, entre 0 et 1 pour les rapports de tailles $x = \frac{1}{5}$ et $x = \frac{1}{2,5}$.

6.7.7. Récapitulatif des paramètres utilisés lors de l'étape DM.

Lors de l'étape d'initialisation de l'algorithme de Dynamique Moléculaire (DM) utilisé, les paramètres suivants ont été employés :

- le module d'Young du matériau constitutif des billes, le verre : $E = 70000 \text{ MPa}$;
- le coefficient de Poisson : $\nu = 0,3$;
- un paramètre de raideur des contacts : $\frac{2E}{3(1-\nu^2)} \approx 51282 \text{ MPa}$.
- la fréquence d'affichage : 1000 ;
- la fréquence de calcul des voisins : 105 ;
- la distance de voisinage entre surfaces des billes : $0,05$;
- la fréquence des sauvegardes : 10000 ;

- la fréquence des tests permettant de savoir si l'équilibre est atteint : **250** ;
- la tolérance acceptée vis-à-vis de l'équilibre : **10^{-5}** ;
- la tolérance liée à l'énergie cinétique : **10^{-9}** ;
- les contraintes principales de compression appliquées sur la boîte parallélépipédique contenant l'assemblée granulaire : **$P = 0,1 \text{ MPa}$** ;
- la vitesse de déformation maximale (consigne) : **0,002** ;
- le paramètre d'amortissement visqueux normal : **$\alpha_N = 0,98$** .

6.8. RÉSULTATS OBTENUS PAR SIMULATION NUMÉRIQUE POUR LES

MÉLANGES BINAIRES DE RAPPORTS DE TAILLES $x = \frac{1}{5}$ ET $x = \frac{1}{25}$.

Nous allons successivement examiner la compacité et l'indice des vides obtenus, comparer les valeurs avec celles mesurées sur des empilements de billes de verre, puis avec celles fournies par la théorie des mélanges de particules (TPM) de Dewar, par le modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard et par le modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard.

6.8.1. Compacité et indice des vides obtenus par simulation numérique.

Les résultats, obtenus en moyenne sur 8 échantillons, sont fournis dans les tableaux suivants, où figurent :

- les codes correspondant aux différentes séries d'échantillons numériques ;
- la proportion volumique des grosses billes : γ_1 ;
- leur nombre N_1 parmi les $N = 4000$ billes constituant le mélange ;
- le facteur de gonflement Γ utilisé dans l'algorithme LS tel que le diamètre des particules au temps t s'exprime sous la forme : $d(t) = d(0)(1 + \Gamma t)$;
- la compacité initiale du mélange dans l'algorithme LS : $\phi_{LS,init}$;
- la compacité correspondant au basculement de l'algorithme LS vers l'algorithme DM : $\phi_{LS \rightarrow DM}$;
- le nombre de collisions par particule dans l'étape LS : n_{coll} ;
- la compacité finale moyenne obtenue après l'étape de calcul par DM (à partir de $\phi_{LS \rightarrow DM}$) : ϕ^* et son écart-type : $\Delta\phi^*$;
- l'indice des vides final moyen e^* .

codes	γ_1	N_1	Γ	$\phi_{LS,init}$	$\phi_{LS \rightarrow DM}$	n_{coll}	ϕ^*	$\Delta\phi^*$	e^*
B50 à B57	0	0	0,01	0,0057	0,6	343	0,6413	0,00045	0,5592
G00 à G07	0,1	4	0,01	0,0065		292	0,6591	0,00051	0,5172
I01 à I08	0,2	8	0,01	0,0072		251	0,6731	0,00056	0,4855
I09 à I16	0,3	14	0,01	0,0082		209	0,6915	0,00031	0,4461
I17 à I24	0,4	21	0,005	0,0095		349	0,7089	0,00068	0,4105
I25 à I32	0,5	32	0,005	0,011		281	0,7287	0,00060	0,3723
I33 à I40	0,6	47	0,005	0,014		223	0,7481	0,00081	0,3366
I41 à I48	0,7	73	0,002	0,018		418	0,7686	0,00223	0,3009
I49 à I56	0,8	124	0,002	0,028		293	0,7778	0,00552	0,2855
H08 à H15	0,9	269	0,002	0,054		179	0,7043	0,00192	0,4198

Tableau VI-2 : compacités et indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM pour un mélange binaire composé de N=4000 particules, avec un rapport de tailles $x=1/5$, pour différentes proportions volumiques de grosses billes.

codes	γ_1	N_1	Γ	$\phi_{LS,init}$	$\phi_{LS \rightarrow DM}$	n_{coll}	ϕ^*	$\Delta\phi^*$	e^*
B50 à B57	0	0	0,01	0,0057	0,6	343	0,6413	0,00045	0,5592
G16 à G23	0,05	13	0,01	0,048		328	0,6461	0,00044	0,5477
J65 à J72	0,1	28	0,01	0,051		305	0,6508	0,00037	0,5364
J01 à J08	0,2	63	0,01	0,056		265	0,6599	0,00058	0,5153
J09 à J16	0,3	107	0,01	0,064		230	0,6692	0,00070	0,4943
J17 à J24	0,4	164	0,005	0,073		390	0,6786	0,00057	0,4736
J25 à J32	0,5	241	0,005	0,087		330	0,6866	0,00084	0,4563
J33 à J40	0,6	350	0,005	0,105		274	0,6932	0,00087	0,4425
J41 à J48	0,7	520	0,002	0,134		543	0,6971	0,00057	0,4345
J49 à J56	0,8	815	0,002	0,183		407	0,6931	0,00088	0,4427
J57 à J64	0,9	1462	0,002	0,292		259	0,6741	0,00128	0,4833
F16 à F23	0,95	2195	0,002	0,202		237	0,6575	0,00073	0,5208

Tableau VI-3 : compacités et indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM pour un mélange binaire composé de N=4000 particules, avec un rapport de tailles $x=1/2,5$, pour différentes proportions volumiques de grosses billes.

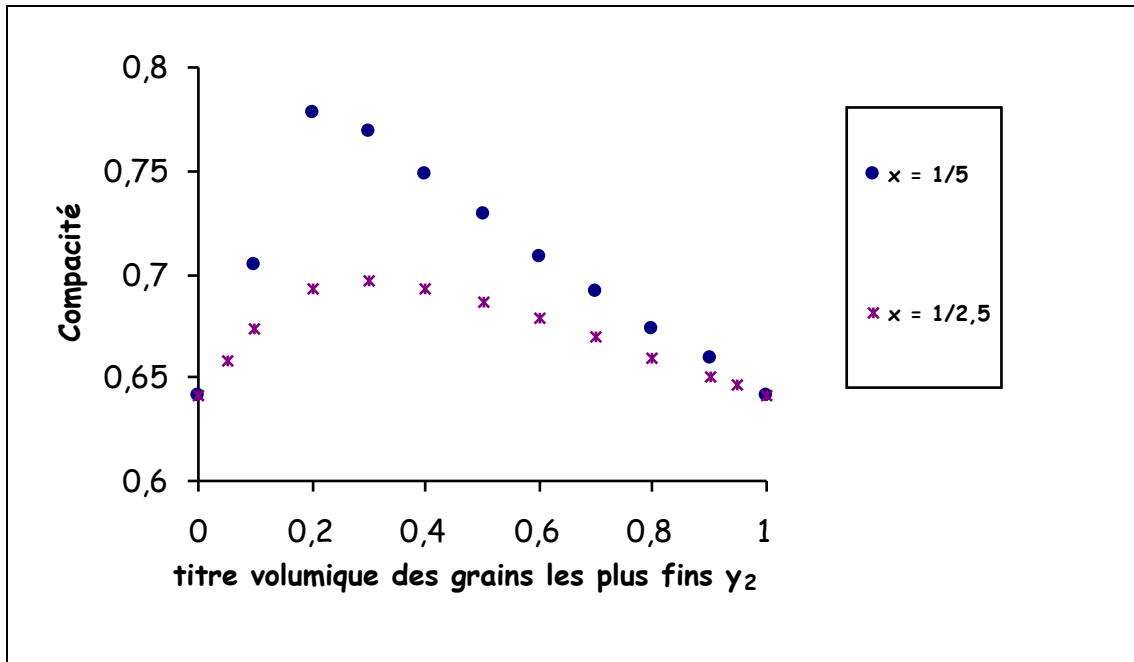


Figure VI-4 : évolution de la compacité de mélanges binaires de billes ($x=1/5$ et $x=1/2,5$), obtenue par simulation numérique LS + DM, en fonction de la proportion volumique d'éléments fins. Les mélanges sont constitués de 4000 particules.

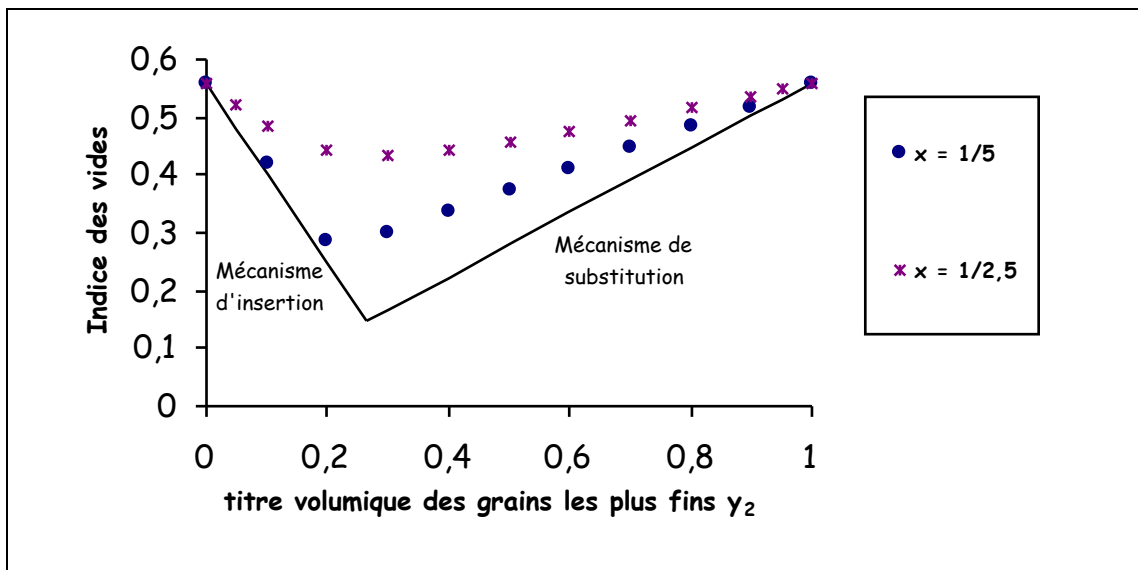


Figure VI-5 : évolution de l'indice des vides de mélanges binaires de billes ($x=1/5$ et $x=1/2,5$), obtenu par simulation numérique LS + DM, en fonction de la proportion volumique d'éléments fins. Les valeurs obtenues sont situées relativement à l'évolution idéalisée de l'indice des vides selon les mécanismes d'insertion et de substitution.

L'analyse des résultats va nous conduire à nous interroger sur la compacité du mélange mono-modulaire obtenue, à étudier l'influence du rapport de tailles sur la compacité optimale d'un mélange binaire et sur la proportion volumique de petits grains pour laquelle elle est atteinte, ainsi que sur l'hypothèse de linéarité des effets de paroi et de desserrement.

Commençons par la compacité mono-modulaire obtenue : elle vaut ici $\phi^* \approx 0,6413 \pm 0,0004$ en effectuant la moyenne sur 8 échantillons de $N = 4000$ billes, avec un nombre moyen $n_{\text{coll}} = 343$ de collisions par particule avant le recours à l'étape DM. Ce résultat paraît concorder avec d'autres mesures effectuées en laboratoire ou par simulation numérique. Citons notamment :

- O'Hern, Silbert, Liu et Nagel (OSLN) [OHER03] qui trouvent $\phi^* = 0,639 \pm 0,001$ dans la limite des grands systèmes ;
- Donev, Torquato et Stillinger (DTS), cités dans [AGNO07], qui mentionnent des valeurs obtenues en excluant le volume des particules flottantes (« rattlers »). Une fois ces dernières prises en compte, les compacités des mélanges comprenant un seul diamètre de billes se situent dans l'intervalle : $0,639 \leq \phi^* \leq 0,644$;
- Roux, Chevoir et Toussaint [ROUX07] qui fournissent $\phi^* = 0,637 \pm 0,001$ pour un assemblage rapide ($n_{\text{coll}} = 50$ collisions par particule en moyenne dans l'étape LS) et $\phi^* = 0,6423 \pm 0,0004$ pour un assemblage lent ($n_{\text{coll}} = 5000$) ;
- Pica Ciamarra, Coniglio et de Candia [CIAM10] qui aboutissent à $\phi_{\text{RCP}} = 0,646$.

Nous avons déjà insisté sur le débat opposant la communauté des spécialistes des milieux granulaires à propos de la compacité $\phi_{\text{RCP}} \approx 0,64$ que certains qualifient de bien définie (même si sa valeur précise reste inconnue) alors que d'autres estiment, au contraire, qu'elle dépend fortement du taux de compression utilisé. Au fur et à mesure que ce dernier décroît, la densité de blocage d'un empilement d'une seule taille de billes peut en effet augmenter jusqu'à atteindre la valeur correspondant à un réseau cristallin parfait : $\frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0,74$.

Rintoul et Torquato [RINT96] ont notamment montré que l'équation d'état (EOS) d'un fluide métastable divergeait à $\phi_{RCP} = 0,644 \pm 0,005$. Bien que nous n'ayons pas fait appel à des « paramètres d'ordre » [AGN007] permettant de détecter des traces d'arrangement cristallin, nous pensons que $\phi^* \approx 0,6413 \pm 0,0004$ constitue une valeur représentative de la densité d'un empilement RCP comportant une seule taille de billes.

Examinons maintenant l'influence, sur la compacité, du rapport de tailles fin/gros $x = \frac{d_2}{d_1}$, à partir des deux choix de simulation effectués (figure VI-4). On note bien une augmentation de la compacité optimale lorsque ce rapport baisse, en raison de la diminution progressive des interactions granulaires : effet de paroi et effet de desserrement.

De plus, la proportion volumique des petites billes y_2 tend à décroître à l'optimum : aux environs de $y_2 = 0,3$ pour $x = 0,4$ et très proche de $y_2 = 0,25$ pour $x = 0,2$.

Pour les rapports de tailles inférieurs à 0,2 et à condition de considérer les petites billes parfaitement insérées dans les interstices de la matrice constituée au départ de grosses billes, l'abscisse correspondant à l'optimum devrait se rapprocher d'une valeur pratiquement constante égale à $\frac{1-\alpha}{2-\alpha} \approx 0,264$ (figure I-1). La condition énoncée ci-dessus concernant l'emplacement des éléments fins par rapport à ceux plus grossiers reste cependant un préalable que nous devons tenter d'analyser plus finement en examinant les nombres de coordination obtenus.

Pour les rapports de tailles évoluant progressivement vers 1, un raisonnement intuitif nous incite à penser que la proportion volumique de petites billes, pour laquelle la compacité est maximale, va graduellement se rapprocher de 0,5 : plus les dimensions des deux classes granulaires tendent l'une vers l'autre, plus ces dernières devraient être interchangeables.

Intéressons-nous maintenant à l'hypothèse de linéarité de l'effet de paroi. En mélangeant quelques grosses billes à une multitude de petites, on s'aperçoit que l'indice des vides obtenu (figure VI-5) est plus important que celui fourni par l'équation I-5 correspondant au mécanisme de substitution et représenté par une droite.

Au regard des figures VI-6 et VI-7 correspondant respectivement aux mélanges binaires de rapports de tailles $x = \frac{1}{5}$ et $x = \frac{1}{2,5}$, on remarque que les points sont extrêmement bien alignés pour des proportions volumiques de petites particules supérieures à $y_2 = 0,5$ dans le premier cas et $y_2 = 0,7$ dans le second cas.

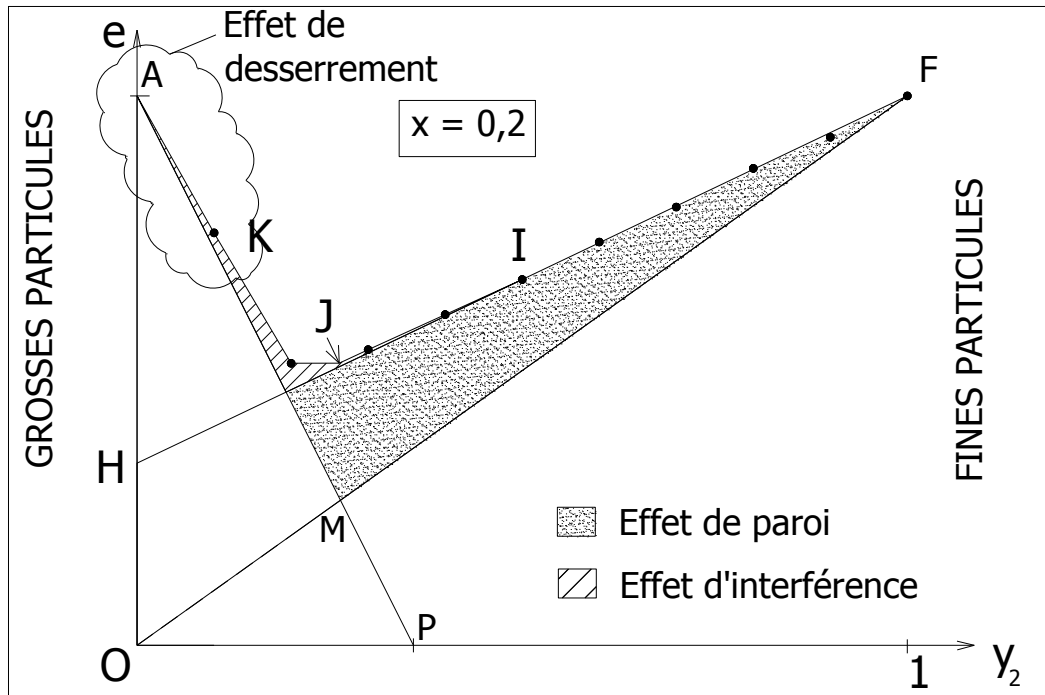


Figure VI-6 : mise en évidence des effets de paroi et de desserrement sur des mélanges binaires de billes de rapport $x=1/5$ obtenus par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules.

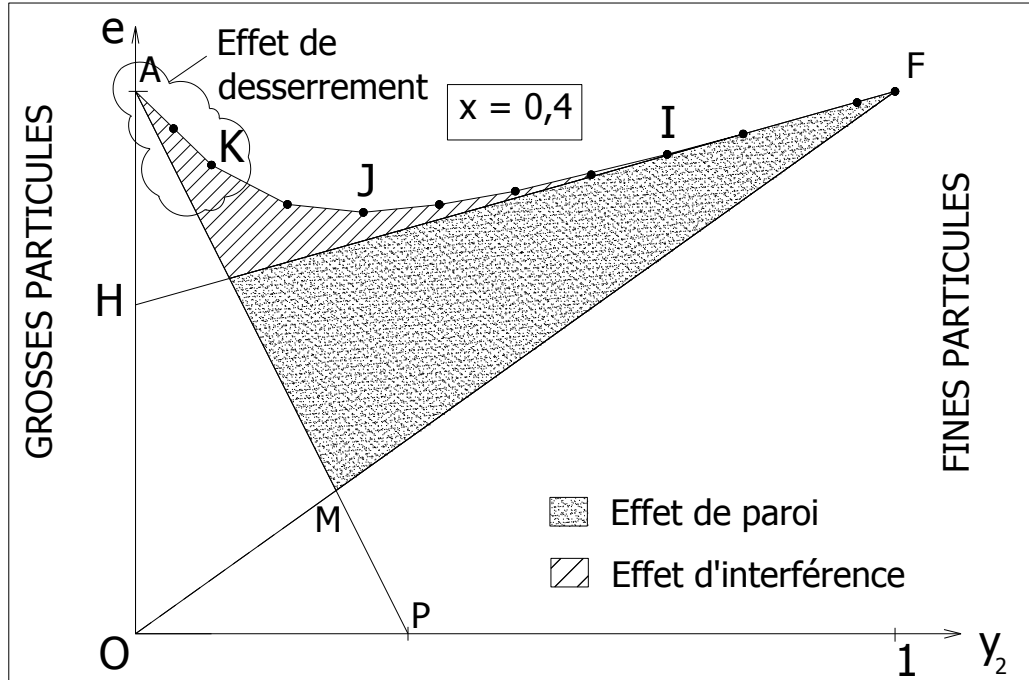


Figure VI-7 : mise en évidence des effets de paroi et de desserrement sur des mélanges binaires de billes de rapport $x=1/2,5$ obtenus par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules.

Dans cette situation, le principe de superposition s'applique : l'effet de deux parois correspond à la somme des effets de chacune d'entre elles et ce, quelle que soit leur position. Les grosses billes peuvent en effet tout aussi bien se situer « dans un coin » ou au contraire être uniformément disposées, l'important est que l'aire totale de leurs parois en contact avec les petites billes soit toujours identique.

Continuons avec la question relative à l'hypothèse de linéarité de l'effet de desserrement. Lorsque les petites billes sont faiblement représentées en volume dans le mélange, on note que l'indice des vides obtenu (figure VI-5) est plus important que celui fourni par l'équation I-4 correspondant au mécanisme d'insertion représenté par une droite. L'écart est léger pour $x = \frac{1}{5}$, plus sensible pour $x = \frac{1}{2,5}$. Sur les figures VI-6 et VI-7, l'effet de desserrement apparaît linéaire pour une proportion volumique γ_2 inférieure à 20 % pour le premier rapport de tailles cité, à 10 % pour le second. Cependant, l'appréciation est plus difficile à effectuer car les points sont moins nombreux dans cette zone. Avant de poursuivre notre analyse, rappelons la nuance entre effet de desserrement et effet d'interférence. Si l'on effectue notre raisonnement en partant de la zone des « gros dominants », l'effet de desserrement est vraiment localisé autour d'une particule insuffisamment fine pour se nicher dans l'interstice situé entre plusieurs grosses particules en contact sans provoquer leur desserrement. L'effet d'interférence est plus global. Si l'on effectue notre raisonnement à partir de la zone des « fins dominants », l'effet des gros grains se réduit à celui de leur paroi s'ils sont rares et disséminés dans le granulat fin. Si leur proportion augmente, leur disposition relative finira, à un moment donné, par avoir une influence : leurs parois trop rapprochées vont interagir sur l'arrangement des éléments fins. Il se produira alors une interférence entre les structures de chacun des deux constituants. Puisque ces dernières sont considérées comme un tout, on peut argumenter que ce type d'interaction ne peut pas satisfaire au principe de superposition, rejetant ainsi l'hypothèse de linéarité. Pour notre part et depuis le début de notre modélisation, nous avons considéré que les petites particules sont en mesure d'accéder au maximum de cavernes formées par les grosses particules. Le concept d'effet de desserrement fait alors référence à une possible dilatation de la structure de ces dernières dans le cas d'un rapport de dimensions supérieur à $x_0 = 0,224$. Cette valeur correspond en effet à la taille d'une caverne tétraédrique délimitée par 4 sphères aux sommets d'un tétraèdre. Au vu des résultats obtenus sur les deux mélanges binaires, elle semble établir une frontière entre deux types de représentation de l'indice des vides en fonction du titre volumique des petits grains, que Ben Aim avait déjà mise en évidence dans sa thèse [BENA70].

Pour un rapport de tailles $x = \frac{1}{5} = 0,2$ légèrement inférieur à **0,224** caractéristique d'une cavité tétraédrique, la courbe obtenue est pratiquement constituée de deux segments de droite. L'existence de deux domaines séparés par le mélange à indice des vides minimal est assez clairement mise en évidence : l'un du côté des grains fins dominants, l'autre du côté des gros grains dominants. Concernant cette dernière zone, il semble que les petites particules soient en mesure de se loger de manière relativement satisfaisante dans les cavernes formées par les grosses particules.

Pour un rapport de tailles $x = \frac{1}{2,5} = 0,4$ supérieur à **0,224**, il est plus difficile d'établir une distinction entre ces deux domaines. Toutefois, il apparaît encore possible d'assimiler les extrémités de la courbe à deux portions de droites.

Que ce soit pour le rapport de tailles $x = \frac{1}{5}$ ou $x = \frac{1}{2,5}$, l'optimum du mélange, que l'on choisit de repérer par le point J, peut être positionné soit légèrement au-dessus de la droite FH, soit, plus exceptionnellement, directement sur celle-ci. C'est pourquoi on peut dire que lorsque les proportions du mélange sont optimales, il y a, en général, un effet d'interférence du gros granulat par le granulat fin.

6.8.2. Comparaison avec les résultats d'indices des vides obtenus expérimentalement sur des billes de verre sphériques.

Dans sa thèse, Ben Aïm [BENA70] étudie des empilements binaires constitués de billes de verre. Pour obtenir des mélanges homogènes et isotropes, ces dernières proviennent de deux alimentateurs vibrants assurant un débit régulier de chacune des fractions constituant le mélange. Elles traversent ensuite une chambre de mélangeage conçue pour permettre l'écoulement des particules sans que celles-ci ne puissent s'écouler directement dans le récipient utilisé pour la mesure et soient donc obligées de s'entrechoquer. Ce volume destiné à assurer l'homogénéité et l'isotropie du mélange est constitué par un quinconce à 3 dimensions de grosses billes. La colonne de mesure, quant à elle, est en verre industriel de **10 cm** de diamètre et **50 cm** ou **1 m** de haut.

Voici les résultats obtenus par Ben Aïm avec des billes de diamètre $d_2 = 1,010 \text{ mm}$ et $d_1 = 4,730 \text{ mm}$ fournissant un rapport de tailles $x \approx 0,212$ très proche de $x = 0,2$.

Rapport de tailles $x = 0,212$								
γ_2	0	0	0,132	0,136	0,219	0,228	0,259	0,282
e	0,555	0,546	0,355	0,348	0,271	0,290	0,297	0,287
γ_2	0,292	0,343	0,365	0,379	0,420	0,534	0,785	1
e	0,290	0,305	0,316	0,333	0,337	0,364	0,471	0,543

Tableau VI-4 : indices des vides e d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,212$ en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 d'après des expériences de Ben Aïm [BENA70].

Nous allons maintenant comparer les indices des vides obtenus sur des mélanges binaires par simulation numérique LS + DM (4000 particules) (rapport de tailles $x = 0,2$) avec les résultats expérimentaux de Ben Aïm mesurés sur des billes de verre sphériques (rapport de tailles $x = 0,212$) en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 .

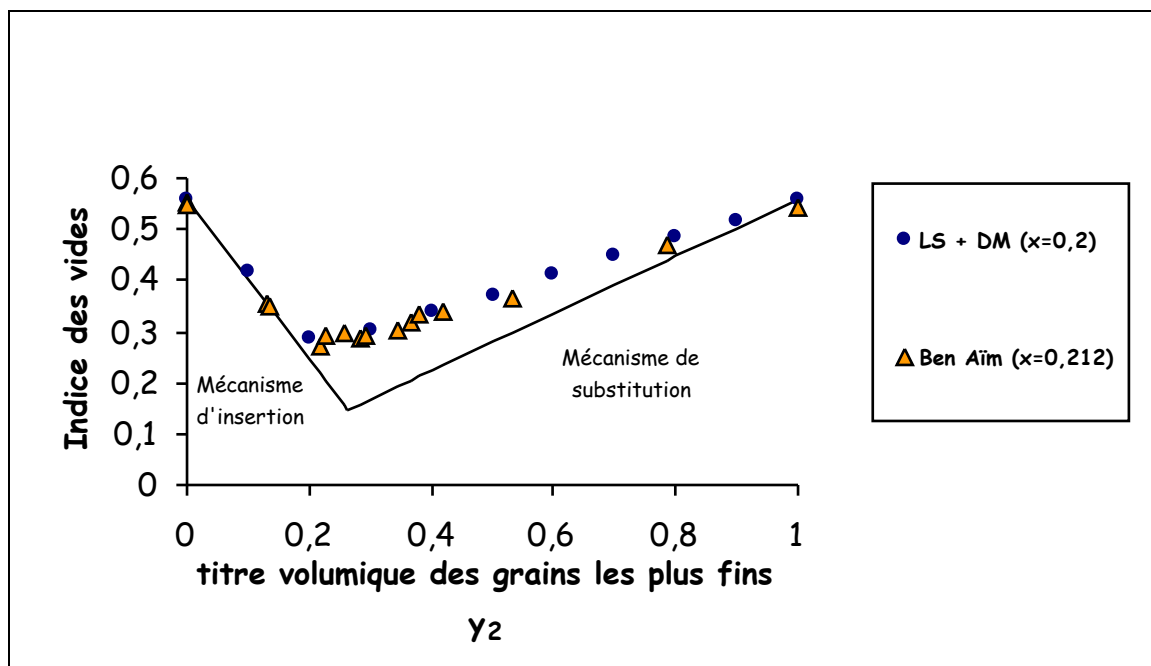


Figure VI-8 : comparaison des indices des vides obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM sur des mélanges binaires de rapport de tailles $x=0,2$ contenant 4000 particules et d'autre part expérimentalement par Ben Aïm sur des mélanges binaires de rapport de tailles $x=0,212$ composés de billes de verre.

Ben Aïm (1970) n'effectue pas de mesures pour des rapports de tailles proches de $x = 0,4$. Cependant, dans sa thèse, il fait référence à des travaux de Yerazunis *et al.* (1965) d'une part et de Naar *et al.* (1963) d'autre part qui ont respectivement testé des mélanges de rapports de tailles $x = 0,388$ et $x = 0,419$.

La dernière équipe a utilisé un appareillage identique, dans son principe, à celui de Ben Aïm, même si la chambre de mélangeage est composée par une série de 5 tamis espacés d'environ 5 cm dont la maille possède une taille égale à 3 fois celle des plus grosses particules.

Rapport de tailles $x = 0,388$						
y_2	0,415	0,430	0,470	0,490	0,610	0,650
e	0,414	0,410	0,431	0,435	0,460	0,462
y_2	0,700	0,730	0,785	0,830	0,900	
e	0,471	0,479	0,499	0,515	0,531	

Tableau VI-5 : indices des vides e d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,388$ en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 d'après des expériences de Yerazunis *et al.* citées dans la thèse de Ben Aïm [BENA70].

Rapport de tailles $x = 0,419$				
y_2	0,090	0,190	0,450	0,640
e	0,495	0,449	0,460	0,508

Tableau VI-6 : indices des vides e d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,419$ en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 d'après des expériences de Naar *et al.* citées dans la thèse de Ben Aïm [BENA70].

Comparons ces résultats avec ceux que nous avons obtenus par simulation numérique.

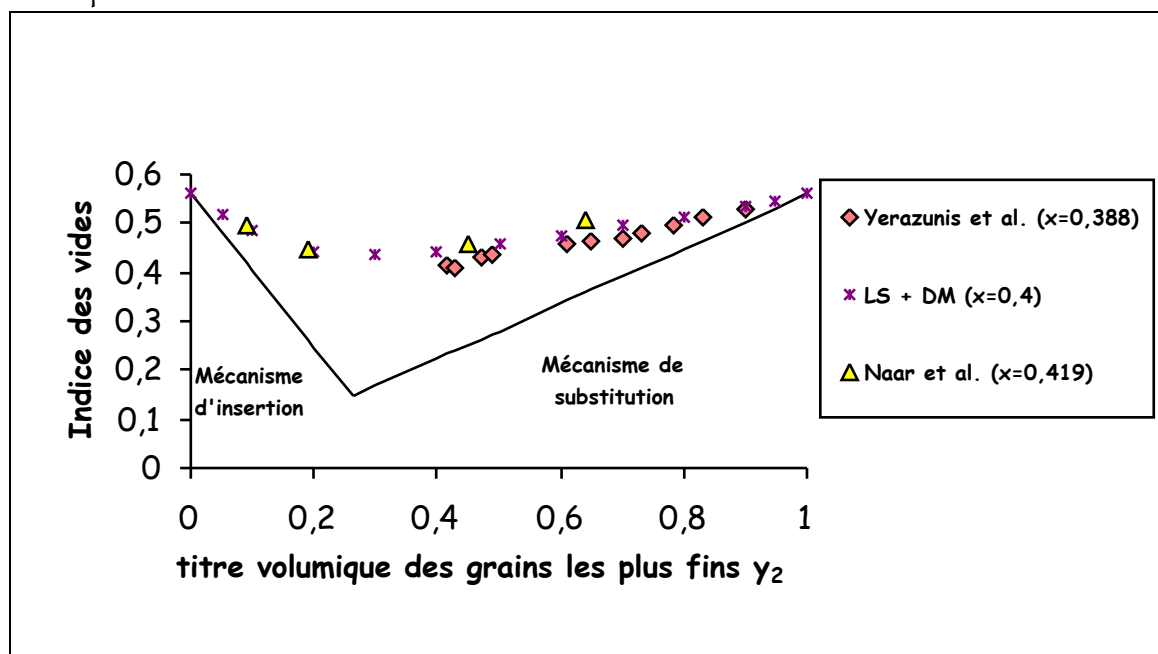


Figure VI-9 : comparaison des indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM sur des mélanges binaires de rapport de tailles $x=0,4$ contenant 4000 particules avec les résultats obtenus expérimentalement sur des mélanges de billes de verre de rapports de tailles $x=0,388$ et $x=0,419$ par Yerazunis *et al.* d'une part et Naar *et al.* d'autre part.

La comparaison des résultats obtenus sur des mélanges binaires de sphères par simulation numérique d'une part et expérimentalement sur des billes de verre d'autre part amène les conclusions suivantes :

- pour les rapports de tailles valant $x = 0,2$ simulé numériquement et $x = 0,212$ testé par Ben Aïm, on note une très bonne concordance des résultats obtenus (figure VI-8).

Pour une seule taille de grains tout d'abord, Ben Aïm obtient des indices des vides de 0,555 et 0,546 pour $\gamma_2 = 0$ (correspondant à des empilements de billes de diamètre $d_1 = 4,730$ mm) et de 0,543 pour $\gamma_2 = 1$ (correspondant à des empilements de billes de diamètre $d_2 = 1,010$ mm). Transformées en compacités mono-modulaires, ces valeurs deviennent respectivement 0,643, 0,647 et 0,648 à comparer avec la notre $\phi^* \approx 0,6413 \pm 0,0004$. Elles sont un peu élevées mais n'oublions pas que certains spécialistes de la simulation numérique ont eux aussi obtenu des résultats semblables : Pica Cíamarra, Coniglio et de Candia [CIAM10] avec $\phi_{RCP} = 0,646$ et Rintoul et Torquato [RINT96] qui ont montré une divergence de l'équation d'état (EOS) d'un fluide métastable à $\phi_{RCP} = 0,644 \pm 0,005$ [RINT96].

Pour les mélanges binaires, nous allons distinguer 2 zones majeures séparées par une mineure. Du côté des « gros dominants » ($\gamma_2 \leq 0,2$), nos valeurs ont en commun avec celles de Ben Aïm de mettre en évidence un très faible effet de desserrement : elles sont extrêmement proches de la droite matérialisant le mécanisme d'insertion où les petites particules parviennent à s'insérer dans les cavernes disponibles entre les grosses particules. Du côté des « fins dominants » ($\gamma_2 \geq 0,3$), les points obtenus, aussi bien en simulation numérique qu'expérimentalement sur les billes de verre, sont en très bon accord les uns par rapport aux autres, les premiers s'alignant parfaitement, les seconds légèrement moins bien. Cependant, l'effet de paroi satisfait plutôt bien au principe de superposition. Enfin, une petite zone « intermédiaire » semble apparaître pour les valeurs expérimentales de Ben Aïm (γ_2 comprise entre 0,2 et 0,3) mais n'est pas confirmée par la simulation numérique en raison d'un nombre insuffisant de points recensés à l'intérieur : l'indice des vides du mélange y passe par un minimum.

- pour les rapports de tailles valant $x = 0,4$ simulé numériquement et $x = 0,388$ ou $x = 0,419$ testés expérimentalement, on note une bonne concordance des résultats obtenus (figure VI-9). Comme prévu et compte tenu des légères variations entre ces 3 rapports de tailles, les indices des vides des mélanges sont globalement légèrement plus faibles pour $x = 0,388$ et un peu plus élevés pour $x = 0,419$ par rapport à ceux recensés numériquement pour $x = 0,4$. Du côté des « gros dominants » ($\gamma_2 \leq 0,2$), les 2 points expérimentaux de Naar *et al.* dans cette zone coïncident pratiquement avec ceux que nous avons obtenus. Du côté des « fins dominants » ($\gamma_2 \geq 0,4$), les nombreux points de Yerazunis *et al.* ne sont pas exactement alignés sur une même droite mais nous ne connaissons pas le dispositif expérimental qui a été utilisé et ses conséquences sur l'incertitude des mesures. Mais globalement et pour confirmer ce que nous avons déjà écrit, même s'il est plus difficile de distinguer les domaines des « gros dominants » et des « fins dominants », la courbe semble pouvoir encore être assimilée à deux portions de droites à ses extrémités.

6.8.3. Comparaison avec les résultats d'indices des vides fournis par la théorie des mélanges de particules (TPM) de Dewar.

Dans ce paragraphe, nous allons comparer nos résultats avec ceux issus de la théorie des mélanges de particules (TPM) de Dewar [DEWA99] qui a déjà été présentée (paragraphe 1.2.2.14). Se situant dans la lignée des travaux précurseurs de Powers datant de 1968, elle présente l'avantage de faire appel à des diagrammes d'indices des vides privilégiés en raison de la présence de frontières rectilignes caractérisant les mécanismes d'insertion et de substitution.

Powers (1968) avait observé que lorsqu'un granulat fin est mélangé avec un gros granulat, le premier ne se loge pas seulement dans les vides disponibles mais disperse les particules du second. Il distingue le cas des « gros dominants » de celui des « fins dominants » et reconnaît que les interactions granulaires sont à l'origine des écarts enregistrés entre les indices des vides mesurés et ceux fournis par les frontières rectilignes.

Dans sa lignée, Dewar développe une théorie des mélanges de particules en proposant deux hypothèses fortes. Tout d'abord, il considère que les points représentatifs des indices des vides obtenus peuvent être reliés entre eux non pas par l'intermédiaire d'une courbe lissée mais par une série de lignes droites subissant des changements de pentes. Ensuite, il affirme qu'il existe un certain nombre de points caractéristiques, chacun d'entre eux étant associé à une valeur particulière d'un facteur d'espacement m qui, multiplié par le diamètre des petites particules d_2 , fournit l'espacement moyen entre les grosses (voir tableau I-2). Par exemple, son point caractéristique **B** correspond à un facteur d'espacement $m = 0,3$. Cela signifie, d'après Dewar, que les grosses particules sont espacées de $0,3 d_2$.

Considérons tout d'abord le domaine des « gros dominants » situé sur la partie gauche de la figure VI-10. La droite **AP**, qui se prolonge jusqu'en **N** de coordonnées $(1, -1)$, représente les mélanges pour lesquels les éléments fins remplissent les vides entre les grosses particules sans modifier la structure de ces dernières qui constituent le composant dominant. L'écart entre une courbe réelle d'indice des vides et cette droite de référence indique que le mélange réel contient plus de vides que le type de mélanges qui vient d'être décrit. La structure du gros granulat subit une influence du granulat fin pouvant s'exprimer en fonction de l'accroissement de son indice des vides qui se calcule, selon Dewar, à l'aide de la formule I-73 déjà présentée:

$$\text{I-73} \quad e_1'' = (1 + e_1)(1 + mx)^3 - 1$$

Prenons l'exemple d'un mélange de rapport de tailles $x = 0,2$ et conservons comme point caractéristique de Dewar son point $B_{(x=0,2; m=0,3)}$ censé correspondre à un facteur d'espacement $m = 0,3$. $B_{(x=0,2; m=0,3)}$ va être situé sur une droite $NB_{(x=0,2; m=0,3)}$, qui, en étant prolongée jusqu'à l'axe $y_2 = 0$, fournit un point $Q_{(x=0,2; m=0,3)}$ qui correspond à l'indice des vides effectif des grosses particules dilatées $e_{1(x=0,2; m=0,3)}''$, du fait de la présence du granulat fin. $e_{1(x=0,2; m=0,3)}''$ se calcule à partir de l'expression I-73 en prenant comme indice des vides des grosses particules seules celui que nous avons obtenu par simulation numérique: $e_1 = 0,5592$. On aboutit à : $e_{1(x=0,2; m=0,3)}'' = 0,857$.

Considérons maintenant un granulat très fin auquel sont ajoutées de petites quantités de gros granulat, les particules du second étant dispersées dans la matrice du premier. Le gros granulat ne présente pas une structure de granulat : chacune de ses particules est indépendante des autres.

Chaque fois que l'on en introduit une nouvelle, c'est de la matière solide qui est incorporée et c'est le mécanisme de substitution qui est mis en évidence. Cela se traduit par l'obtention de la droite **OF** lorsque $x \rightarrow 0$. Seulement, au fur et à mesure que ce rapport de tailles fins/gros augmente, les résultats montrent une divergence entre la courbe expérimentale obtenue et cette droite de référence **OF**. La structure du granulat fin subit une influence du gros granulat pouvant s'exprimer en fonction de l'accroissement de son indice des vides (figure VI-10). Reprenons, par exemple, la courbe correspondant au rapport de tailles $x = 0,2$ et considérons le même point $B_{(x=0,2; m=0,3)}$ que précédemment. $B_{(x=0,2; m=0,3)}$ va être situé sur une droite $OB_{(x=0,2; m=0,3)}$, qui, en étant prolongée jusqu'à l'axe $y_2 = 1$, fournit un point $S_{(x=0,2; m=0,3)}$ qui correspond à l'indice des vides effectif des particules fines dilatées $e''_{2(x=0,2; m=0,3)}$, du fait de la présence du gros granulat. $e''_{2(x=0,2; m=0,3)}$ se calcule à partir des expressions I-74 et I-75 déjà présentées :

$$\text{I-74} \quad z = k_{\text{int}} + \left[(1 + e_1)^{1/3} - 1 - k_{\text{int}} \right] x^{k_p}$$

$$\text{I-75} \quad e''_2 = \frac{(1 + e_2) e''_1}{(1 + e''_1) - (1 + z)^3} - 1$$

où k_{int} et k_p sont des constantes empiriques dont les valeurs dépendent des points caractéristiques définis par Dewar (voir tableau I-3). Pour le point **B**, ce dernier propose : $k_{\text{int}} = 0,12$ et $k_p = 0,60$. En conservant comme indice des vides des particules fines seules celui que nous avons obtenu par simulation numérique $e_2 = 0,5592$, on aboutit à $e''_{2(x=0,2; m=0,3)} = 2,386$.

Les coordonnées de chaque point caractéristique de Dewar sont obtenues par intersection des droites **OS** et **NQ** (formules I-76 déjà établies) :

$$\text{I-76} \quad y_2 = \frac{e''_1}{1 + e''_1 + e''_2}$$

$$e = \frac{e''_1 e''_2}{1 + e''_1 + e''_2}$$

Pour le point $B_{(x=0,2; m=0,3)}$ étudié dans l'exemple, on obtient : $y_{2B(x=0,2; m=0,3)} = 0,202$ et $e_{B(x=0,2; m=0,3)} = 0,482$.

On peut étendre ce raisonnement à l'ensemble des points caractéristiques de Dewar afin d'obtenir la courbe de l'indice des vides du mélange en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 pour un rapport de tailles $x = 0,2$. Les résultats sont donnés dans le tableau VI-7.

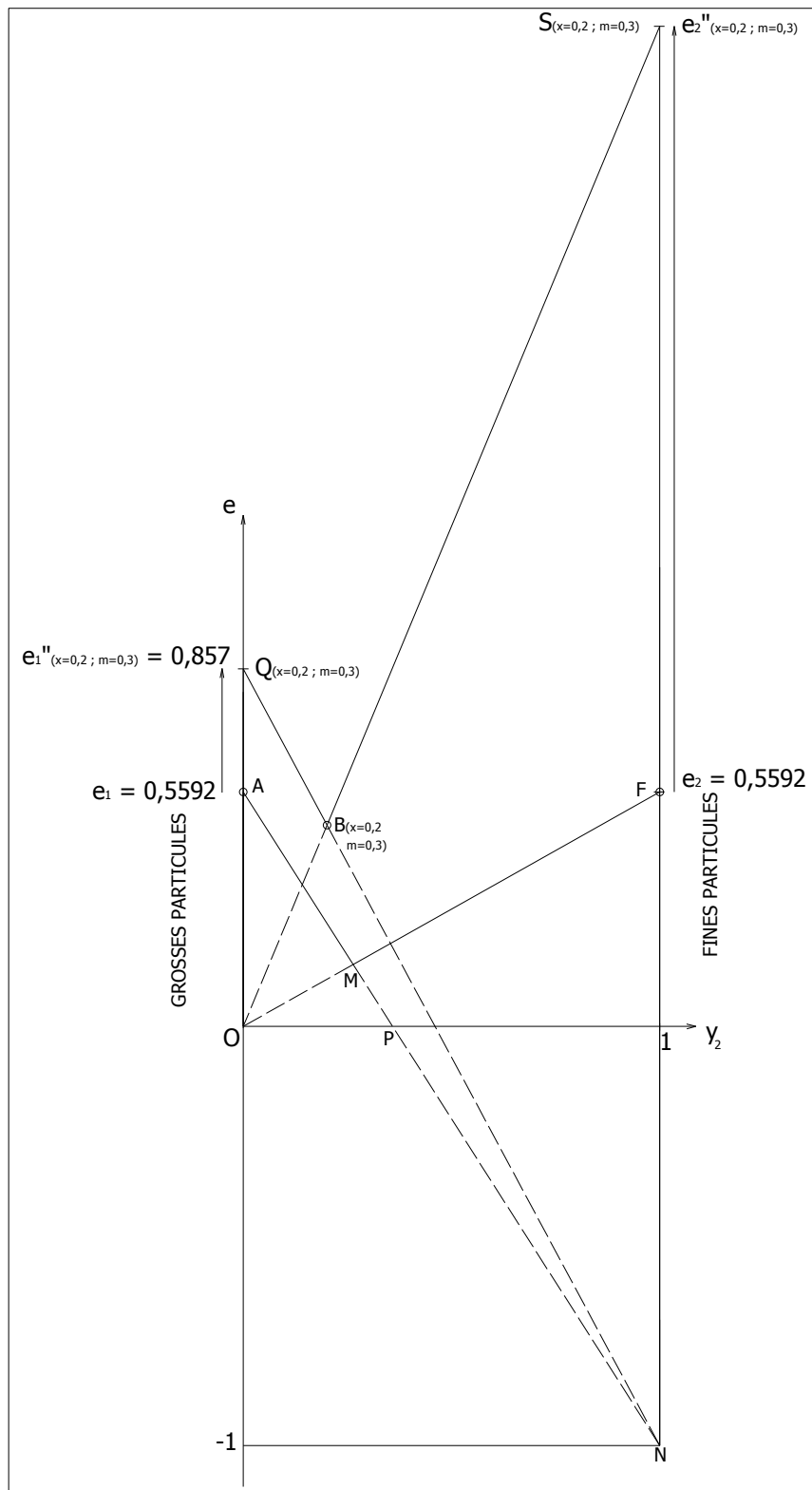


Figure VI-10 : mise en évidence des indices des vides effectifs des grosses particules e_1'' et des particules fines e_2'' pour un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,2$. Exemple pour un facteur d'espacement $m=0,3$ d'après la théorie TPM de Dewar.

Rapport de tailles $x = 0,2$								
Point caractéristique de Dewar	Facteur d'espacement m	e_1''	k_{int}	k_p	z	e_2''	γ_2	e
B	0,3	0,857	0,12	0,60	0,135	2,386	0,202	0,482
C	0,75	1,371	0,06	0,65	0,095	1,020	0,404	0,412
D	3	5,386	0,015	0,8	0,055	0,611	0,770	0,470
E	7,5	23,363	0	0,9	0,037	0,567	0,937	0,531

Tableau VI-7 : indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,2$ pour 4 points caractéristiques représentatifs d'un certain espacement entre grosses particules d'après la théorie des mélanges de particules (TPM) de Dewar.

Nous allons maintenant comparer les indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM (4000 particules) avec ceux résultant de la théorie TPM de Dewar en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 sur un mélange binaire dont le rapport de tailles est $x = 0,2$.

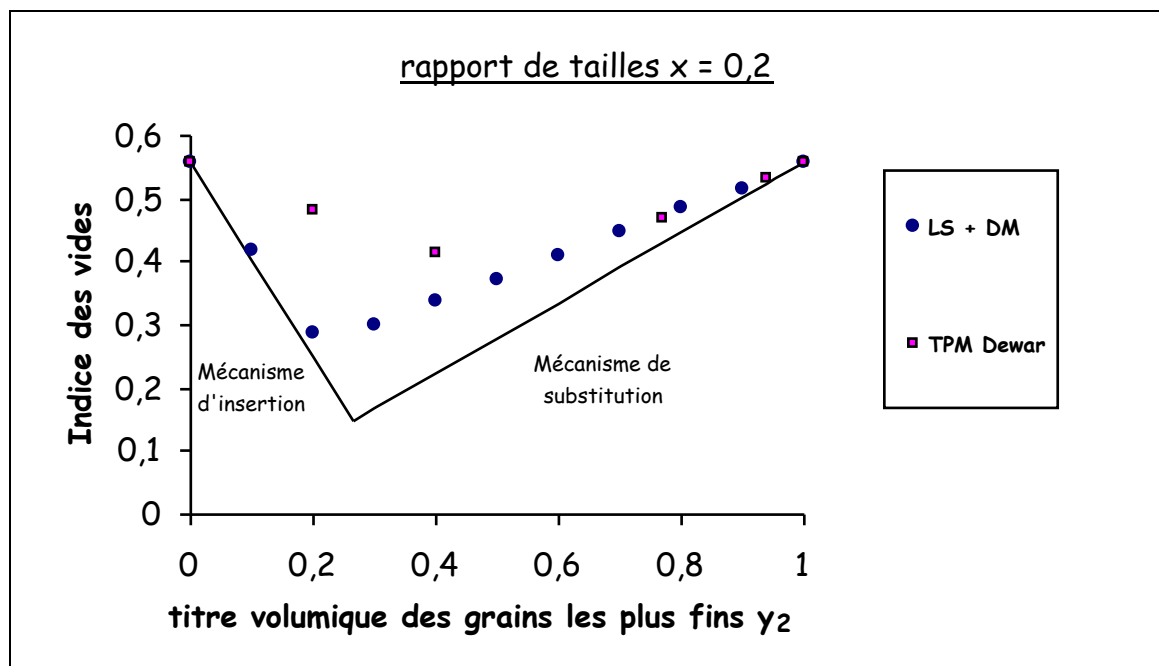


Figure VI-11 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,2$, obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules et d'autre part à partir de la théorie des mélanges de particules TPM de Dewar. Les valeurs obtenues sont situées relativement à l'évolution idéalisée de l'indice des vides selon les mécanismes d'insertion et de substitution.

Répetons la même opération pour un rapport de tailles $x = 0,4$.

Rapport de tailles $x = 0,4$								
Point caractéristique de Dewar	Facteur d'espacement m	e_1''	k_{int}	k_p	z	e_2''	γ_2	e
B	0,3	1,191	0,12	0,60	0,143	1,660	0,309	0,513
C	0,75	2,426	0,06	0,65	0,115	0,854	0,567	0,484
D	3	15,602	0,015	0,8	0,084	0,587	0,908	0,533
E	7,5	98,789	0	0,9	0,070	0,563	0,984	0,554

Tableau VI-8 : indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,4$ pour 4 points caractéristiques représentatifs d'un certain espacement entre grosses particules d'après la théorie des mélanges de particules (TPM) de Dewar.

Nous allons maintenant comparer les indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM (4000 particules) avec ceux résultant de la théorie TPM de Dewar en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 sur un mélange binaire dont le rapport de tailles est $x = 0,4$.

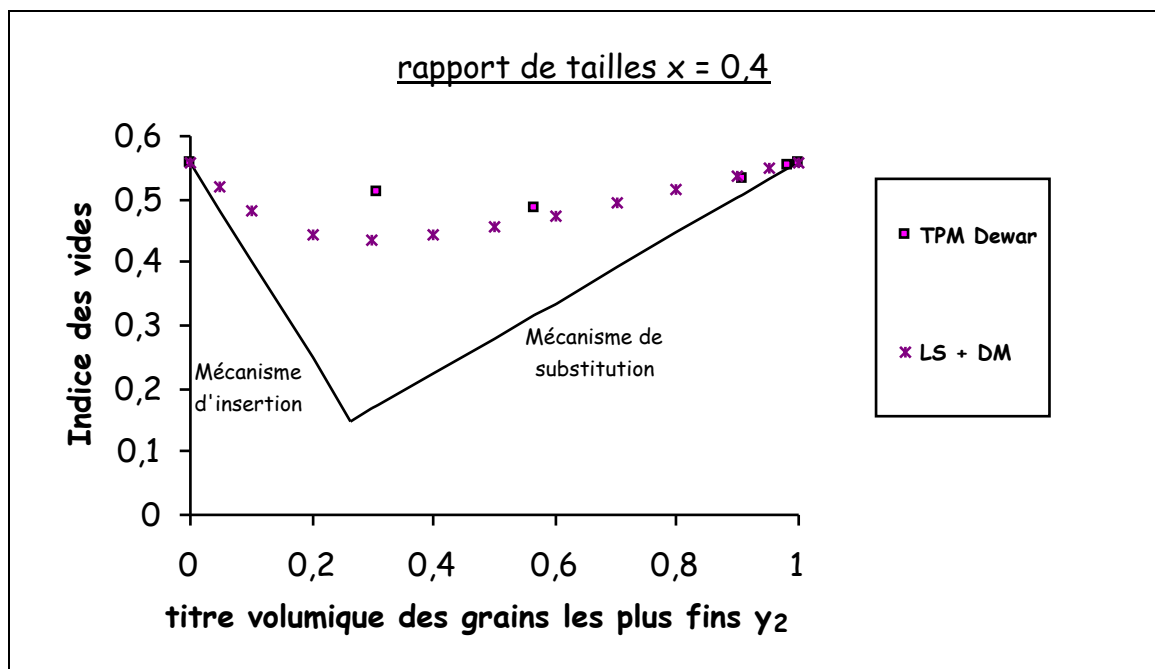


Figure VI-12 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,4$, obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules et d'autre part à partir de la théorie des mélanges de particules TPM de Dewar. Les valeurs obtenues sont situées relativement à l'évolution idéalisée de l'indice des vides selon les mécanismes d'insertion et de substitution.

Au vu des résultats, les remarques et analyses suivantes peuvent être proposées :

- une divergence des indices des vides obtenus par simulation numérique et par la théorie TPM apparaît du côté des « gros dominants ». Elle est d'autant plus marquée que le rapport de tailles x est faible.
- une assez bonne convergence est mise en évidence du côté des « fins dominants » pour des proportions volumiques de petites particules supérieures à 75%.
- la théorie de Dewar semble globalement surestimer les indices des vides par rapport à ceux issus de la simulation numérique LS + DM pour les rapports de tailles testés.
- elle suggère qu'une plus grande proportion d'éléments fins γ_2 est nécessaire pour atteindre l'indice des vides minimal du mélange. En particulier, pour le rapport de tailles $x = 0,4$, elle situe l'optimum aux environs de 57% de fins – 43% de gros, même si l'on peut reconnaître que l'indice des vides qu'elle fournit évolue peu pour les mélanges comprenant entre 31% et 57% de petites particules. Or, nous avons déjà mis en évidence que cet optimum devait plutôt se situer à une abscisse γ_2 comprise entre 26,4% pour $x \rightarrow 0$ et 50% pour $x \rightarrow 1$.
- Dewar [DEWA99] précise que ses points caractéristiques B, D et E, correspondant aux facteurs d'espacement respectifs $m = 0,3, 3$ et $7,5$, ont été identifiés à partir de l'analyse de 48 digrammes d'indices des vides, couvrant un domaine étendu de combinaisons de matériaux d'une seule taille ou à granulométrie étalée utilisés pour les bétons. Il affirme que les valeurs de m ne sont pas affectées par l'indice des vides des composants du mélange, leur rapport de taille ou le niveau d'énergie de serrage transmis au mélange. A la lecture de ces indications, trois facteurs peuvent, selon nous, expliquer les divergences observées. Premièrement, Dewar étalonne son modèle sur des matériaux qui ne sont pas, à priori, constitués de particules sphériques. Deuxièmement, certains composants utilisés présentent une distribution granulométrique et non pas une taille unique. Troisièmement, enfin et surtout, il est probable que le niveau de serrage joue un rôle non négligeable. Ainsi, de Larrard [DELA00] a montré l'influence de l'énergie de serrage fournie au mélange : plus elle est élevée, plus

les valeurs d'indices des vides diminuent et plus la courbe est « pointue ». De plus, le titre volumique des particules fines à l'optimum décroît car elles disposent de moins d'espace disponible pour se loger dans les interstices du gros granulat lorsque la compacité du mélange augmente.

6.8.4. Comparaison avec les résultats d'indices des vides fournis par le Modèle Linéaire de Compacité (MLC) de Stovall et de Larrard.

Dans ce paragraphe, nous allons comparer nos résultats avec ceux issus du Modèle Linéaire de Compacité (MLC) de Stovall et de Larrard ([STOV86], [DELA88]) qui a déjà été présenté au paragraphe 1.2.2.9. Ce dernier découle directement du modèle de Mooney (1950). Stovall et de Larrard distinguent dans un premier temps la classe dominante, responsable du serrage du milieu granulaire grâce à la création d'une matrice connexe. Ils considèrent ensuite que les effets de paroi et de desserrement sont linéaires par rapport au volume de la classe étrangère, respectivement du côté des « fins dominants » et du côté des « gros dominants ». La compacité d'un mélange binaire s'exprime alors à partir des expressions suivantes, déjà établies :

$$c = \inf \left(\frac{\alpha_1}{1 - f_{12} \gamma_2} ; \frac{\alpha_2}{1 - (1 - \alpha_2) g_{21} \gamma_1} \right)$$

où α_1 et α_2 sont les compacités respectives des gros grains seuls et des grains fins seuls, γ_1 et γ_2 leurs proportions volumiques et g_{21} et f_{12} les fonctions d'interaction liées respectivement aux effets de paroi et de desserrement.

Exprimées en termes d'indice des vides, elles deviennent :

$$e = \sup \left(e_1 - (1 + e_1) f_{12} \gamma_2 ; e_2 (1 - g_{21} \gamma_1) \right)$$

où e_1 et e_2 sont les indices des vides respectifs des gros grains seuls et des grains fins seuls. Dans sa thèse, de Larrard propose d'exprimer les fonctions d'interaction en fonction du rapport des tailles x :

$$g(x) = (1 - x)^{1,6} \text{ et } f(x) = (1 - x)^{3,1} + 3,1 x (1 - x)^{2,9}$$

Pour les deux rapports de tailles testés $x = 0,2$ et $x = 0,4$, on obtient : $g(0,2) = 0,700$, $f(0,2) = 0,825$, $g(0,4) = 0,442$ et $f(0,4) = 0,487$.

Comparons les indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM (4000 particules) avec ceux résultant du modèle linéaire de compacité MLC de Stovall et de Larrard en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 sur un mélange binaire dont le rapport de tailles est $x = 0,2$.

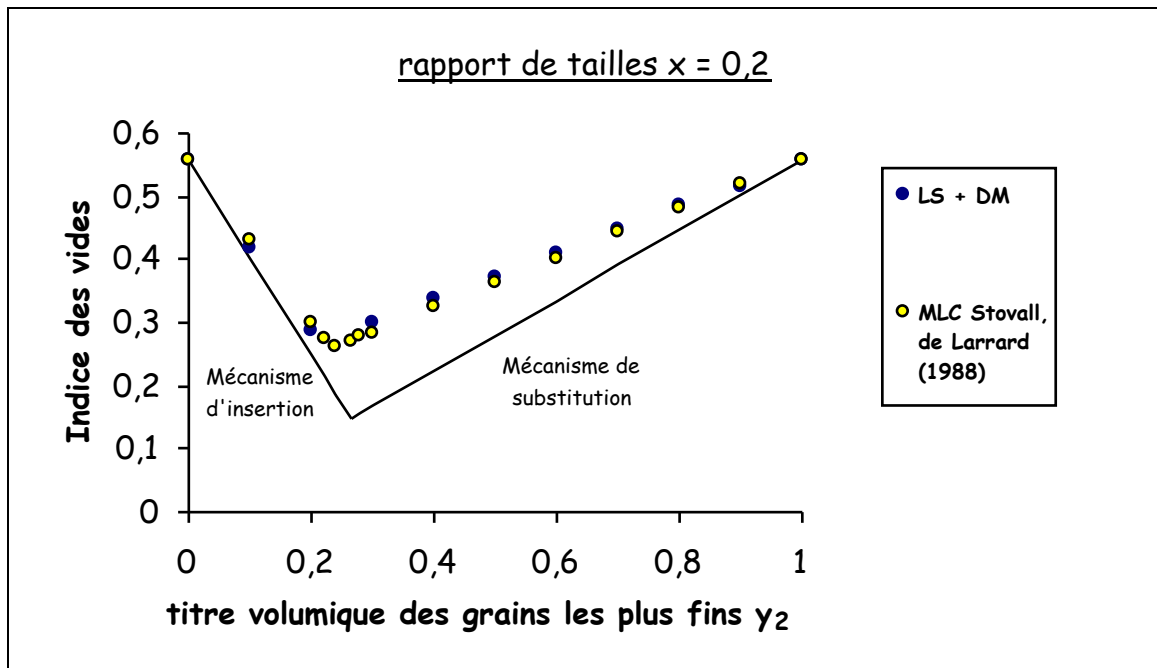


Figure VI-13 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,2$, obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules et d'autre part à partir du modèle linéaire de compacité MLC de Stovall et de Larrard (1988).

Répetons la même opération pour $x = 0,4$.

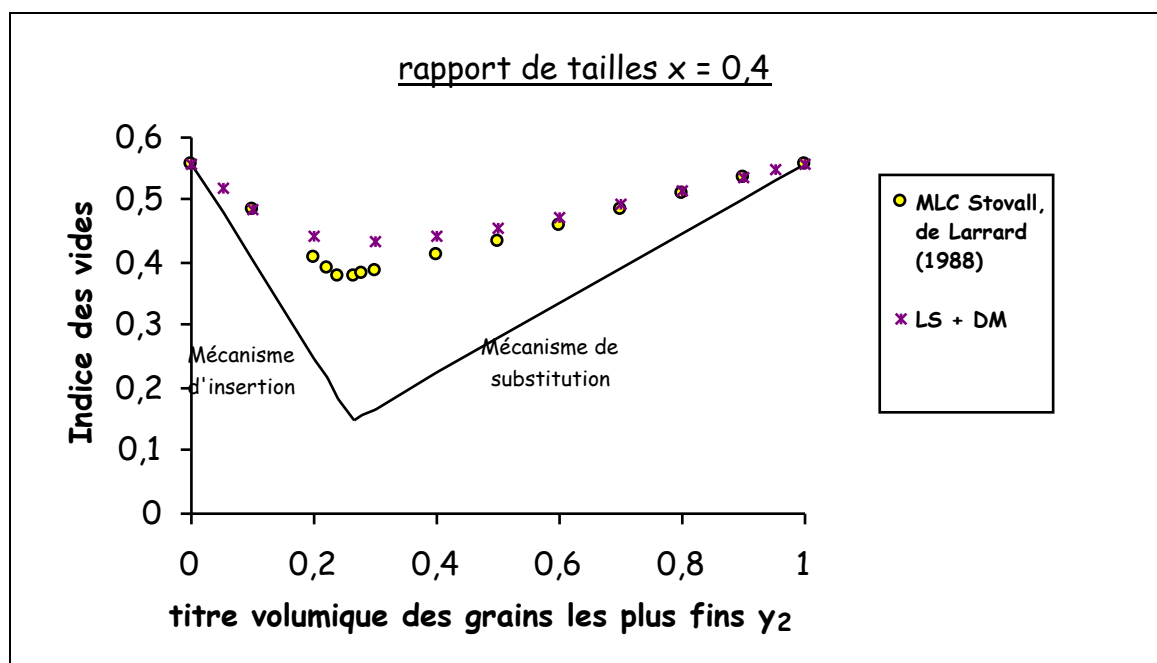


Figure VI-14 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,4$, obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules et d'autre part à partir du modèle linéaire de compacité MLC de Stovall et de Larrard (1988).

Nous allons maintenant procéder à l'analyse des résultats obtenus par simulation numérique d'une part et par le modèle linéaire de compacité (MLC) d'autre part qui correspond à la 1^{ère} génération de modèles mis au point en France (1986/1988) pour optimiser les proportions des constituants afin de minimiser l'indice des vides :

- pour le rapport de tailles $x = 0,2$, c'est à dire pour un fort contraste de dimensions, on observe une très bonne adéquation entre les deux séries de résultats. Le MLC fournit cependant une courbe présentant une forme plutôt anguleuse à l'optimum qui manque probablement de réalisme. Par ailleurs, il semble que la proportion volumique des petites particules conduisant au mélange le plus compact prédite par le MLC soit légèrement sous-estimée si l'on compare avec les résultats de Ben Aïm sur les billes de verre.
- Pour le rapport de tailles $x = 0,4$, c'est-à-dire pour un contraste de dimensions plus réduit, on note une allure assez fidèle du MLC aux deux extrémités, pour les fins ou les gros « largement dominants ». Mais l'écart dans la zone des mélanges à faible indice des vides s'est encore accru : le MLC confirme qu'il y pêche par optimisme. Sa petite tendance à déplacer les minima vers les « gros » est également observée.

Les résultats obtenus par simulation numérique accréditent l'idée selon laquelle le MLC, à l'époque de sa mise au point, était un outil plus qualitatif que quantitatif, s'avérant particulièrement intéressant pour estimer les proportions volumiques des constituants conduisant aux mélanges contenant le minimum de vides mais qu'il manquait d'efficacité pour évaluer cette dernière grandeur.

6.8.5. Comparaison avec les résultats d'indices des vides fournis par le Modèle d'Empilement Compressible (MEC) de de Larrard.

Le MLC (1986/1988) a ensuite évolué vers un Modèle de Suspension Solide (1994), puis a encore été amélioré pour aboutir au Modèle d'Empilement Compressible (MEC) en 2000 [DELA00].

Avec ce dernier, le calcul de compacité s'effectue en deux étapes. Dans un premier temps, une compacité virtuelle correspondant à la compacité maximale susceptible

d'être atteinte en faisant appel à des moyens de serrage considérables est déterminée grâce à un Modèle Linéaire de Compacité similaire au MLC. Seules quelques modifications ont été apportées par rapport à ce dernier. Les fonctions d'interaction ont notamment été redéfinies. Dans le cas où les deux matériaux mélangés ont la même compacité lorsqu'ils sont seuls, elles deviennent, compte tenu de I-68 :

$$b_{21} = 1 - g_{21} \text{ pour l'effet de paroi}$$

$$a_{12} = 1 - f_{12} \text{ pour l'effet de desserrement.}$$

Par ailleurs, elles ont été recalibrées en fonction du rapport de tailles x . De Larrard [DELA00] propose :

$$\text{II-19} \quad b_{L00}(x) = 1 - (1 - x)^{1,5}$$

$$\text{II-46} \quad a_{L00}(x) = \sqrt{1 - (1 - x)^{1,02}}$$

Toujours dans le cas où les deux matériaux mélangés ont la même compacité lorsqu'ils sont seuls, la compacité virtuelle du mélange binaire du côté des gros grains dominants s'exprime par :

$$\text{VI-36} \quad \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - (1 - \alpha_{12}) \gamma_2}$$

et du côté des grains fins dominants par :

$$\text{VI-37} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - (1 - \beta_2)(1 - b_{21}) \gamma_1}$$

où β_1 et β_2 sont les compacités résiduelles des gros grains seuls et des grains fins seuls.

Dans un deuxième temps, la compacité réelle s'obtient à partir de la compacité virtuelle en ayant recours à un indice de serrage, dénommé K , représentatif de la technique utilisée pour construire l'empilement. Sa forme a été choisie par analogie au modèle de viscosité de Mooney (1950) [DELA00]. Pour un mélange binaire, son expression est la suivante :

$$\text{VI-38} \quad K = \frac{\frac{\gamma_1}{\beta_1}}{\frac{1}{\phi^*} - \frac{1}{\gamma_1}} + \frac{\frac{\gamma_2}{\beta_2}}{\frac{1}{\phi^*} - \frac{1}{\gamma_2}}$$

La compacité réelle ϕ^* est déduite implicitement de cette relation où γ_1 et γ_2 sont les proportions volumiques respectives des éléments grossiers et fins et γ_1 et γ_2 les compacités déterminées ci-dessus.

Les valeurs de K calibrées par de Larrard pour différents procédés de remplissage à sec sont résumées dans le tableau suivant :

Procédé de remplissage	Déversement	Piquage avec une tige	Vibration	Vibration + pression 10 kPa	virtuel
K	4.1	4.5	4.75	9	∞

Tableau VI-9 : résumé des valeurs de l'indice de serrage K pour différents procédés de remplissage d'après de Larrard [DELA00].

La procédure de simulation numérique LS + DM choisie étant composée d'une étape d'agitation prolongée suivie d'une étape de compaction isotrope, il apparaît opportun de faire appel, en 1^{ère} approche, à l'indice de serrage K se rapprochant le plus de ces conditions de remplissage : vibration + pression avec $K = 9$. Avec ce dernier, nous pouvons déterminer la compacité virtuelle des petites ou des grosses particules seules à partir de leur compacité réelle $\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$ en utilisant VI-38 :

$$\text{VI-39} \quad K = \frac{\frac{1}{\beta_1}}{\frac{1}{\alpha_1} - \frac{1}{\beta_1}} \Rightarrow \beta_1 = \beta_2 = \alpha_1 \frac{(1+K)}{K} \approx 0,712$$

Comparons les indices des vides obtenus par simulation numérique avec ceux résultant du modèle d'empilement compressible MEC de de Larrard *et al.* avec $K = 9$ et avec les coefficients d'interaction b_{L00} et a_{L00} sur un mélange binaire dont le rapport de tailles est $x = 0,2$: $b_{L00}(0,2) = 0,284$ et $a_{L00}(0,2) = 0,451$.

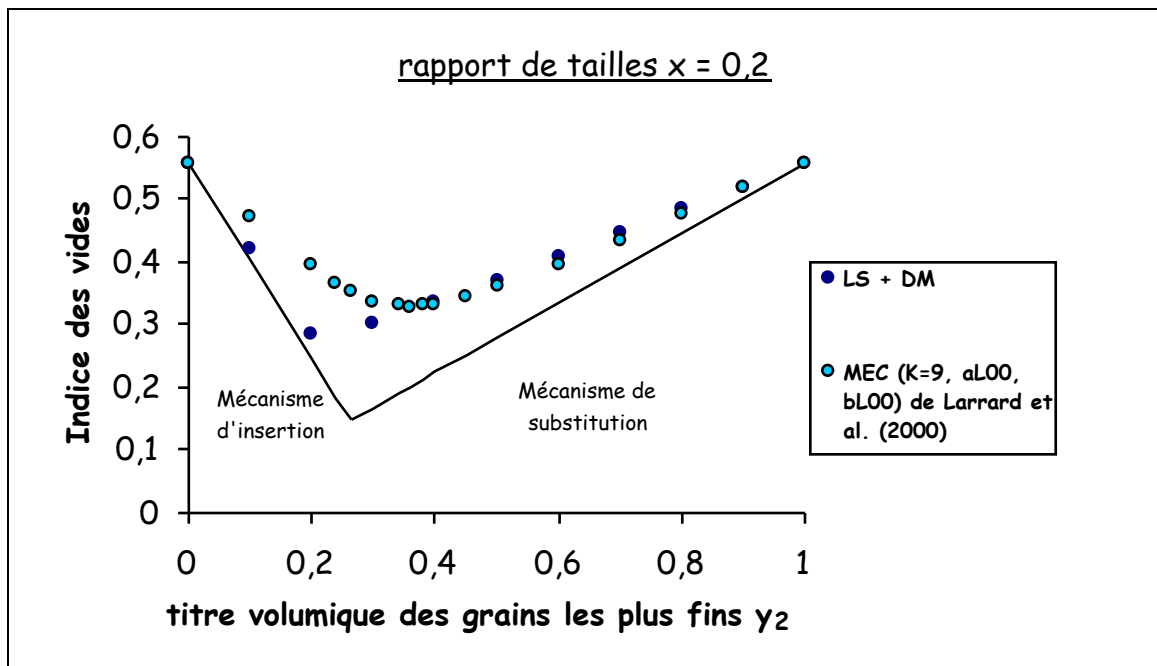


Figure VI-15 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,2$, obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules et d'autre part à partir du modèle d'empilement compressible MEC de de Larrard *et al.* (2000) avec un indice de serrage $K=9$ et les coefficients d'interaction originaux a_{L00} (dessalement) et b_{L00} (paroi).

Répétons la même opération pour $x = 0,4$ avec le même indice de serrage que précédemment, $K = 9$, qui conduit à des compacités virtuelles $\beta_1 = \beta_2 \approx 0,712$ lorsque $\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$, et avec les coefficients d'interaction $b_{L00}(0,4) = 0,535$ pour l'effet de paroi et $a_{L00}(0,4) = 0,637$ pour l'effet de desserrement.

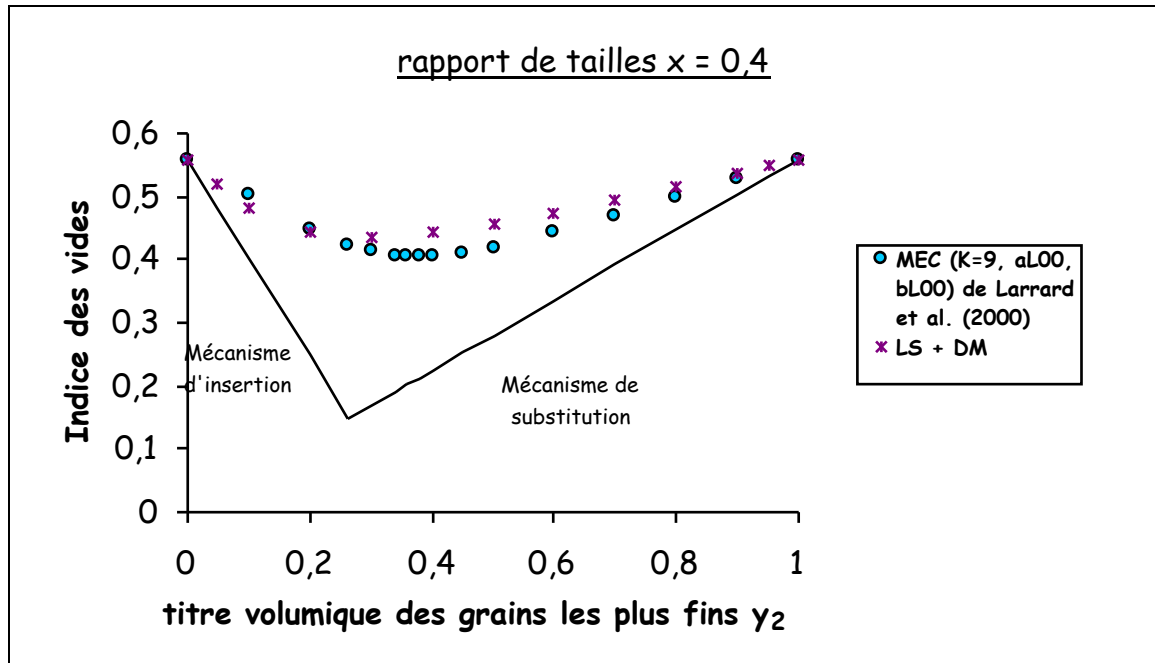


Figure VI-16 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,4$, obtenus d'une part par simulation numérique LS + DM avec 4000 particules et d'autre part à partir du modèle d'empilement compressible MEC de de Larrard *et al.* (2000) avec un indice de serrage $K=9$ et les coefficients d'interaction originaux a_{L00} (desserrement) et b_{L00} (paroi).

Analysons les résultats obtenus par le modèle d'empilement compressible (MEC) correspondant à la dernière génération de modèles mis au point en 2000 pour estimer la compacité des mélanges granulaires à la lumière de ceux fournis par la simulation numérique. Nous établirons cette comparaison avec les coefficients d'interaction du MEC étalonnés par de Larrard dans sa publication d'origine : a_{L00} (desserrement) et b_{L00} (paroi) et pour un indice de serrage $K=9$ correspondant à un procédé de remplissage « vibration + pression 10 kPa » :

- les courbes d'indices des vides obtenues avec le MEC présentent une forme beaucoup moins anguleuse à l'optimum que celles fournies par le MLC : l'introduction d'un indice de serrage K , de manière à obtenir une expression analogue à celle établie par Mooney [MOON50] pour son modèle de viscosité, engendre des résultats beaucoup plus réalistes.

- pour le rapport de tailles $x = 0,2$, on observe une bonne concordance du côté des « fins dominants » ($y_2 \geq 0,4$), mais des écarts relativement importants du côté des « gros dominants » : il est probable que le coefficient d'interaction lié à l'effet de desserrement $a_{L00}(0,2) = 0,451$ a été fortement surestimé. Rappelons toutefois que son expression a été établie par de Larrard à partir d'un lissage de données expérimentales recueillies sur des grains réels roulés ou concassés plus ou moins rugueux et frottants, développant une réaction granulaire plus importante qu'avec des éléments sphériques et lisses.
- pour le rapport de tailles $x = 0,4$, on observe une bonne adéquation du côté des « gros dominants », mais des prévisions trop optimistes de l'indice des vides à l'optimum et du côté des « fins dominants » par le MEC. Ces observations laissent à penser que le coefficient d'effet de paroi $b_{L00}(0,4) = 0,535$ est sous-évalué.

Le MEC ayant apporté une indéniable valeur ajoutée par rapport au MLC en fournissant une courbe plus réaliste à l'optimum, nous allons le conserver en apportant les modifications suivantes.

Pour le rapport de tailles $x = 0,2$, les écarts mis en évidence du côté des « gros dominants » proviennent principalement d'un coefficient de desserrement inadapté à des particules sphériques et lisses. Pour celui-ci et pour le coefficient d'effet de paroi, nous allons maintenant faire appel à la théorie ROAD (ROund ADjustable cell) que nous avons spécialement élaborée pour cette forme géométrique de grains. Pour le rapport de tailles étudié, légèrement inférieur à 0,224 caractéristique d'une cavité tétraédrique, la courbe obtenue par simulation numérique du côté des « gros dominants » fait apparaître l'existence d'un segment de droite très proche de la droite représentative du « mécanisme d'insertion » : les petites particules semblent en mesure de se loger de manière relativement satisfaisante dans les cavernes formées par les grosses particules. C'est pourquoi le coefficient de desserrement a_{ROAD} va être déterminé pour une taille de cavité $x_0 = 0,2$.

Compte tenu des différents paramètres qui viennent d'être évoqués et des expressions établies pour la modélisation de l'effet de paroi dans le cadre de la théorie ROAD, voici les résultats obtenus pour un rapport de tailles $x = 0,2$ (les différents paramètres sont récapitulés sur la figure suivante, qui a déjà été présentée).

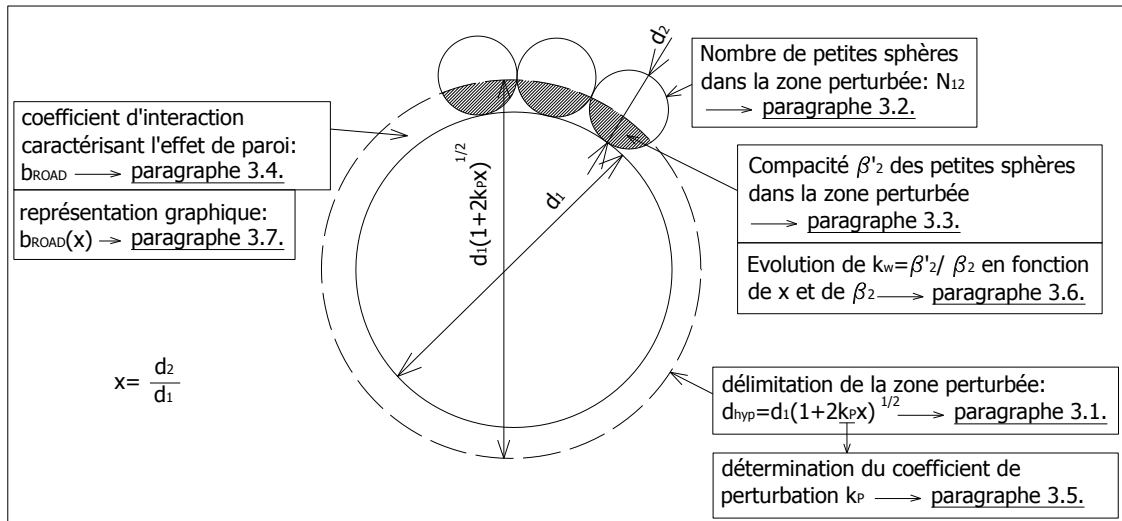


Figure III-1 : phasage d'élaboration du modèle d'effet de paroi.

Coefficient d'effet de paroi : b_{ROAD} – rapport de tailles : $x=0,2$		
Paramètre	Expression ou tableau	valeur
Compacité mono-modulaire réelle : $\alpha_1 = \alpha_2$	Tableau VI-2	$\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$
Indice de serrage : K	Tableau VI-9	$K = 9$
Compacité mono-modulaire virtuelle : $\beta_1 = \beta_2$	Expression VI-39	$\beta_1 = \beta_2 \approx 0,712$
Coefficient de perturbation permettant de délimiter la zone perturbée autour d'une grosse particule : k_p	Tableau III-7	$k_p = 1,0499$
Diamètre de la cellule de référence permettant de délimiter la zone perturbée : d_{hyp}	Expression III-1	$d_{hyp} \approx 1,192 d_1$
Nombre de petites sphères dans la zone perturbée : N_{12}	Expression III-15	$N_{12,CS}^{dense}(0,2) = 112,57$
Compacité des petites sphères dans la zone perturbée : β'_2	Expression III-20	$\beta'_2 = 0,569$
Rapport des compacités en zone perturbée et en pleine masse : $k_w = \frac{\beta'_2}{\beta_2}$		$k_w \approx 0,799$
Coefficient d'effet de paroi de la théorie ROAD : b_{ROAD}	Expression III-25	$b_{ROAD}(0,2) = 0,344$

Tableau VI-10 : Coefficient d'effet de paroi b_{ROAD} pour un rapport de tailles $x=0,2$.

Concernant l'effet de desserrement étudié à partir de la théorie ROAD, voici les résultats obtenus pour le rapport de tailles $x = 0,2$ et pour une taille de caverne $x_0 = 0,2$.

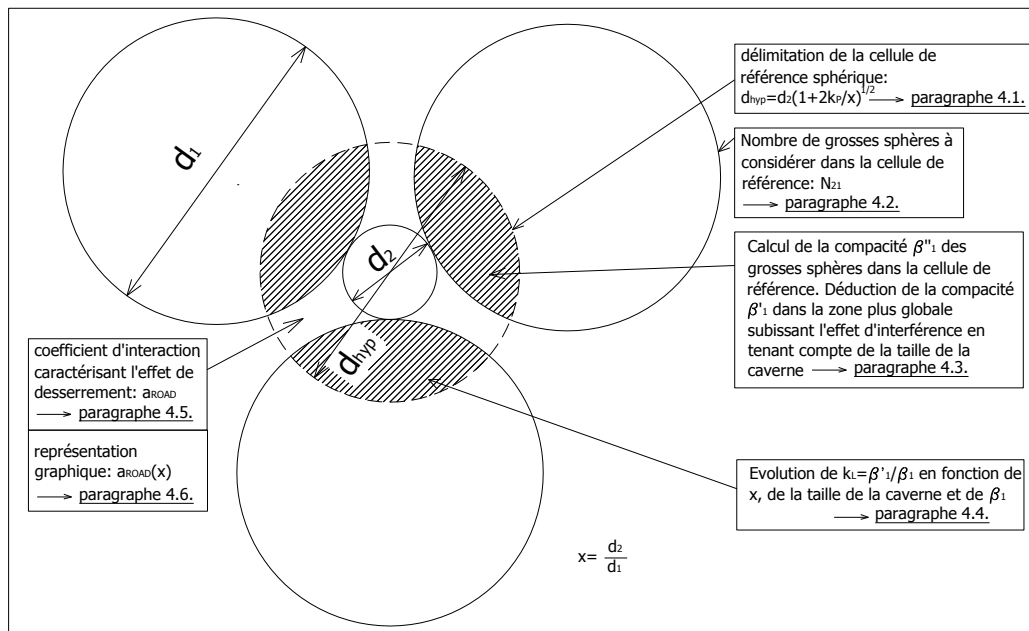


Figure IV-1 : phasage d'élaboration du modèle d'effet de desserrement.

Coefficient d'effet de desserrement : a_{ROAD} – rapport de tailles : $x=0,2$ – caverne $x_0=0,2$		
Paramètre	Expression ou tableau	valeur
Compacité mono-modulaire réelle : $\alpha_1 = \alpha_2$	Tableau VI-2	$\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$
Indice de serrage : K	Tableau VI-9	$K = 9$
Compacité mono-modulaire virtuelle : $\beta_1 = \beta_2$	Expression VI-39	$\beta_1 = \beta_2 \approx 0,712$
Coefficient de perturbation permettant de délimiter la cellule de référence sphérique autour d'une petite particule : k_p	Tableau III-7	$k_p = 1,0499$
Diamètre de la cellule de référence : d_{hyp}	Expression IV-1	$d_{hyp} \approx 3,391 d_2$
Nombre de grosses sphères dans la cellule de référence : N_{21}	Expression IV-9	$N_{21,CS}^{dense}(0,2) = 3,827$
Compacité dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence : β'_1	Expression IV-16	$\beta'_1 = 0,712$
Rapport des compacités en zone subissant l'interférence et en pleine masse : $k_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$		$k_L = 1$
Coefficient d'effet de desserrement de la théorie ROAD : a_{ROAD}	Expression IV-22	$a_{ROAD}(0,2) = 0$

Tableau VI-11 : Coefficient d'effet de desserrement a_{ROAD} pour un rapport de tailles $x=0,2$ et pour une taille de caverne $x_0=0,2$.

Ce résultat, $a_{\text{ROAD}}(0,2) = 0$, était bien évidemment attendu puisque le rapport de tailles étudié correspond précisément à la taille de la caverne.

La courbe d'indice des vides obtenue à partir de la théorie ROAD pour un rapport de tailles $x = 0,2$ et pour une taille de caverne $x_0 = 0,2$ est la suivante.

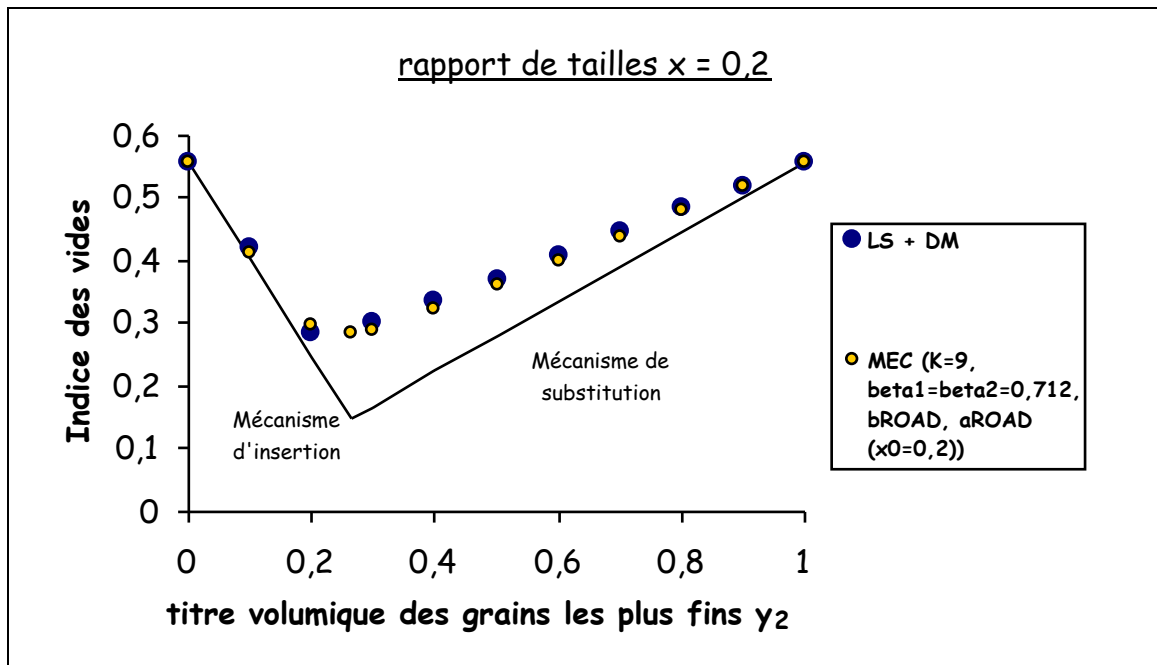


Figure VI-17 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,2$, obtenus par simulation numérique LS + DM et à partir du MEC. Ce dernier est utilisé avec un indice de serrage $K=9$, avec les coefficients d'interaction de la théorie ROAD b_{ROAD} et a_{ROAD} , pour une taille de caverne $x_0=0,2$ et avec les compacités résiduelles $\beta_1=\beta_2=0,712$ correspondant aux compacités réelles $\alpha_1=\alpha_2=0,641$.

Pour un rapport de tailles $x = 0,2$, si l'on effectue une comparaison avec les résultats issus de la simulation numérique, les valeurs provenant du Modèle d'Empilement Compressible MEC combinées avec les coefficients d'interaction de la théorie ROAD, que nous avons développée, sont très satisfaisantes. Cela signifie que l'indice de serrage $K=9$ est bien adapté et que les écarts enregistrés précédemment provenaient effectivement d'un coefficient de desserrement inadapté. En remplaçant la valeur initiale $a_{\text{L00}}(0,2) = 0,451$ adaptée aux grains roulés ou concassés par $a_{\text{ROAD}}(0,2) = 0$, cela montre d'une part que la condition aux limites $\left. \frac{\partial a(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$ est acceptable pour des particules sphériques et lisses et d'autre part qu'il est possible, comme Stovall l'a fait en 1986 [STOV86], de baser la modélisation de l'effet de desserrement sur l'existence de cavernes dans lesquelles peuvent se glisser des particules plus petites.

Pour le rapport de tailles $x = 0,4$, les valeurs trop optimistes prédites par le MEC à l'optimum et autour de celui-ci du côté des « fins dominants » montrent que le coefficient d'effet de paroi est sous-estimé. C'est pourquoi nous allons remplacer les coefficients d'interaction originaux a_{L00} (desserrement) et b_{L00} (paroi) par ceux de la théorie ROAD a_{ROAD} et b_{ROAD} . Concernant la taille de caverne à adopter, nous allons conserver $x_0 = 0,2$. En effet, nous avons montré (figure V-4) que les points expérimentaux du coefficient d'effet de desserrement obtenus à partir des expériences de Ben Aïm sur des sphères et représentés en fonction du rapport de tailles x étaient assez bien répartis autour de la courbe obtenue à partir de la théorie ROAD pour la taille de caverne $x_0 = 0,2$.

Le coefficient d'effet de paroi b_{ROAD} se détermine de la façon suivante :

Coefficient d'effet de paroi : b_{ROAD} – rapport de tailles : $x=0,4$		
Paramètre	Expression ou tableau	valeur
Compacité mono-modulaire réelle : $\alpha_1 = \alpha_2$	Tableau VI-2	$\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$
Indice de serrage : K	Tableau VI-9	$K = 9$
Compacité mono-modulaire virtuelle : $\beta_1 = \beta_2$	Expression VI-39	$\beta_1 = \beta_2 \approx 0,712$
Coefficient de perturbation permettant de délimiter la zone perturbée autour d'une grosse particule : k_p	Tableau III-7	$k_p = 1,0499$
Diamètre de la cellule de référence permettant de délimiter la zone perturbée : d_{hyp}	Expression III-1	$d_{hyp} \approx 1,356 d_1$
Nombre de petites sphères dans la zone perturbée : N_{12}	Expression III-15	$N_{12,CS}^{dense}(0,4) = 37,95$
Compacité des petites sphères dans la zone perturbée : β'_2	Expression III-20	$\beta'_2 = 0,595$
Rapport des compacités en zone perturbée et en pleine masse : $k_w = \frac{\beta'_2}{\beta_2}$		$k_w \approx 0,835$
Coefficient d'effet de paroi : b_{ROAD}	Expression III-25	$b_{ROAD}(0,4) = 0,610$

Tableau VI-12 : Coefficient d'effet de paroi b_{ROAD} pour un rapport de tailles $x=0,4$.

Concernant l'effet de desserrement étudié à partir de la théorie ROAD, voici les résultats obtenus pour le rapport de tailles $x = 0,4$ et pour une taille de caverne $x_0 = 0,2$.

Coefficient d'effet de desserrement : a_{ROAD} – rapport de tailles : $x=0,4$ – caverne $x_0=0,2$		
Paramètre	Expression ou tableau	valeur
Compacité mono-modulaire réelle : $\alpha_1 = \alpha_2$	Tableau VI-2	$\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$
Indice de serrage : K	Tableau VI-9	$K = 9$
Compacité mono-modulaire virtuelle : $\beta_1 = \beta_2$	Expression VI-39	$\beta_1 = \beta_2 \approx 0,712$
Coefficient de perturbation permettant de délimiter la cellule de référence sphérique autour d'une petite particule : k_p	Tableau III-7	$k_p = 1,0499$
Diamètre de la cellule de référence : d_{hyp}	Expression IV-1	$d_{hyp} \approx 2,500 d_2$
Nombre de grosses sphères dans la cellule de référence : N_{21}	Expression IV-9	$N_{21,CS}^{dense}(0,4) = 5,528$
Compacité dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence : β'_1	Expression IV-16	$\beta'_1 = 0,581$
Rapport des compacités en zone subissant l'interférence et en pleine masse : $k_L = \frac{\beta'_1}{\beta_1}$		$k_L = 0,816$
Coefficient d'effet de desserrement de la théorie ROAD : a_{ROAD}	Expression IV-22	$a_{ROAD}(0,4) = 0,668$

Tableau VI-13 : Coefficient d'effet de desserrement a_{ROAD} pour un rapport de tailles $x=0,4$ et pour une taille de caverne $x_0=0,2$.

Pour un rapport de tailles $x = 0,4$ et une taille de caverne $x_0 = 0,2$, les valeurs issues du Modèle d'Empilement Compressible MEC combinées avec les coefficients d'interaction de la théorie ROAD que nous avons développée, sont très satisfaisantes comme le montre la figure VI-18 sur laquelle sont également portées les valeurs issues de la simulation numérique et celles obtenues par le MEC avec les coefficients d'interaction originaux (b_{L00} et a_{L00}). Par rapport aux paramètres ayant permis d'aboutir aux résultats présentés sur la figure VI-16, deux évolutions ont été apportées. Analysons-les.

Premièrement, du côté des « fins dominants », l'augmentation du coefficient d'effet de paroi de $b_{L00}(0,4)=0,535$, fourni empiriquement par l'expression II-19 de de Larrard, à $b_{ROAD}(0,4)=0,610$, évalué grâce à la modélisation ROAD pour une compacité mono-modulaire virtuelle $\beta_2 \approx 0,712$, a permis de corriger une légère sous-évaluation des indices des vides dans cette zone.

Deuxièmement, du côté des « gros dominants », l'évolution du coefficient d'effet de desserrement de $a_{L00}(0,4)=0,637$ à $a_{ROAD}(0,4)=0,668$ n'a que très légèrement modifié les résultats mais a permis de les affiner encore davantage à l'optimum.

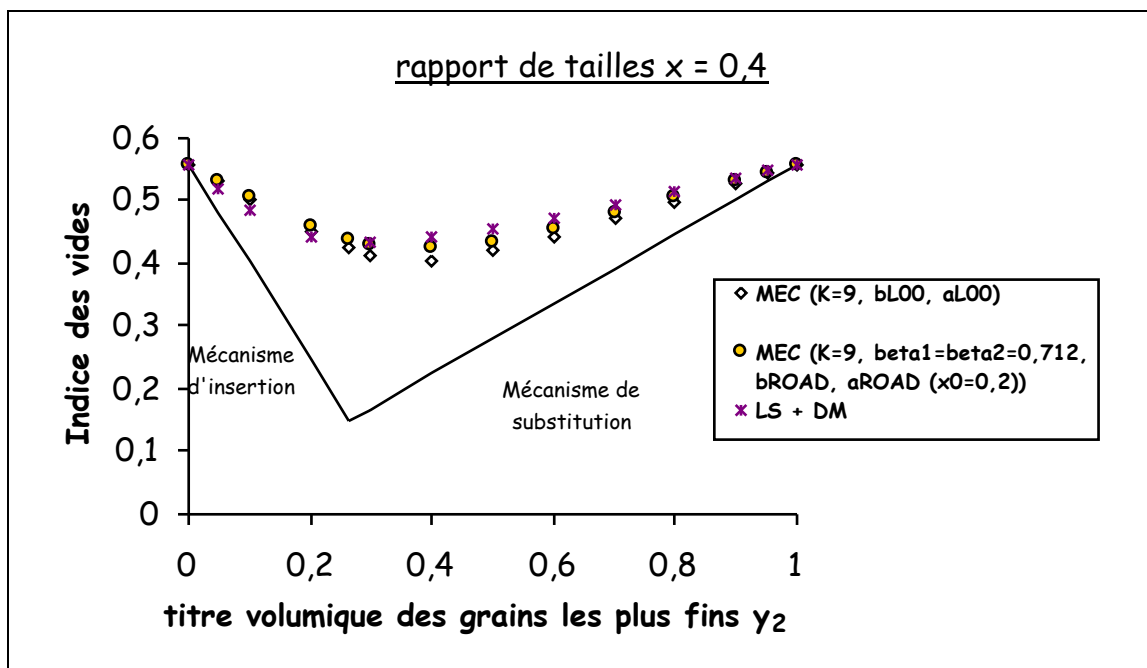


Figure VI-18 : comparaison des indices des vides d'un mélange binaire de rapport de tailles $x=0,4$, obtenus premièrement par simulation numérique LS + DM, deuxièmement à partir du MEC avec un indice de serrage $K=9$ et avec les coefficients d'interaction d'origine b_{L00} et a_{L00} et troisièmement à partir du MEC avec $K=9$ et les coefficients d'interaction de la théorie ROAD b_{ROAD} et a_{ROAD} pour une taille de caverne $x_0=0,2$ et avec les compacités résiduelles $\beta_1=\beta_2=0,712$ correspondant aux compacités réelles $\alpha_1=\alpha_2=0,641$.

Pour les deux rapports de tailles testés, $x = 0,2$ et $x = 0,4$, il apparaît que la modélisation baptisée ROAD adoptée pour les coefficients d'interaction liés à l'effet de paroi et à l'effet de desserrement permet un gain de précision si l'on se réfère aux résultats obtenus par simulation numérique LS + DM sur des sphères pour au moins trois raisons :

- tout d'abord, elle est précisément élaborée pour cette forme géométrique de particule ;
- ensuite, elle permet de s'adapter à différentes compacités monomodulaires virtuelles ($\beta_1 = \beta_2 \approx 0,712$ sur les exemples étudiés) lorsque celles-ci sont connues en réel ($\alpha_1 = \alpha_2 = 0,641$) et que l'indice de serrage est fixé ($\kappa = 9$);
- enfin, la reconnaissance de l'existence d'un rapport de tailles critique en deçà duquel une petite particule peut s'immiscer dans la caverne disponible sans créer de désorganisation du squelette des grosses particules et au delà duquel ce dernier subit une décompaction locale semble avérée.

6.8.6. Nombres de coordination.

Nous avons vu que la coordinnence est indispensable dans notre modélisation des interactions granulaires dans la mesure où sa détermination constitue une étape incontournable pour calculer la compacité virtuelle des petites billes dans la zone perturbée par l'effet de paroi et celle des grosses billes dans la zone subissant l'effet de desserrement. Mais elle présente également un intérêt théorique considérable dans la mesure où elle permet de donner des indications importantes pour savoir si l'empilement est bloqué ou non. Elle fournit, en quelque sorte, un aperçu du réseau des contacts en quantifiant leur connectivité. Il est ainsi possible d'établir une comparaison entre l'état d'équilibre de l'empilement étudié et celui d'un empilement de référence isostatique caractérisé par une coordinnence moyenne égale à **6** en l'absence de frottement entre particules sphériques. En revanche, un empilement est dit hyperstatique si le nombre de contacts est strictement supérieur à **6**. Il faut toutefois préciser que l'isostaticité est une propriété relative aux particules constituant le squelette par lequel transitent les efforts. Il s'agit de la structure composée des particules non-flottantes (« non-rattlers »). Au contraire, les particules flottantes (« rattlers ») sont celles qui ne transmettent aucune force : en raison de l'absence de pesanteur dans les simulations effectuées, elles sont libres de se mouvoir à l'intérieur des cavités formées par leurs voisines immobiles. Examinons leur pourcentage pour les rapports de tailles $x = 0,2$ et $x = 0,4$, lorsque le paramètre de raideur vaut $\kappa \approx 8400$ (expression VI-35), en fonction de la proportion γ_2 (tableau VI-14 et figure VI-19). Parallèlement, nous analyserons les nombres de coordination obtenus en tenant compte de leur présence : **NC** (figure VI-20).

Y ₁	Y ₂	x = 0,2			x = 0,4		
		codes	Nombre de particules flottantes	% de particules flottantes P ₀	codes	Nombre de particules flottantes	% de particules flottantes P ₀
0,05	0,95				G16 à G23	71	1,775
0,1	0,9	G00 à G07	69	1,725	J65 à J72	72	1,800
0,2	0,8	I01 à I08	76	1,900	J01 à J08	90	2,250
0,3	0,7	I09 à I16	86	2,150	J09 à J16	105	2,625
0,4	0,6	I17 à I24	96	2,400	J17 à J24	143	3,575
0,5	0,5	I25 à I32	127	3,175	J25 à J32	198	4,950
0,6	0,4	I33 à I40	151	3,775	J33 à J40	296	7,400
0,7	0,3	I41 à I48	251	6,275	J41 à J48	511	12,775
0,8	0,2	I49 à I56	3641	91,025	J49 à J56	1170	29,250
0,9	0,1	H08 à H15	3694	92,350	J57 à J64	1729	43,225
0,95	0,05				F16 à F23	1420	35,500

Tableau VI-14 : Pourcentage p₀ de particules flottantes dans une configuration de N=4000 particules, paramètre de raideur κ=8400, pour des rapports de tailles x=0,2 et x=0,4, en fonction de la proportion volumique des petites particules y₂.

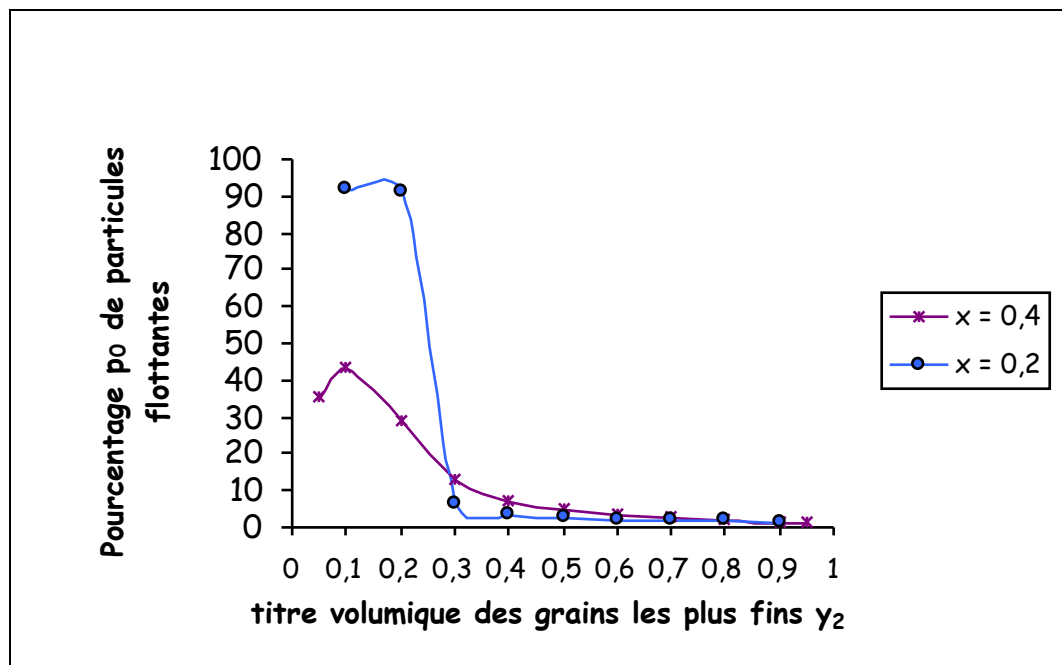


Figure VI-19 : Pourcentage p₀ de particules flottantes dans une configuration de N=4000 particules, avec un paramètre de raideur κ=8400, pour x=0,2 et x=0,4, en fonction de la proportion volumique des petites particules y₂.

Rapport de tailles $x = 0,2 - N = 4000$ particules						
codes	Y_1	Y_2	Nombre de contacts	Nombre de particules flottantes	Nombre de coordination avec les particules flottantes	Nombre de coordination sans les particules flottantes
G00 à G07	0,1	0,9	11927	69	5,96	6,07
I01 à I08	0,2	0,8	11909	76	5,95	6,07
I09 à I16	0,3	0,7	11876	86	5,93	6,07
I17 à I24	0,4	0,6	11857	96	5,92	6,07
I25 à I32	0,5	0,5	11753	127	5,87	6,07
I33 à I40	0,6	0,4	11676	151	5,83	6,07
I41 à I48	0,7	0,3	11362	251	5,68	6,06
I49 à I56	0,8	0,2	1127	3641	0,563	6,26
H08 à H15	0,9	0,1	929	3694	0,464	6,07

Tableau VI-15 : Nombre de coordination, avec et sans particules flottantes, dans une configuration de $N=4000$ particules, paramètre de raideur $\kappa=8400$, pour un rapport de tailles $x=0,2$, en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 .

Rapport de tailles $x = 0,4 - N = 4000$ particules						
codes	Y_1	Y_2	Nombre de contacts	Nombre de particules flottantes	Nombre de coordination avec les particules flottantes	Nombre de coordination sans les particules flottantes
G16 à G23	0,05	0,95	11921	71	5,96	6,07
J65 à J72	0,1	0,9	11932	72	5,96	6,08
J01 à J08	0,2	0,8	11875	90	5,94	6,07
J09 à J16	0,3	0,7	11830	105	5,91	6,07
J17 à J24	0,4	0,6	11715	143	5,86	6,07
J25 à J32	0,5	0,5	11554	198	5,78	6,08
J33 à J40	0,6	0,4	11257	296	5,63	6,08
J41 à J48	0,7	0,3	10620	511	5,31	6,09
J49 à J56	0,8	0,2	8600	1170	4,30	6,08
J57 à J64	0,9	0,1	6903	1729	3,45	6,08
F16 à F23	0,95	0,05	7834	1420	3,92	6,07

Tableau VI-16 : Nombre de coordination, avec et sans particules flottantes, dans une configuration de $N=4000$ particules, paramètre de raideur $\kappa=8400$, pour un rapport de tailles $x=0,4$, en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 .

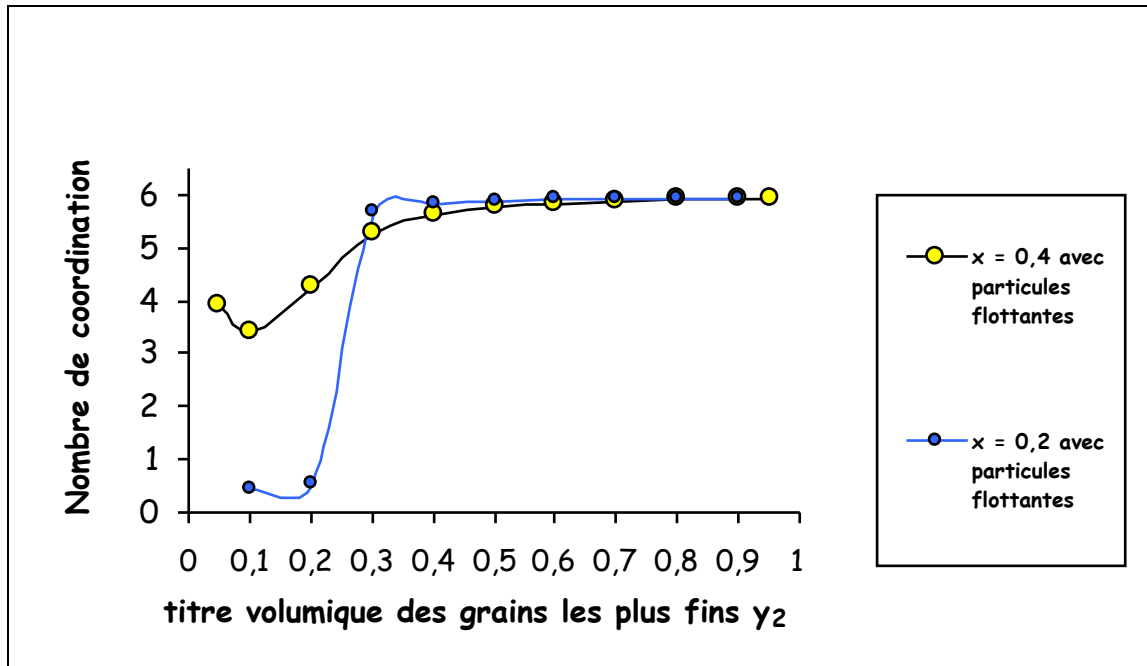


Figure VI-20 : Nombre de coordination NC , avec particules flottantes, pour $N=4000$ particules, en fonction de la proportion volumique des particules fines y_2 .

Pour effectuer notre analyse, nous distinguerons essentiellement quatre zones, les résultats étant obtenus avec un paramètre de raideur $\kappa \approx 8400$.

Pour les mélanges riches en éléments fins ($y_2 \geq 60\%$), on observe une proportion de particules flottantes inférieure à 4 % (figure VI-19) : en l'absence de frottement, une très grande majorité de petites billes participe à l'édifice granulaire et à la transmission des efforts. Pour les deux rapports de tailles étudiés, on ne distingue pas de divergence notable concernant la proportion de grains flottants p_0 . Parallèlement (figure VI-20), le nombre de coordination calculé en tenant compte de ces derniers, NC , évolue très peu : il est légèrement inférieur à 6 quel que soit le rapport de tailles. Les éléments fins constituent effectivement la classe granulaire dominante. Eu égard à ce critère, on peut effectivement qualifier cette zone de zone des « petits dominants ».

Pour les mélanges dont la proportion volumique en petites particules y_2 est comprise entre 30 % et 60 % et au fur et à mesure que celle-ci décroît, on observe un écart croissant entre les proportions de particules flottantes p_0 mesurées pour chacun des rapports de tailles étudiés. Pour $y_2 = 60\%$, on obtient en effet : $p_0^{x=0,4} \approx 3,5\%$ contre $p_0^{x=0,2} = 2,4\%$ et pour $y_2 = 30\%$: $p_0^{x=0,4} \approx 12,8\%$ contre $p_0^{x=0,2} \approx 6,3\%$. Leur pourcentage s'avère plus important pour le plus faible contraste de dimensions : $x = 0,4$. Pour celui-ci, cette évolution va de pair avec l'apparition de l'effet d'interférence et son intensification, comme le met en évidence la figure VI-7. Au fur

et à mesure que leur proportion augmente, les grosses particules ne sont plus éparpillées dans la matrice des éléments fins : leur effet ne se réduit plus uniquement à l'effet de leur paroi. Leur disposition les unes par rapport aux autres finit par avoir une influence. Une certaine quantité de particules fines se trouve progressivement prise au piège dans les interstices disponibles entre les grosses, favorisant un accroissement de la proportion de particules flottantes et la diminution du nombre de coordination les prenant en compte NC .

Pour les mélanges dont la proportion volumique en petites particules γ_2 est comprise entre 20% et 30%, c'est-à-dire dans la zone de l'optimum, mais dont la composition évolue du second pourcentage vers le premier, on assiste à une très nette augmentation de la proportion de particules flottantes pour le plus grand des deux contrastes de tailles ($x = 0,2$) : $p_0^{x=0,2}$ passe en effet de 6,3% pour $\gamma_2 = 30\%$ à 91,0% pour $\gamma_2 = 20\%$. Parallèlement, NC chute de 5,68 à 0,56. Pour l'autre rapport de tailles, $x = 0,4$, cette évolution se produit également, mais de façon beaucoup plus douce. Cela signifie que la transition vers un réseau de contacts s'établissant principalement entre les grosses particules s'effectue d'autant plus brutalement, autour de l'optimum, que le contraste des dimensions du mélange binaire est important. Dans ce cas, ce passage s'accompagne d'une forte localisation des contacts inter-particulaires puisqu'ils sont beaucoup moins nombreux et qu'une grande quantité d'éléments fins piégés dans les cavités se comportent comme des particules flottantes. La classe dominante est alors constituée des grosses particules et l'appellation « gros dominants » est alors parfaitement justifiée. Ces résultats, obtenus par simulation numérique, viennent également conforter l'idée qu'une modélisation de l'effet de desserrement basée sur l'existence de cavernes est adaptée à la situation.

Enfin, pour les mélanges dont la proportion volumique en petites particules γ_2 est inférieure à 20%, p_0 et NC restent stables pour $x = 0,2$ alors qu'ils subissent des variations lors du passage de 20% à 5% pour $x = 0,4$. Pour ce dernier rapport de tailles, un pic de p_0 est décelé pour $\gamma_2 = 10\%$. C'est en effet pour ce titre volumique que les particules flottantes sont en plus grande quantité relativement au nombre total de particules N . Mais c'est bien pour $\gamma_2 = 5\%$ qu'elles restent le plus nombreuses relativement au nombre N_2 de particules fines.

Pour conclure, signalons que le nombre de coordination obtenu sans tenir compte des particules flottantes (tableaux VI-15 et VI-16) est légèrement supérieur à 6. Nous aurons l'occasion d'y revenir.

Intéressons-nous maintenant à la distribution des nombres de contacts des petites et des grosses particules pour différentes proportions γ_2 : 10 %, 20 %, 30 %, 50 %, 70 % et 90 %.

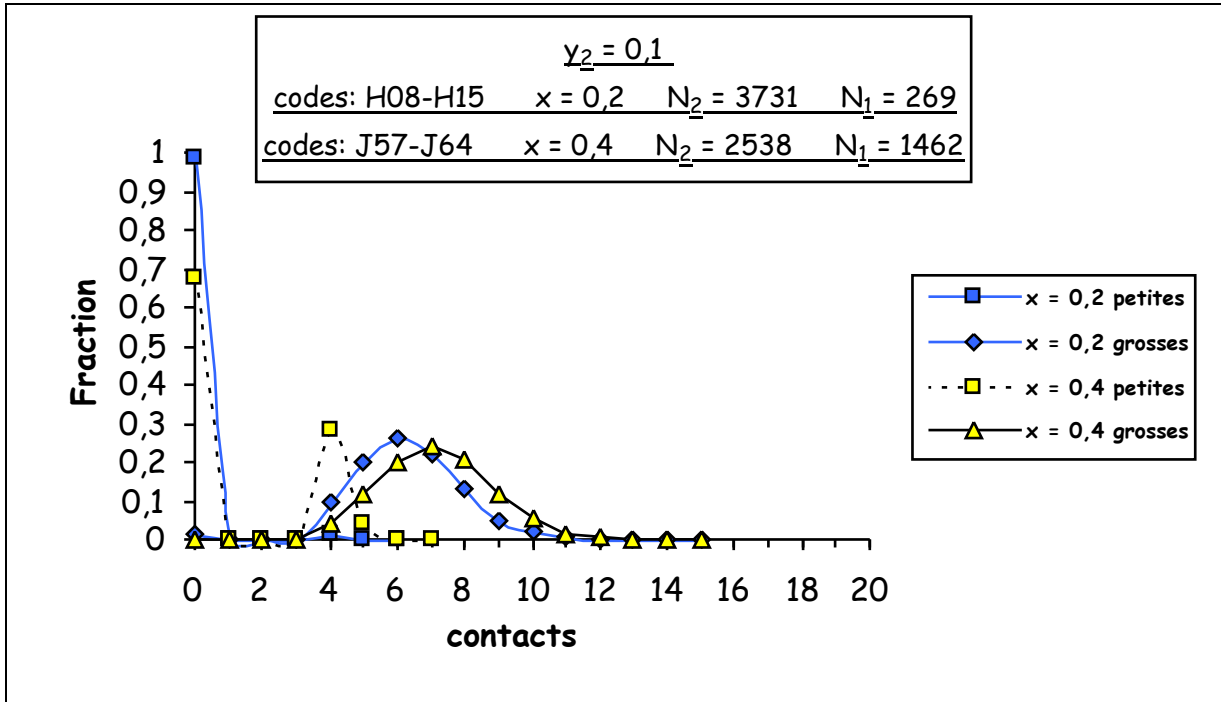


Figure VI-21 : distribution du nombre de contacts sur les petites et les grosses particules pour une proportion volumique de petites particules $\gamma_2=10\%$.

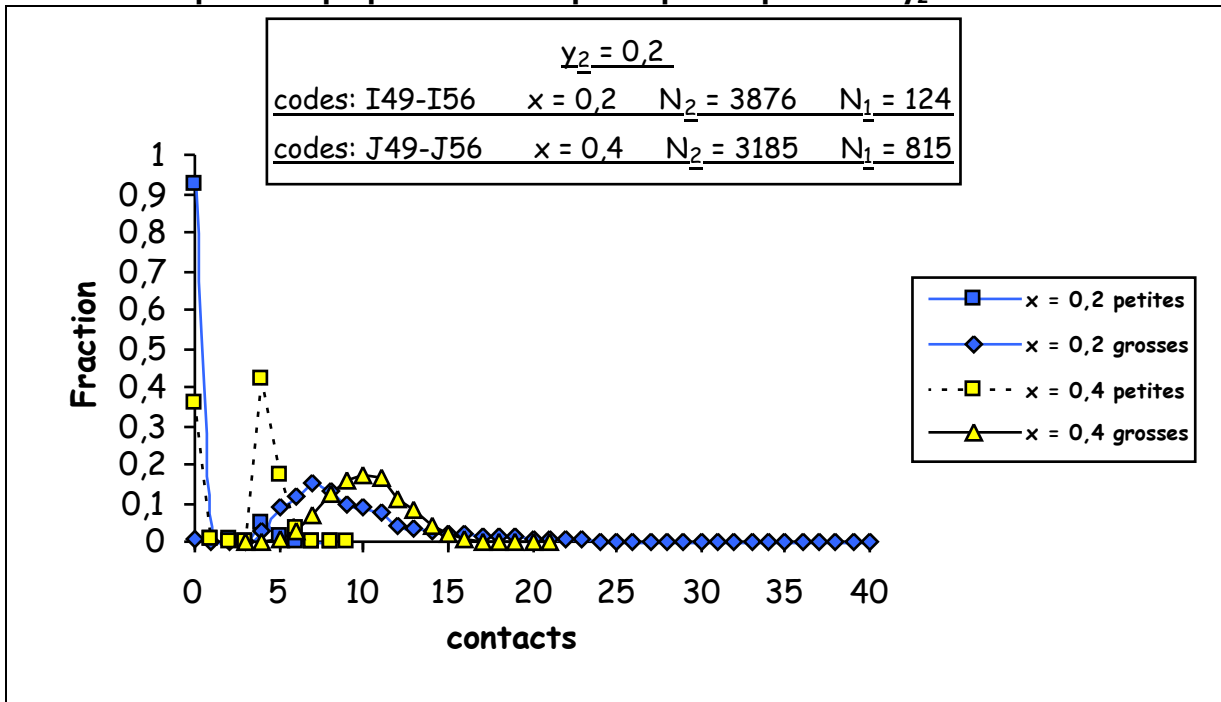


Figure VI-22 : distribution du nombre de contacts sur les petites et les grosses particules pour une proportion volumique de petites particules $\gamma_2=20\%$.

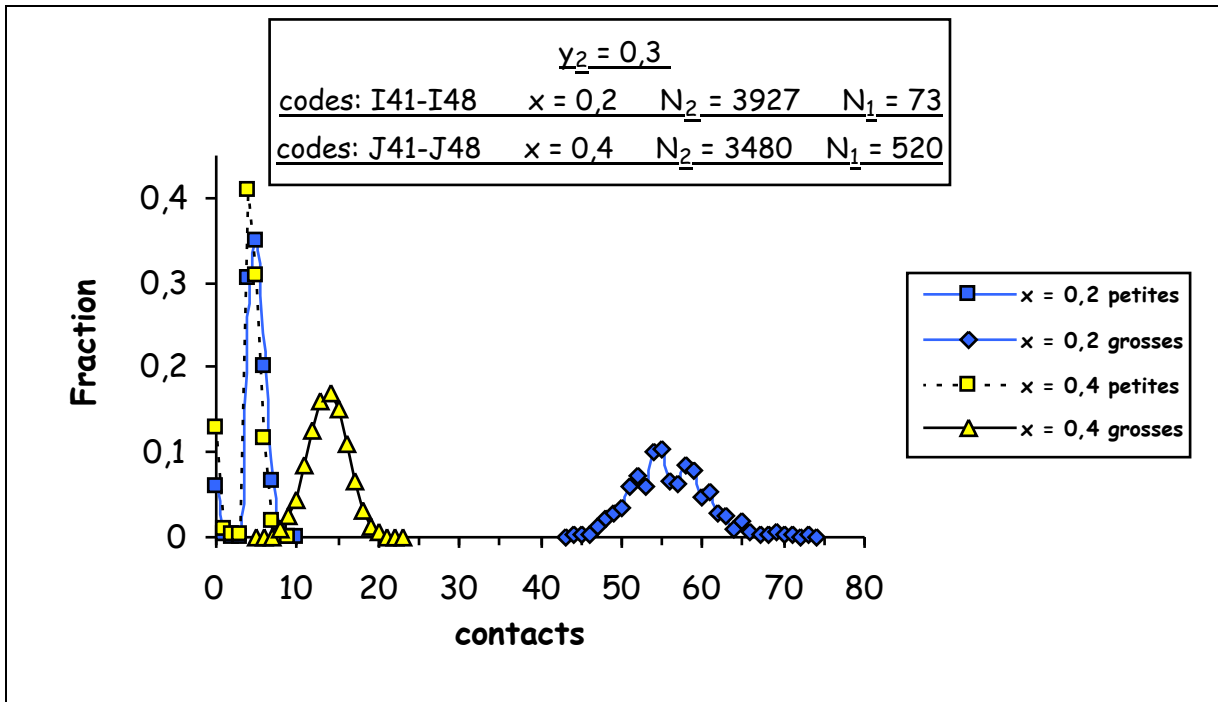


Figure VI-23 : distribution du nombre de contacts sur les petites et les grosses particules pour une proportion volumique de petites particules $y_2=30\%$.

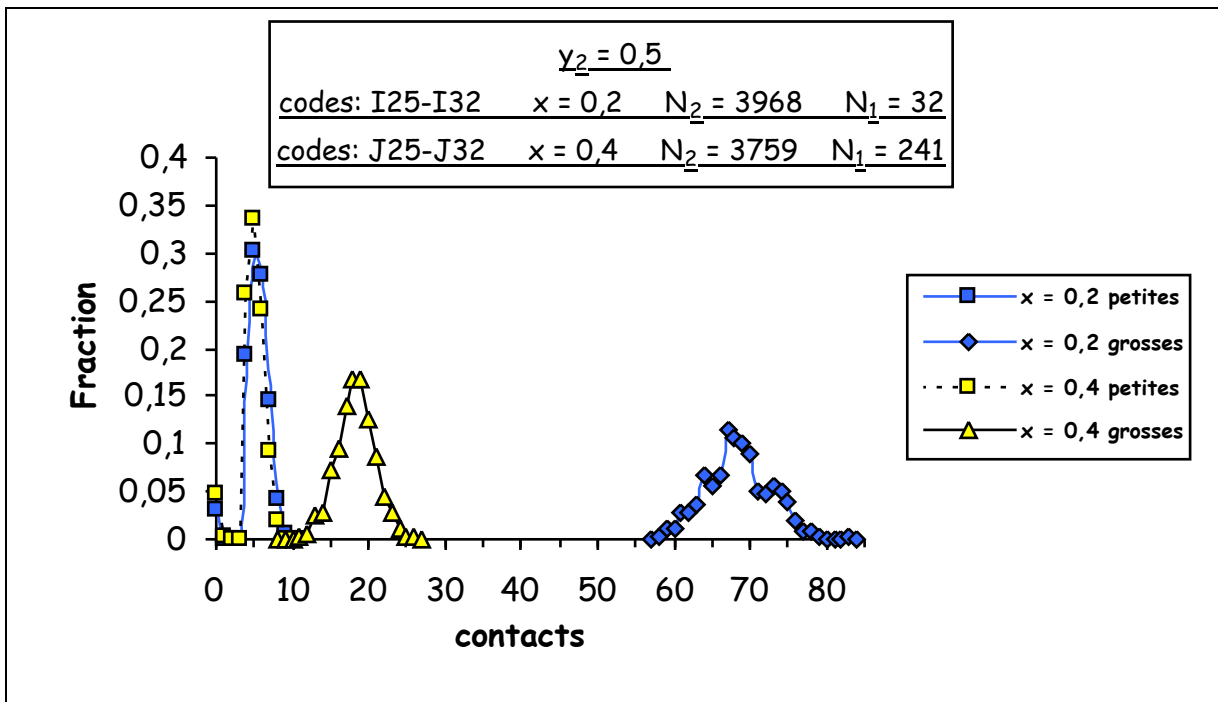


Figure VI-24 : distribution du nombre de contacts sur les petites et les grosses particules pour une proportion volumique de petites particules $y_2=50\%$.

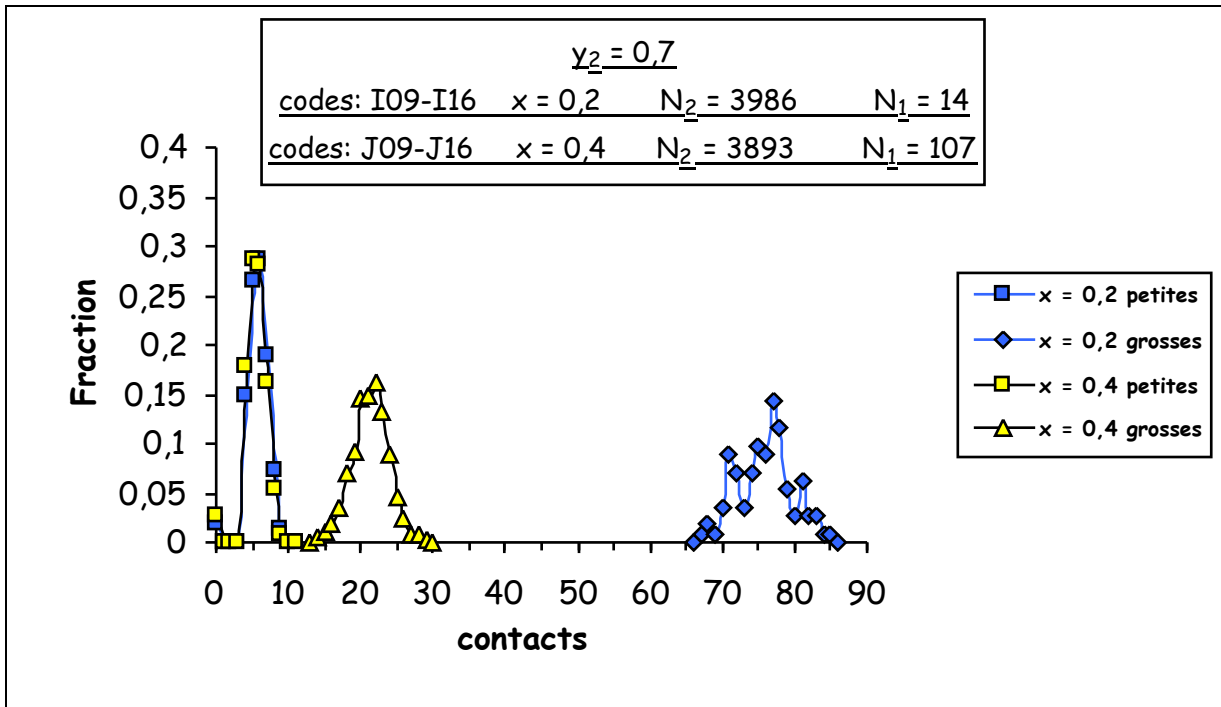


Figure VI-25 : distribution du nombre de contacts sur les petites et les grosses particules pour une proportion volumique de petites particules $y_2=70\%$.

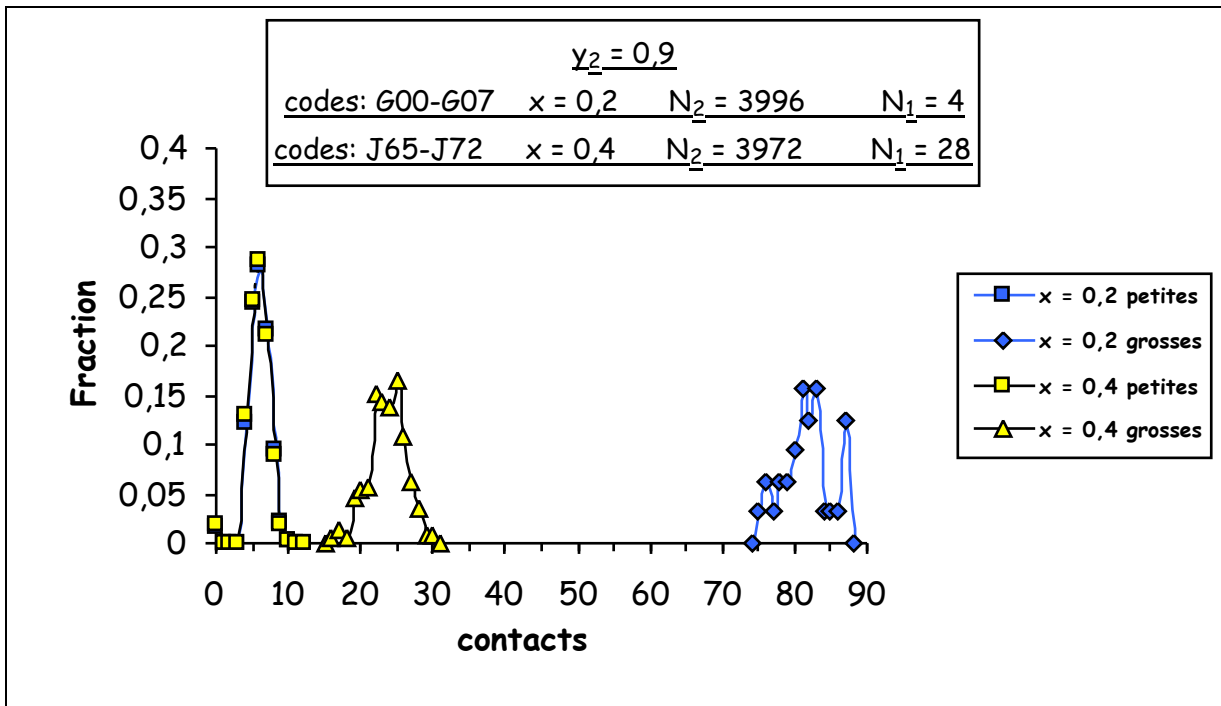


Figure VI-26 : distribution du nombre de contacts sur les petites et les grosses particules pour une proportion volumique de petites particules $y_2=90\%$.

Pour obtenir une configuration d'empilement stable, chaque bille doit avoir au moins 4 contacts avec ses voisines. Nous pouvons le vérifier en examinant plus particulièrement la distribution de ce nombre sur les particules fines. Pour les différentes proportions volumiques γ_2 examinées, et si l'on fait abstraction de la zone concernant les particules flottantes, les figures VI-21 à VI-34 font apparaître un pic situé entre 4 et 6 contacts selon les cas, comme le résume le tableau suivant.

γ_2	$x = 0,2$		$x = 0,4$	
	Nombre de contacts sur les petites particules	fraction	Nombre de contacts sur les petites particules	fraction
10 %	4	$\approx 1\%$	4	$\approx 28\%$
20 %	4	$\approx 5\%$	4	$\approx 42\%$
30 %	5	$\approx 35\%$	4	$\approx 41\%$
50 %	5 ou 6	$\approx 30\%$ ou $\approx 28\%$	5	$\approx 33\%$
70 %	5 ou 6	$\approx 27\%$ ou $\approx 29\%$	5 ou 6	$\approx 29\%$ ou $\approx 28\%$
90 %	6	$\approx 29\%$	6	$\approx 29\%$

Tableau VI-17 : Situation du « pic » concernant la distribution des contacts exercés sur les petites billes, en fonction de la proportion volumique de ces dernières γ_2 , pour les deux rapports de tailles étudiés $x=0,2$ et $x=0,4$. La fraction est obtenue en tenant compte des particules flottantes.

Plus précisément, pour les deux rapports de tailles étudiés et au fur et à mesure que la proportion volumique des petites particules augmente de $\gamma_2 = 10\%$ à $\gamma_2 = 90\%$, on observe une tendance à l'accroissement du nombre de contacts, de 4 à 6, correspondant à la « bosse » de la courbe de distribution (figures VI-27 et VI-28). Celle-ci s'adoucit alors progressivement, passant d'une forme plus (pour $x = 0,4$) ou moins (pour $x = 0,2$) pointue dissymétrique à une forme en cloche beaucoup plus symétrique.

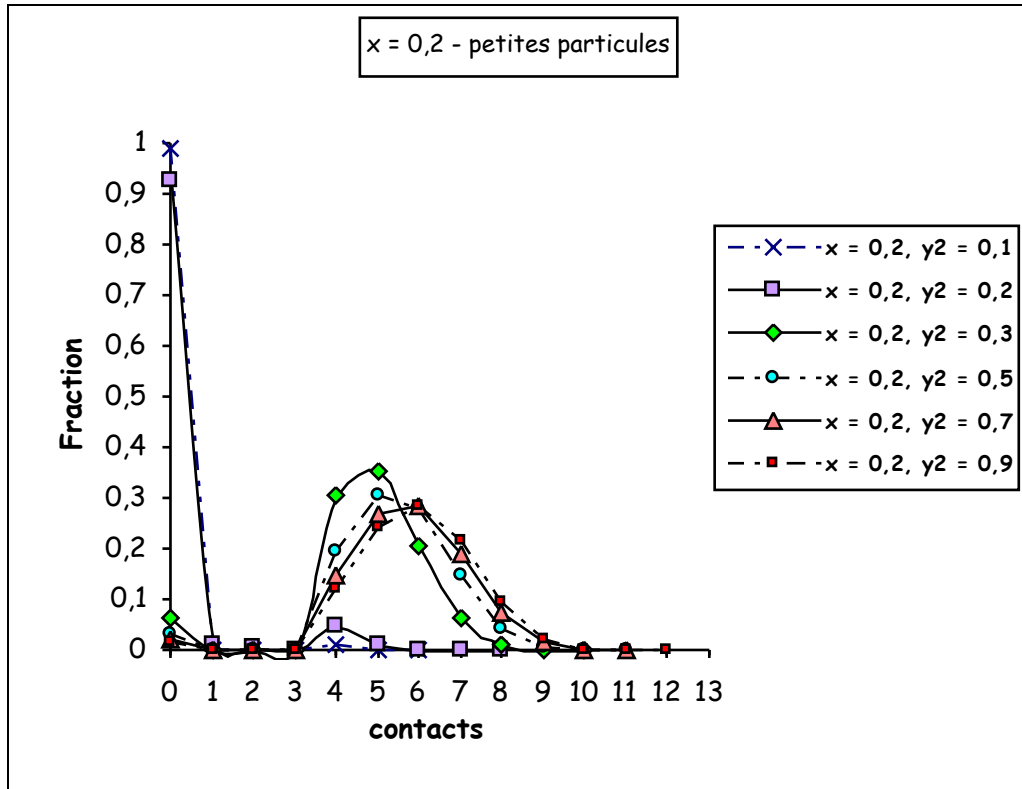


Figure VI-27 : distribution du nombre de contacts sur les **petites particules** pour un rapport de tailles $x=0,2$ et pour différentes proportions volumiques y_2 .

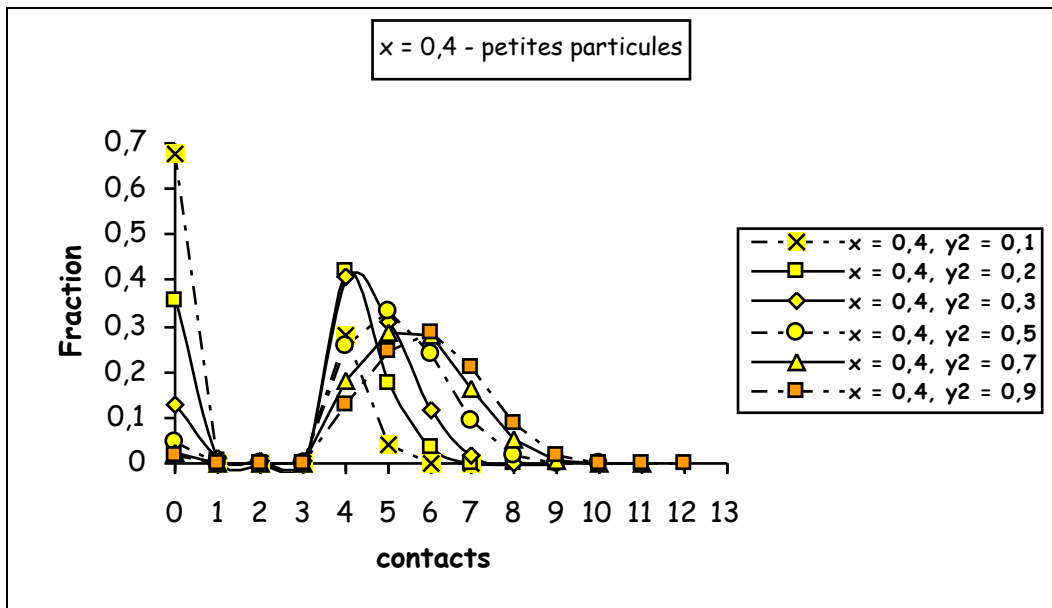


Figure VI-28 : distribution du nombre de contacts sur les **petites particules** pour un rapport de tailles $x=0,4$ et pour différentes proportions volumiques y_2 .

Poursuivons plus finement notre analyse des contacts sur les petites particules.

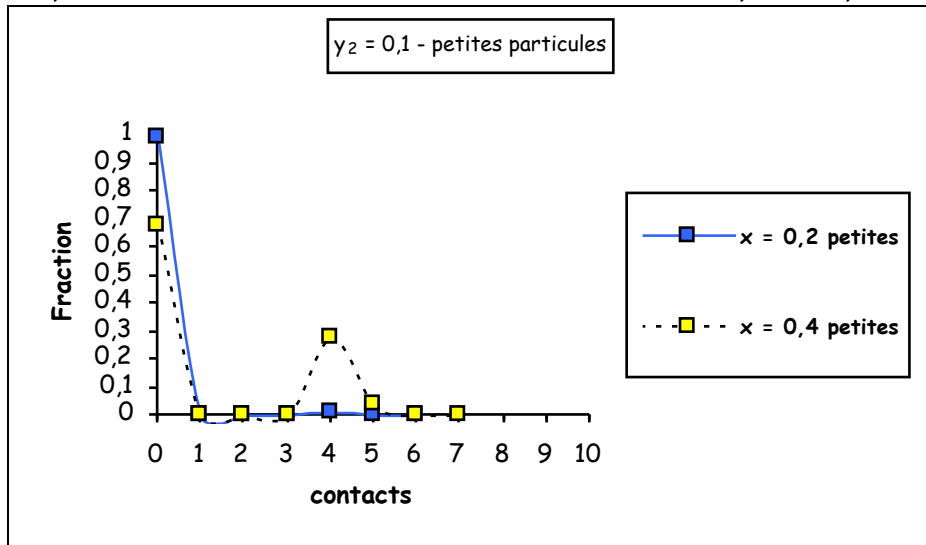


Figure VI-29 : distribution du nombre de contacts sur les particules fines avec $y_2=10\%$.

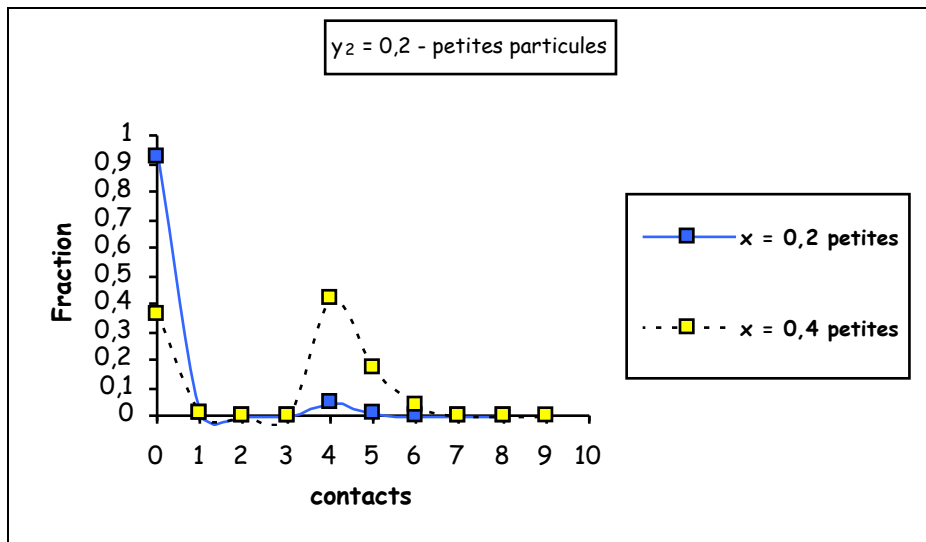


Figure VI-30 : distribution du nombre de contacts sur les particules fines avec $y_2=20\%$.

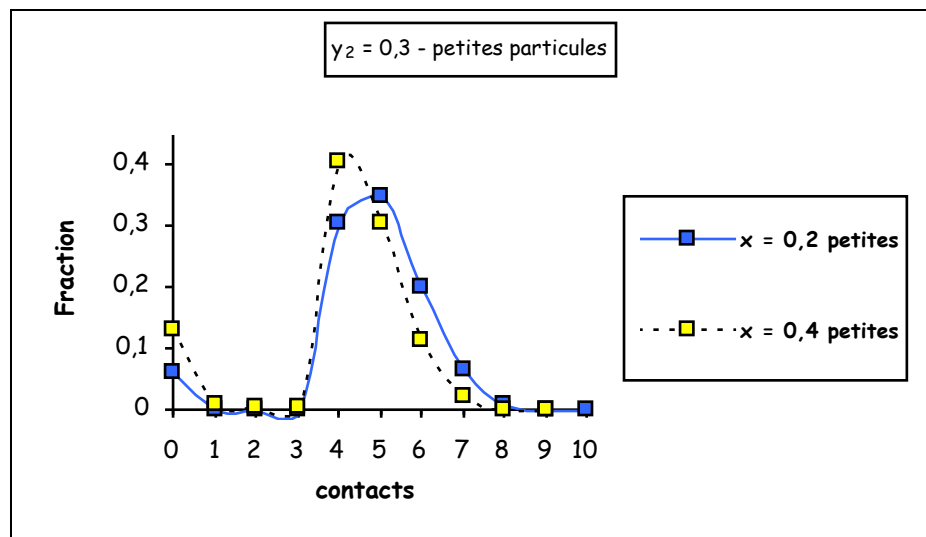


Figure VI-31 : distribution du nombre de contacts sur les particules fines avec $y_2=30\%$.

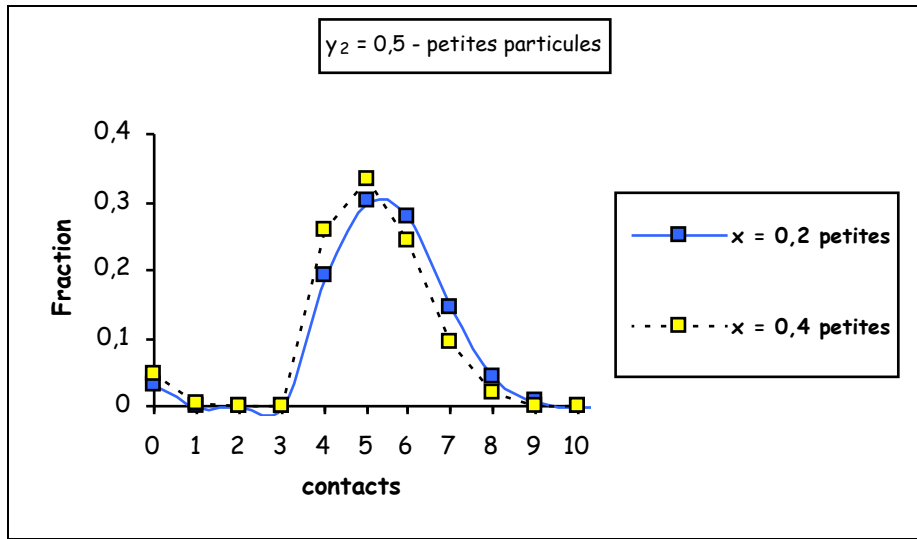


Figure VI-32 : distribution du nombre de contacts sur les particules fines avec $\gamma_2=50\%$.

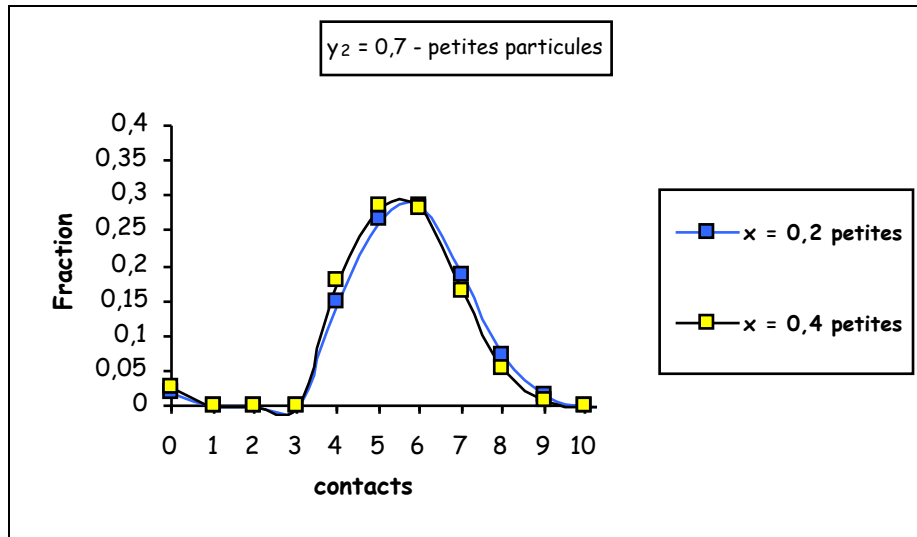


Figure VI-33 : distribution du nombre de contacts sur les particules fines avec $\gamma_2=70\%$.

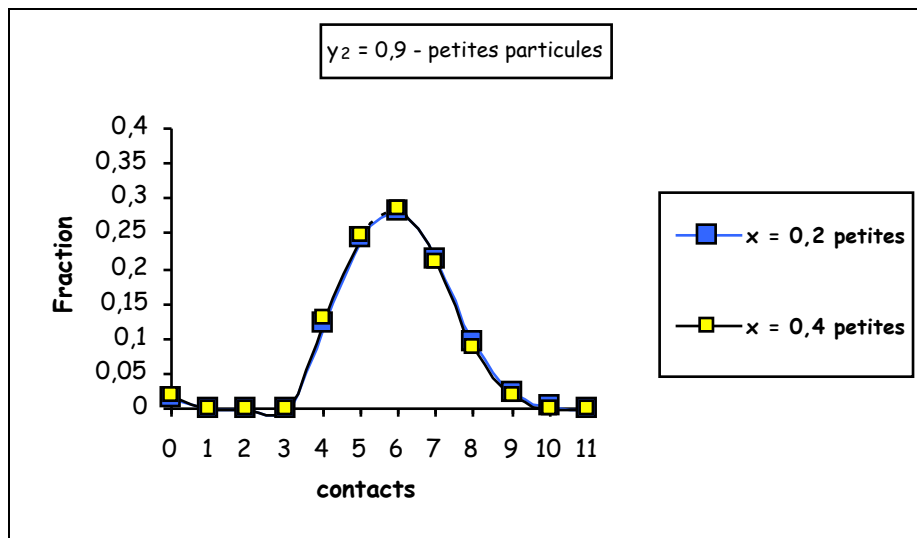


Figure VI-34 : distribution du nombre de contacts sur les particules fines avec $\gamma_2=90\%$.

Examinons, cette fois-ci, l'évolution du nombre de contacts sur les particules fines au fur et à mesure que la proportion volumique γ_2 décroît.

Pour les mélanges riches en éléments fins ($\gamma_2 = 90\%$ et $\gamma_2 = 70\%$) (figures VI-26 et VI-25), on note une forte concordance des courbes représentatives pour les deux rapports de tailles étudiés $x = 0,2$ et $x = 0,4$. En changeant l'échelle des abscisses (figures VI-34 et VI-33), on obtient une forme « arrondie » symétrique autour d'une valeur se rapprochant de 6 contacts dans les deux cas. Cela signifie que plus on se rapproche d'un mélange constitué d'une taille unique de particules ($\gamma_2 = 100\%$), plus le nombre de contacts associé aux éléments fins va tendre vers le nombre de coordination NC_{iso}^* (formule VI-8), dit isostatique, qui correspond à la valeur à atteindre pour assurer la rigidité de la structure de l'empilement.

Pour les mélanges dont la proportion volumique en petites particules γ_2 est de 50% (figures VI-24 et VI-32), on obtient également une bonne concordance entre les deux courbes correspondant à $x = 0,2$ et $x = 0,4$. Cependant, par rapport aux mesures effectuées pour $\gamma_2 = 90\%$ et $\gamma_2 = 70\%$, une nouvelle tendance apparaît : la courbe correspondant à $x = 0,4$ est légèrement décalée vers la gauche par rapport à celle représentative de $x = 0,2$ et une forme plus pointue se précise. La proportion de fines particules présentant un nombre de contacts ≤ 5 est un peu plus importante pour le plus faible contraste de dimensions $x = 0,4$. Pour celui-ci, le transfert de contacts commençant à s'opérer des éléments « fins » vers les « gros » est légèrement plus accentué, l'effet d'interférence commençant à se faire sentir.

Pour les mélanges dont la proportion volumique en petites particules γ_2 est de 30% (figures VI-23 et VI-31), le nombre de contacts dominant est de 5 pour $x = 0,2$ et de 4 pour $x = 0,4$. Pour ce dernier, la courbe culmine à 40%. Elle présente une forme pointue dissymétrique liée à ce fort taux, combiné avec un pourcentage non négligeable à 5 contacts et avec l'absence presque totale de particules présentant 1, 2 ou 3 contacts. On sait en effet que moins de 3 contacts conduit à un mécanisme et que s'ils sont précisément au nombre de 3, l'équilibre est impossible si les forces exercées sont purement de compression.

Enfin, pour les mélanges dont la proportion volumique en petites particules γ_2 est égale à 20% ou 10%, la courbe correspondant au plus fort contraste de tailles $x = 0,2$ se démarque très nettement de celle obtenue pour $x = 0,4$ (figures VI-21, VI-22, VI-29 et VI-30). Pour $x = 0,4$, on note encore une bonne proportion de contacts

avec un nombre égal à 4, principalement pour $\gamma_2 = 20\%$. Cette remarque est particulièrement significative. Cela signifie que, pour ce rapport de tailles, une petite bille n'est pas suffisamment fine pour se glisser dans une cavité tétraédrique disponible entre 4 autres particules, et qu'elle les écarte en exerçant sur elles une certaine pression : l'effet de desserrement est vraiment mis en exergue. Pour $x = 0,2$, la courbe obtenue met en évidence un très faible pourcentage de particules fines à 4 contacts (5% pour $\gamma_2 = 20\%$, 1% pour $\gamma_2 = 10\%$). La raison tient à la forte surabondance de grains fins flottants (respectivement 94% et 99% calculés par rapport au nombre d'éléments fins) dont nous avons expliqué les raisons précédemment: l'effet de desserrement est alors très faible. Cela confirme, une fois de plus, que pour le rapport de tailles $x = 0,2$, le passage d'une proportion de particules fines de $\gamma_2 = 30\%$ à $\gamma_2 = 20\%$ se traduit par un fort transfert de contacts des éléments « fins » vers les « gros », et un passage très net vers la zone des « gros dominants ».

Examinons maintenant le nombre de contacts moyen sur les petites billes en fonction de leur proportion volumique γ_2 :

γ_2	$x = 0,2$			$x = 0,4$		
	codes	Nombre de petites billes avec les flottantes	Nombre de contacts moyen sur les petites billes avec les flottantes	codes	Nombre de petites billes avec les flottantes	Nombre de contacts moyen sur les petites billes avec les flottantes
0,95				G16 à G23	3987	5,90
0,9	G00 à G07	3996	5,89	J65 à J72	3972	5,84
0,8	I01 à I08	3992	5,81	J01 à J08	3937	5,67
0,7	I09 à I16	3986	5,69	J09 à J16	3893	5,49
0,6	I17 à I24	3979	5,57	J17 à J24	3836	5,26
0,5	I25 à I32	3968	5,37	J25 à J32	3759	4,98
0,4	I33 à I40	3953	5,16	J33 à J40	3650	4,61
0,3	I41 à I48	3927	4,75	J41 à J48	3480	4,05
0,2	I49 à I56	3876	0,280	J49 à J56	3185	2,80
0,1	H08 à H15	3731	0,045	J57 à J64	2538	1,33
0,05				F16 à F23	1805	0,909

Tableau VI-18 : Nombre de contacts moyen sur les petites billes, pour $x=0,2$ et $x=0,4$, en fonction de γ_2 , avec 4000 particules.

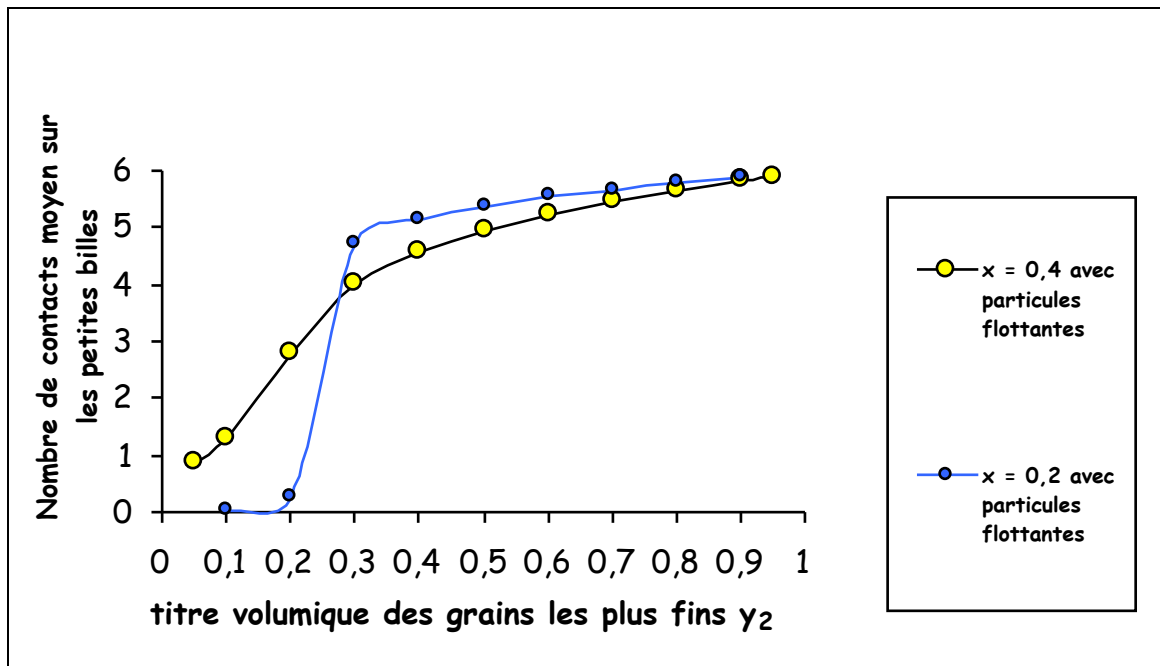


Figure VI-35 : Nombre de contacts moyen sur les petites billes pour des rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$, en fonction de γ_2 .

Pour les deux rapports de tailles testés, on observe une augmentation du nombre de contacts moyen sur les petites particules qui va évoluer ainsi jusqu'au cas du mélange à taille unique $\gamma_2 \rightarrow 1$ où une valeur légèrement supérieure à 6 va être atteinte si l'on ne tient pas compte des particules flottantes.

Pour $x = 0,4$, on obtient une courbe avec une évolution plutôt régulière. Pour $\gamma_2 = 5\%$ et $\gamma_2 = 10\%$, des contacts sur les fines sont déjà recensés, probablement et principalement de type fine-grosses : le desserrement des grosses particules par les petites commence à se faire sentir.

Pour $x = 0,2$, une courbe plutôt plate est obtenue au départ avec un nombre de contacts quasi-nul sur les éléments fins en raison de l'existence des cavernes au sein desquelles ceux-ci peuvent se loger. Elle se redresse subitement lors du passage par le titre volumique des fines particules pour lequel la compacité du mélange est maximale. Puis elle évolue quasi-linéairement entre les ordonnées 5 et 6 où les valeurs sont supérieures à celles obtenues pour l'autre rapport de tailles : le nombre de contacts fine-fines y est en effet plus important, les gros éléments étant davantage disséminés dans le mélange. Cette forme de courbe en « S » est caractéristique d'un changement brutal au niveau du squelette porteur de l'assemblée granulaire.

Intéressons-nous maintenant à l'analyse des contacts sur les grosses particules.

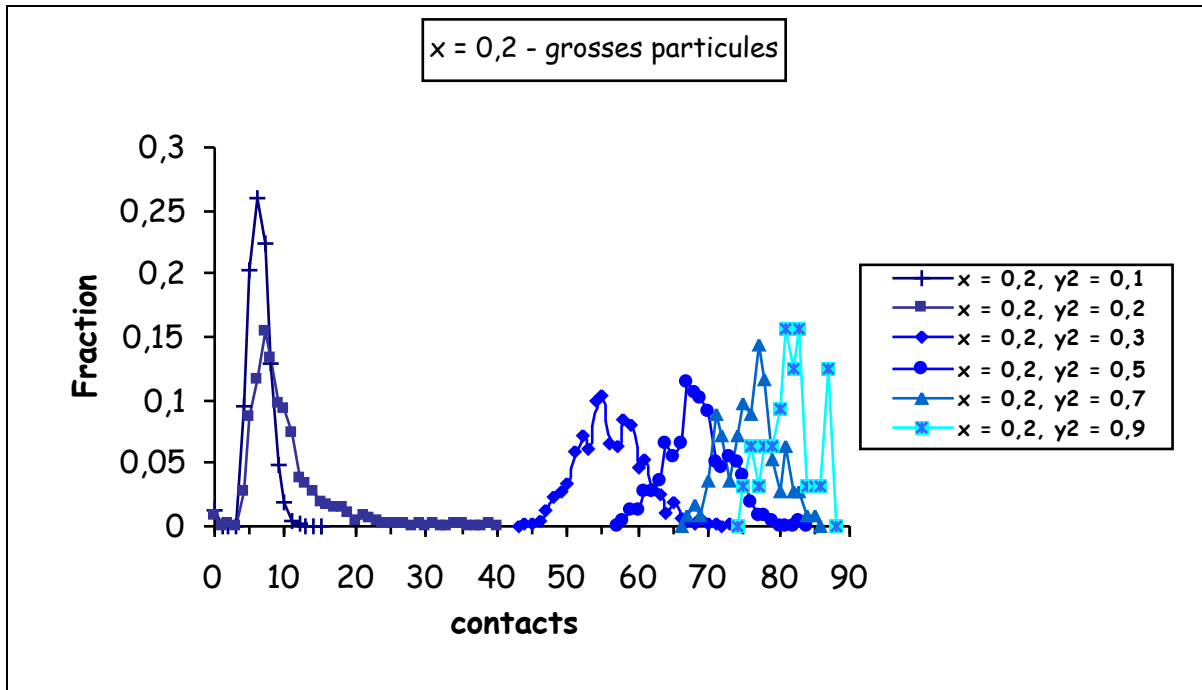


Figure VI-36 : distribution du nombre de contacts sur les grosses particules pour un rapport de tailles $x=0,2$ et pour différentes proportions volumiques y_2 .

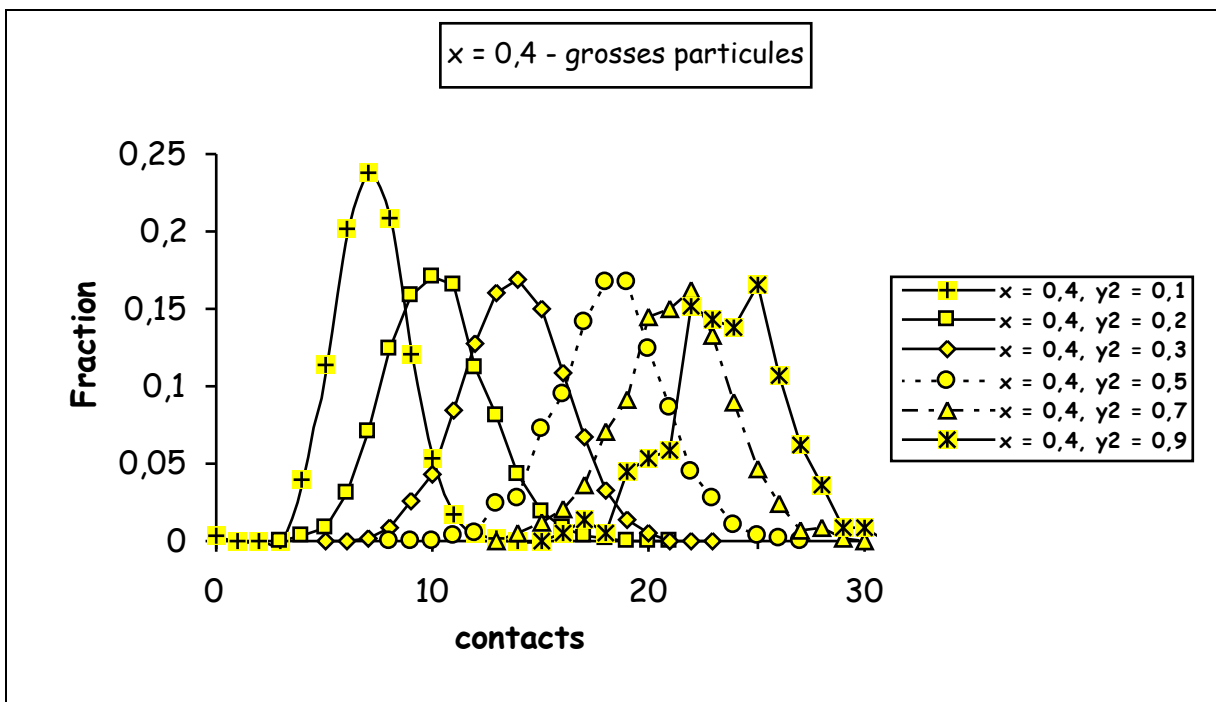


Figure VI-37 : distribution du nombre de contacts sur les grosses particules pour un rapport de tailles $x=0,4$ et pour différentes proportions volumiques y_2 .

Commençons par remarquer que les courbes de distribution du nombre de contacts sur les grosses particules présentent une forme beaucoup plus lissée et symétrique pour le rapport de tailles $x = 0,4$ (figure VI-37) par rapport à $x = 0,2$ (figure VI-36). Elles sont en effet obtenues sur un plus grand nombre de gros éléments.

Concernant $x = 0,4$ (figure VI-37), deux courbes se distinguent légèrement des autres, toujours en lien avec le commentaire précédent. Celle correspondant à la proportion $y_2 = 90\%$ présente un profil plus irrégulier car elle résulte d'une analyse effectuée sur des échantillons contenant seulement **28** grosses particules. Au contraire, celle correspondant à la proportion $y_2 = 10\%$ affiche un « pic » légèrement plus élevé que les autres : les résultats sont en effet moins dispersés car obtenus avec **1462** grosses particules.

Concernant $x = 0,2$ (figure VI-36), on remarque assez nettement deux séries de courbes.

Du côté des « gros dominants », la courbe de distribution sur les grosses particules obtenue pour $y_2 = 10\%$ est plutôt symétrique : d'une part parce que leur nombre est relativement important (**269**), d'autre part car le squelette porteur constitué par ces dernières est bien identifié. La courbe représentative de la proportion $y_2 = 20\%$, quant à elle, présente une distribution asymétrique avec une étendue importante du côté des grands nombres de contacts. Cela signifie qu'au voisinage de l'optimum, la position relative des grosses et des petites particules dans l'échantillon peut être légèrement fluctuante même si l'influence ne se fait pas ressentir au niveau de la compacité du mélange (voir l'exemple des échantillons **I49** et **I55** sur la figure VI-38).

De « l'autre côté » enfin et toujours pour $x = 0,2$, sur les quatre courbes (figure VI-36) correspondant à $y_2 = 30\%$, $y_2 = 50\%$, $y_2 = 70\%$, $y_2 = 90\%$ et au fur et à mesure que le titre volumique des fines particules augmente, on assiste à une légère croissance de la fraction maximale de chaque distribution mais avec des formes de courbes de plus en plus irrégulières : le premier constat est lié au fait que l'on progresse dans la zone des « fins dominants » et que celle-ci est de mieux en mieux identifiée, le deuxième constat provient du nombre de grosses billes de moins en moins important dans chaque échantillon (**4** pour $y_2 = 90\%$).

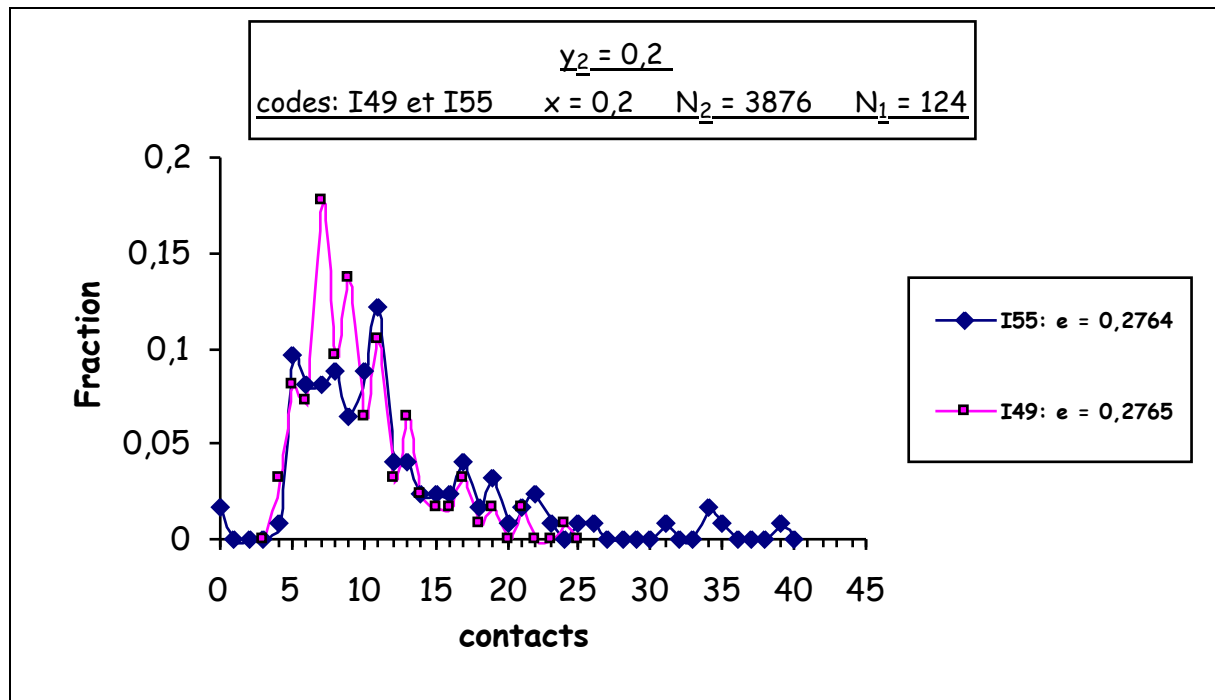


Figure VI-38 : distribution du nombre de contacts sur les grosses particules pour un rapport de tailles $x=0,2$ et pour une proportion volumique $y_2=20\%$, pour les 2 échantillons les plus compacts de la série [I49-I56] : I55 et I49 (indices des vides : $e = 0,2764$ et $0,2765$).

y_2	$x = 0,2$			$x = 0,4$		
	codes	Nombre de grosses billes avec les flottantes	Nombre de contacts moyen sur les grosses billes avec les flottantes	codes	Nombre de grosses billes avec les flottantes	Nombre de contacts moyen sur les grosses billes avec les flottantes
0,95				G16 à G23	13	24,23
0,9	G00 à G07	4	81,53	J65 à J72	28	23,59
0,8	I01 à I08	8	78,22	J01 à J08	63	22,39
0,7	I09 à I16	14	75,87	J09 à J16	107	21,23
0,6	I17 à I24	21	73,32	J17 à J24	164	19,81
0,5	I25 à I32	32	68,43	J25 à J32	241	18,24
0,4	I33 à I40	47	63,02	J33 à J40	350	16,27
0,3	I41 à I48	73	55,97	J41 à J48	520	13,77
0,2	I49 à I56	124	9,42	J49 à J56	815	10,18
0,1	H08 à H15	269	6,28	J57 à J64	1462	7,13
0,05				F16 à F23	2195	6,39

Tableau VI-19 : Nombre de contacts moyen sur les grosses particules, pour des rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$, en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 .

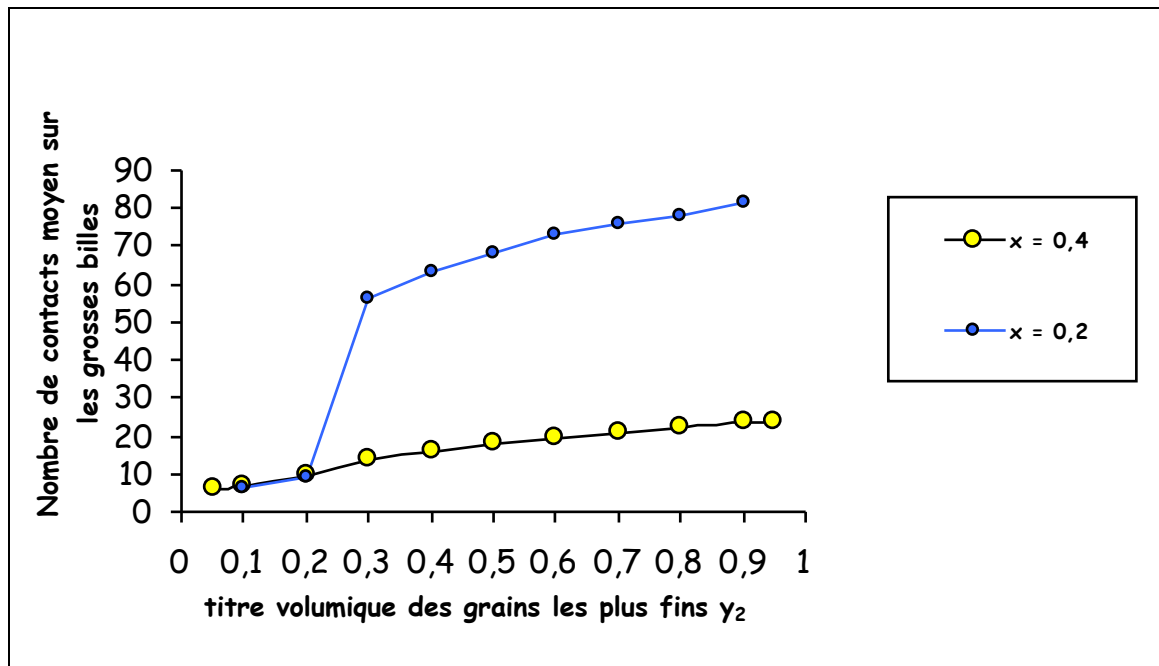


Figure VI-39 : Nombre de contacts moyen sur les grosses particules, pour des rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$, en fonction de la proportion volumique des petites particules y_2 , pour des échantillons de $N=4000$ particules.

La courbe représentant le nombre de contacts moyen sur les grosses particules (tableau VI-19 et figure VI-39) fait apparaître deux zones bien distinctes :

- pour $y_2 = 10\%$ et $y_2 = 20\%$: des valeurs quasi-identiques pour les deux rapports de tailles étudiés : le contraste des diamètres ne constitue pas le critère déterminant. Les fines particules ne sont pas encore en mesure d'envelopper correctement les plus grosses.
- de $y_2 = 30\%$ à $y_2 = 90\%$: une évolution dans la continuité des valeurs précédentes pour $x = 0,4$ et une croissance très forte suivie d'une progression beaucoup moins intense pour $x = 0,2$. Pour ce dernier rapport de tailles, la brusque augmentation dont il est question est liée au contraste des diamètres et à la possibilité qu'ont désormais les petites billes de pouvoir se plaquer contre une grosse.

Pour les deux rapports de tailles mais de façon plus marquée pour $x = 0,2$, l'interférence des parois voisines des grosses particules se fait de moins en moins sentir au fur et à mesure que y_2 augmente. Les contacts qui s'établissaient entre elles, et qui pénalisaient le nombre moyen de contacts s'exerçant sur elles, se font de moins en moins nombreux. Les petites particules sont de plus en plus en capacité d'occuper l'espace moyen existant entre deux grosses billes adjacentes même si, suivant la mise en place des échantillons, certaines hétérogénéités locales peuvent être relevées.

- A la limite $\gamma_2 \rightarrow 1$, on peut imaginer quelques grosses billes noyées dans un océan de petites. Le nombre moyen maximum de ces dernières qui peuvent venir se plaquer contre chacun des gros éléments est appelé « parking number » ou « nombre de rangement dense aléatoire ». Il a été déterminé par Bouvard et Lange [BOUV91] qui proposent l'expression suivante, déjà rencontrée dans le paragraphe 3.2.2. :

$$\text{III-6} \quad N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(x) = \frac{1,1}{1 - \frac{\sqrt{1+2x}}{1+x}}$$

Elle fournit les résultats suivants : $N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(0,2) = 78,6$ et $N_{12,BL}^{\text{aléatoire}}(0,4) = 26,3$. On voit que ce modèle sous-estime la valeur pour le rapport de tailles $x = 0,2$ qui est déjà de **81,53** pour $\gamma_2 = 90\%$.

Affinons notre analyse en nous intéressant aux nombres de coordination entre une particule d'espèce i ($i = 1$ pour les grosses, $i = 2$ pour les fines) avec les particules d'espèce j . Dans les tableaux suivants, x'_0 représente la proportion des N_i particules d'une espèce qui sont flottantes (alors que p_0 représentait la proportion des N particules flottantes).

Rapport de tailles $x = 0,2$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$								
codes	γ_2	x'_0 (%)	x''_0 (%)	NC_{11}	NC_{12}	NC_{21}	NC_{22}	NC^*
G00 à G07	0,9	0	1,727	0	81,53	0,082	5,81	6,07
I01 à I08	0,8	0	1,904	0,187	78,03	0,156	5,65	6,07
I09 à I16	0,7	0	2,158	0,446	75,43	0,265	5,43	6,07
I17 à I24	0,6	0	2,413	0,821	72,50	0,383	5,19	6,07
I25 à I32	0,5	0	3,201	1,49	66,94	0,540	4,83	6,07
I33 à I40	0,4	0	3,820	2,37	60,64	0,721	4,44	6,07
I41 à I48	0,3	0	6,392	3,61	52,36	0,973	3,77	6,06
I49 à I56	0,2	0,806	93,911	5,29	4,13	0,132	0,148	6,26
H08 à H15	0,1	1,487	98,901	5,84	0,443	0,032	0,013	6,07

Tableau VI-20 : Nombres de coordination fine-fines NC_{22} , fine-grosses NC_{21} , grosse-fines NC_{12} , grosse-grosses NC_{11} et nombre de coordination sans particules flottantes NC^* , pour $x=0,2$, en fonction du titre volumique des particules fines γ_2 .

Rapport de tailles $x = 0,4$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$								
codes	γ_2	x_0^1 (%)	x_0^2 (%)	NC_{11}	NC_{12}	NC_{21}	NC_{22}	NC^*
G16 à G23	0,95	0	1,781	0,192	24,04	0,078	5,82	6,07
J65 à J72	0,9	0	1,813	0,446	23,15	0,163	5,68	6,08
J01 à J08	0,8	0	2,286	0,726	21,66	0,347	5,33	6,07
J09 à J16	0,7	0	2,697	1,22	20,01	0,550	4,94	6,07
J17 à J24	0,6	0	3,728	1,80	18,01	0,770	4,49	6,07
J25 à J32	0,5	0	5,267	2,31	15,93	1,02	3,96	6,08
J33 à J40	0,4	0	8,110	2,80	13,46	1,29	3,32	6,08
J41 à J48	0,3	0	14,684	3,50	10,27	1,53	2,51	6,09
J49 à J56	0,2	0	36,735	4,35	5,83	1,49	1,30	6,08
J57 à J64	0,1	0,342	67,927	5,29	1,84	1,06	0,273	6,08
F16 à F23	0,05	0,866	77,618	5,71	0,679	0,826	0,084	6,07

Tableau VI-21 : Nombres de coordination NC_{22} , NC_{21} , NC_{12} , NC_{11} et NC^* pour un rapport de tailles $x=0,4$, en fonction de γ_2 .

Étudions l'évolution des nombres de coordination fine-fines NC_{22} , fine-grosses NC_{21} , grosse-fines NC_{12} , grosse-grosses NC_{11} , pour un rapport de tailles $x = 0,2$, puis pour $x = 0,4$, en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 .

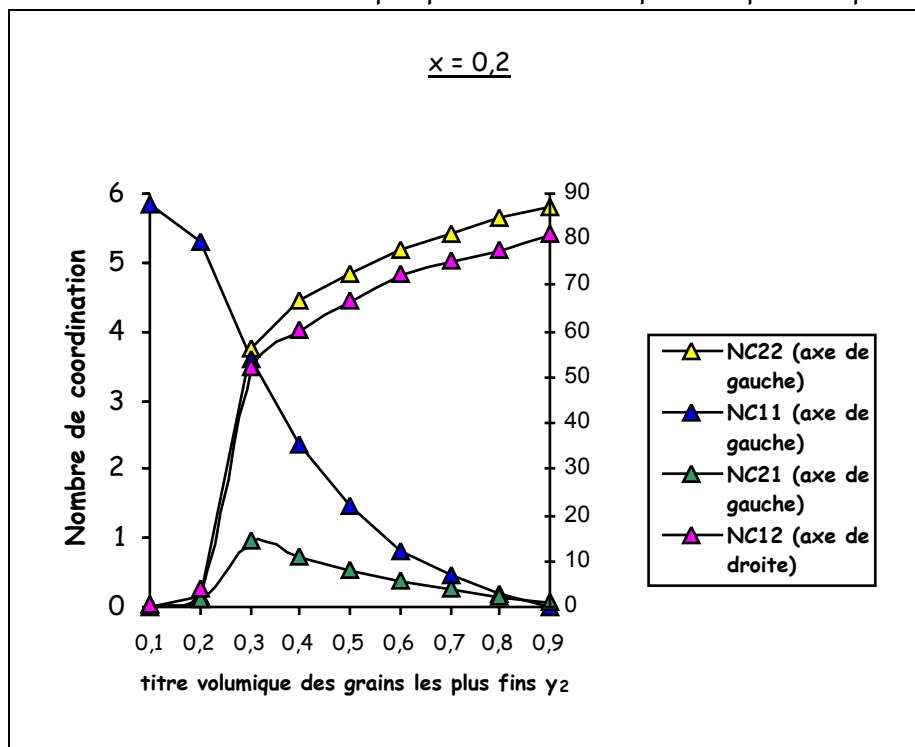


Figure VI-40 : Evolution des nombres de coordination NC_{22} , NC_{21} , NC_{12} , NC_{11} , pour un rapport de tailles $x=0,2$, en fonction de γ_2 .

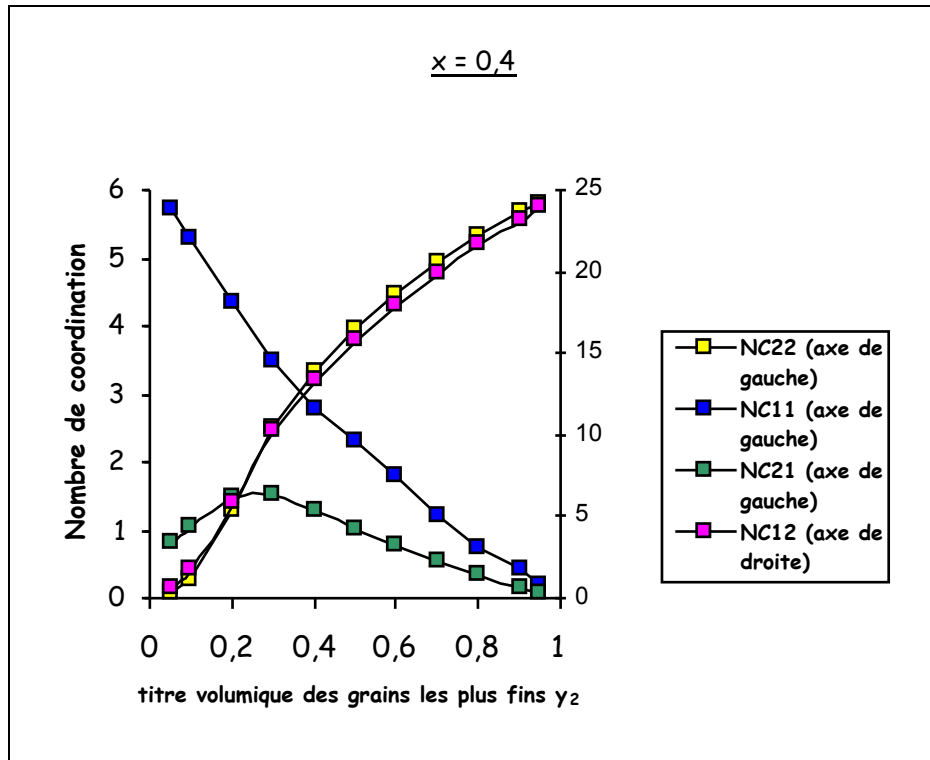


Figure VI-41 : Évolution des nombres de coordination NC_{22} , NC_{21} , NC_{12} , NC_{11} , pour un rapport de tailles $x=0,4$, en fonction de y_2 .

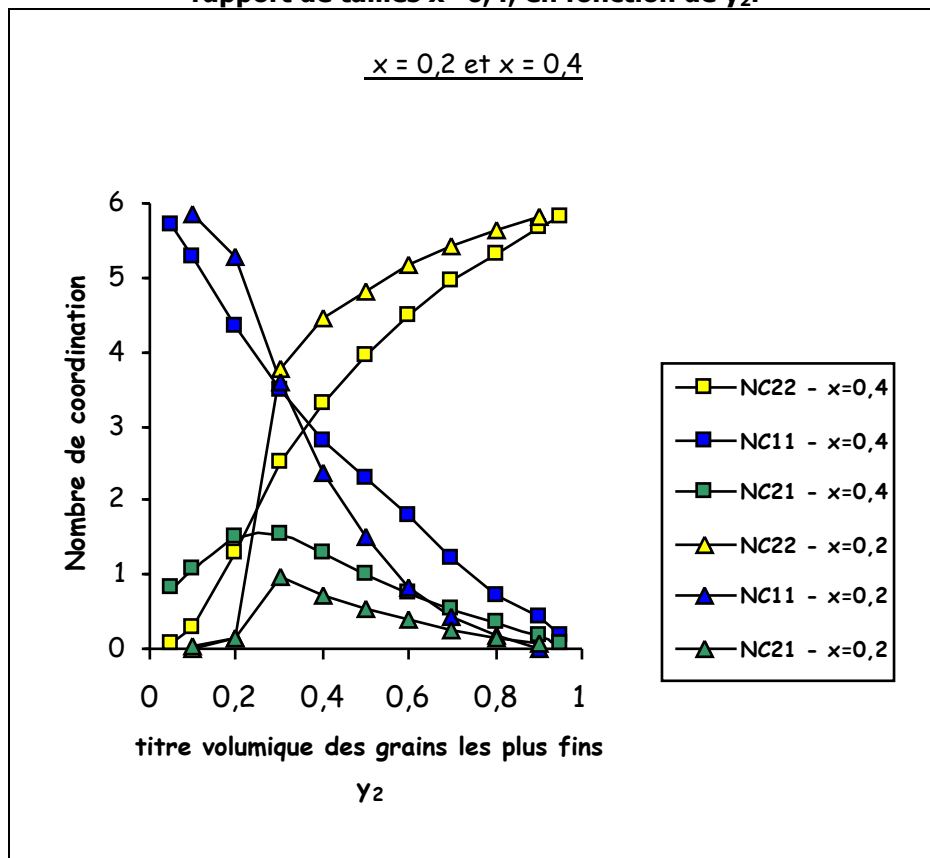


Figure VI-42 : Comparaison de l'évolution des nombres de coordination NC_{22} , NC_{21} , NC_{11} , pour les rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$ en fonction de y_2 .

Si l'on compare les résultats obtenus pour $x = 0,4$ par rapport à ceux présentés pour $x = 0,2$ (figures VI-40, VI-41 et VI-42), on remarque que :

- le nombre de coordination grosse-grosses NC_{11} devient plus important pour $x = 0,2$ dès que le titre volumique des fines particules devient inférieur à 30% : comme nous l'avons déjà écrit, le réseau de contacts est alors de plus en plus porté par les grosses particules entre elles.
- le nombre de coordination fine-fines NC_{22} est lui aussi plus élevé pour $x = 0,2$ à partir de la proportion volumique $\gamma_2 = 30\%$: les contacts entre fines particules se développent de plus en plus.
- le nombre de coordination grosse-fines NC_{12} est beaucoup plus grand pour le plus fort contraste de tailles ($x = 0,2$) à partir de $\gamma_2 = 30\%$. La raison en est purement géométrique : le nombre de petites billes pouvant envelopper une grosse est d'autant plus élevé que cette dernière présente un diamètre important. Le modèle des carrés sphériques CS, par exemple, nous indique que $N_{12,CS}(0,2) > N_{12,CS}(0,4)$.
- le nombre de coordination fine-grosses NC_{21} est plus important pour $x = 0,4$: $NC_{21}^{x=0,4} \geq NC_{21}^{x=0,2}$.

Pour $\gamma_2 = 10\%$ et $\gamma_2 = 20\%$, l'explication est double. D'une part, elle est géométrique et liée au rapport des diamètres. La théorie CS nous montre que $N_{21,CS}(0,4) > N_{21,CS}(0,2)$. D'autre part, $NC_{21}^{x=0,2}$ est très faible car les particules fines sont très majoritairement logées dans les cavernes disponibles entre les grosses.

Pour $\gamma_2 \geq 30\%$, l'explication réside essentiellement dans le fait que $NC_{22}^{x=0,4} \leq NC_{22}^{x=0,2}$ et que, par réciprocity, c'est le nombre de contacts moyen fine-grosses qui devient plus important pour $x = 0,4$.

Poussons cette analyse en fonction de certaines proportions volumiques γ_2 .

γ_2	$x = 0,2$	$x = 0,4$
$\gamma_2 = 10\%$	<p>Le nombre de coordination grosse-grosses $NC_{11}^{x=0,2}$ (5,84) se rapproche de la valeur isostatique $NC_{iso}^* = 6$ alors que $NC_{12}^{x=0,2}$ (0,443) est très proche de 0 : les grosses particules ont des contacts presque exclusifs avec leurs congénères et constituent le squelette porteur de l'assemblée granulaire. $NC_{21}^{x=0,2}$ et $NC_{22}^{x=0,2}$ sont pratiquement nuls ce qui confirme que les particules fines occupent les interstices disponibles : l'effet de desserrement est pratiquement inexistant. L'idée d'introduire un paramètre « taille de cavernes », pour modéliser ce type d'interaction granulaire, apparaît validée numériquement.</p>	<p>$NC_{11}^{x=0,4}$ (5,29) n'est pas non plus très éloigné de $NC_{iso}^* = 6$: la classe dominante est là aussi constituée des « gros ». $NC_{12}^{x=0,4}$ (1,84) reste marginal eu égard au nombre de petites particules qui seraient susceptibles d'envelopper une grosse si celle-ci était isolée. On remarque également que $NC_{11}^{x=0,2} + NC_{12}^{x=0,2} \approx NC_{11}^{x=0,4} + NC_{12}^{x=0,4}$: chaque grosse particule a, en moyenne, le même nombre de contacts quel que soit le rapport des diamètres ce qui signifie que, de ce point de vue là, ce dernier n'est pas prépondérant. En revanche, $NC_{21}^{x=0,4} = 1,06 \gg NC_{21}^{x=0,2} = 0,032$: un desserrement commence à se produire autour des petites particules. L'analyse des valeurs obtenues montre que sur les 4,15 contacts recensés en moyenne sur les fines non flottantes, et qui se traduit par un pic à 4 contacts sur la figure VI-29, 3,3 concernent les grosses particules : un modèle de desserrement basé sur l'existence d'une caverne dont la taille est insuffisante pour accueillir une petite particule, qui provoque alors l'écartement de 4 grosses billes (pour $x > 0,22$) en contact avec elle, apparaît assez proche de la réalité.</p>

γ_2	$x = 0,2$	$x = 0,4$
$\gamma_2 = 20\%$	<p>Les tendances dégagées pour $\gamma_2 = 10\%$ restent valables : <u>la classe dominante est constituée des grosses particules et le mécanisme d'insertion continue à bien fonctionner.</u></p>	<p>Comme pour $\gamma_2 = 10\%$, on obtient : $NC_{11}^{x=0,2} + NC_{12}^{x=0,2} \approx NC_{11}^{x=0,4} + NC_{12}^{x=0,4}$: le nombre moyen de particules entourant une grosse ne dépend pas du rapport des diamètres pris en compte dans l'étude. Mais par rapport à $x = 0,2$, on dénombre moins de grosses ($NC_{11}^{x=0,4} = 4,35 < NC_{11}^{x=0,2} = 5,29$) et davantage de fines ($NC_{12}^{x=0,4} = 5,83 > NC_{12}^{x=0,2} = 4,13$) autour.</p> <p>Une petite particule, quant à elle, se trouve à peu près équitablement entourée de grosses ($NC_{21}^{x=0,4} = 1,49$) et de petites ($NC_{22}^{x=0,4} = 1,30$).</p>
$\gamma_2 = 30\%$	<p>Lorsque le titre volumique des particules fines passe de 20 % à 30 %, on observe une nette brisure de la courbe représentative de $NC_{12}^{x=0,2}$ qui subit une forte progression (de 4,13 à 52,36) : Le « jeu* du gros granulat » est tel que les particules le constituant sont désormais en mesure d'être enveloppées par une multitude de petites.</p> <p>On observe, par ailleurs, que $NC_{11}^{x=0,2} \approx NC_{22}^{x=0,2}$: les grosses et petites billes présentent le même nombre de contacts moyen, se situant aux alentours de 3,7, avec leurs congénères.</p> <p>Enfin, la courbe représentative de $NC_{21}^{x=0,2}$ semble passer par un maximum à 0,97 après un accroissement assez marqué : le mécanisme d'insertion ne fonctionne plus car les petites particules sont désormais trop nombreuses.</p>	<p>Lorsque le titre volumique des particules fines passe de 20 % à 30 %, la courbe représentative de $NC_{12}^{x=0,4}$ évolue de façon beaucoup plus douce et atteint une valeur beaucoup plus faible (10,27) en comparaison de l'autre rapport de tailles. En revanche, le nombre de contacts moyen grosse-grosses est presque similaire : $NC_{11}^{x=0,4} \approx NC_{11}^{x=0,2}$. Au voisinage de l'optimum pour $x = 0,4$, la disposition des grosses particules les unes par rapport aux autres est telle qu'elle ne permet pas aux éléments fins de venir facilement à leur contact : le « jeu du gros granulat » est en effet insuffisant et l'effet d'interférence demeure.</p> <p>$NC_{21}^{x=0,4} = 1,53$ constitue la valeur maximale obtenue pour $x = 0,4$. La décroissance qui s'amorce ensuite pour $\gamma_2 > 30\%$ est liée à la raréfaction croissante du nombre de grosses particules.</p>
	*Le « jeu du granulat » s'entend au sens du jeu d'un assemblage.	

γ_2	$x = 0,2$	$x = 0,4$
$\gamma_2 = 50 \%$	<p>Lorsque le titre volumique des particules fines passe de 30 % à 50 %, $NC_{11}^{x=0,2}$ et $NC_{21}^{x=0,2}$ décroissent logiquement, le premier assez fortement, en raison d'un facteur statistique déjà évoqué précédemment : les contacts provenant des grosses particules diminuent en même temps que la quantité de ces dernières dans le mélange.</p> <p>Leur éparpillement favorise d'une part leur enveloppement par les fines ($NC_{12}^{x=0,2} \uparrow$) et d'autre part un accroissement des contacts entre ces dernières ($NC_{22}^{x=0,2} \uparrow$).</p>	<p>Les évolutions décrites pour l'autre rapport de tailles restent valables. Cependant, les valeurs obtenues pour $NC_{11}^{x=0,4}$ sont plus importantes ($NC_{11}^{x=0,4} > NC_{11}^{x=0,2}$) et subissent une décroissance moins marquée alors que celles enregistrées pour $NC_{22}^{x=0,4}$ sont moins fortes ($NC_{22}^{x=0,4} < NC_{22}^{x=0,2}$) mais croissent, en revanche, plus fortement. Le premier constat est lié à un nombre plus important de grosses particules à proportion volumique égale. Le deuxième constat résulte du premier : les fines particules ont davantage de difficultés à se regrouper entre elles. On observe par ailleurs que $NC_{12}^{x=0,4} \ll NC_{12}^{x=0,2}$: le contact grosse-fines est ici essentiellement gouverné par un facteur géométrique. C'est le rapport des diamètres qui est déterminant.</p>
$\gamma_2 = 70 \%$	<p>On note des faibles nombres de coordination $NC_{11}^{x=0,2}$ et $NC_{21}^{x=0,2}$ (valeurs < 1) : les grosses particules ne sont désormais plus susceptibles d'entourer une congénère ou un grain de l'autre espèce. Elles peuvent en revanche être enveloppées d'un grand nombre de fines, comme le montre une valeur de $NC_{12}^{x=0,2}$ élevée (75,43), mais il faut rappeler qu'elles sont dans ce cas peu nombreuses dans le mélange (14 sur 4000).</p>	<p>Les remarques énoncées pour $\gamma_2 = 50 \%$ restent valables.</p>

γ_2	$x = 0,2$	$x = 0,4$
$\gamma_2 = 90\%$	Le nombre de coordination fine-fines $NC_{22}^{x=0,2}$ (5,81) se rapproche de $NC_{iso}^* = 6$ alors que $NC_{11}^{x=0,2}$ vaut 0 : les grosses particules sont maintenant noyées dans un océan de <u>petites</u> . Celles-ci constituent <u>indéniablement la classe dominante</u> . Le nombre de coordination grosse-fines $NC_{12}^{x=0,2}$ augmente encore pour atteindre 81,53 .	$NC_{22}^{x=0,4}$ (5,68) n'est pas non plus très éloigné de $NC_{iso}^* = 6$: la <u>classe dominante est là aussi constituée des « fines »</u> . $NC_{11}^{x=0,4} = 0,446$ reste faible et atteint même 0,192 pour $\gamma_2 = 95\%$: les contacts grosse-grosses tendent progressivement vers 0 .
	Dans les deux cas, l'effet de paroi peut effectivement se modéliser en considérant uniquement des éléments fins au contact d'une grosse particule « intruse ».	

Voici les principales conclusions que l'on peut établir au regard des tableaux précédents.

Pour le rapport de tailles $x = 0,2$, des brisures nettes, enregistrées sur les courbes représentatives des nombres de coordination grosse-fines $NC_{12}^{x=0,2}$, fine-fines $NC_{22}^{x=0,2}$ et fine-grosses $NC_{21}^{x=0,2}$ en fonction du titre volumique des grains les plus fins, semblent illustrer un changement au niveau du squelette porteur.

Pour $x = 0,4$, seule la courbe représentative de $NC_{21}^{x=0,4}$, en forme de « cloche » dissymétrique, nous informe d'une phase de transition. Pour $\gamma_2 < 30\%$, la présence des particules fines flottantes, dans le calcul de $NC_{21}^{x=0,4}$, entraîne une baisse de ce dernier d'autant plus significative que les particules fines sont peu représentées dans le mélange. Pour $\gamma_2 > 30\%$, la diminution progressive du nombre de grosses particules engendre une raréfaction des contacts de leur part au fur et à mesure que γ_2 augmente.

Enfin, les deux modèles mis au point pour caractériser les interactions granulaires sont cohérents avec les résultats issus de la simulation numérique.

Du côté des « gros dominants », l'élaboration d'un modèle d'effet de desserrement basé sur l'existence d'une taille de caverne critique $x_0 \approx 0,22$ semble adaptée.

Dans le cas $x = 0,2$, une particule fine est effectivement capable de s'insérer dans l'interstice disponible comme le confirme le résultat pratiquement nul obtenu pour $NC_{21}^{x=0,2}$ avec $\gamma_2 = 10\%$ et $\gamma_2 = 20\%$.

Dans le cas $x = 0,4$ en revanche, elle n'est plus en mesure de s'y glisser sans provoquer un desserrement des particules plus grosses qui l'entourent (3,3 d'après la simulation numérique pour $\gamma_2 = 10\%$, 4 selon le modèle pour $x > 0,22$).

Du côté des « fins dominants », l'établissement d'un modèle d'effet de paroi basé sur une cellule élémentaire constituée d'une grosse « particule intruse » entourée de petites semble approprié dès lors que $\gamma_2 \geq 90\%$.

6.8.7. Isostaticité.

Nous allons maintenant nous attarder sur les propriétés d'isostaticité des mélanges binaires étudiés. Comme nous l'avons déjà souligné au paragraphe 6.1.1., l'isostaticité correspond à une propriété du squelette granulaire, c'est-à-dire au réseau de contacts qui supportent les forces, dans les empilements en équilibre de billes rigides sans frottement. Cela signifie [AGN007] que de tels réseaux ne sont ni hyperstatiques, auquel cas il existe des forces indéterminées, ni hypostatiques, avec des déplacements indéterminés, à part pour des mécanismes triviaux. L'absence d'hyperstatice est liée au désordre régnant dans la géométrie de l'empilement. En raison de cette propriété d'isostaticité, le nombre de coordination moyen NC^* , déterminé avec les seules billes supportant des forces, doit être égal à 6. Plus précisément, il s'agit d'une limite atteinte lorsque le paramètre de raideur $\kappa = \left(\frac{E}{(1-\nu^2)P} \right)^{2/3} \rightarrow \infty$ (formule VI-35), c'est-à-dire dans la limite des faibles pressions P ou encore dans la limite des billes rigides.

La condition correspondant à un réseau de contacts isostatique doit respecter, dans la limite des billes rigides, d'après [ROUX07] :

$$\text{VI-40} \quad NC_{\text{iso}}^* = \frac{N_1}{N^*} (NC_{11} + NC_{12}) + \frac{N_2}{N^*} (NC_{21} + NC_{22}) = 6$$

avec $N^* = N - x_0^1 N_1 - x_0^2 N_2$

Rappelons que x_0^i représente la proportion des N_i particules d'une espèce qui sont flottantes.

Dans les simulations effectuées avec $\kappa \approx 8400$, les résultats présentés dans les tableaux VI-20 et VI-21 montrent que la condition $NC_{\text{iso}}^* = 6$ est satisfaite puisque nous obtenons $NC^* \geq 6,06$ quel que soit le rapport de tailles ($x = 0,2$ ou $x = 0,4$). Le petit supplément enregistré au-dessus de la limite de 6 résulte des contacts qui devraient disparaître si l'on faisait décroître la pression de telle manière que le paramètre de raideur évolue depuis $\kappa \approx 8400$ vers l'infini.

Décomposons maintenant l'expression VI-40 en une somme de quatre termes pour quantifier la contribution de chaque type de contact à la stabilité du mélange, relativement à NC^* :

$$\text{VI-41} \quad \frac{N_1 \times NC_{11}}{NC^* N^*} + \frac{N_1 \times NC_{12}}{NC^* N^*} + \frac{N_2 \times NC_{21}}{NC^* N^*} + \frac{N_2 \times NC_{22}}{NC^* N^*} = 1$$

Rapport de tailles $x = 0,2$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$							
codes	Y_2	N_1	N_2	$\frac{N_1 \times NC_{11}}{NC^* N^*}$	$\frac{N_1 \times NC_{12}}{NC^* N^*}$	$\frac{N_2 \times NC_{21}}{NC^* N^*}$	$\frac{N_2 \times NC_{22}}{NC^* N^*}$
G00 à G07	0,9	4	3996	0,000	0,014	0,014	0,972
I01 à I08	0,8	8	3992	0,000	0,026	0,026	0,948
I09 à I16	0,7	14	3986	0,000	0,044	0,044	0,912
I17 à I24	0,6	21	3979	0,001	0,064	0,064	0,871
I25 à I32	0,5	32	3968	0,002	0,091	0,091	0,816
I33 à I40	0,4	47	3953	0,005	0,122	0,122	0,751
I41 à I48	0,3	73	3927	0,012	0,168	0,168	0,652
I49 à I56	0,2	124	3876	0,292	0,227	0,227	0,254
H08 à H15	0,1	269	3731	0,846	0,064	0,064	0,026

Tableau VI-22 : Contribution de chaque type de contact à la stabilité du mélange, relativement au nombre de coordination sans les particules flottantes NC^* , pour un rapport de tailles $x=0,2$.

Rapport de tailles $x = 0,4$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$							
codes	Y_2	N_1	N_2	$\frac{N_1 \times NC_{11}}{NC^* N^*}$	$\frac{N_1 \times NC_{12}}{NC^* N^*}$	$\frac{N_2 \times NC_{21}}{NC^* N^*}$	$\frac{N_2 \times NC_{22}}{NC^* N^*}$
G16 à G23	0,95	13	3987	0,000	0,013	0,013	0,974
J65 à J72	0,9	28	3972	0,001	0,027	0,027	0,945
J01 à J08	0,8	63	3937	0,002	0,057	0,057	0,884
J09 à J16	0,7	107	3893	0,006	0,090	0,090	0,814
J17 à J24	0,6	164	3836	0,013	0,126	0,126	0,735
J25 à J32	0,5	241	3759	0,024	0,166	0,166	0,644
J33 à J40	0,4	350	3650	0,044	0,209	0,209	0,538
J41 à J48	0,3	520	3480	0,086	0,251	0,251	0,412
J49 à J56	0,2	815	3185	0,206	0,276	0,276	0,242
J57 à J64	0,1	1462	2538	0,561	0,195	0,195	0,049
F16 à F23	0,05	2195	1805	0,800	0,095	0,095	0,010

Tableau VI-23 : Contribution de chaque type de contact à la stabilité du mélange, relativement à NC^* , pour un rapport de tailles $x=0,4$.

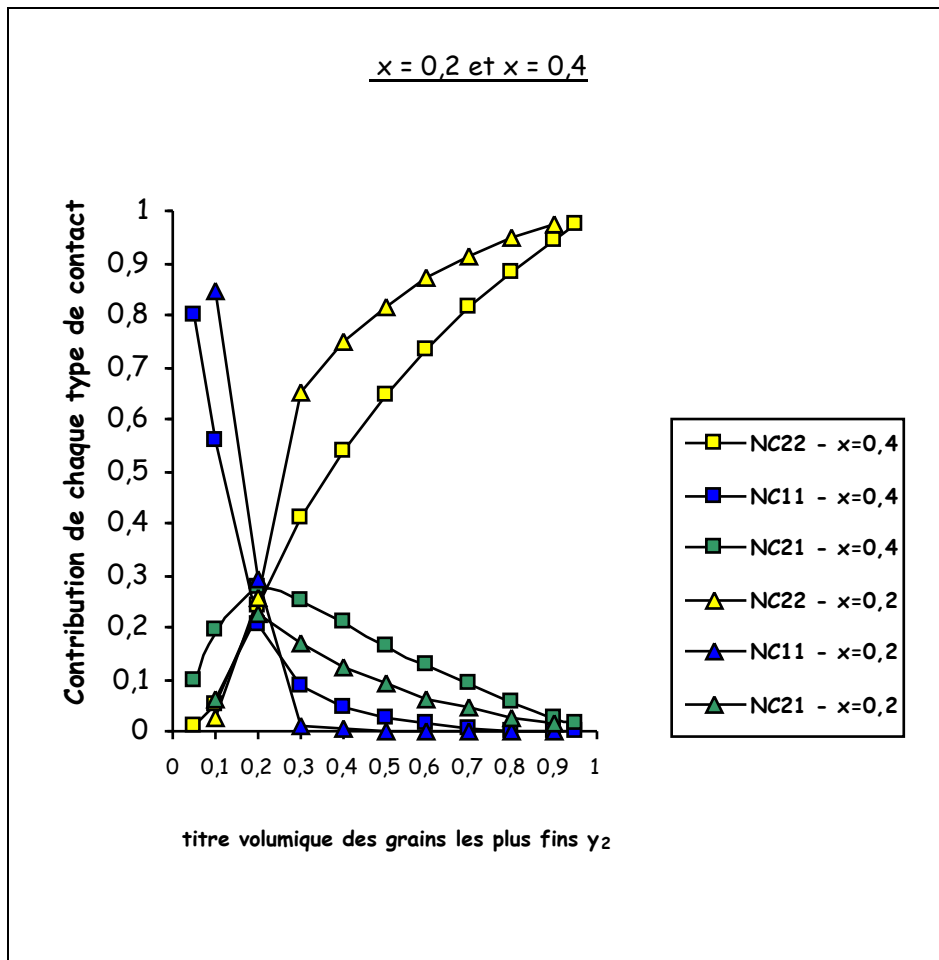


Figure VI-43 : Comparaison de l'évolution de la contribution de chaque type de contact à la stabilité du mélange pour les rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$ en fonction de y_2 .

Quels que soient les deux rapports de tailles testés, on assiste à des contributions bien réparties entre les différents types de contacts pour $y_2 = 20\%$.

Pour $y_2 < 20\%$, les contacts entre grosses particules sont les contributeurs les plus importants à la stabilité du mélange.

Pour $y_2 > 20\%$, ce sont les contacts entre fines particules.

Ces effets sont d'autant plus marqués que le contraste des diamètres des particules constituant le mélange binaire est élevé.

Pour $x = 0,2$ et pour γ_2 évoluant de 20 % à 100 %, on observe que les contacts entre grosses particules participent peu à la stabilité de l'édifice granulaire, d'une part car elles sont peu nombreuses relativement au nombre de particules constituant le mélange, d'autre part et en lien avec le constat précédent, car le nombre de coordination caractérisant leurs contacts est faible. En revanche et même si leur nombre diminue, elles sont de plus en plus entourées de petites particules ce qui engendre une influence significative, même si elle est décroissante, des contacts entre grosses et fines.

Pour $x = 0,4$ et toujours dans le même intervalle d'étude de γ_2 , l'importance des contacts entre grosses particules est un peu plus marquée. Un nombre plus élevé des éléments les plus volumineux du mélange, en hausse par rapport à $x = 0,2$ à γ_2 constante, en constitue la raison. Il tient également un rôle prépondérant sur la contribution des contacts entre grosses et fines. Celle-ci est en effet plus grande que pour l'autre rapport de tailles, alors que le contraste de tailles et le nombre de coordination correspondant sont plus faibles. Enfin, l'apport des contacts grosses-fines à la stabilité de l'édifice granulaire est non négligeable pour les faibles proportions de particules fines correspondant à $\gamma_2 < 20\%$. Mais l'explication réside ici essentiellement dans le desserrement des grosses particules par les fines logées dans des cavernes de taille insuffisante pour les recevoir.

6.8.8. Forces de contact.

L'analyse des forces de contact dans un milieu granulaire suscite la curiosité des chercheurs depuis les premiers travaux entrepris dans le domaine de la mécanique des sols qui ont permis de mettre en évidence l'existence de « chaînons de contraintes ». L'essor de la simulation numérique par éléments discrets a permis des avancées considérables dans ce domaine. Mais ces études portent essentiellement sur des empilements constitués d'une seule taille de grains. C'est pourquoi notre volonté va consister à étendre ces investigations aux mélanges binaires. Après avoir étudié les nombres de coordination les caractérisant du côté des « fins dominants », du côté des « gros dominants » et aux alentours du point de compacité maximale, ce paragraphe va concerner la façon dont se transmettent les forces au niveau des contacts entre particules. Il s'agit ici de mieux identifier les mécanismes intervenant localement lorsque nous sommes en présence de deux tailles de grains plus ou moins contrastées et de mieux comprendre les phénomènes mis en jeu lorsque le mélange atteint sa densité la plus importante.

La méthode de calcul des forces de contact a déjà été exposée. Rappelons simplement ici les hypothèses les plus importantes :

- frottement inexistant entre particules ;
- force normale de contact établie en associant la composante élastique non linéaire de Hertz avec une composante visqueuse linéaire ;
- temps de collision déterminé en faisant intervenir un terme dissipatif. Ce dernier est égal à une proportion fixée de l'amortissement critique d'un oscillateur harmonique constitué d'une paire de grains, possédant une certaine masse effective, reliés par un ressort linéaire présentant une certaine raideur ;
- pas de temps calculé en considérant une petite portion du temps de collision.

Les résultats obtenus sont fournis dans les tableaux suivants. $\langle F_{N11} \rangle$, $\langle F_{N12} \rangle$, $\langle F_{N22} \rangle$ représentent respectivement les moyennes des forces normales de contact grosse-grosse, grosse-fine, fine-fine.

Rapport de tailles $x = 0,2$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$						
codes	γ_2	N_1	N_2	$\langle F_{N11} \rangle$	$\langle F_{N12} \rangle$	$\langle F_{N22} \rangle$
G00 à G07	0,9	4	3996	0	1,245	0,819
I01 à I08	0,8	8	3992	5,702	1,235	0,826
I09 à I16	0,7	14	3986	5,666	1,228	0,837
I17 à I24	0,6	21	3979	5,658	1,243	0,843
I25 à I32	0,5	32	3968	5,649	1,263	0,875
I33 à I40	0,4	47	3953	6,530	1,291	0,887
I41 à I48	0,3	73	3927	9,606	1,239	0,833
I49 à I56	0,2	124	3876	19,912	3,977	1,322
H08 à H15	0,1	269	3731	20,495	7,562	4,260

Tableau VI-24 : moyennes des forces normales de contact grosse-grosse $\langle F_{N11} \rangle$, grosse-fine $\langle F_{N12} \rangle$, fine-fine $\langle F_{N22} \rangle$ pour un rapport de tailles $x=0,2$.

Rapport de tailles $x = 0,4$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$						
codes	γ_2	N_1	N_2	$\langle F_{N11} \rangle$	$\langle F_{N12} \rangle$	$\langle F_{N22} \rangle$
G16 à G23	0,95	13	3987	3,703	1,161	0,822
J65 à J72	0,9	28	3972	2,675	1,166	0,823
J01 à J08	0,8	63	3937	2,655	1,167	0,837
J09 à J16	0,7	107	3893	2,807	1,177	0,851
J17 à J24	0,6	164	3836	2,987	1,212	0,864
J25 à J32	0,5	241	3759	3,124	1,244	0,898
J33 à J40	0,4	350	3650	3,341	1,319	0,939
J41 à J48	0,3	520	3480	3,861	1,406	0,969
J49 à J56	0,2	815	3185	4,533	1,663	1,037
J57 à J64	0,1	1462	2538	4,939	2,311	1,454
F16 à F23	0,05	2195	1805	5,071	2,553	1,639

Tableau VI-25 : moyennes des forces normales de contact grosse-grosse $\langle F_{N11} \rangle$, grosse-fine $\langle F_{N12} \rangle$, fine-fine $\langle F_{N22} \rangle$ pour un rapport de tailles $x=0,4$.

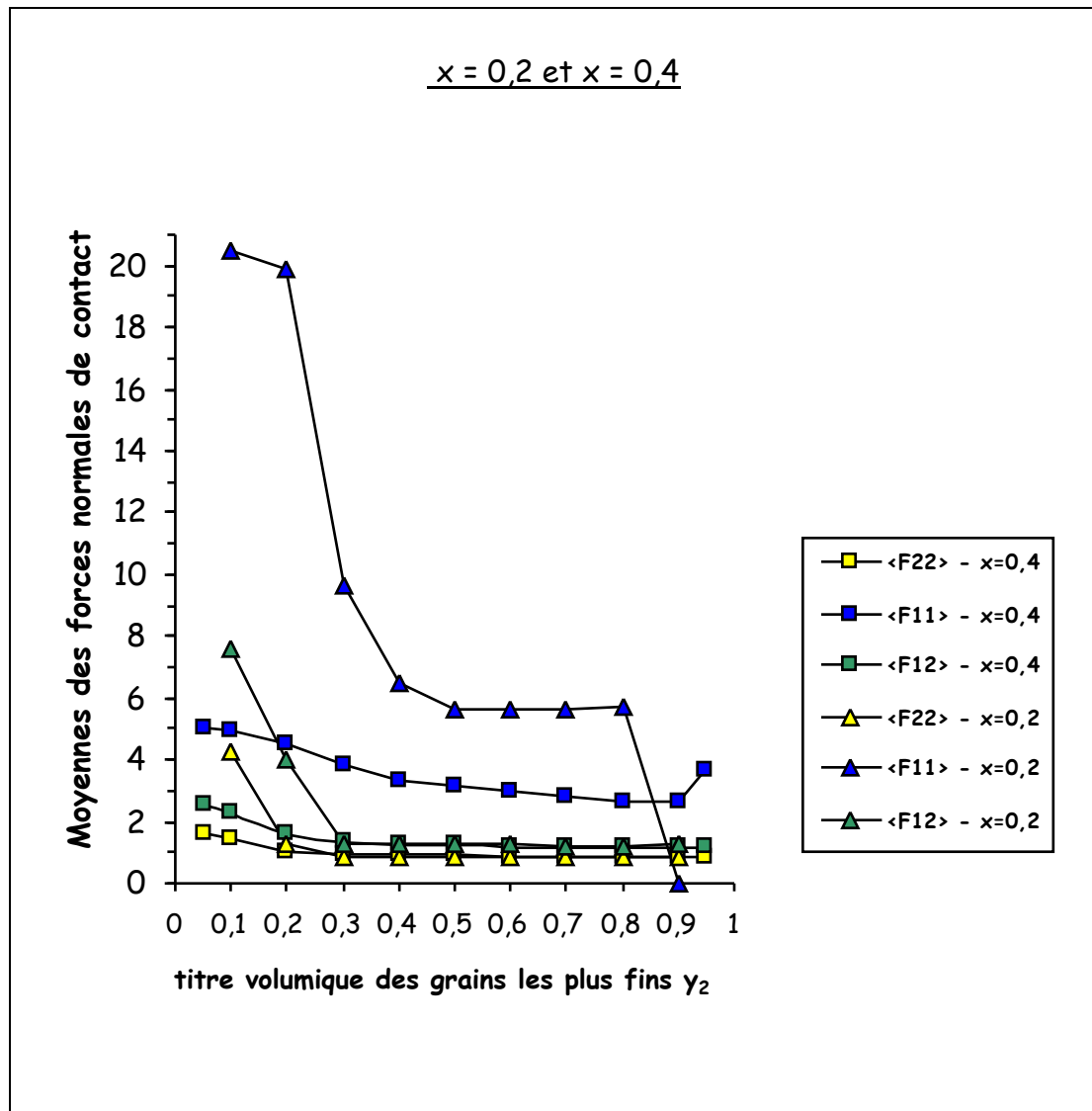


Figure VI-44 : Comparaison des moyennes des forces normales de contact grosse-grosse $\langle F_{N11} \rangle$, grosse-fine $\langle F_{N12} \rangle$, fine-fine $\langle F_{N22} \rangle$ pour les rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$ en fonction de γ_2 .

L'analyse des moyennes des forces normales de contact fait apparaître les éléments suivants :

- pour les deux rapports de tailles, ce sont les grosses particules entre elles qui supportent les efforts les plus intenses.
- pour $x = 0,2$ et pour une proportion de fines particules $\gamma_2 \leq 20\%$, on constate des chaînes de forces intenses entre éléments les plus volumineux du mélange : ils constituent vraiment le squelette porteur de l'édifice granulaire. Puis, lorsque γ_2 augmente pour atteindre 50%, on assiste à une décroissance de l'intensité des contacts entre eux particulièrement marquée lors du passage de $\gamma_2 = 20\%$ à $\gamma_2 = 30\%$, celle-ci se produisant

alors que les nombres de coordination NC_{12} et NC_{22} subissent une très forte augmentation. Les chaînes de forces restent malgré tout encore importantes. Une stabilisation est ensuite enregistrée en raison de deux phénomènes qui s'opposent. D'une part, les particules fines ont une influence qui ne cesse d'augmenter en raison d'un nombre de contacts entre elles qui s'accroît continuellement. D'autre part, les grosses particules présentent entre elles des contacts de plus en plus fortement localisés en raison de leur raréfaction dans le mélange. Enfin, une chute se produit lorsque la proportion volumique des gros éléments ne représente plus que 10% : l'intensité de $\langle F_{N11} \rangle$ devient nulle car on ne recense plus de contacts entre eux.

- pour $x = 0,4$, les grosses particules entre elles sont à l'origine de forces intergranulaires sensiblement plus faibles par rapport à $x = 0,2$ car ces dernières se répartissent sur une quantité de contacts bien plus grande. Cette classe granulaire est en effet bien plus représentée en nombre pour le premier rapport de tailles par rapport au second, et ce, d'autant plus que γ_2 est faible (pour $\gamma_2 = 20\%$: $N_1 = 815$ pour $x = 0,4$ et $N_1 = 124$ pour $x = 0,2$). La courbe représentative de $\langle F_{N11} \rangle$ versus γ_2 présente une décroissance jusqu'à $\gamma_2 = 80\%$, légèrement plus marquée entre 20% et 40%, moins accentuée ensuite : les chaînes de forces entre gros éléments s'affaiblissent au profit des contacts entre fines qui, sans s'intensifier individuellement, n'en demeurent pas moins de plus en plus nombreux comme le confirme la forte croissance de NC_{22} pour $x = 0,4$ dans cette zone. On note enfin un brusque accroissement de $\langle F_{N11} \rangle$ lorsque γ_2 passe de 90% à 95% : les contacts entre grosses particules, en nombres très faibles, sont maintenant davantage sollicités en raison de cette forte localisation.
- On retrouve le même phénomène à l'autre extrémité de l'axe des abscisses, pour les faibles proportions de γ_2 . Si les courbes représentatives de $\langle F_{N12} \rangle$ et $\langle F_{N22} \rangle$ font apparaître un plateau pour $\gamma_2 \geq 30\%$ avec des valeurs peu élevées correspondant à des chaînes de forces faibles, elles présentent des intensités plus importantes pour $\gamma_2 \leq 20\%$ avec une légère prépondérance pour $\langle F_{N12} \rangle$.

- Cette tendance est plus accentuée pour le plus fort contraste de tailles $x = 0,2$ en raison d'un très faible nombre de fines particules non flottantes. C'est ainsi que pour $\gamma_2 = 10\%$ par exemple, sur $N_2 = 3731$ éléments fins, seuls $N_2^* = 41$ supportent des forces (pour $x = 0,4$: $N_2 = 2538$ et $N_2^* = 814$). Ces fines particules « porteuses », du fait de leur « rareté », supportent alors davantage d'efforts.
- Cette inclination existe également pour $x = 0,4$ où, pour $\gamma_2 \leq 20\%$, une « chaîne de forces » est légèrement mise en évidence entre les grosses particules subissant l'effet de desserrement et les fines particules à l'origine de ce dernier.

6.8.9. Pressions partielles supportées par les particules : affinement de la notion de classe dominante.

Lors de l'étape DM, l'empilement de billes est contenu dans une boîte de simulation soumise à une pression isotrope. Il présente donc des forces de contact interparticulaire que nous avons analysées au paragraphe précédent. La question consiste maintenant à savoir comment les pressions locales qui en résultent vont évoluer en fonction du rapport de tailles et de la proportion volumique des constituants. La finalité consistera à mieux préciser la notion de classe dominante en utilisant un critère complémentaire et plus abouti, par rapport à ceux du nombre de coordination et des forces normales de contact.

Dans ce but, nous allons faire appel à la notion de « pressions partielles ». Comment la définir ?

Nous avons déjà mis en évidence, dans le paragraphe 6.6., que le tenseur statistique des contraintes internes $\underline{\sigma}^{int}$ à l'intérieur de l'empilement s'établit en fonction des actions intergranulaires. En termes de composantes, la contrainte interne d'origine statique s'écrit, si l'on considère l'ensemble des contacts α :

$$VI-25 \quad \sigma_{kl}^{int} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha=1}^{N_c} \ell_{l\alpha} f_{k\alpha}$$

Exprimée entre les grains i et j , elle devient :

$$VI-42 \quad \sigma_{kl}^{int} = \frac{1}{V} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} f_{ij}^k \ell_{ij}^l$$

où V représente le volume du domaine simulé (volume des grains et volume des vides).

ℓ_{ij}^l est une composante du vecteur branche $\vec{\ell}$ reliant les centres de deux particules en contact i et j alors que f_{ij}^k correspond à l'action intergranulaire normale que la première exerce sur la deuxième.

La somme $\sum_{i,j}$, qui devrait concerner en principe tous les couples de particules de l'empilement, peut, dans les faits, être restreinte aux seuls binômes i et j en contact.

σ_{kl}^{int} représente la contrainte s'exerçant suivant la normale unitaire \vec{n} . La formule VI-42 met, en quelque sorte, en évidence la contribution apportée par chaque action intergranulaire f_{ij}^k , présente dans l'empilement, au tenseur statistique des contraintes internes.

Les particules de l'empilement sont numérotées de 1 à N : $1 \leq i \leq N$, les petites et les grosses étant respectivement concernées par les indices $1 \leq i \leq N_2$ et $N_2 + 1 \leq i \leq N$.

L'expression permettant la détermination de $\underline{\sigma}_{kl}^{int}$ peut ainsi être réécrite de façon à faire apparaître la contribution de chacune des actions intergranulaires : fine-fine, fine-grosse et grosse-grosse. On obtient ainsi :

$$VI-43 \quad \sigma_{kl}^{int} = \frac{1}{V} \left\{ \sum_{1 \leq i < j \leq N_2} f_{ij}^k \ell_{ij}^l + \sum_{\substack{1 \leq i \leq N_2 \\ N_2 + 1 \leq j \leq N}} f_{ij}^k \ell_{ij}^l + \sum_{N_2 + 1 \leq i < j \leq N} f_{ij}^k \ell_{ij}^l \right\}$$

Puisque la boîte de simulation est soumise à une pression isotrope P, la trace de la matrice $\underline{\underline{\sigma}}^{int}$ s'écrit :

$$VI-44 \quad \text{Tr}(\underline{\underline{\sigma}}^{int}) = 3P = \frac{1}{V} \sum_{i < j} f_{Nij} \left(\frac{d_i + d_j}{2} \right)$$

f_{Nij} représente la composante normale de l'action intergranulaire de i vers j, alors que d_i et d_j sont les diamètres des particules i et j.

Cette expression peut être reformulée sous la forme :

$$VI-45 \quad \text{Tr}(\underline{\underline{\sigma}}^{int}) = 3P = \frac{1}{V} \left\{ N_{c22} \langle F_{N22} \rangle d_2 + N_{c12} \langle F_{N12} \rangle \frac{(d_1 + d_2)}{2} + N_{c11} \langle F_{N11} \rangle d_1 \right\}$$

N_{cij} correspond au nombre de connexions entre particules i et j et $\langle F_{Nij} \rangle$ à la valeur moyenne de l'intensité de la force normale entre elles.

Il est intéressant maintenant de s'affranchir du volume V de la boîte de simulation en exprimant chaque rapport $\frac{N_{cij}}{V}$ en fonction des nombres de coordination NC_{ij} , des volumes occupés par chaque classe granulaire dans une unité de volume ϕ_i et ϕ_j et des volumes de chaque bille exprimés grâce à leur diamètre d_i et d_j :

$$VI-46 \quad 3P = \frac{6 \phi_2}{2 \pi d_2^2} NC_{22} \langle F_{N22} \rangle + \frac{6 \phi_2}{2 \pi d_2^3} NC_{21} \langle F_{N12} \rangle \frac{(d_1 + d_2)}{2} + \frac{6 \phi_1}{2 \pi d_1^2} NC_{11} \langle F_{N11} \rangle \text{ soit :}$$

$$P = \frac{\phi_2}{\pi d_2^2} NC_{22} \langle F_{N22} \rangle + \frac{\phi_2}{\pi} \frac{(d_1 + d_2)}{2 d_2^3} NC_{21} \langle F_{N12} \rangle + \frac{\phi_1}{\pi d_1^2} NC_{11} \langle F_{N11} \rangle$$

Cette relation peut alors s'exprimer relativement à P :

$$\text{VI-47} \quad \frac{\phi_2}{P \pi d_2^2} \text{NC}_{22} \langle F_{N22} \rangle + \frac{\phi_2}{P \pi} \frac{(d_1 + d_2)}{2 d_2^3} \text{NC}_{21} \langle F_{N12} \rangle + \frac{\phi_1}{P \pi d_1^2} \text{NC}_{11} \langle F_{N11} \rangle = 1$$

Faisons maintenant intervenir les pressions partielles correspondant respectivement aux contacts fine-fine, fine-grosse, grosse-grosse telles que leur somme soit égale à 1 :

$$\text{VI-48} \quad p_{22} + p_{21} + p_{11} = 1$$

On aboutit à :

$$\begin{aligned} \text{VI-49} \quad p_{22} &= \frac{\phi_2}{P \pi d_2^2} \text{NC}_{22} \langle F_{N22} \rangle \\ p_{21} &= \frac{\phi_2}{P \pi} \frac{(d_1 + d_2)}{2 d_2^3} \text{NC}_{21} \langle F_{N12} \rangle \\ p_{11} &= \frac{\phi_1}{P \pi d_1^2} \text{NC}_{11} \langle F_{N11} \rangle \end{aligned}$$

Les résultats obtenus sont fournis dans les tableaux suivants.

Rapport de tailles $x = 0,2$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$						
codes	γ_2	N_1	N_2	P_{11}	P_{21}	P_{22}
G00 à G07	0,9	4	3996	0,000	0,114	0,886
I01 à I08	0,8	8	3992	0,002	0,199	0,799
I09 à I16	0,7	14	3986	0,007	0,298	0,695
I17 à I24	0,6	21	3979	0,017	0,388	0,595
I25 à I32	0,5	32	3968	0,039	0,473	0,488
I33 à I40	0,4	47	3953	0,088	0,535	0,377
I41 à I48	0,3	73	3927	0,237	0,532	0,231
I49 à I56	0,2	124	3876	0,834	0,156	0,010
H08 à H15	0,1	269	3731	0,966	0,033	0,001

Tableau VI-26 : « pressions partielles » grosse-grosse p_{11} , fine-grosse p_{21} , fine-fine p_{22} pour un rapport de tailles $x=0,2$.

Rapport de tailles $x = 0,4$ - $N = 4000$ particules - $\kappa \approx 8400$						
codes	γ_2	N_1	N_2	P_{11}	P_{21}	P_{22}
G16 à G23	0,95	13	3987	0,001	0,062	0,937
J65 à J72	0,9	28	3972	0,004	0,124	0,872
J01 à J08	0,8	63	3937	0,013	0,238	0,749
J09 à J16	0,7	107	3893	0,035	0,338	0,627
J17 à J24	0,6	164	3836	0,074	0,423	0,503
J25 à J32	0,5	241	3759	0,127	0,485	0,388
J33 à J40	0,4	350	3650	0,199	0,526	0,275
J41 à J48	0,3	520	3480	0,335	0,503	0,162
J49 à J56	0,2	815	3185	0,557	0,383	0,060
J57 à J64	0,1	1462	2538	0,808	0,184	0,008
F16 à F23	0,05	2195	1805	0,922	0,077	0,001

Tableau VI-27 : « pressions partielles » grosse-grosse p_{11} , fine-grosse p_{21} , fine-fine p_{22} pour un rapport de tailles $x=0,4$.

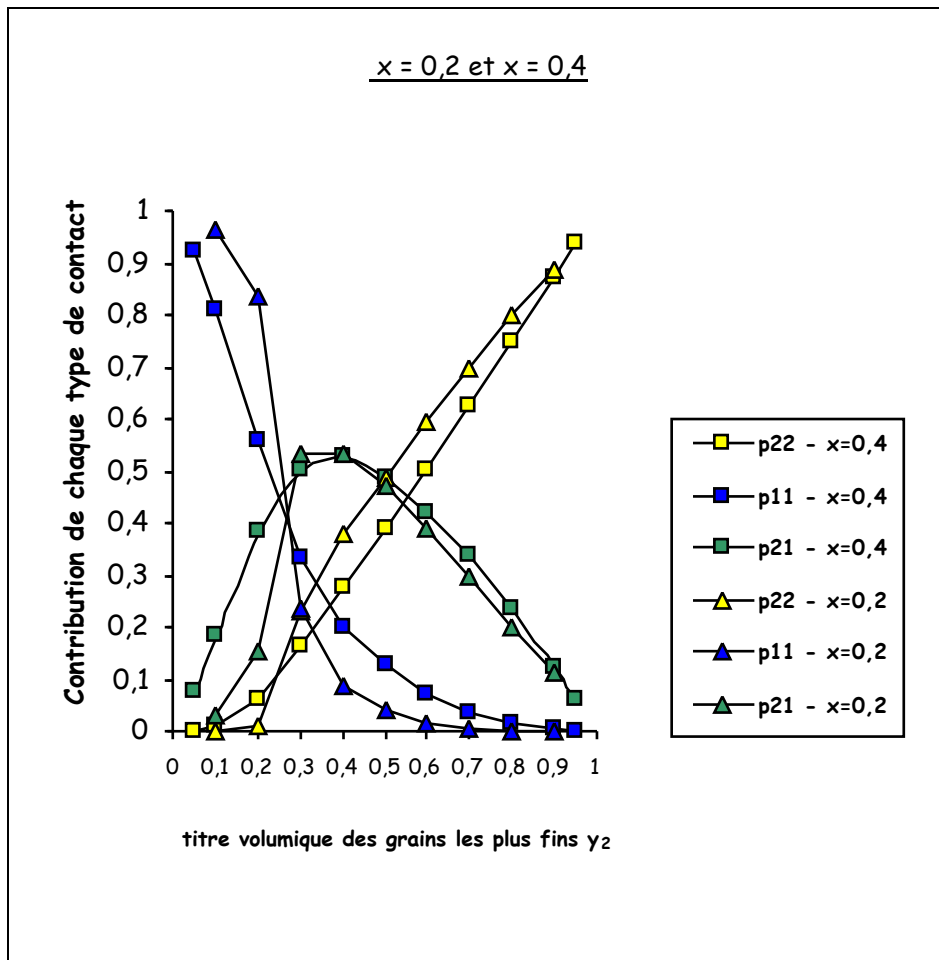


Figure VI-45 : Comparaison des « pressions partielles » grosse-grosse p_{11} , fine-grosse p_{21} , fine-fine p_{22} pour les rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$ en fonction de y_2 .

Le critère « pressions partielles » est particulièrement intéressant pour analyser la notion de classe dominante car leurs expressions mathématiques font intervenir à la fois les forces normales de contact et les nombres de coordination. La mécanique et la géométrie y sont donc intimement liées.

L'examen des courbes présentées ci-dessus amène les commentaires suivants :

- Trois secteurs sont mis en évidence, valables à la fois pour $x = 0,2$ et pour $x = 0,4$: une zone des « gros dominants » pour $y_2 \leq 25\%$, une zone « mixte » pour $25\% \leq y_2 \leq 50\%$ et une zone des « fins dominants » pour $y_2 \geq 50\%$. Ils correspondent aux trois domaines dans lesquelles p_{11} , p_{21} , p_{22} sont respectivement les plus fortes.

- Les zones des « gros dominants » et des « fins dominants » présentent des pressions partielles, respectivement p_{11} et p_{22} , plus importantes pour $x = 0,2$, indiquant une « domination » d'autant plus marquée que le contraste de tailles est fort. Cet effet est toutefois moins accentué du côté des « fins dominants » où les écarts entre $p_{22}^{x=0,2}$ et $p_{22}^{x=0,4}$ sont moins nets.
- Dans cette dernière zone, les pressions partielles $p_{11}^{x=0,2}$ enregistrées au niveau des contacts grosse-grosse pour $x = 0,2$ sont très faibles. Pourtant, nous avons pu enregistrer des chaînes de forces non négligeables entre elles. L'explication réside dans la combinaison de trois facteurs pouvant être mis en évidence à partir de l'expression de p_{11} dans VI-49 : un faible volume occupé par la classe granulaire 1 dans une unité de volume ϕ_1 , un petit nombre de coordination NC_{11} , un diamètre de particule d_1 relativement important.
- La zone mixte ne laisse pas apparaître de différences notables entre $p_{21}^{x=0,2}$ et $p_{21}^{x=0,4}$: les pressions partielles fine-grosse régnant à l'intérieur de l'empilement sont indépendantes des rapports des diamètres testés pour les proportions volumiques correspondantes à ce secteur.
- Cette observation est également valable dans la zone des « fins dominants ». En revanche, elle n'est plus vraie dans la zone des « gros dominants » où $p_{21}^{x=0,4} > p_{21}^{x=0,2}$: l'effet de desserrement se fait particulièrement sentir pour $x = 0,4$.
- Le passage de la zone dite « mixte » à celle des « gros dominants » (pour y_2 décroissant) s'effectue approximativement à la proportion volumique pour laquelle la compacité des deux mélanges binaires atteint son maximum : $y_2 \approx 25\%$ pour $x = 0,2$, $y_2 \approx 30\%$ pour $x = 0,4$.

En résumé, le concept de « pressions partielles », qui combine les aspects géométrique et mécanique, a permis d'affiner la notion de classe dominante et de mieux comprendre la constitution du squelette porteur de l'édifice granulaire. Il fait ressortir trois zones : celle des « gros dominants », celle des « fins dominants » et celle, mixte, que nous dénommerons : zone de « synergie du squelette porteur » (dans un contexte légèrement différent, Yu et Standish [JUST88] avaient fait référence à « the synergism of the mixture »). Pour $x = 0,2$ et $x = 0,4$, la jonction des zones « gros dominants » et « synergie du squelette porteur » correspond peu ou prou au mélange à compacité maximale.

6.9. L'EUTECTIQUE.

Dans sa thèse, Ben Aim [BENA70] fait référence au mélange à porosité minimale comme étant celui correspondant au maximum de petites sphères que l'on peut venir loger entre les grosses sphères préalablement empilées. Il considère ce minimum comme un point de rebroussement pour $x \leq 0,2$ qu'il appelle « eutectique » en référence aux eutectiques moléculaires où les petites molécules viennent se loger à l'intérieur du réseau pseudo-cristallin des grosses molécules.

La question consiste à savoir ici si le point situé à la jonction entre les zones « gros dominants » et « synergie du squelette porteur », qui correspond approximativement au mélange à compacité maximale, peut être considéré comme un point d'eutectique, selon la notion introduite par Ben Aim pour les mélanges granulaires.

Dans le cas $x = 0,2 \leq 0,22$ et pour les faibles proportions de petites billes, celle-ci ont la possibilité de se loger relativement bien dans les cavernes formées par les grosses particules comme semble le confirmer l'analyse des résultats obtenus par simulation numérique : grosses particules en contacts presque exclusifs avec leurs congénères, chaînes de forces et pressions partielles intenses entre ces dernières, très fort pourcentage de particules fines flottantes, peu de contacts sur les petits éléments qui sont en mesure d'occuper les interstices disponibles. « L'eutectique » est assez clairement mis en évidence dans cette situation.

Dans le cas $x > 0,22$, la distinction n'est plus aussi nette. Pour $x = 0,4$, en allant de la zone de « synergie du squelette porteur » vers celle des « gros dominants », on note un accroissement des particules flottantes, mais sans commune mesure avec le rapport de tailles précédent. Les pressions partielles grosse-grosse sont prépondérantes mais celles concernant les contacts fine-grosse restent à un niveau assez élevé. Pour $y_2 = 20\%$, on assiste à une forte dominante de 4 contacts sur les petites particules. Cela signifie que chacune d'entre elles n'est pas suffisamment fine pour s'introduire dans la caverne disponible et qu'elle écarte les quatre particules avec lesquelles elle est en contact. Cette remarque a tendance à conforter notre modélisation de l'effet de desserrement, basée sur l'existence d'une taille de caverne critique et sur la notion de décompaction locale autour d'une petite particule insuffisamment fine pour s'y glisser.

Nous allons maintenant aborder la notion d'eutectique pour un mélange binaire de rapport de tailles $x = 0,1$ qui, lors de l'analyse des résultats obtenus sur 8 échantillons par simulation numérique pour une proportion $y_2 = 20\%$, a révélé l'existence d'un cas bien particulier : 4 valeurs de compacité se situent aux alentours de 0,750, 4 aux environs de 0,843.

Codes	γ_1	N_1	Γ	$\phi_{LS,init}$	$\phi_{LS \rightarrow DM}$	n_{coll}	ϕ^*	e^*
H75, H78, H79, H80	0,8	16	0,002	0,004	0,6	230	0,7499	0,3334
H76, H77, H82, H84							0,8429	0,1863

Tableau VI-28 : compacités et indices des vides obtenus par simulation numérique LS + DM pour un mélange binaire composé de N=4000 particules, avec un rapport de tailles $x=0,1$, pour une proportion volumique de grosses billes $y_1=80\%$.

Codes des échantillons		H75, H78, H79, H80	H76, H77, H82, H84
Nombre de particules ne portant pas de forces		3984	186
Nombre de grosses particules portant des forces		16	16
Nombre de petites particules portant des forces		0	3798
Nombres de coordination	NC_{11}	5,875	4,125
	NC_{12}	0,3542	204
	NC_{21}	0,0014	0,8195
	NC_{22}	0,0268	4,155
	NC^*	12,713	6,058
Forces de contact	$\langle F_{N11} \rangle$	89,099	23,797
	$\langle F_{N12} \rangle$	0	1,250
	$\langle F_{N22} \rangle$	0	0,838
Pressions partielles	p_{11}	1	0,211
	p_{21}	0	0,603
	p_{22}	0	0,186

Tableau VI-29 : caractéristiques obtenues par simulation numérique avec un rapport de tailles $x=0,1$, pour une proportion volumique de grosses billes $y_1=80\%$.

Quelle est alors la classe granulaire dominante ? Pour H75, H78, H79, H80, il s'agit clairement des « gros ». Pour H76, H77, H82, H84, il convient d'analyser les résultats.

Dans le premier cas (échantillons H75, H78, H79, H80), ce sont uniquement les 16 grosses particules qui supportent les forces. Les petites particules se placent librement entre elles et ne reprennent rien : l'effet de desserrement est nul. Les grosses billes, qui sont en nombre très faible, forment une structure stable sous la pression exercée, comme le démontrent les valeurs obtenues pour les pressions partielles : $p_{11} = 1$, $p_{21} = p_{22} = 0$. Elles forment une structure qui semble avoir cristallisé, comme le prouve la valeur élevée de NC^* ($NC^* \approx 12,713$), et qui peut s'avérer périodique puisqu'elles sont 16 à supporter les forces. D'après le mécanisme d'insertion, la compacité du mélange se calcule grâce à l'expression I-8 :

$$\text{I-8} \quad c_1 = \frac{\alpha_1}{\gamma_1} = \frac{\alpha_1}{1 - \gamma_2}$$

La compacité correspondante des grosses billes se détermine donc de la façon suivante $\alpha_1 = c_1 \gamma_1 = 0,7499 \times 0,8 \approx 0,6$. Elle est par conséquent inférieure à la compacité mono-modulaire obtenue : $\phi^* \approx 0,6413 \pm 0,0004$. Cela montre l'influence du nombre restreint de grosses particules. Si elles se trouvaient présentes en grande quantité, la compacité du mélange devrait être : $c_1 = \frac{\alpha_1}{\gamma_1} = \frac{0,6413}{0,8} \approx 0,8$. On voit ici la limite d'un échantillon constitué de 4000 billes lorsque le contraste des tailles du mélange binaire est si important. Ici, on peut dire que l'effet de desserrement est nul à condition que la proportion volumique des petites billes soit inférieure à une certaine valeur : dans ce cas uniquement, ces dernières peuvent se trouver dans la situation de particules flottantes.

Se pose également le problème de ségrégation qui pourrait survenir. Il existe en effet une possibilité de migration des particules fines à travers le squelette constitué par les grosses particules. Le diamètre d_2 d'une petite bille pouvant passer à travers le restreint entre 3 billes tangentes de diamètre d_1 est : $d_2 = \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1 \right) d_1 \approx 0,1547 d_1$. Or, le rapport de tailles concerné est ici $x = 0,1$.

Mais les échantillons H75, H78, H79, H80 constituent bien un mélange eutectique : par ce terme, est désigné le mélange tel que les petites sphères investissent les cavernes entre les grosses. Il est, dans ce cas, possible d'établir une analogie avec la thermodynamique des solutions binaires.

Dans le deuxième cas (échantillons H76, H77, H82, H84), la situation est complètement différente : toutes les particules (sauf 186 petites avec moins de 4 contacts) portent des forces. En tenant compte uniquement du squelette porteur, le nombre de coordination moyen NC^* vaut : $NC^* = 6,06$, ce qui indique qu'il est en

état d'équilibre. L'analyse des autres nombres de coordination apporte par ailleurs un certain nombre d'éclairages intéressants : alors que NC_{11} est plus faible ($NC_{11} \approx 4,13$) que celui relevé pour l'autre série d'échantillons, NC_{12} est relativement important ($NC_{12} = 204$) ce qui veut dire que les fines particules sont en mesure de se positionner autour d'une grosse. Une pression partielle p_{21} élevée ($p_{21} = 0,603$) confirme que le squelette porteur de l'édifice granulaire de H76, H77, H82, H84 est constitué à la fois des éléments fins et gros du mélange.

Mais surtout, le point représentatif de la moyenne obtenue sur ces 4 échantillons sur le diagramme représentant l'indice des vides en fonction de γ_2 se situe en-dessous de la droite symbolisant le mécanisme d'insertion (figure VI-46) : le mélange présente une compacité de 0,8429 supérieure à celle attendue ($c_1 = \frac{\alpha_1}{\gamma_1} = \frac{0,6413}{0,8} \approx 0,8$) lorsque les petites billes s'insèrent parfaitement dans les interstices disponibles en considérant comme compacité mono-modulaire : $\phi^* \approx 0,6413$.

Trois explications peuvent être avancées pour expliquer ce résultat :

- la proportion volumique des grosses particules pourrait être légèrement différente de celle théoriquement prévue : $\gamma_1 = 0,8$. Mais nous avons vérifié qu'en considérant 16 grosses particules de diamètre 10 fois supérieur à celui des 3984 petites particules, elle était en réalité de : $\gamma_1 = 0,80064$.
- la pression isotrope exercée sur l'échantillon engendre une légère déflexion de chacune des billes d'après la loi de Hertz. Cependant, celle que nous avons choisie correspond à un paramètre de raideur $\kappa \approx 8400$, suffisamment élevé pour approcher les caractéristiques des empilements de billes présentant une bonne rigidité. Cette dernière ne permet pas à l'empilement de passer d'une compacité théorique de 0,8 à une compacité mesurée de 0,8429.
- enfin, la plus plausible est qu'un début de cristallisation ait pu se produire : l'empilement des grosses billes a pu commencer à s'ordonner. Leur compacité non-modulaire est en effet égale à : $\alpha_1 = c_1 \gamma_1 = 0,8429 \times 0,8 \approx 0,6743 \geq 0,6413$. A cet égard, le fait qu'elles supportent toutes des forces et qu'elles soient au nombre de 16 peut, là aussi, laisser supposer l'existence d'une structure périodique quant à leur disposition. On sort alors progressivement du cadre des empilements aléatoires. Deux remarques viennent toutefois nuancer ce propos. D'une part, le nombre de coordination obtenu $NC^* = 6,06$ n'est guère supérieur à 6 correspondant aux empilements isostatiques et, d'autre part, la distribution du

nombre de contacts moyen sur les petites particules présente un maximum à 5 avec une courbe (figure VI-47) très proche de celle obtenue dans le cas $x = 0,2$, $y_2 = 30\%$ où aucun signe de cristallisation n'a été décelé. Cependant, on peut parfaitement imaginer des grosses billes disposées de façon relativement bien ordonnée avec, entre elles, des petites billes plutôt placées aléatoirement mais supportant néanmoins des forces.

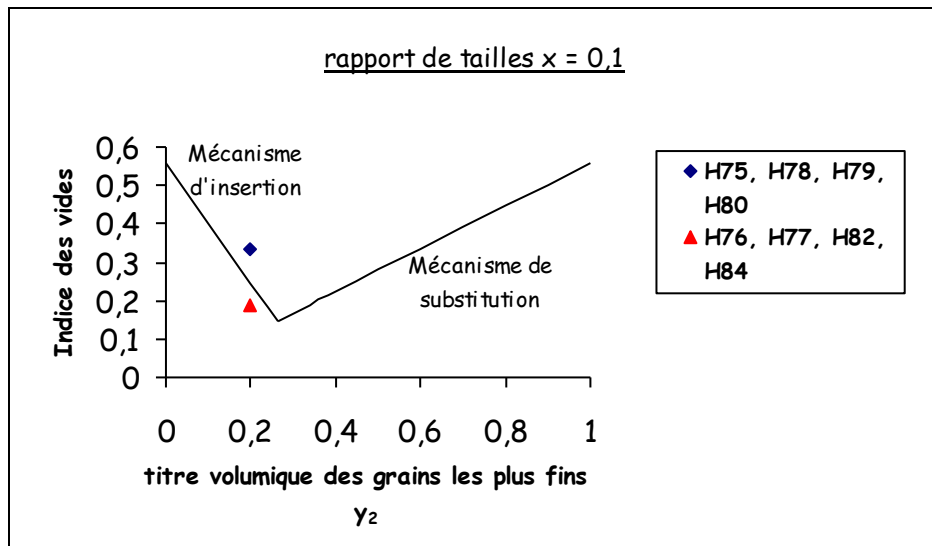


Figure VI-46 : situation des points représentatifs des échantillons de la série H75, H78, H79, H80 et de la série H76, H77, H82, H84 par rapport à la droite symbolisant le mécanisme d'insertion.

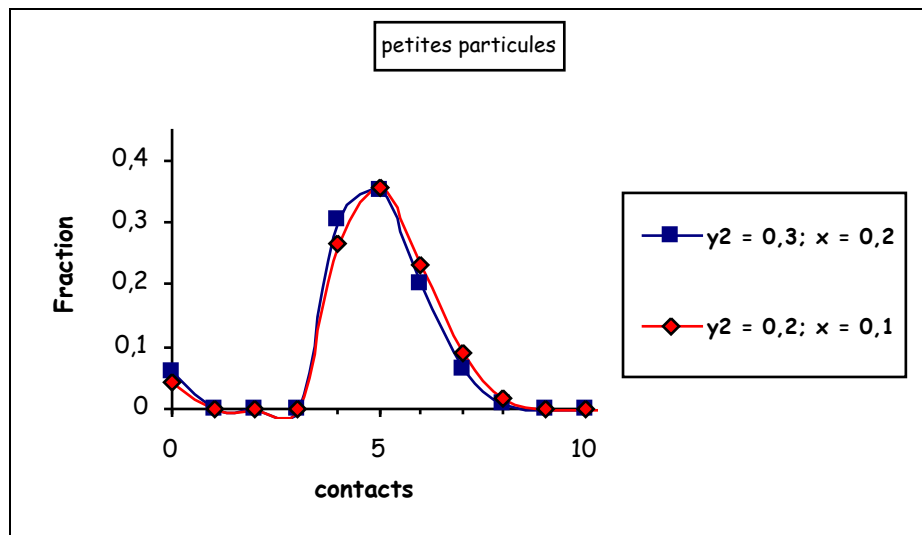


Figure VI-47 : comparaison des distributions du nombre de contacts sur les petites particules lorsque celles-ci ont une proportion volumique $\gamma_2 = 20\%$ et un rapport de tailles $x = 0,1$ d'une part (pour la série H76, H77, H82, H84) et dans le cas $\gamma_2 = 30\%$, $x = 0,2$ d'autre part.

6.10. DÉTERMINATION DU COEFFICIENT D'INTERACTION LIÉ À L'EFFET DE PAROI PAR SIMULATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE.

Nous allons maintenant nous intéresser à la détermination du coefficient d'effet de paroi en fonction du rapport des diamètres x par simulation numérique discrète.

L'étude de l'évolution de l'indice des vides d'un mélange binaire en fonction de la proportion volumique des petites particules γ_2 du côté où ces dernières sont largement dominantes fait apparaître une variation linéaire : le principe de superposition s'applique. L'indice des vides peut être calculé à l'aide d'une formule établie dans le paragraphe 5.1.4 :

$$e_2 = \frac{1}{\beta_2} \left\{ 1 - \left[1 - \beta_2 + b_{21}\beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1} \right) \right] (1 - \gamma_2) \right\} - 1$$

Dans le cas où $\beta_1 = \beta_2$ (des petites billes empilées seules ont la même compacité que des grosses billes empilées seules dans les mêmes conditions), on obtient :

$$e_2 = \frac{1}{\beta_2} \left(1 - (1 - \beta_2)(1 - b_{21})\gamma_1 \right) - 1$$

En reliant l'indice des vides e_2 à la compacité du mélange ϕ^* obtenue à l'issue de l'étape de dynamique moléculaire DM, $e_2 = \frac{1}{\phi^*} - 1$, on parvient à l'expression du coefficient d'effet de paroi suivante:

$$\text{VI-50} \quad b_{21} = 1 - \frac{\phi^* - \beta_2}{\phi^* (1 - \beta_2) \gamma_1} \text{ en compacités virtuelles}$$

$$b_{21} = 1 - \frac{\phi^* - \alpha_2}{\phi^* (1 - \alpha_2) \gamma_1} \text{ en compacités réelles}$$

Il reste à déterminer ϕ^* par simulation numérique en considérant des mélanges binaires comprenant quelques grosses billes noyées dans un océan de petites.

Les mélanges testés comprennent $N = 4000$ particules. Lorsqu'ils sont composés de deux tailles de billes, les rapports de diamètres varient de $x = 0,1$ à $x = 0,9$ par pas de $0,1$. Lorsqu'ils sont constitués d'une seule taille de billes (codes **B50** à **B57**), ils permettent d'obtenir la compacité α_2 .

N_1 représente le nombre de grosses particules présentes dans l'assemblée granulaire. La proportion volumique γ_1 de ces dernières vaut 0,05 pour les contrastes de tailles les moins marqués ($x = 0,4$ à $x = 0,9$). Elle est portée à 0,1 ou 0,2, dans le cas contraire, de telle manière qu'un nombre minimum de gros éléments soient présents dans le mélange. A titre d'exemple, un seul d'entre eux ($N_1 = 1$) représente une proportion $\gamma_1 = 0,20$ pour un rapport de tailles $x = 0,1$ lorsqu'on dénombre $N = 4000$ éléments.

Comme nous l'avons déjà souligné, pour obtenir la meilleure compacité possible, le facteur de gonflement Γ est choisi de telle manière que la phase de mélange, avant recours à la méthode DM, soit suffisante avec un nombre moyen de collisions par grain minimal fixé à $n_{coll,min} = 200$. La sélection de $\Gamma = 0,01$ permet le respect de ce critère.

6.10.1. Coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique.

Les coefficients de paroi obtenus sont les suivants :

codes	x	γ_1	N_1	Γ	$\phi_{LS,init}$	n_{coll}	ϕ^*	$\Delta\phi^*$	Coef. d'effet de paroi b_{21}
B50 à B57 (1 seule taille de billes)	0,5	0	0	0,01	0,0057	343	$\alpha_2 \approx 0,64133$	0,00045	/
G24 à G31	0,1	0,2	1		0,0009	242	0,68063	0,00040	0,195
G00 à G07	0,2	0,1	4		0,0065	292	0,65910	0,00051	0,248
G08 à G15	0,3	0,1	12		0,021	302	0,65353	0,00048	0,479
G16 à G23	0,4	0,05	13		0,048	328	0,64612	0,00044	0,587
B58 à B65	0,5	0,05	26		0,094	322	0,64494	0,00046	0,687
B66 à B73	0,6	0,05	45		0,090	327	0,64378	0,00039	0,787
B74 à B81	0,7	0,05	71		0,092	331	0,64255	0,00047	0,894
B82 à B89	0,8	0,05	105		0,092	334	0,64207	0,00034	0,936
B90 à B97	0,9	0,05	148		0,092	338	0,64179	0,00043	0,960

Tableau VI-30 : coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM ($\phi_{LS \rightarrow DM} = 0,6$) pour un mélange binaire composé de $N=4000$ particules.

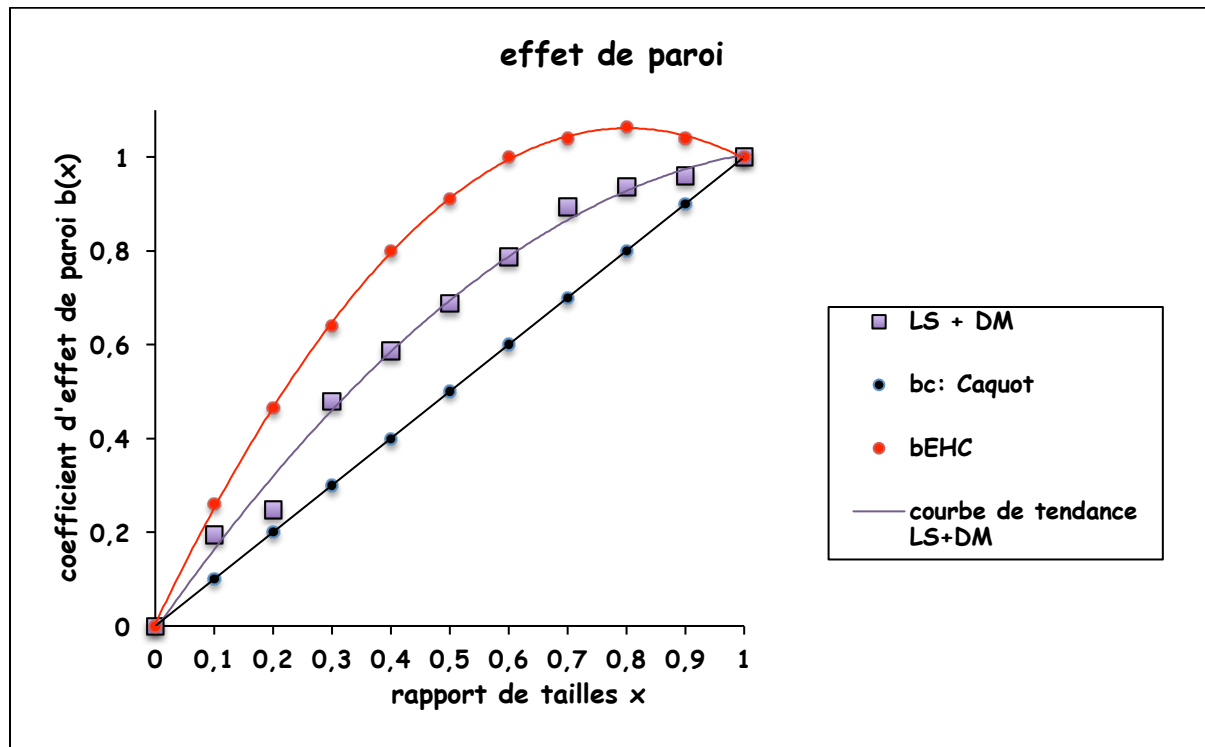


Figure VI-48 : coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM (courbe de tendance en polynôme du 2^{ème} degré). Comparaison avec la fonction b_c du modèle de Caquot et la fonction b_{EHC} issue du modèle Empilement Hexagonal Compact de Dodds.

Les points obtenus par simulation numérique se situent, comme prévu, entre ce que nous avons convenu d'appeler la borne inférieure de Caquot d'une part et la borne supérieure de Dodds correspondant à un Empilement Hexagonal Compact EHC d'autre part. Rappelons qu'elles sont issues de modèles analytiques. La première a été établie sans tenir compte de la façon dont les petits grains sont arrangés contre la paroi de la grosse particule, supposée rectiligne indéfinie. La deuxième, quant à elle, correspond à des éléments, gros et petits, de forme sphérique, arrangés idéalement, dont les centres sont disposés aux sommets de tétraèdres.

Il est à noter que, pour le rapport de tailles $x = 0,2$, le point représentatif du coefficient d'effet de paroi obtenu par LS + DM est situé en-dessous de la courbe de tendance (polynôme de degré 2) et se rapproche de la borne inférieure de Caquot. Lorsque les contrastes de diamètres sont particulièrement forts, rappelons que de Larrard [DELA00] a mis en évidence, expérimentalement, que les grosses particules pouvaient aider les éléments les plus fins à se compacter grâce à la vibration. Cela peut même conduire, dans certains cas, à un « anti-effet de paroi » se traduisant, selon cet auteur, par des coefficients b_{21} pouvant être négatifs.

Lors de la simulation numérique et de l'étape d'agitation LS en particulier, il est possible que les 4 grosses particules noyées au milieu des 3996 petites aient pu tenir un rôle quelque peu similaire. En revanche, le constat est différent pour le rapport de tailles $x = 0,1$ où le coefficient d'effet de paroi est représenté par un point situé au-dessus de la courbe de tendance obtenue pour la simulation LS + DM. L'explication pourrait résider, cette fois-ci, dans la présence d'uniquement 1 grosse particule parmi les 4000 constituant le mélange. Celle-ci serait trop isolée pour tenir le même rôle.

6.10.2. Comparaison avec les résultats obtenus expérimentalement sur des billes de verre sphériques.

Nous allons reprendre les résultats extraits de la thèse de Ben Aïm [BENA70], déjà présentés dans le paragraphe 5.1.5.1., et pour lesquels on avait $\alpha_1 = \alpha_2$ (les grosses billes empilées seules présentent la même compacité que les petites billes empilées seules), correspondant à l'une des hypothèses de constitution de notre modèle (théorie ROAD). Nous allons rajouter deux séries de données, extraites de la même thèse, mais pour lesquelles on a $\alpha_1 \neq \alpha_2$. Rappelons que pour passer du facteur d'encombrement lié à l'effet de paroi de Mooney, λ_{21} , au coefficient d'interaction b_{21} du modèle d'empilement compressible (MEC), nous avons fait appel à l'expression I-67:

$$\text{I-67} \quad b_{21\text{MEC}} = \frac{\lambda_{21\text{Mooney}} - 1}{\frac{1}{\alpha_1} - 1}$$

Auteurs	$x = \frac{d_2}{d_1}$	α_1	λ_{21}	b_{21}
Westman et Hugill	0,02	0,623	1,03	0,049
	0,125	0,618	1,13	0,210
	0,159	0,623	1,15	0,248
Tickell, Mechem, Mc Curdy	0,01	0,639	1	0
	0,352		1,24	0,425
	0,5		1,42	0,743
	0,71		1,47	0,832

Tableau VI-31 : valeurs du coefficient d'effet de paroi b_{21} mesurées sur des sphères. Données extraites de Ben Aïm [BENA70].

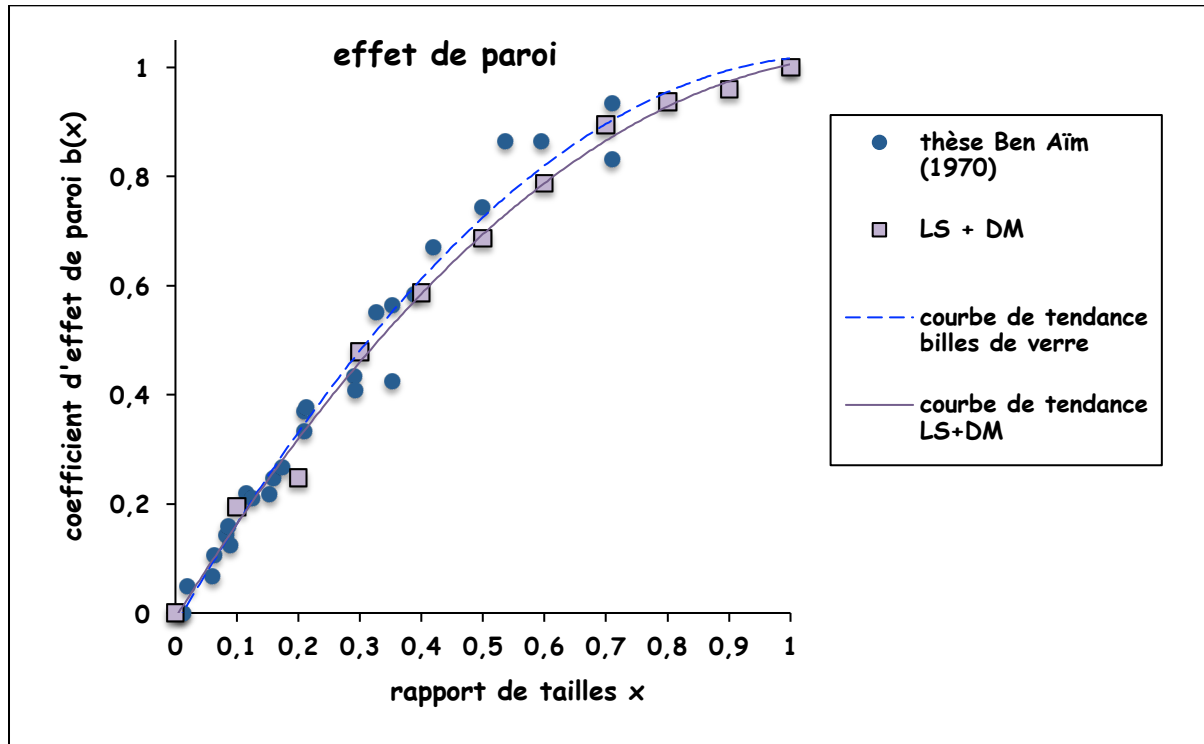


Figure VI-49 : coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM. Comparaison avec les résultats expérimentaux issus de la thèse de Ben Aïm [BENA70] avec des billes de verre. Courbes de tendance en polynôme du 2^{ème} degré.

On remarque que les points obtenus par simulation numérique LS + DM et expérimentalement sur des billes de verre sont assez similaires pour les faibles rapports de tailles ($x \leq 0,4$) pour s'écarter ensuite légèrement au fur et à mesure que le contraste entre les diamètres des billes constituant chaque mélange binaire diminue ($x \geq 0,4$) : l'effet de paroi est alors un peu plus prononcé pour les mélanges réellement expérimentés par rapport à ceux simulés, même si le nombre de points répertoriés dans cette zone est relativement limité. On en dénombre en effet 6 qui proviennent de 3 équipes de chercheurs différentes : Naar *et al.* d'une part, Tickell *et al.* d'autre part et Ben Aïm pour finir.

Les résultats obtenus sur les billes de verre peuvent en effet avoir été influencés par les facteurs suivants : écart à la sphéricité des éléments testés, mélanges présentant une légère hétérogénéité et/ou anisotropie due(s) aux modes de mélangeage, de remplissage et à la forme du récipient dans lequel s'effectuent les mesures, méthode de mesure de la compacité nécessitant notamment de connaître la densité des lots de billes, elle-même influencée par les bulles d'air incluses dans ces dernières.

Par ailleurs, la théorie ROAD montre que les coefficients d'effet de paroi sont infléchis par la compacité α_2 des petites billes en pleine masse. Or cette dernière n'était pas identique pour les différents lots de billes testés.

6.10.3. Comparaison avec les modèles empiriques de de Larrard (1988 et 2000), Lecomte et Zennir (1997), Yu, Zou et Standish (1996).

Ces modèles empiriques ont été présentés dans le paragraphe 2.1.6. Ils ont été retenus pour cette étude comparative d'une part car ils respectent les conditions aux limites $b(0) = 0$ et $b(1) = 1$ et d'autre part car ils ont été établis à partir d'un grand nombre de résultats expérimentaux.

Rappelons les expressions obtenues (par ordre chronologique) et leurs auteurs :

II-16 $b_{L88}(x) = 1 - (1 - x)^{1,6}$ en 1988 par de Larrard [DELA88] ;

II-20 $b_{YZS}(x) = 1 - (1 - x)^{1,97} - 0,36 x (1 - x)^{3,67}$ en 1996 par Yu, Zou et Standish [YUZ096] ;

II-18 $b_{LZ}(x) = x^{1,33} + x(1 - x)$ en 1997 par Lecomte et Zennir [LECO97] ;

II-19 $b_{L00}(x) = 1 - (1 - x)^{1,5}$ en 2000 par de Larrard [DELA00].

La première expression était utilisée dans le modèle linéaire de compacité (MLC) qui correspond à la première génération de modèles mis au point en France pour estimer la compacité des mélanges granulaires. Elle a été obtenue par lissage de 27 points expérimentaux générés sur des sphères, tout en s'appuyant sur les théories de Caquot [STOV86], Ben-Aïm [BENA70] et Dodds [DODD80].

La deuxième a été introduite dans une évolution d'un autre modèle linéaire de compacité établi parallèlement au précédent par une équipe de chercheurs en Australie. Nous ne connaissons pas combien de points ont permis d'aboutir à son expression, ni la nature et la forme des grains testés.

La troisième résulte d'une étude entreprise en vue d'utiliser des concassés tendres de Moselle dans la formulation d'un béton courant en faisant appel au modèle de suspension solide, évolution du MLC. Elle est basée sur l'analyse de 25 résultats expérimentaux.

La quatrième enfin, établie à partir de 14 points sur des grains roulés de la Loire et des concassés de Arnay-le-Duc, est celle utilisée dans le modèle d'empilement compressible (MEC), dernière génération de modèles permettant de calculer la compacité d'un mélange en faisant intervenir un indice de serrage.

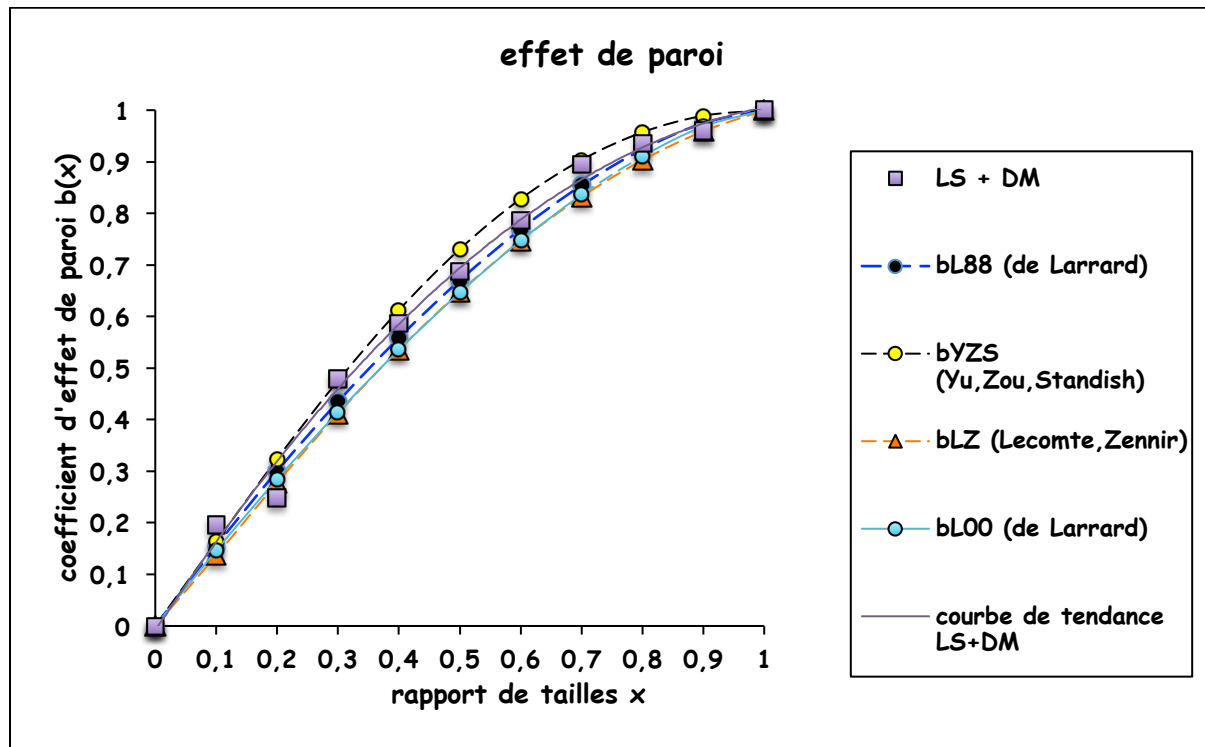


Figure VI-50 : coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM (courbe de tendance en polynôme du 2^{ème} degré). Comparaison avec les fonctions b_{L88} de de Larrard (1988), b_{YZS} de Yu, Zou et Standish (1996), b_{LZ} de Lecomte et Zennir (1997) et b_{L00} de de Larrard (2000).

Les coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM se situent, à deux exceptions près, à l'intérieur d'un fuseau de modèles empiriques qui serait défini par la fonction $b_{YZS}(x)$ pour la partie haute et par les fonctions $b_{LZ}(x)$ ou $b_{L00}(x)$ pour la partie basse. Seuls les résultats recensés pour les rapports de tailles $x = 0,1$ et $x = 0,2$ font exception à ce constat. Nous avons déjà émis quelques hypothèses précédemment pour expliquer ces écarts.

La simulation numérique LS + DM fournit, en réalité, des résultats extraordinairement proches de ceux obtenus par la fonction $b_{L88}(x)$ de la forme $1 - (1 - x)^p$, avec $p = 1,6$, choisie en 1988 par de Larrard dans sa thèse pour aboutir au meilleur lissage des valeurs expérimentales relevées précisément sur des sphères. Vingt ans plus tard, Jean-Noël Roux [ROUX07] s'interrogeait pour savoir si des approches discrètes permettraient de préciser diverses notions utilisées dans la formulation des bétons, notamment celle de l'effet de paroi introduite par de Larrard dans son modèle d'empilement. Les travaux présentés ici permettent probablement d'y répondre par l'affirmative.

6.10.4. Comparaison avec les résultats fournis par la théorie ROAD.

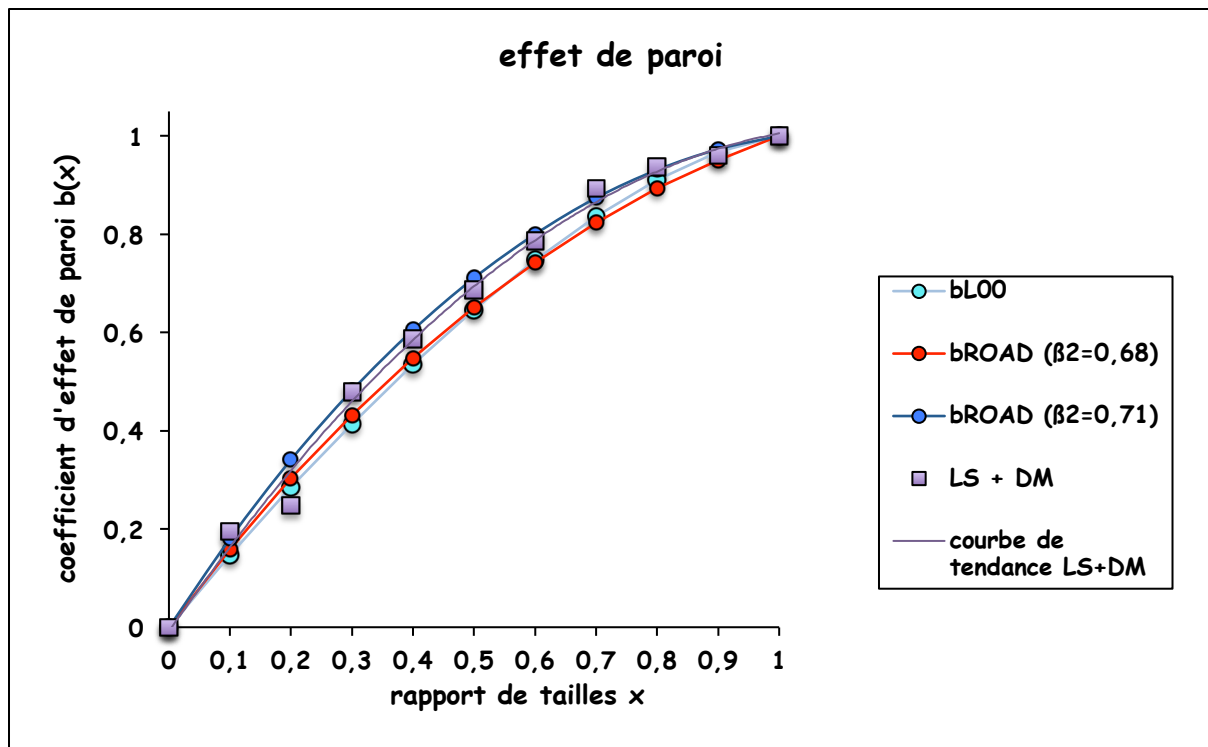


Figure VI-51 : coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM. Comparaison avec la théorie ROAD pour les compacités virtuelles $\beta_2 = 0,68$ et $\beta_2 = 0,71$ et avec la fonction b_{L00} de de Larrard. Courbes de tendance en polynôme du 2^{ème} degré.

L'analyse des résultats fait ressortir plusieurs points remarquables :

- Les coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM sont pratiquement confondus avec ceux fournis par la théorie ROAD pour une compacité virtuelle des petites billes en pleine masse $\beta_2 = 0,71$.

Or, si nous faisons appel à l'indice de serrage K [DELA00] pour passer d'une compacité virtuelle à une compacité réelle et si nous considérons une valeur $K = 9$ (tableau VI-9) calibrée par de Larrard dans le MEC comme étant représentative d'un procédé de remplissage « vibration + pression de 10 kPa », nous obtenons, d'après l'expression VI-39, la compacité propre

réelle $\alpha_2 = \beta_2 \frac{K}{1+K} = 0,71 \times \frac{9}{10} \approx 0,64$, très proche de celle établie par l'approche LS + DM : $\alpha_2 = 0,641$.

- La théorie ROAD fait appel à une cellule de référence permettant de délimiter la zone perturbée par l'effet de paroi autour d'une grosse bille. Son diamètre se calcule à partir de l'expression III-1 : $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2k_p x}$. Or, pour $\beta_2 = 0,71$ qui est la valeur évoquée dans le point précédent, le coefficient k_p est environ égal à 1. Dans ce cas, l'épaisseur de la zone perturbée est équivalente à celle de la cellule de référence choisie par Ben-Aïm [BENA70] et par Suzuki et Oshima [SUZU83], [SUZU85] qui vaut $\frac{d_2}{2}$ lorsque $d_2 \ll d_1$.
- La fonction $b_{L00}(x) = 1 - (1 - x)^{1,5}$ constitue la dernière évolution sélectionnée en 2000 par de Larrard dans son ouvrage « structures granulaires et formulation des bétons ». Comme nous l'avons déjà souligné, elle a notamment été étalonnée sur des grains roulés de la Loire dont la forme est celle qui se rapproche le plus de celle d'une sphère. En observant la figure VI-51, on peut remarquer qu'elle fournit des résultats très proches de la théorie ROAD pour une compacité virtuelle des petites billes en pleine masse égale, cette fois-ci, à $\beta_2 = 0,68$. D'après l'expression VI-39, cette dernière correspond à une compacité propre réelle $\alpha_2 = \beta_2 \times \frac{K}{1+K} \approx 0,61$ lorsque l'indice de serrage K vaut 9. Or, la valeur de α_2 calculée coïncide avec la moyenne des compacités α_2 de chacune des classes granulaires testées constituées des grains roulés de la Loire (voir tableau V-1) : $\alpha_2 = \frac{1}{7} \times (4 \times 0,592 + 0,609 + 0,616 + 0,6195) = 0,61$. La compacité $\alpha_2 = 0,592$ est multipliée par 4 car elle correspond à la compacité propre de la classe granulaire élémentaire R05_{SLA} qui intervient comme classe la plus fine dans 4 mélanges testés (tableau V-7) : R8R05_{SLA}, R4R05_{SLA}, R2R05_{SLA} et R1R05_{SLA}.

En résumé et en d'autres termes, avec un indice de serrage $K=9$ correspondant à un procédé de remplissage « vibration + pression de 10 kPa », les coefficients d'effet de paroi fournis par la théorie ROAD:

- avec $\beta_2 = 0,71$, sont pratiquement similaires à ceux obtenus par LS + DM pour une compacité simulée des petites billes en pleine masse valant $\alpha_2 = 0,64$. Or, d'après l'expression VI-39, cette dernière est précisément équivalente à $\beta_2 = 0,71$ en virtuel. La zone perturbée par l'effet de paroi est alors délimitée par une cellule de référence sphérique pratiquement identique à celle choisie par Ben-Aïm ou Suzuki et Oshima.
- avec $\beta_2 = 0,68$, sont quasiment identiques à ceux fournis par la fonction $b_{L00}(x) = 1 - (1-x)^{1,5}$ optimisée par de Larrard pour lisser au mieux les valeurs expérimentales obtenues notamment sur des grains roulés de la Loire dont la compacité propre réelle des classes fines est en moyenne $\alpha_2 \approx 0,61$. Or, d'après l'expression VI-39, cette dernière est équivalente à $\beta_2 = 0,68$ en virtuel.

6.11. DÉTERMINATION DU COEFFICIENT D'INTERACTION LIÉ A L'EFFET DE DESSERREMENT PAR SIMULATION NUMÉRIQUE DISCRÈTE.

Nous allons maintenant nous intéresser à la détermination du coefficient d'effet de desserrement en fonction du rapport des diamètres x par simulation numérique discrète.

L'étude de l'évolution de l'indice des vides d'un mélange binaire en fonction du titre volumique des petites particules γ_2 du côté où ces dernières sont largement minoritaires en proportion fait apparaître une variation dont la linéarité est sujette à caution. Néanmoins, elle est tolérée par un grand nombre de chercheurs : Mooney (1950), Stovall et de Larrard (1986), Yu et Standish (1987), Goltermann dans sa modification du modèle de Toufar (1997) car elle permet une restitution plus que correcte des mesures effectuées sur un milieu particulièrement complexe qu'est le milieu granulaire. C'est pourquoi nous allons l'adopter pour évaluer le coefficient d'effet de desserrement. Dans le cas des grosses particules dominantes, l'indice des vides peut être calculé à l'aide d'une formule établie dans le paragraphe 5.1.4 :

$$e_1 = \frac{1}{\beta_1} \left\{ 1 - \left[1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} a_{12} \right] \gamma_2 \right\} - 1$$

Dans le cas où $\beta_1 = \beta_2$, on obtient :

$$e_1 = \frac{1}{\beta_1} \left\{ 1 - [1 - a_{12}] \gamma_2 \right\} - 1$$

En reliant l'indice des vides e_1 à la compacité du mélange ϕ^* obtenue à l'issue de l'étape de dynamique moléculaire DM, $e_1 = \frac{1}{\phi^*} - 1$, on parvient à l'expression du coefficient d'effet de desserrement suivante:

$$\text{VI-51} \quad a_{12} = 1 - \frac{\phi^* - \beta_1}{\phi^* (1 - \gamma_1)} \text{ en compacités virtuelles}$$

$$a_{12} = 1 - \frac{\phi^* - \alpha_1}{\phi^* (1 - \gamma_1)} \text{ en compacités réelles}$$

Il reste à déterminer ϕ^* par simulation numérique en considérant des mélanges binaires à dominante de grosses billes commençant à se desserrer en raison de la présence des petites.

Les assemblées granulaires testées comprennent $N = 4000$ particules. Les mélanges binaires présentent des rapports de diamètres variant par pas de 0,05 entre $x = 0,1$ et 0,3 et par pas de 0,1 entre $x = 0,3$ et $x = 0,9$. Les intervalles d'études ont en effet été resserrés autour du rapport de tailles théorique $x_0 = 0,224$ correspondant à une cavité tétraédrique. Les mélanges portant les codes A50 à A57 sont ceux qui ont permis d'obtenir la compacité propre α_1 .

N_1 représente le nombre de grosses particules présentes dans l'assemblée granulaire. La proportion volumique γ_1 de ces dernières vaut 0,95 pour les contrastes de tailles les moins marqués ($x = 0,3$ à $x = 0,9$). Elle est diminuée à 0,9 ou 0,8 dans le cas contraire, de telle manière qu'un nombre minimum d'éléments fins soient présents dans le mélange.

Comme nous l'avons déjà souligné, pour obtenir la meilleure compacité possible, nous avons prévu de choisir le facteur de gonflement Γ de telle manière que la phase de mélange, avant recours à la méthode DM, soit suffisante avec un nombre moyen de collisions par grain minimal fixé à $n_{\text{coll,min}} = 200$. Il s'avère que la sélection de $\Gamma = 0,002$ permet le respect de ce critère à deux exceptions près. Nous avons tout de même conservé cette valeur.

6.11.1. Coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique.

Les coefficients de desserrement obtenus sont les suivants :

codes	x	y ₁	N ₁	Γ	φ _{LS,init}	φ _{LS→DM}	n _{coll}	φ*	Δφ*	Coef. d'effet de desserrement a ₁₂
A50 à A57 (1 seule taille de billes)	0,5	1	4000	0,002	0,2	0,6	284	α ₁ = 0,64133	0,00045	/
H75 à H84	0,1	0,8	16		0,004		230	0,79641	0,04973	0,026
H67 à H74	0,15	0,8	53		0,012		263	0,79246	0,00603	0,046
H08 à H15	0,2	0,9	269		0,054		179	0,70432	0,00191	0,106
H16 à H23	0,25	0,9	493		0,1		205	0,69853	0,00141	0,181
F08 à F15	0,3	0,95	1356		0,2		164	0,66062	0,00130	0,416
F16 à F23	0,4	0,95	2195		0,202		238	0,65753	0,00073	0,507
A58 à A65	0,5	0,95	2815		0,2		344	0,65075	0,00031	0,711
A66 à A73	0,6	0,95	3216		0,2		488	0,64759	0,00046	0,807
A74 à A81	0,7	0,95	3468		0,2		676	0,64588	0,00049	0,859
F82 à F89	0,8	0,95	3627		0,2		0,58	784	0,64360	0,00025
F90 à F97	0,9	0,95	3731		0,2	0,57	961	0,64267	0,00022	0,958

Tableau VI-32 : coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique LS + DM pour un mélange binaire composé de N=4000 particules.

Pour deux rapports de tailles, $x = 0,8$ et $x = 0,9$, la valeur de la compacité à atteindre pour basculer de l'algorithme LS vers l'algorithme DM, $\phi_{LS \rightarrow DM}$, a été respectivement abaissée de 0,6 à 0,58 et 0,57 car il semble qu'un début de cristallisation se soit produit pour la valeur de $\phi_{LS \rightarrow DM}$ initialement prévue.

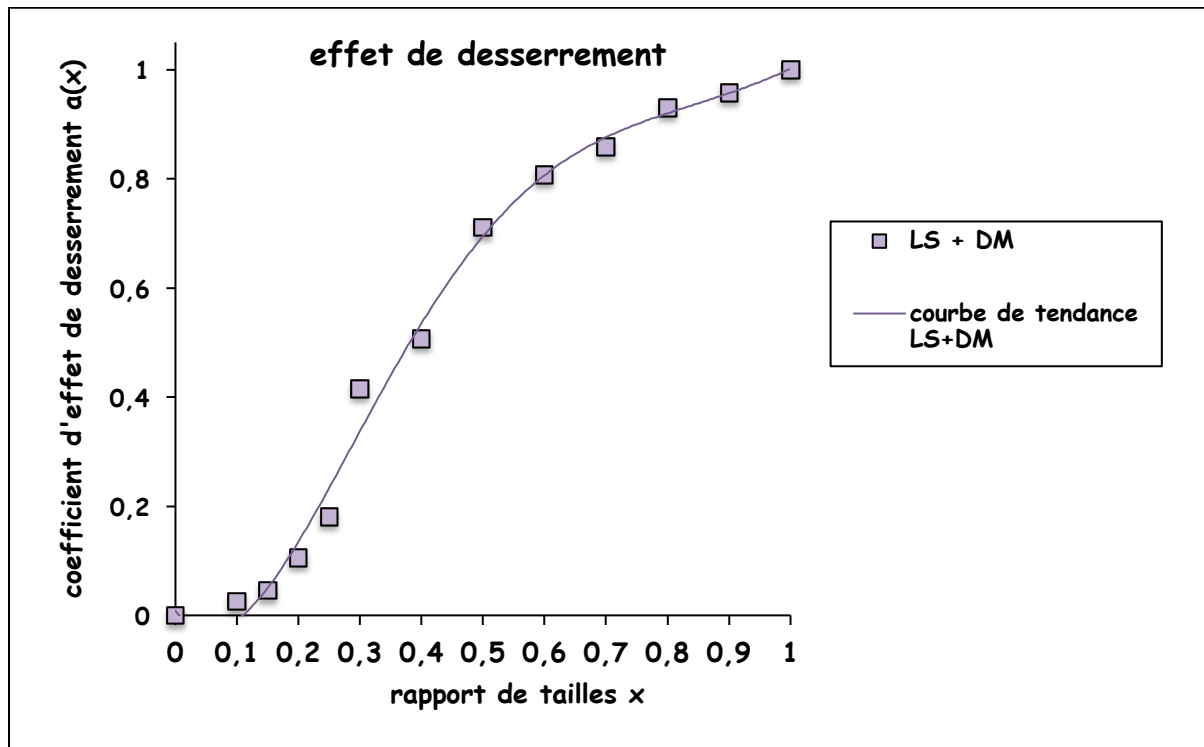


Figure VI-52 : coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique LS + DM (courbe de tendance en polynôme du 5^{ème} degré).

Les points obtenus par simulation numérique LS + DM montrent que l'effet de desserrement se manifeste très légèrement pour le rapport de tailles $x = 0,15$ et un peu plus nettement à partir de $x = 0,2$, voisin du rapport de tailles théorique $x_0 = 0,224$ correspondant à une cavité tétraédrique. Rappelons que le motif tétraédrique est le motif élémentaire le plus compact susceptible de figurer dans un lit désordonné [BENA70]. Pour un mélange binaire de billes dont le rapport des diamètres est inférieur à 0,2, les éléments fins ont théoriquement la possibilité de se loger dans les cavités que peuvent former les grosses particules. Tout dépend en réalité du mode de formation de l'empilement.

Il convient également de rappeler (paragraphe 6.9.) que, pour $x = 0,1$ et une proportion volumique de grosses billes $\gamma_1 = 0,8$, deux séries de compacité avaient été obtenues : la première aux environs de 0,7499, la seconde aux environs de 0,8429. Les coefficients d'effet de desserrement correspondants sont respectivement : $a_{12} = 0,276$ et $a_{12} = -0,196$.

Dans le premier cas, nous avons montré que l'ensemble des forces était supporté par les 16 grosses billes : aucun élément fin ne reprend d'actions mécaniques. L'effet de desserrement est donc nul alors que le coefficient le caractérisant ne l'est pas.

Cela confirme que le nombre de grosses particules constituant l'échantillon est trop faible. Si elles avaient été en quantités suffisantes, leur compacité propre aurait dû être de **0,64133** alors qu'elle est, dans le cas présent, égale à : $\alpha_1 = c_1 y_1 = 0,7499 \times 0,8 \approx 0,6$.

Dans le deuxième cas, le résultat est bel et bien négatif : numériquement, il serait possible de mettre en évidence un « anti-effet de desserrement ». En réalité, dans l'analyse que nous avons déjà proposée, nous avons suggéré que les grosses billes, au nombre de 16, forment une structure périodique et qu'un début de cristallisation a dû se produire.

6.11.2. Comparaison avec les résultats obtenus expérimentalement sur des billes de verre sphériques.

Nous allons reprendre les résultats extraits de la thèse de Ben Aïm [BENA70], déjà présentés dans le paragraphe 5.1.5.1., et pour lesquels on avait $\alpha_1 = \alpha_2$ (les grosses billes empilées seules présentent la même compacité que les petites billes empilées seules), correspondant à l'une des hypothèses de constitution de notre modèle (théorie ROAD). Nous allons rajouter deux séries de données, extraites de la même thèse, mais pour lesquelles on a $\alpha_1 \neq \alpha_2$. Rappelons que pour passer du facteur d'encombrement lié à l'effet de desserrement de Mooney, λ_{12} , au coefficient d'interaction α_{12} du modèle d'empilement compressible (MEC), nous avons fait appel à l'expression I-63 :

$$\text{I-63} \quad \alpha_{12\text{MEC}} = \alpha_2 \lambda_{12\text{Mooney}}$$

Auteurs	$x = \frac{d_2}{d_1}$	α_2	λ_{12}	α_{12}
Westman et Hugill	0,02	0,575	0,01	0,006
	0,125	0,575	0,05	0,028
	0,159	0,618	0,03	0,019
Tickell, Mechem, Mc Curdy	0,01	0,615	0	0
	0,352	0,611	0,9	0,550
	0,5	0,615	1,18	0,725
	0,71	0,624	1,40	0,875

Tableau VI-33 : valeurs du coefficient d'effet de desserrement α_{12} mesurées sur des sphères. Données extraites de Ben Aïm [BENA70].

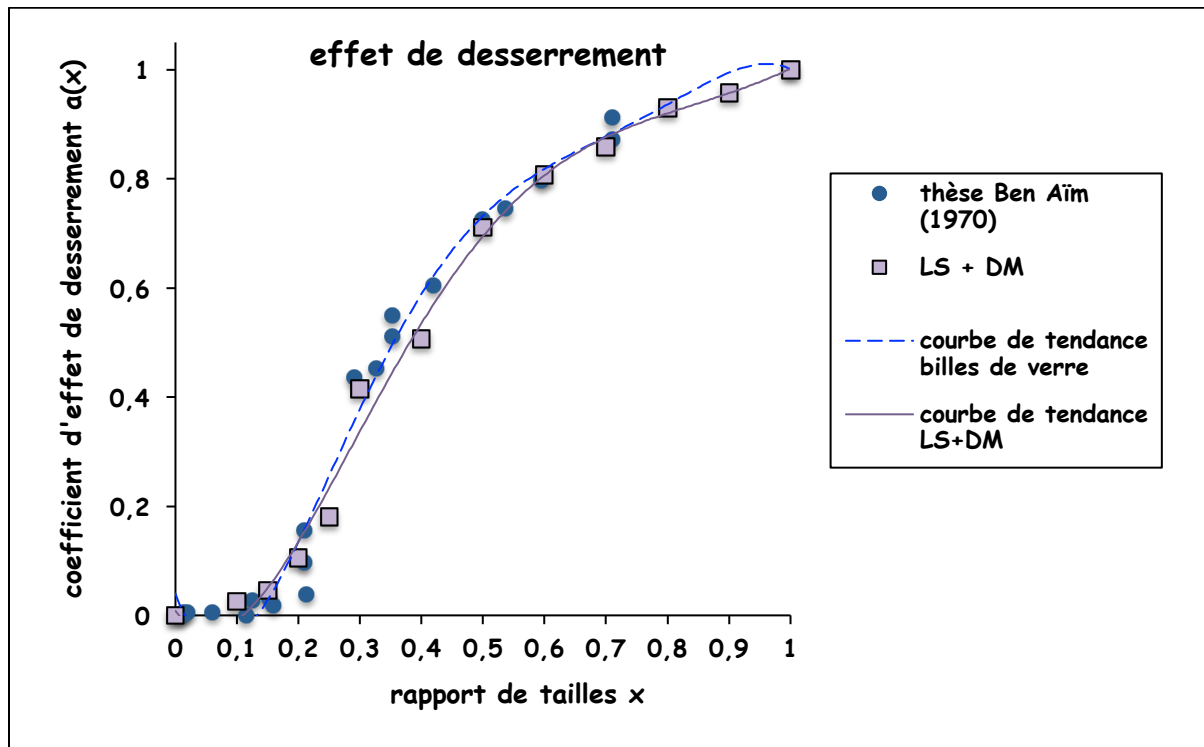


Figure VI-53 : coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique LS + DM. Comparaison avec les résultats issus de la thèse de Ben Aïm [BENA70] et obtenus expérimentalement avec des billes de verre. Courbes de tendance en polynôme du 5^{ème} degré.

Pour l'effet de desserrement, on remarque une très bonne concordance entre les points obtenus par simulation numérique LS + DM et expérimentalement sur des billes de verre.

Concernant ces dernières, l'interaction granulaire est pratiquement nulle pour $x < 0,2$, confirmant l'existence de cavernes tétraédriques. Pour $x \approx 0,2$, on dénombre 3 coefficients s'échelonnant entre 0,039 et 0,156, prouvant que les résultats sont très sensibles à une infime variation de la géométrie des cavernes.

L'adéquation des valeurs obtenues entre l'approche discrète et l'approche expérimentale sur les billes de verre est aussi satisfaisante pour l'effet de desserrement que pour l'effet de paroi.

6.11.3. Comparaison avec les modèles empiriques de de Larrard (1988 et 2000), Lecomte et Zennir (1997), Yu, Zou et Standish (1996).

Ces modèles empiriques ont été présentés dans le paragraphe 2.2.5. Ils ont été retenus pour cette étude comparative d'une part car ils respectent les conditions aux limites $\alpha(0) = 0$ et $\alpha(1) = 1$ et d'autre part car ils font appel à un grand nombre de résultats expérimentaux.

Rappelons les expressions obtenues (par ordre chronologique), leurs auteurs, ainsi que la nature des particules testées :

II-42 $\alpha_{L88}(x) = 1 - (1-x)^{3,1} - 3,1x(1-x)^{2,9}$ en 1988 par de Larrard [DELA88] sur des billes sans frottement;

II-43 $\alpha_{vzs}(x) = 1 - (1-x)^{3,33} - 2,81x(1-x)^{2,77}$ en 1996 par Yu, Zou et Standish [YUZ096] sur des grains de nature inconnue mais probablement des billes;

II-45 $\alpha_{LZ}(x) = x^{0,414}$ en 1997 par Lecomte et Zennir [LEC097] sur des concassés tendres;

II-46 $\alpha_{L00}(x) = \sqrt{1 - (1-x)^{1,02}}$ en 2000 par de Larrard [DELA00] sur des grains roulés et concassés.

La première expression a été obtenue par lissage de 14 points expérimentaux générés sur des sphères, tout en s'appuyant sur les théories de Stovall (modèle « linéaire ») [STOV86] et du modèle de décompaction locale [DELA88].

La deuxième a été établie sur des grains dont nous ne connaissons pas la nature mais dont nous pouvons supposer qu'il s'agit de billes.

La troisième résulte d'une étude entreprise en vue d'utiliser des concassés tendres de Moselle. Elle est basée sur l'analyse de 25 résultats expérimentaux.

La quatrième a été établie à partir de 14 points sur des grains roulés de la Loire et des concassés de Arnay-le-Duc.

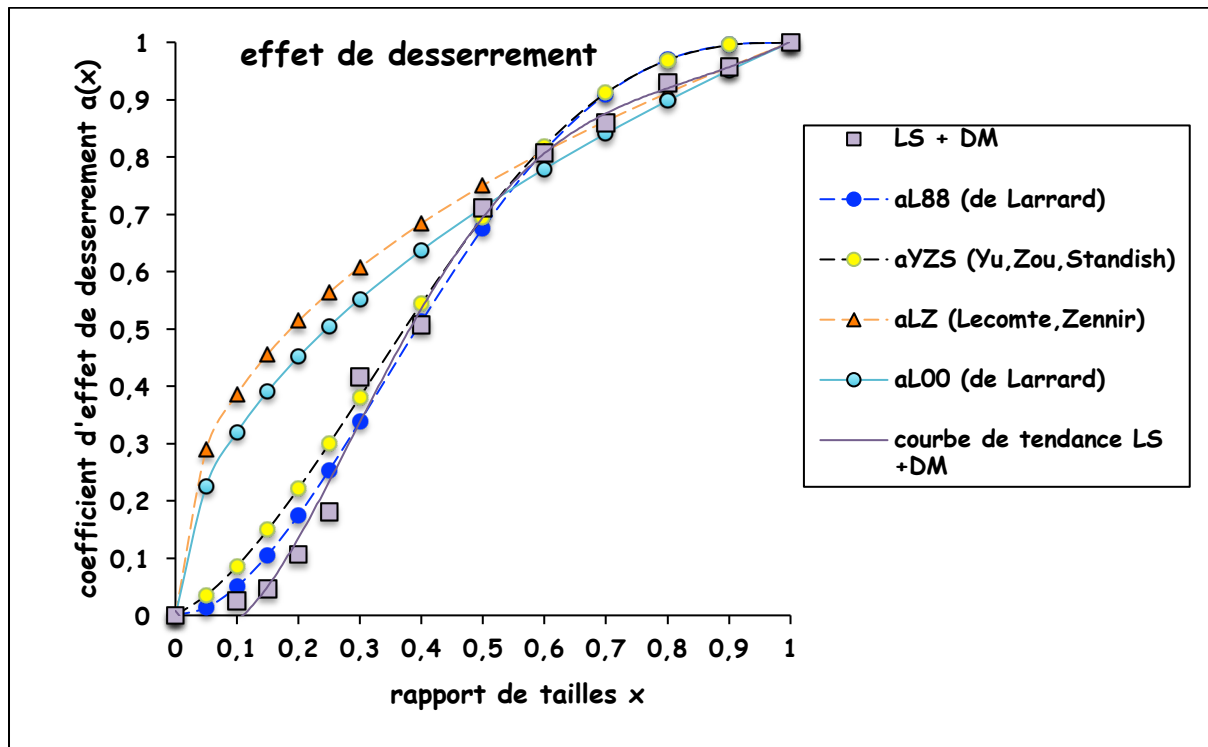


Figure VI-54 : coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique LS + DM (courbe de tendance en polynôme du 5^{ème} degré). Comparaison avec les fonctions a_{L88} de de Larrard (1988), a_{YZS} de Yu, Zou et Standish (1996), a_{LZ} de Lecomte et Zennir (1997) et a_{L00} de de Larrard (2000).

Au vu de la figure précédente, les valeurs des coefficients d'effet de desserrement obtenues par simulation numérique LS + DM pourraient fort bien être approximées par la fonction $a_{L88}(x)$ pour les rapports de tailles $0 \leq x \leq 0,6$ et par la fonction $a_{L00}(x)$ (ou $a_{LZ}(x)$) pour $0,6 \leq x \leq 1$.

Commençons par l'intervalle $0 \leq x \leq 0,6$.

Il convient tout d'abord de rappeler que le modèle empirique $a_{L88}(x)$ a été étalonné à partir de mesures effectuées sur des éléments sphériques sans frottement, alors que $a_{L00}(x)$ et $a_{LZ}(x)$ ont été obtenus par lissage de valeurs expérimentales relevées sur des grains roulés ou concassés présentant plus ou moins de frottement entre eux.

D'un point de vue mathématique, le premier se distingue très nettement des seconds de par leur dérivée en $x = 0$:

$$\left. \frac{\partial a_{L88}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \text{ alors que } \left. \frac{\partial a_{L00}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial a_{LZ}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = \infty .$$

La signification physique correspondante est la suivante.

Commençons par la fonction $\alpha_{L88}(x)$. En 1988, de Larrard [DELA88], influencé par les travaux de Ben-Aïm [BENA70] sur des billes et ceux qu'il a menés avec Stovall et Buil [STOV86], estime qu'il existe bel et bien un rapport de diamètres critique en-deçà duquel un élément fin peut loger dans une cavité de la structure des gros : dans ce cas, la fonction représentative du coefficient d'effet de desserrement présente un palier horizontal d'ordonnée nulle tant que l'insertion est possible. Ensuite, elle subit un accroissement plus ou moins marqué dès que la dimension de l'interstice ne l'autorise plus.

Continuons avec les fonctions $\alpha_{L00}(x)$ et $\alpha_{LZ}(x)$. De Larrard (en 2000 cette fois-ci), d'une part, Lecomte et Zennir, d'autre part, se basent cette fois-ci sur des données expérimentales obtenues sur des granulats roulés ou concassés qui semblent montrer qu'il n'existe pas vraiment de cavités susceptibles d'accueillir les éléments les plus fins : le desserrement se manifesterait dès que le rapport de tailles commence à s'éloigner de manière infime de 0.

Au final, les résultats obtenus par simulation numérique indiquent que l'hypothèse,

$\left. \frac{\partial \alpha_{L88}(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$, adoptée par de Larrard en 1988 dans sa thèse est fondée et judicieuse pour des éléments de forme sphérique ne subissant pas de frottement.

Continuons avec l'intervalle $0,6 \leq x \leq 1$.

L'approche discrète montre cette fois-ci, et paradoxalement, que ce sont les fonctions $\alpha_{L00}(x)$ et $\alpha_{LZ}(x)$ étalonnées sur des grains réels qui rendent le mieux compte des résultats numériquement obtenus pour les faibles contrastes de tailles sur des billes sans frottement.

Globalement, il semble que les valeurs obtenues par LS + DM pourraient être lissées en utilisant une équation de sigmoïde asymétrique avec un point d'inflexion à l'abscisse $x = 0,3$.

6.11.4. Comparaison avec les résultats fournis par la théorie ROAD.

Les valeurs fournies par la théorie ROAD vont être déterminées à partir d'une compacité virtuelle des grosses billes en pleine masse $\beta_1 = 0,71$ correspondant à une compacité réelle $\alpha_1 = \beta_1 \frac{K}{1+K} \approx 0,64$ (lorsque l'indice de serrage calibré par de Larrard [DELA00] vaut $K = 9$), très proche de celle établie par l'approche LS + DM : $\alpha_1 = 0,641$. Le rapport critique de taille de cavité est $x_0 = 0,20$.

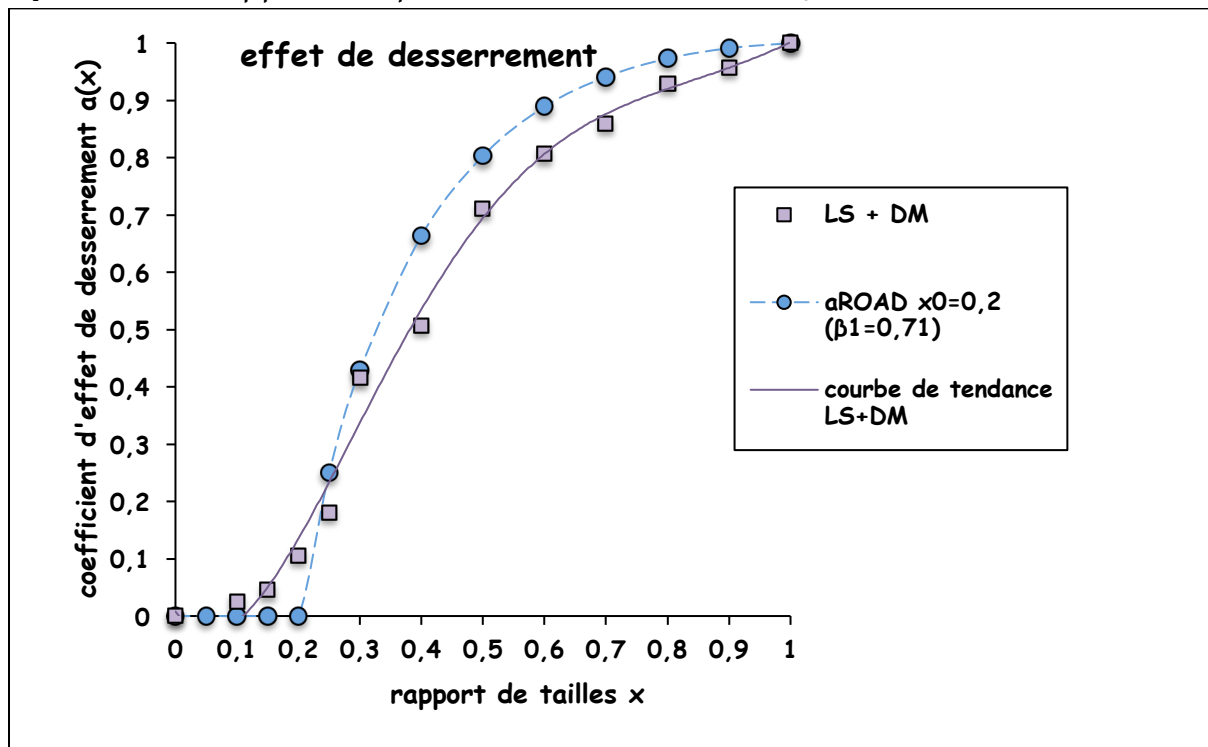


Figure VI-55 : coefficients d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique LS + DM. Comparaison avec la théorie ROAD pour la compacité virtuelle $\beta_1 = 0,71$. Courbe de tendance en polynôme du 5^{ème} degré.

Pour $x \leq 0,3$, on remarque une bonne adéquation entre les résultats LS + DM et la théorie ROAD pour une taille de cavité $x_0 = 0,20$, très proche du rapport de diamètres correspondant à une cavité tétraédrique ($x_0 = 0,224$). En définitive, l'existence d'un diamètre critique permettant à une petite particule de s'introduire ou non dans une matrice constituée d'éléments beaucoup plus gros semble être une hypothèse adaptée à la modélisation de l'effet de desserrement dans le cas de sphères. Si son diamètre est inférieur à cette valeur critique, la petite particule peut s'insérer sans déstructurer l'organisation de l'empilement. Si son diamètre est

supérieur à cette valeur, elle modifie le squelette initialement constitué en dilatant la structure en place.

Pour $x > 0,3$, la théorie ROAD engendre des réactions granulaires légèrement plus fortes que celles obtenues par simulation numérique LS + DM. Au fur et à mesure que x évolue vers 1, on observe d'ailleurs que sa courbe représentative avec $\beta_1 = 0,71$ présente une pente qui diminue pour se rapprocher de zéro. Nous en avons déjà analysé les raisons dans le paragraphe 4.6.

6.11.5. Comparaison des coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement obtenus par simulation numérique.

Nous avons porté sur un même graphe les coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement obtenus par la simulation LS + DM.

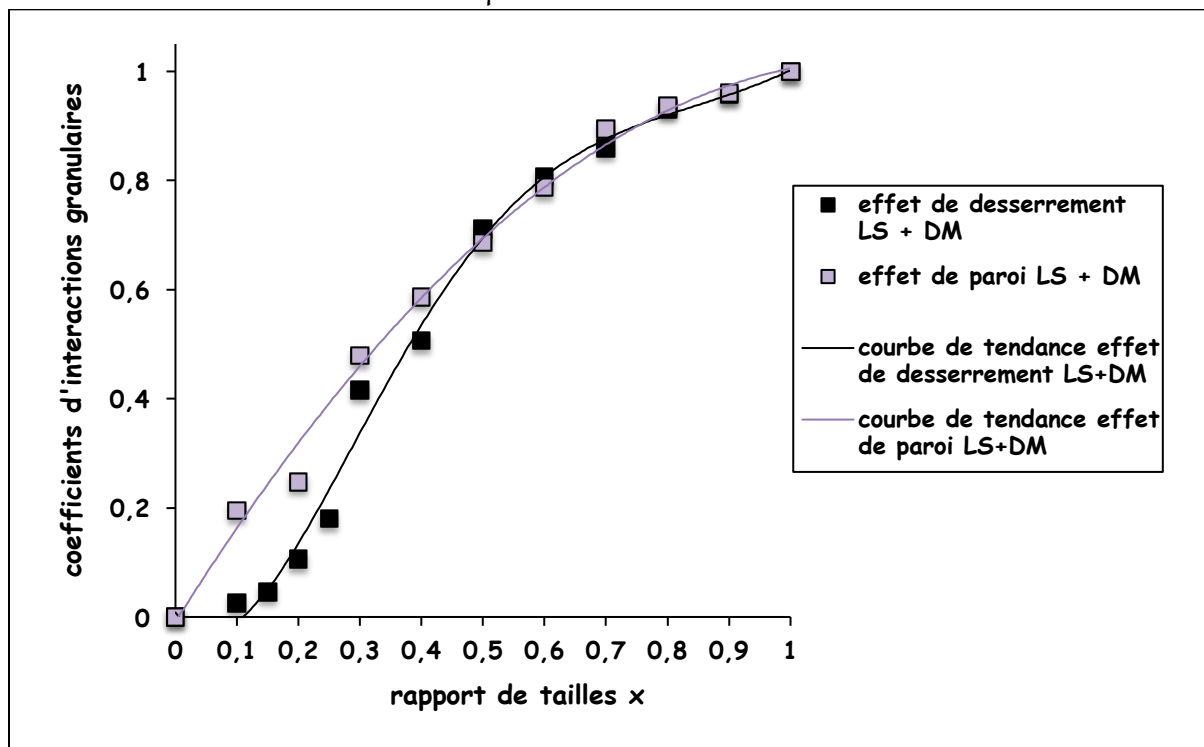


Figure VI-56 : coefficients d'effet de paroi (courbe de tendance en polynôme de degré 2) et d'effet de desserrement (courbe de tendance en polynôme de degré 5) obtenus par simulation numérique LS + DM.

Les coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement obtenus par simulation sont-ils équivalents pour des billes ?

Au vu des résultats présentés sur la figure ci-dessus, on pourrait répondre par la négative pour les forts contrastes de tailles ($0 \leq x \leq 0,4$) et de façon positive pour les plus faibles ($0,5 \leq x \leq 1$).

Pour $0 \leq x \leq 0,4$, il apparaît que l'existence de cavernes contribue à une diminution sensible des coefficients d'effet de desserrement dans cette zone. Au contraire, l'effet de paroi subsiste même s'il existe une possibilité pour que les grosses particules tiennent le rôle de vibrateurs internes, pouvant conduire expérimentalement à un anti-effet de paroi. Cependant, la nature des phénomènes est bien distincte : géométrique d'une part, dynamique d'autre part.

Pour $0,5 \leq x \leq 1$, les résultats obtenus sont très similaires. Ils confortent les différentes étapes communes adoptées pour aboutir à la théorie ROAD dans le but de modéliser les deux types d'interaction granulaire :

- celle consistant à faire appel à une cellule de référence sphérique, autour d'une particule isolée appartenant à la classe dominée, afin de déterminer la compacité des particules de la classe dominante affectées par l'effet de paroi ou l'effet de desserrement.
- celle permettant de calculer le nombre de billes de même diamètre positionnées contre une bille centrale plus ou moins grosse grâce au modèle des carrés sphériques.
- celle consistant à effectuer un raisonnement à l'eutectique permettant de faire intervenir le coefficient d'effet de paroi dans l'expression du coefficient d'effet de desserrement (expression IV-23 obtenue dans le cas où $\beta_1 = \beta_2 = \beta$), β'_1 représentant la compacité des grosses particules dans la zone subissant l'effet d'interférence :

$$a_{\text{ROAD}}(x, x_0) = \frac{1}{1 + (1 - b_{\text{ROAD}}(x)) \left(1 - \beta\right) \frac{\beta}{1 - \frac{\beta'_1(x, x_0)}{\beta}}}$$

CHAPITRE 7

ÉVALUATION DU MODÈLE D'EMPILEMENT
COMPRESSIBLE 4-PARAMÈTRES INCLUANT
LES THÉORIES
DE L'EFFET DE PAROI ET
DE L'EFFET DE DESSERREMENT.

Les modèles d'empilement sont utilisés dans de nombreux secteurs industriels tels que la céramique, la fabrication des poudres métalliques par frittage, les activités liées aux suspensions qui nécessitent l'estimation de leur viscosité, les pavages, l'exploitation du charbon. Ils sont nécessaires aux géologues qui, pour déterminer la perméabilité des sols, ont besoin de connaître leur porosité et, plus généralement, à de nombreuses activités rattachées aux milieux granulaires. Enfin, ils ont connu une nette évolution dans les années 1980 lorsque l'industrie du béton s'est résolue à compléter les méthodes de composition basées sur des démarches expérimentales par des concepts plus scientifiques avec l'arrivée de nouveaux constituants tels que la fumée de silice. L'essor de la simulation numérique a, dans un premier temps, ralenti leur exploitation, avant de constituer un outil intéressant permettant d'affiner leurs prédictions grâce à une meilleure compréhension des phénomènes mis en jeu. Récemment, trois articles sont venus compléter l'abondante littérature qui leur a été consacrée : [KWAN13], [CHAN14], [KWAN15].

C'est pourquoi nous avons estimé nécessaire de compléter ce travail par une évaluation des prédictions du modèle d'empilement compressible incluant les théories sur l'effet de paroi et l'effet de desserrement. Il sera maintenant dénommé :

MODÈLE D'EMPILEMENT COMPRESSIBLE (MEC) 4-PARAMÈTRES :

Indice de serrage K

Coefficient d'effet de paroi b : théorie ROAD

Coefficient d'effet de desserrement a : théorie ROAD

Rapport de tailles de caverne critique x_0

Un travail comparable a déjà été entrepris par [JONE02] et [CHAN14]. La nouveauté réside ici dans l'exploitation des deux nouveaux coefficients d'interaction associés à un rapport de tailles de caverne critique.

Cette appréciation s'effectuera sur quatre catégories de résultats concernant :

- des particules sphériques lisses à partir de données expérimentales obtenues sur des billes de verre trouvées dans la littérature ;
- des particules sphériques lisses à partir des valeurs que nous avons collectées lors de nos simulations numériques ;
- des grains de sable roulés d'après les expériences de de Larrard, Sedran, Angot (1994) et de Joisel (1952) ;
- des concassés issus de quatre carrières différentes.

Ce sont environ 300 valeurs pour les particules sphériques, 20 pour la simulation numérique, 125 pour les grains roulés et 335 pour les grains concassés, représentant un total de 780 données, qui vont permettre cette évaluation.

Rappelons maintenant les grandes étapes de notre modélisation de l'effet de paroi et de l'effet de desserrement, intitulée « ROund ADjustable cell » (ROAD).

Commençons par le domaine des fins dominants.

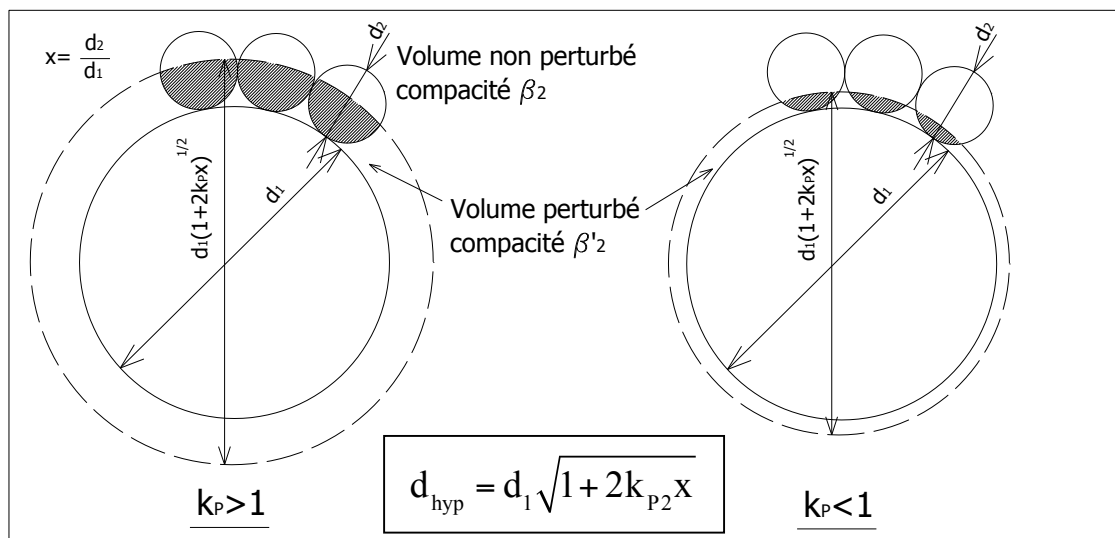


Figure III-4 : rappel des notations utilisées pour l'effet de paroi. Diamètre de la cellule de référence : d_{hyp} .

Le rapport des diamètres est : $x = \frac{d_2}{d_1}$.

On part de la compacité réelle d'un mélange monodispersé constitué uniquement d'éléments fins : α_2 .

On en déduit la compacité virtuelle de ce même mélange qui se définit comme la compacité que l'on pourrait atteindre si l'on positionnait chaque grain à son emplacement idéal comme le ferait un maçon pour construire un mur en pierres sèches. Pour cela, on fait intervenir l'indice de serrage K :

$$VI-39 \quad \beta_2 = \alpha_2 \frac{(1 + K)}{K}$$

On détermine ensuite le diamètre $d_{hyp} = d_1 \sqrt{1 + 2k_{p2} x}$ de la sphère délimitant la zone perturbée par l'effet de paroi autour d'une grosse sphère noyée dans un océan de petites. Pour cela, on écrit que la condition $b(1) = 1$ doit être respectée ce qui conduit à la résolution numérique, à l'aide d'un tableur, ou analytique de l'équation suivante, dont l'inconnue est k_{p2} :

$$\text{III-26} \quad (\beta_2 - 6) \left(1 + 2k_{p2}\right)^{\frac{3}{2}} + \frac{9}{2} k_{p2}^2 + 18k_{p2} + 5 = 0$$

La méthode de calcul de k_{p2} est valable pour :

$$\beta_2 \in \left[6 - \frac{9}{8} \sqrt{\frac{1}{23} \left(\frac{128}{9\sqrt{3}} - 40 \right)} + 24 \approx 0,65 ; 6 - \frac{9}{8} \sqrt{\frac{1}{23} \left(-\frac{128}{9\sqrt{3}} - 40 \right)} + 24 \approx 0,734 \right].$$

Pour cette résolution et seulement pour celle-ci, lorsque $\beta_2 < 0,65$ ou $\beta_2 > 0,734$, on adopte respectivement : $\beta_2 = 0,65$ et $\beta_2 = 0,734$. L'équation à résoudre étant du 3^{ème} degré, on conserve la valeur de k_{p2} cohérente avec celles figurant dans le tableau suivant :

β	0,65	0,66	0,67	0,68	0,69	0,70	0,71	0,72	0,73	0,734
k_p	0,4466	0,5854	0,6729	0,7543	0,8369	0,9253	1,0252	1,1476	1,3284	1,4729

Tableau III-7 : valeurs de k_p en fonction de β .

On calcule ensuite la compacité des petites billes dans le volume perturbé par l'effet de paroi autour d'une grosse particule, à partir d'un nombre de coordination déterminé dans le cadre des empilements virtuels à l'aide de la théorie que nous avons baptisée « modèle des carrés sphériques » :

III-20

$$\beta'_2(x) = \frac{\pi(1+x)}{4x \left((1+2k_{p2}x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \arcsin\left(\frac{x}{1+x}\right)} \times \left(2(1+2k_{p2}x)^{\frac{3}{2}} - 3(1+2k_{p2}x) \left(1 + \frac{k_{p2}x}{1+x} \right) + \left(1 + \frac{k_{p2}x}{1+x} \right)^3 - x^3 + \frac{3k_{p2}x^3}{1+x} + x^3 \left(1 - \frac{k_{p2}}{1+x} \right)^3 \right)$$

On en déduit le coefficient d'effet de paroi b :

$$\text{III-25} \quad b_{21}(x) = \frac{\beta_2 - \beta'_2(x)}{1 - \beta_2} \left[(1 + 2k_{p2}x)^{\frac{3}{2}} - 1 \right]$$

Continuons par le domaine des gros dominants :

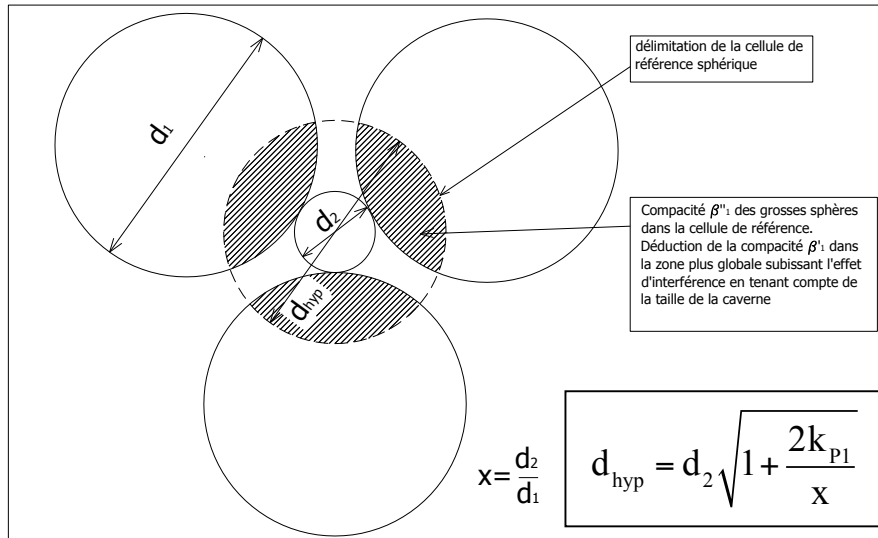


Figure IV-1 : rappel des notations utilisées pour l'effet de desserrement. Diamètre de la cellule de référence : d_{hyp} .

Cette fois-ci, on part de la compacité réelle d'un mélange monodispersé constitué uniquement de gros éléments: α_1 .

On en déduit la compacité virtuelle correspondante :

$$\text{VI-39} \quad \beta_1 = \alpha_1 \frac{(1+K)}{K}$$

On détermine ensuite le diamètre $d_{hyp} = d_2 \sqrt{1 + \frac{2k_{p1}}{x}}$ de la sphère délimitant la zone perturbée par l'effet de desserrement autour d'une petite sphère noyée dans un océan de grosses. Pour cela, on écrit que la condition $a(1) = 1$ doit être respectée ce qui conduit à la résolution de l'équation suivante, dont l'inconnue est k_{p1} :

$$\text{III-26} \quad (\beta_1 - 6) \left(1 + 2k_{p1}\right)^{\frac{3}{2}} + \frac{9}{2} k_{p1}^2 + 18k_{p1} + 5 = 0$$

Comme pour k_{p2} , la méthode de calcul de k_{p1} est valable pour $\beta_1 \in [0,65 ; 0,734]$. Si ce n'est pas le cas, on adopte pour β_1 la valeur de la borne inférieure $\beta_1 = 0,65$ ou supérieure $\beta_1 = 0,734$ de l'intervalle pour résoudre cette équation, et uniquement dans cette optique. Celle-ci étant toujours du 3^{ème} degré, on conserve la valeur de k_{p1} cohérente avec celles figurant dans le tableau III-7.

On calcule ensuite la compacité des grosses billes dans la cellule de référence concernée par l'effet de desserrement. On fait, là aussi, appel à un nombre de coordination déterminé dans le cadre des empilements virtuels à l'aide du « modèle des carrés sphériques » :

IV-14

$$\beta''_1(x) = \frac{\pi(1+x)}{4\left(1 + \frac{2k_{p1}}{x}\right)^{\frac{3}{2}} \arcsin\left(\frac{1}{1+x}\right)} \times \left(2\left(1 + \frac{2k_{p1}}{x}\right)^{\frac{3}{2}} - 3\left(1 + \frac{2k_{p1}}{x}\right)\left(1 + \frac{k_{p1}}{1+x}\right) + \left(1 + \frac{k_{p1}}{1+x}\right)^3 - \frac{1}{x^3} + \frac{3k_{p1}}{x^2(1+x)} + \left(\frac{1}{x} - \frac{k_{p1}}{1+x}\right)^3\right)$$

On en déduit la compacité dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence. Pour cela, on suppose que, lors de l'introduction de petites particules insuffisamment fines pour se glisser dans la structure des grosses, cette dernière se décompacte autour de chaque élément fin. Le calcul du volume partiel des gros grains $\beta'_1(x)$ s'effectue moyennant une hypothèse de dilatation isotrope. Celle-ci tient compte du fait que la dilatation moyenne dans la zone perturbée par l'effet d'interférence est moindre que celle de la cellule de référence sphérique contenant une petite bille. On obtient alors :

$$\beta'_1(x) = \frac{\beta''_1(x)}{\beta''_1(x_0) \left(1 + \frac{(x-x_0)}{(1-x_0)} \left(\sqrt[3]{\frac{2\beta''_1(1)}{\beta''_1(x_0)} - 1}\right)\right)^3} \beta_1$$

$\beta''_1(x_0)$ et $\beta''_1(1)$ s'obtiennent en considérant respectivement $x = x_0$ et $x = 1$ dans l'expression IV-14.

Lorsque $x = x_0$, on aboutit à $\beta'_1(x_0) = \beta_1$: aucun desserrement ne se produit car une fine particule peut se glisser dans la caverne.

Lorsque $x = 1$, $\beta'_1(1) = \frac{\beta_1}{2}$ car le titre volumique optimal pour les mélanges binaires doit tendre vers 0,5, par symétrie, quand $x \rightarrow 1$.

On effectue ensuite un raisonnement à « l'eutectique », pour lequel le titre volumique des petites particules s'écrit :

$$\Phi_2^*(x) = \beta_2 + \left((1-\beta_2)(1-b_{21}(x)) - 1\right) \beta'_1(x)$$

Le coefficient d'effet de desserrement α s'en déduit :

$$\text{IV-22} \quad \alpha_{12}(\mathbf{x}) = \frac{\beta_1 - \beta'_1(\mathbf{x})}{\phi_2^*(\mathbf{x})} \quad \text{pour } \mathbf{x} \geq \mathbf{x}_0$$

$$\alpha_{12}(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{pour } \mathbf{x} < \mathbf{x}_0$$

Dans le cas des fins dominants, la compacité virtuelle du mélange s'écrit :

$$\text{I-66} \quad \gamma_2 = \frac{\beta_2}{1 - \left(1 - \beta_2 + b_{21}\beta_2 \left(1 - \frac{1}{\beta_1}\right)\right) \gamma_1}$$

Dans le cas des gros dominants, elle devient :

$$\text{I-65} \quad \gamma_1 = \frac{\beta_1}{1 - \left(1 - \frac{\beta_1}{\beta_2} \alpha_{12}\right) \gamma_2}$$

Enfin, on aboutit à la compacité réelle en faisant à nouveau appel à l'indice de serrage K :

$$\text{VI-38} \quad K = \frac{\frac{\gamma_1}{\beta_1}}{\frac{1}{\phi^*} - \frac{1}{\gamma_1}} + \frac{\frac{\gamma_2}{\beta_2}}{\frac{1}{\phi^*} - \frac{1}{\gamma_2}}$$

La compacité réelle ϕ^* est déduite implicitement de cette relation dans laquelle γ_1 et γ_2 représentent respectivement les titres volumiques des grosses et des fines particules.

L'indice de serrage K est un scalaire représentatif du processus de construction de l'empilement. Il s'agit d'une fonction strictement croissante de ϕ^* .

Il reste maintenant, pour étalonner le modèle, à :

- fixer l'indice de serrage K en fonction du processus adopté pour remplir le moule, le coffrage ou la boîte de simulation ;
- choisir une distribution judicieuse des rapports de tailles de caverne critiques \mathbf{x}_0 en fonction du type de granulat, de sa forme et de son état de surface.

L'analyse des 780 valeurs qui vont suivre nous a conduit à adopter les valeurs suivantes :

Procédé de remplissage et de serrage	Déversement (Kwan <i>et al.</i>)	Vibration ou Compactage (Joisel, Kwan <i>et al.</i>)	Vibro-compactage (de Larrard, Sedran, Angot)	Simulation numérique LS + DM (Roux, Roquier)	Remplissage optimisé + vibration + pression (Ben Aim, Mc Geary, etc)	virtuel
K	4,7	5,6	9	9	15	∞

Tableau VII-1 : valeurs de l'indice de serrage K destinées au MEC 4-paramètres pour différents procédés de remplissage.

Type de granulats	Concassés			Roulés arrondis (Loire)	Billes sphériques lisses
	Anguleux très rugueux	Anguleux rugueux	Anguleux		
x_0	$x_0 = 0$	$x_0 = 0,02$	$x_0 = 0,1$	$x_0 = \frac{2x}{5}$	$x_0 = 0,2$

Tableau VII-2 : rapports de tailles de cavernes critiques x_0 en fonction du type de granulat, de sa forme et de son état de surface.

Au cours de cette analyse, nous allons procéder à la comparaison des valeurs expérimentales ou issues de la simulation numérique avec 3 modèles :

- le modèle d'empilement compressible original dans lequel interviennent les coefficients d'effet de paroi b , d'effet de desserrement a et l'indice de serrage K : MEC original ;
- le modèle d'empilement compressible à 4 paramètres, présenté dans cette thèse, qui sont b , a , le rapport de tailles de caverne critique x_0 et K : MEC 4-paramètres. b et a sont obtenus par la théorie ROAD, le coefficient a intégrant à la fois un desserrement local et une interférence plus globale.
- un modèle à 3 paramètres présenté en 2013 par Kwan A.K.H., Chan K.W. et Wong V. ([KWAN13], [CHAN14]) et complété en 2015 par Kwan A.K.H., Wong V. et Fung W.W.S. [KWAN15]. En plus de b et a , ces auteurs ont incorporé une interaction granulaire supplémentaire par l'intermédiaire d'un coefficient c : le « wedging effect » que l'on pourrait traduire par « effet de coincement ». Ce modèle est appelé modèle 3-paramètres.

Le modèle 3-paramètres n'ayant pas fait l'objet d'une présentation au début de cette thèse en raison de sa parution récente, nous allons l'effectuer maintenant.

Kwan, Chan, Wong considèrent que les prévisions trop optimistes du modèle linéaire de compacité au voisinage de l'optimum d'un mélange binaire sont moins liées à un manque d'efficacité du procédé de remplissage du récipient contenant les particules qu'à un défaut de structuration inhérent à la composition du mélange lui-même et notamment au rapport des diamètres. C'est pourquoi ils font intervenir un effet de coincement aussi bien du côté des « gros dominants » que du côté des « fins dominants ».

Du côté des « gros dominants », ils émettent l'hypothèse que l'effet de coincement se produit lorsque quelques fines particules isolées perturbent l'empilement des grosses en venant se coincer dans les espaces disponibles entre ces dernières où elles restent emprisonnées. Elles sont alors dans l'impossibilité de venir se glisser dans les cavernes disponibles.

Du côté des « fins dominants », ils considèrent que l'effet de coincement survient lorsque quelques grosses particules sont trop proches les unes des autres, empêchant ainsi leur enveloppement complet par des couches de fines. Des vides supplémentaires se créent alors dans ces espaces restés inoccupés.

Le modèle 3-paramètres est décliné en deux versions :

- une version originale destinée aux mélanges binaires de particules sphériques [KWAN13] ;
- une version étendue aux mélanges binaires de particules anguleuses [KWAN15].

Dans la version originale dédiée aux particules sphériques, Kwan, Chan, Wong [KWAN13] suggèrent que l'effet de coincement peut être pris en compte comme étant

proportionnel à $\left(\frac{y_1}{y_1^*}\right)^2$ lorsque les fines particules sont dominantes et à $\left(\frac{y_2}{y_2^*}\right)^2$ dans le

cas contraire, y_1^* et y_2^* représentant respectivement les titres volumiques des grosses et fines particules à l'optimum.

Les expressions obtenues respectivement du côté des grosses particules dominantes et du côté des particules fines dominantes sont les suivantes :

VII-1

$$c_1 = \frac{1}{\frac{Y_1}{\alpha_1} + \frac{Y_2}{\alpha_2} - (1 - \alpha_{12}) \frac{Y_2}{\alpha_2} \left[1 - c \left(\frac{Y_2}{Y_2^*} \right)^2 \right]}$$

VII-2

$$c_2 = \frac{1}{\frac{Y_1}{\alpha_1} + \frac{Y_2}{\alpha_2} - (1 - b_{21})(1 - \alpha_1) \frac{Y_1}{\alpha_1} \left[1 - c \left(\frac{Y_1}{Y_1^*} \right)^2 \right]}$$

Les coefficients d'interaction pris en compte sont obtenus de la façon suivante :

VII-3

$$a_{12}(x) = 1 - (1 - x)^{3,3} - 2,6 x (1 - x)^{3,6}$$

VII-4

$$b_{21}(x) = 1 - (1 - x)^{1,9} - 2 x (1 - x)^6$$

VII-5

$$c(x) = 0,322 \tanh(11,9 x)$$

Dans la version étendue dédiée aux particules anguleuses, Kwan, Wong, Fung [KWAN15] proposent les expressions suivantes :

VII-6

$$c_1 = \frac{1}{\frac{Y_1}{\alpha_1} + \frac{Y_2}{\alpha_2} - (1 - \alpha_{12}) \frac{Y_2}{\alpha_2} \left[1 - c (3,8^{Y_2} - 1) \right]}$$

VII-7

$$c_2 = \frac{1}{\frac{Y_1}{\alpha_1} + \frac{Y_2}{\alpha_2} - (1 - b_{21})(1 - \alpha_1) \frac{Y_1}{\alpha_1} \left[1 - c (2,6^{Y_1} - 1) \right]}$$

Ensuite, les coefficients d'interaction sont adaptés aux conditions de mise en œuvre. Lorsqu'il s'agit d'un compactage, les auteurs préconisent :

VII-8

$$a_{12}(x) = 1 - (1 - x)^{7,1} - 1,9 x (1 - x)^{3,1}$$

VII-9

$$b_{21}(x) = 1 - (1 - x)^{2,2} - 0,7 x (1 - x)^{9,3} - 0,2 (1 - x)^{10,6}$$

VII-10

$$c(x) = 0,335 \tanh(26,9 x)$$

Le modèle 3-paramètres a fait preuve d'une bonne efficacité sur les mélanges testés par leurs auteurs. Ces derniers tiennent compte de la forme des particules grâce à des coefficients d'interaction différents pour les éléments sphériques et les concassés et prennent en considération le mode de mise en place du mélange uniquement pour le dernier type de granulat cité en distinguant deux cas : « compacté » et « non compacté ». En revanche, ils ne font pas intervenir l'état de surface des particules.

7.1. VALIDATION AVEC DES DONNÉES CONCERNANT DES BILLES DE VERRE.

Nous allons utiliser deux sources de données différentes :

- celles figurant dans la thèse de Ben Aïm [BENA70] qui regroupent ses propres résultats et ceux d'un grand nombre d'autres chercheurs : Mc Geary ; Westman et Hugill ; Tickell, Mechem et Mc Curdy ; Naar, Wygal et Henderson ; Yerazunis, Cornell et Wintner ;
- celles de Kwan, Chan et Wong [KWAN13].

Concernant la première source, Ben Aïm [BENA70] précise, dans sa thèse, toutes les précautions prises par les différents expérimentateurs, aussi bien au moment de la préparation du mélange, que du versement dans le récipient permettant la prise de mesure, ou du procédé de serrage utilisé.

Une des difficultés majeures avec les billes de verre consiste en effet à réaliser un mélange homogène et isotrope et à empêcher l'apparition d'une ségrégation.

Westman et Hugill se sont évertués à mettre au point un appareil dans cette optique. Le cylindre contenant le mélange surmonté d'un piston s'élève lentement et retombe brutalement à raison de 25 fois par minute. L'opération dure de trente minutes à trois heures selon le mélange. Lorsque le rapport des diamètres est très faible, les petits grains sont placés au-dessus des gros au début du processus.

D'autres auteurs réalisent tout d'abord le mélange à la main dans un réservoir fermé par une vanne papillon. Entre ce dernier et la colonne de mesure est intercalée une « chambre de mélangeage ». Il s'agit d'un réseau de balles élastiques conçu pour que les billes s'entrechoquent avant de s'écouler dans la colonne, ni trop lentement, ni trop rapidement.

Naar et ses collaborateurs font appel à un appareil similaire au précédent en apportant quelques modifications. La chambre de mélangeage, notamment, est constituée par une série de 5 tamis espacés de 5 cm environ, dont la maille dépend de la taille des particules.

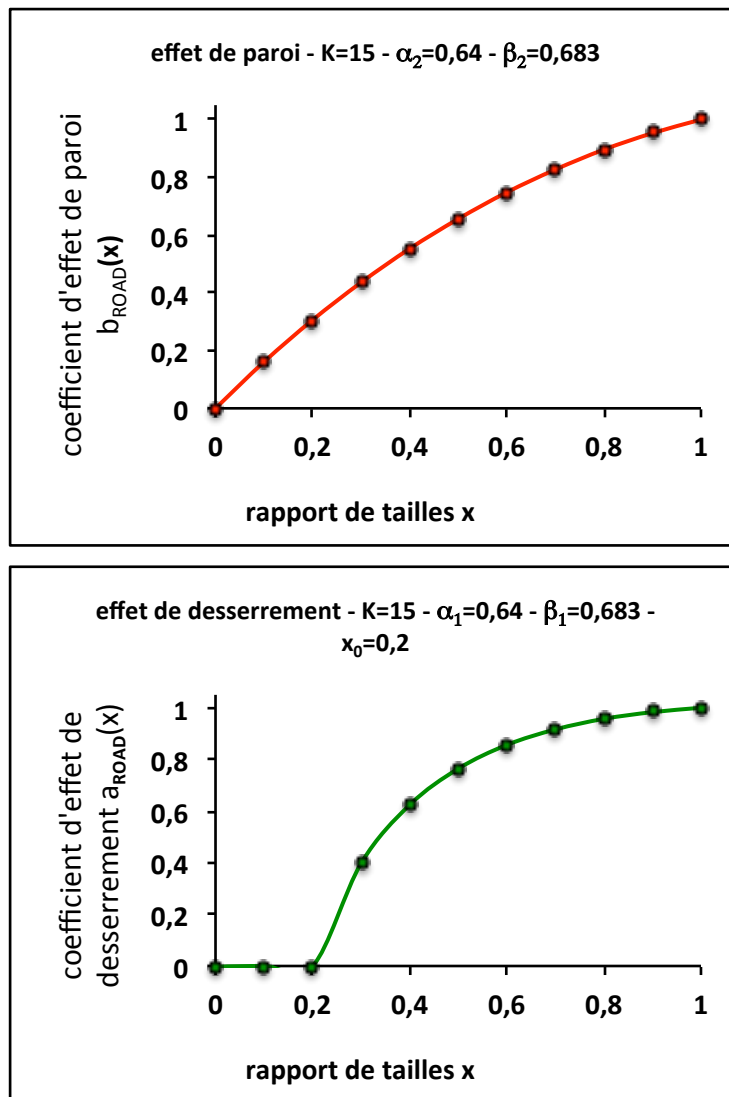
Pour Ben Aïm enfin, elle est composée par un « quinconce à 3 dimensions » de grosses billes surmonté de deux alimentateurs vibrants assurant un débit régulier de chacune des fractions constituant le mélange.

Pour ces différents chercheurs, chaque étape d'élaboration du mélange est parfaitement optimisée, que ce soit au moment de sa préparation, du remplissage du moule ou des procédés de serrage et de compaction utilisés.

C'est pourquoi nous avons opté pour une valeur de K supérieure à celle représentative du procédé de remplissage : « vibration + pression ». Après calibrage, nous avons retenu : $K = 15$.

Nous avons, par ailleurs, sélectionné comme taille de caverne $x_0 = 0,2$ qui correspond approximativement à la taille d'une caverne tétraédrique ($x_0 = 0,224$).

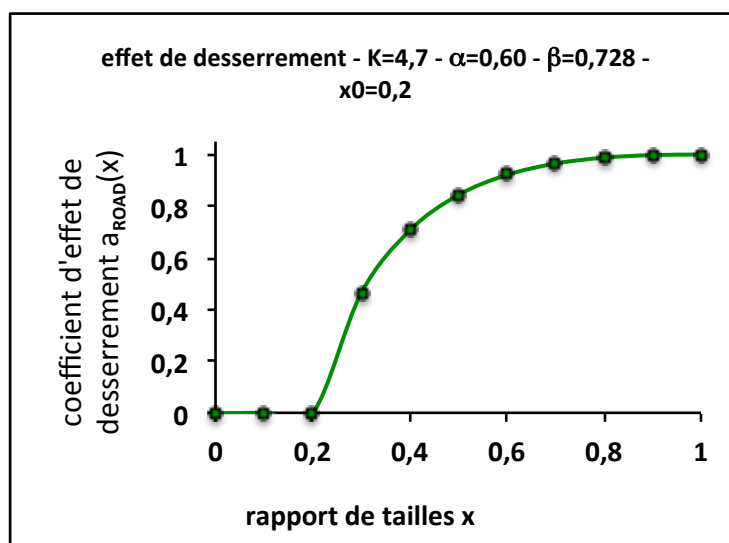
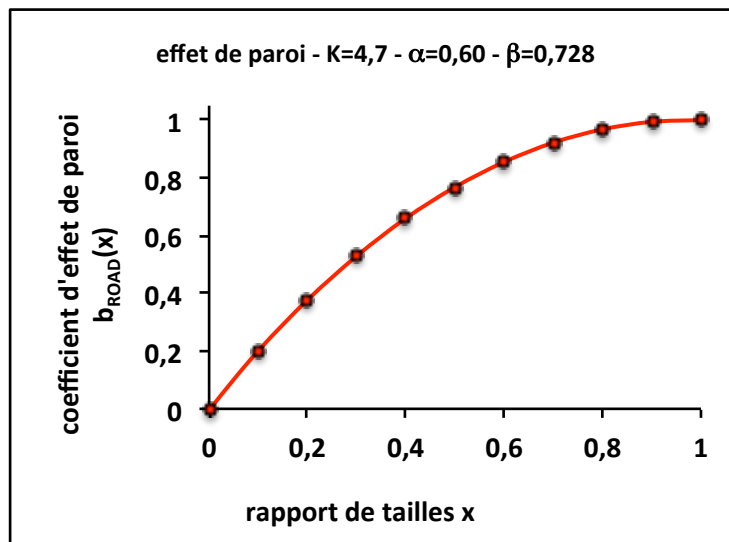
Pour une compacité propre réelle $\alpha = 0,64$ (par exemple), voici les courbes représentatives du coefficient d'effet de paroi et du coefficient d'effet de desserrement obtenues :



Figures VII-1 : exemples de coefficients d'effet de paroi et de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des données de Ben Aïm, Mc Geary, Westman et Hugill, etc (compacité propre réelle $\alpha=0,64$, indice de serrage $K=15$ et rapport de tailles de caverne $x_0=0,2$).

Concernant la deuxième source en revanche, Kwan, Chan et Wong [KWAN13] font appel à la norme British Standard BS 812 : Part 2 :1995 sans compaction appliquée. Après mélangeage manuel, les billes de verre sont placées dans un conteneur à l'aide d'une main écope pour éviter la ségrégation. Durant cette opération, elles sont déposées en couches, chacune d'entre elles étant nivelée. La valeur de K retenue correspond à un simple déversement. Nous l'avons calibrée à : $K = 4,7$.

Toujours pour une taille de caverne $x_0 = 0,2$ mais pour une compacité propre réelle $\alpha = 0,60$ (par exemple) plus faible que précédemment étant donné le mode opératoire retenu pour la réalisation du mélange, voici les courbes représentatives du coefficient d'effet de paroi et du coefficient d'effet de desserrement obtenues :

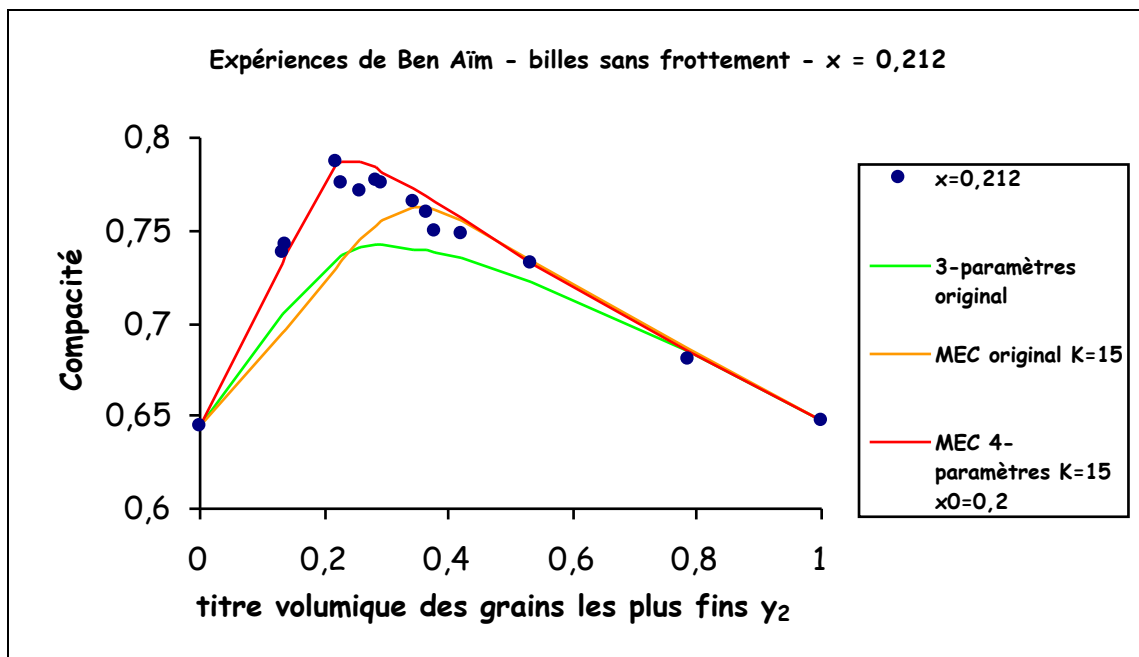
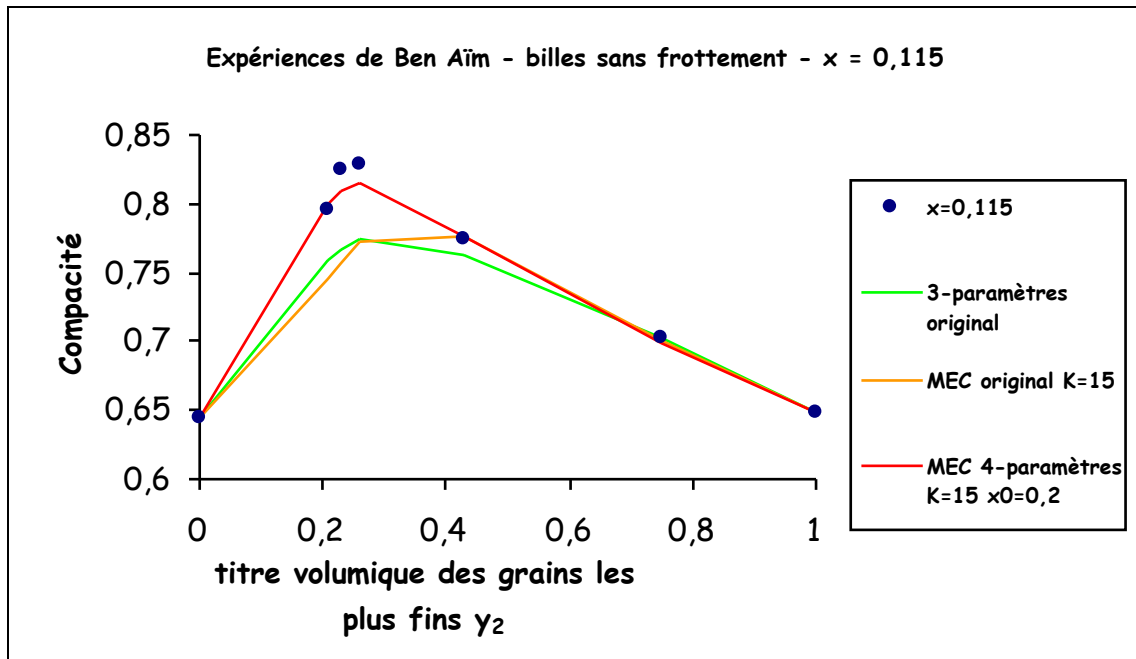


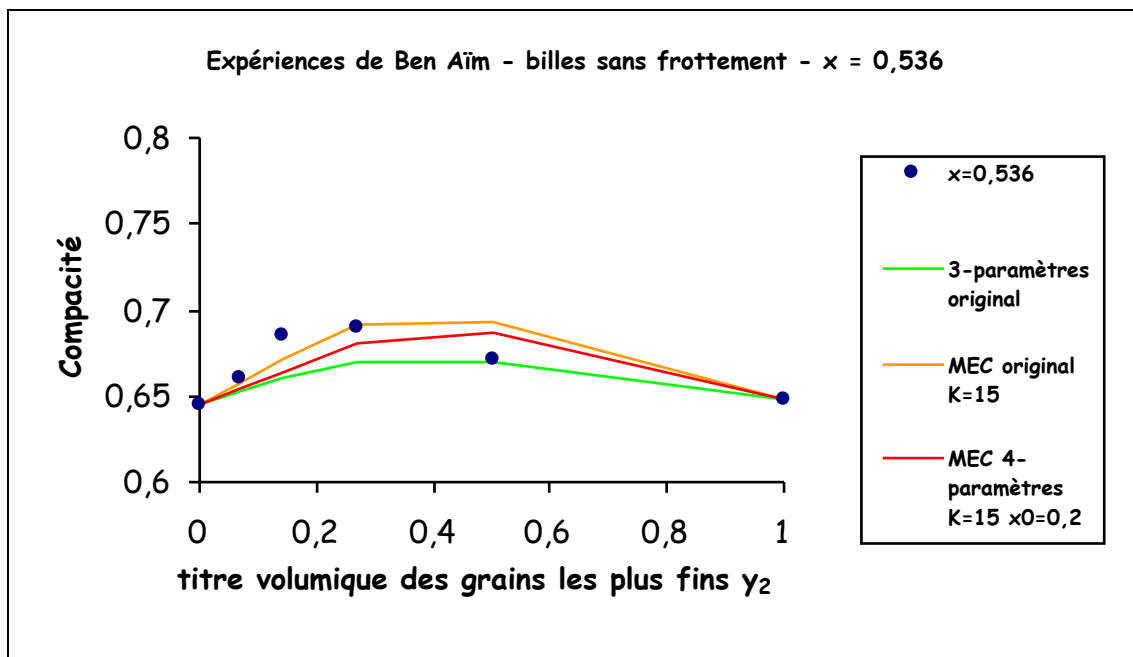
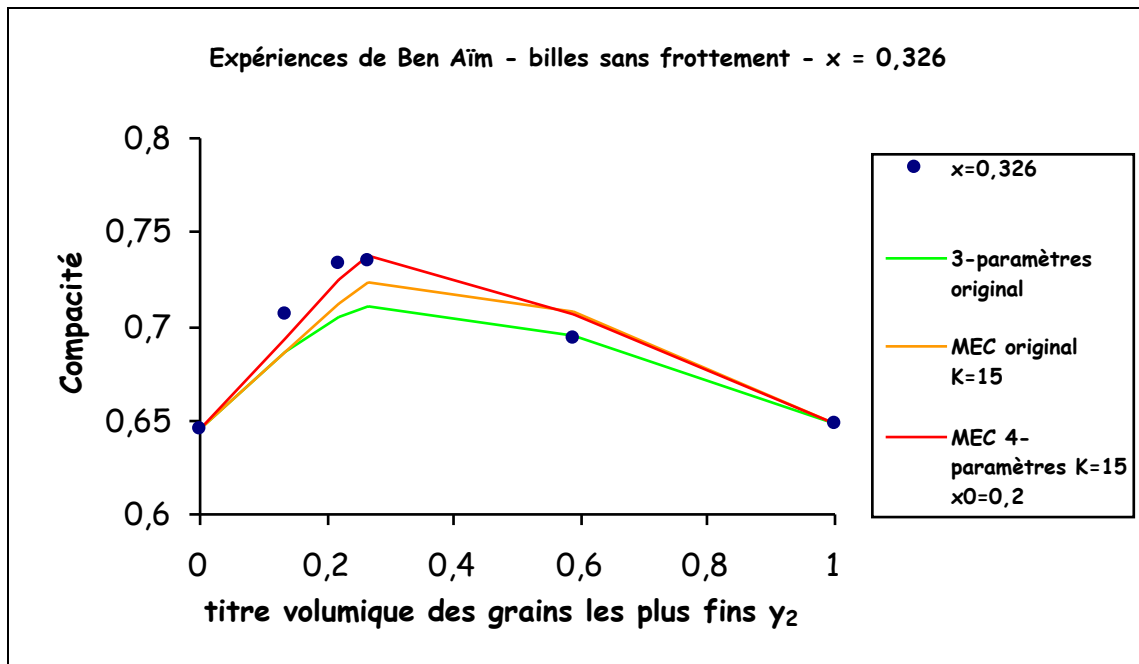
Figures VII-2 : exemples de coefficients d'effet de paroi et de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des données de Kwan, Chan, Wong (compacité propre réelle $\alpha = 0,60$, indice de serrage $K=4,7$ et rapport de tailles de caverne $x_0=0,2$).

Le modèle 3-paramètres retenu pour cette évaluation est l'original [KWAN13] car il s'agit de particules sphériques pour lesquelles il a été spécialement conçu.

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original K = 15 a_{L00} b_{L00}	4-paramètres $x_0 = 0,2$ K = 15 a_{ROAD} b_{ROAD}
0,115	0,206	0,645	0,648	0,795	0,758	0,745	<u>0,799</u>
	0,228			0,824	0,766	0,757	<u>0,810</u>
	0,260			0,829	0,774	0,772	<u>0,815</u>
	0,430			0,775	0,762	<u>0,776</u>	<u>0,776</u>
	0,751			0,702	<u>0,702</u>	0,700	0,699
0,212	0,132	0,645	0,648	0,738	0,705	0,695	<u>0,733</u>
	0,136			0,742	0,706	0,697	<u>0,736</u>
	0,219			0,787	0,734	0,730	<u>0,785</u>
	0,228			0,775	0,736	0,734	<u>0,787</u>
	0,259			0,771	0,741	0,746	<u>0,787</u>
	0,282			0,777	0,742	0,753	<u>0,784</u>
	0,292			0,775	0,742	0,756	<u>0,782</u>
	0,343			0,766	0,740	<u>0,763</u>	0,773
	0,365			0,760	0,739	<u>0,763</u>	0,768
	0,379			0,750	0,738	<u>0,761</u>	0,765
	0,420			0,748	0,735	<u>0,756</u>	0,757
	0,534			0,733	0,723	0,734	<u>0,733</u>
0,785	0,680	<u>0,685</u>	0,686	<u>0,685</u>			
0,326	0,135	0,645	0,648	0,706	0,686	0,686	<u>0,694</u>
	0,220			0,734	0,705	0,712	<u>0,725</u>
	0,265			0,735	0,710	0,724	<u>0,737</u>
	0,590			0,694	<u>0,695</u>	0,708	0,706
0,536	0,067	0,645	0,648	0,660	0,652	<u>0,657</u>	0,654
	0,14			0,685	0,660	<u>0,671</u>	0,664
	0,27			0,690	0,670	<u>0,692</u>	0,681
	0,50			0,672	<u>0,670</u>	0,693	0,687

Tableau VII-3 : compacités expérimentales d'après Ben Aïm [BENA70]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=15) et avec le MEC 4-paramètres (K=15 et $x_0=0,2$). Les résultats soulignés correspondent à la compacité théorique la plus proche de la compacité expérimentale.

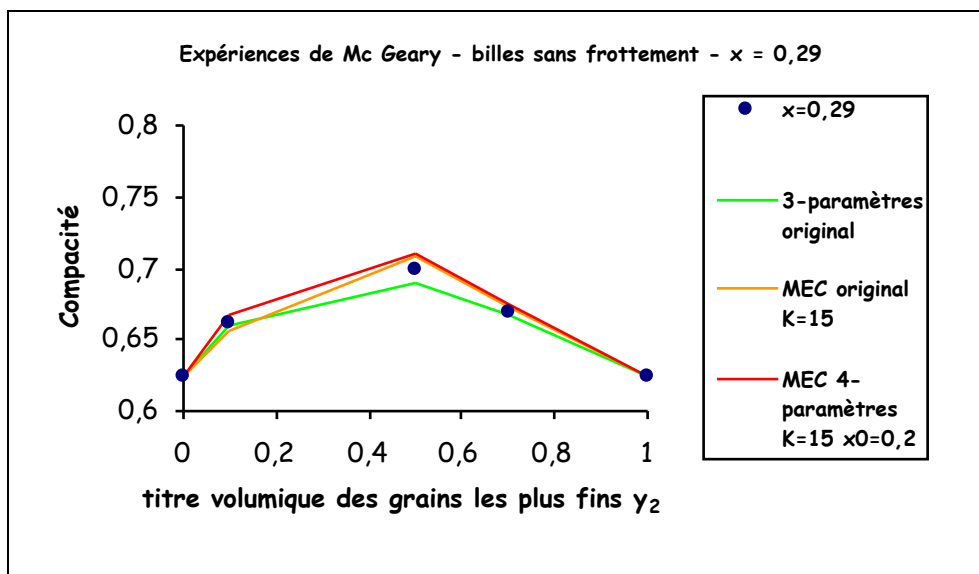
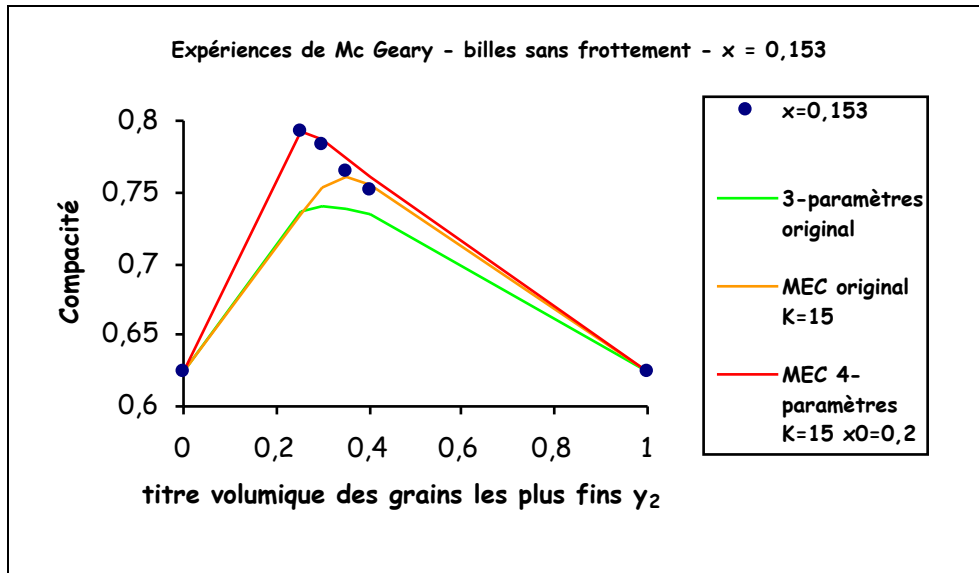
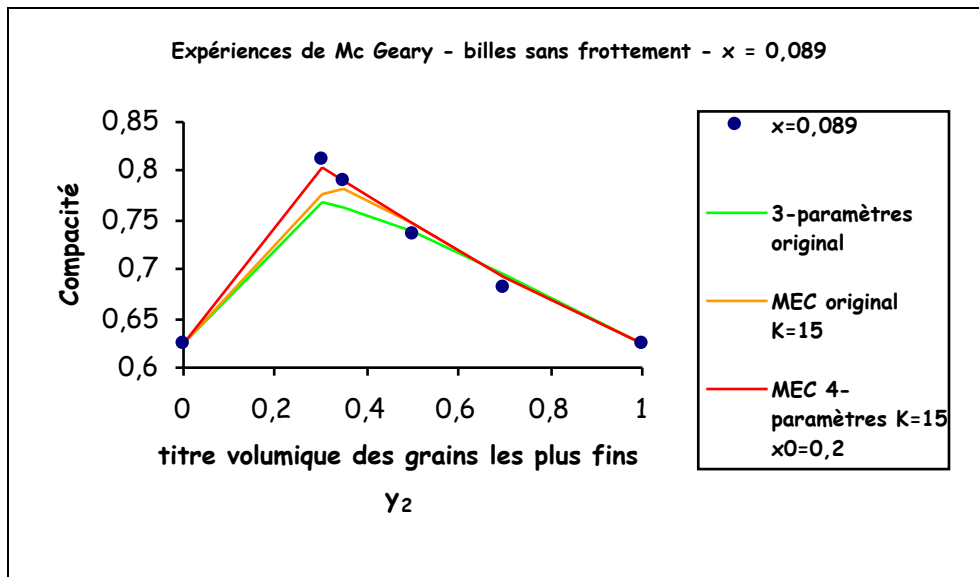


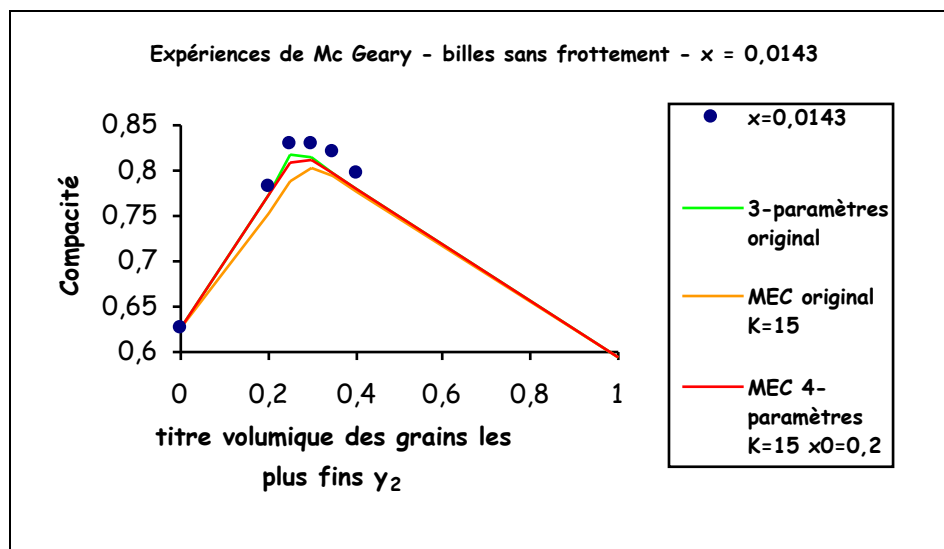
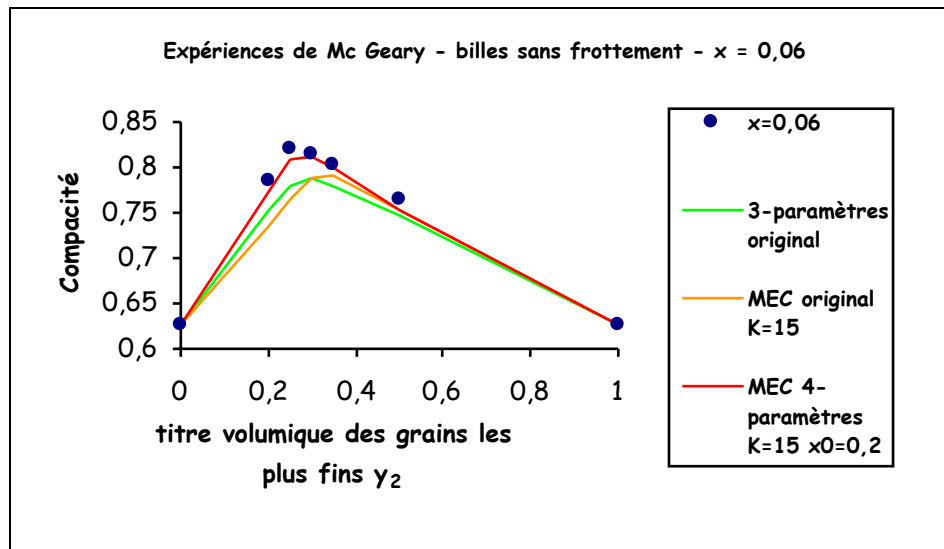
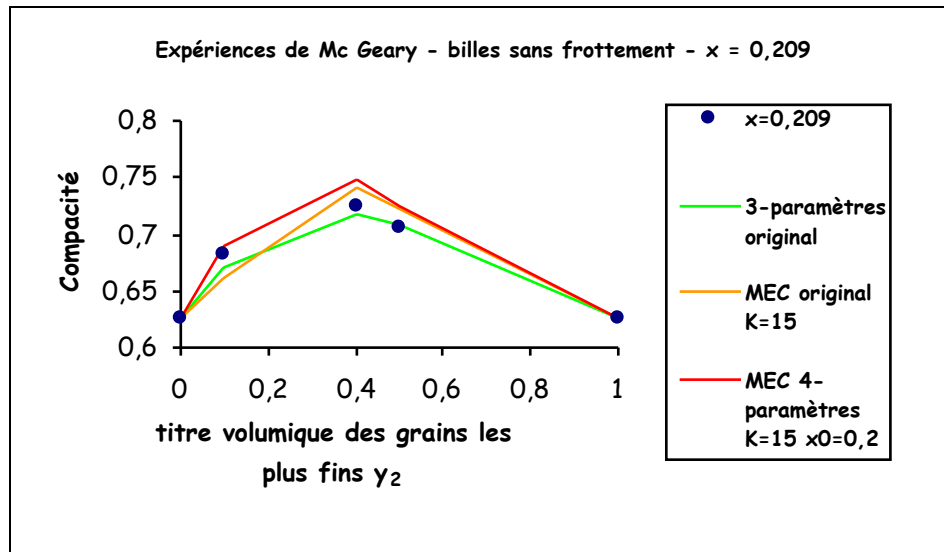


Figures VII-3 : expériences de Ben Aïm. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=15$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=15$ et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						K = 15	$x_0 = 0,2$ K = 15
				a_{L00}	a_{ROAD}		
				b_{L00}	b_{ROAD}		
0,089	0,3	0,625	0,625	0,812	0,769	0,776	<u>0,804</u>
	0,35			0,790	0,764	0,781	<u>0,791</u>
	0,50			0,737	<u>0,739</u>	0,746	0,747
	0,70			0,682	0,695	<u>0,693</u>	<u>0,693</u>
0,153	0,25	0,625	0,625	0,792	0,737	0,734	<u>0,792</u>
	0,30			0,783	0,741	0,753	<u>0,786</u>
	0,35			0,765	0,738	<u>0,760</u>	0,774
	0,40			0,752	0,734	<u>0,755</u>	0,761
0,290	0,1	0,625	0,625	0,662	<u>0,659</u>	0,656	0,668
	0,5			0,700	0,690	<u>0,708</u>	0,711
	0,7			0,670	<u>0,667</u>	<u>0,673</u>	0,674
0,209	0,1	0,625	0,625	0,682	0,670	0,661	<u>0,689</u>
	0,4			0,725	<u>0,718</u>	0,741	0,749
	0,5			0,705	<u>0,708</u>	0,722	0,725
0,06	0,2	0,625	0,625	0,784	0,752	0,734	<u>0,774</u>
	0,25			0,822	0,779	0,765	<u>0,809</u>
	0,30			0,815	0,789	0,789	<u>0,812</u>
	0,35			0,804	0,780	0,792	<u>0,800</u>
	0,50			0,766	0,748	0,752	<u>0,753</u>
0,0143	0,200	0,625	0,595	0,781	0,773	0,753	<u>0,774</u>
	0,250			0,829	<u>0,817</u>	0,788	0,810
	0,300			0,830	<u>0,816</u>	0,804	0,812
	0,350			0,820	<u>0,797</u>	0,793	0,796
	0,400			0,796	<u>0,778</u>	0,776	<u>0,778</u>

Tableau VII-4 : compacités expérimentales d'après Mc Geary [BENA70]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=15) et avec le MEC 4-paramètres (K=15 et $x_0=0,2$).

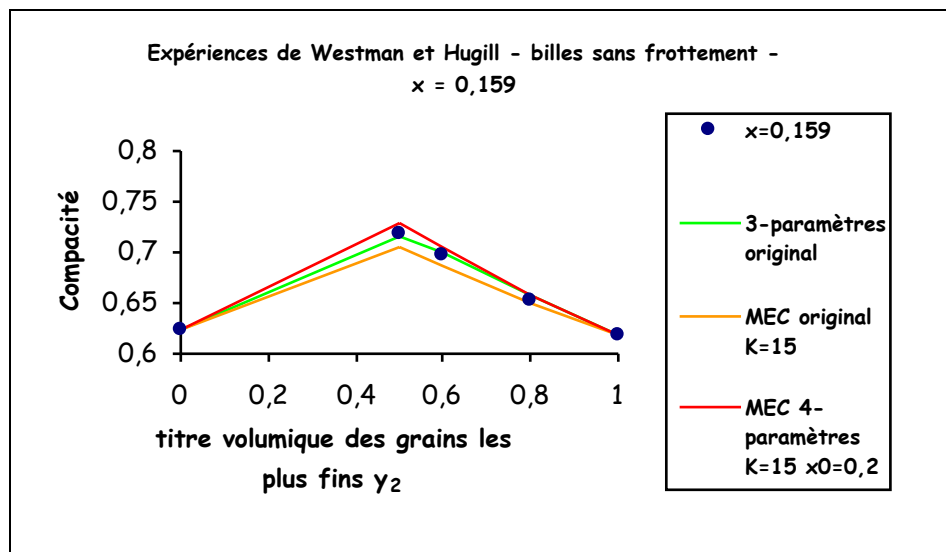
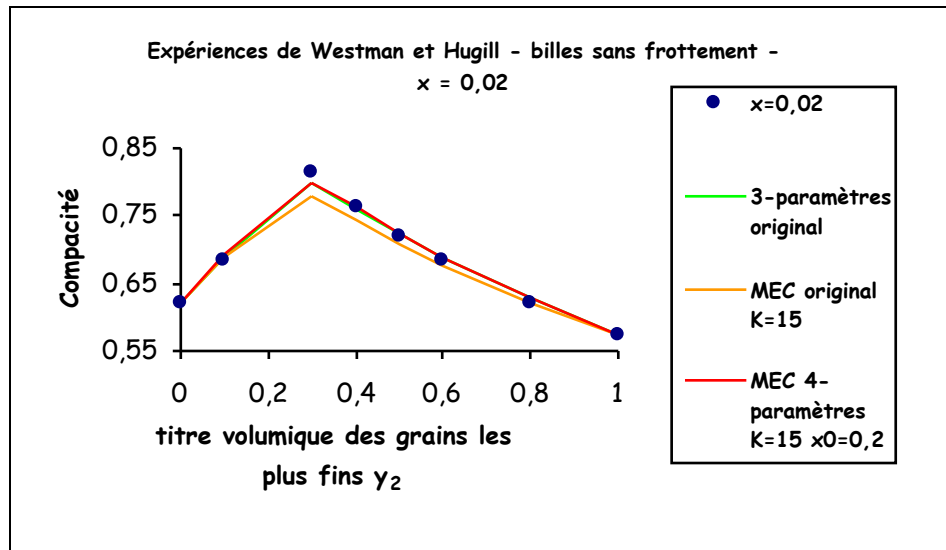
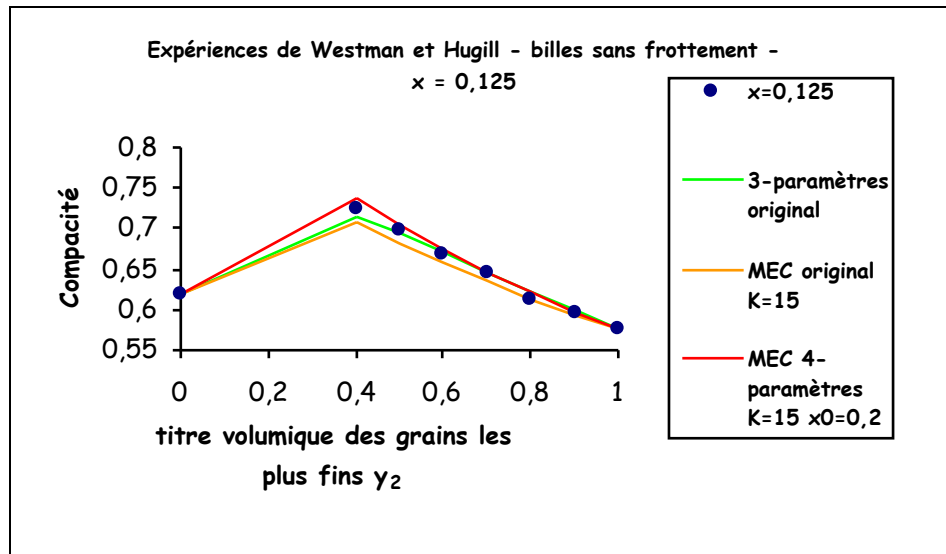




Figures VII-4 : expériences de Mc Geary. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=15$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=15$ et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 15$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ $K = 15$ a_{ROAD} b_{ROAD}
0,125	0,4	0,618	0,575	0,724	<u>0,713</u>	0,707	0,739
	0,5			0,698	<u>0,694</u>	0,682	0,706
	0,6			0,670	<u>0,671</u>	0,657	0,676
	0,7			0,644	<u>0,647</u>	0,635	<u>0,647</u>
	0,8			0,614	0,622	<u>0,614</u>	0,621
	0,9			0,596	0,598	0,594	<u>0,597</u>
0,02	0,1	0,623	0,575	0,685	0,690	<u>0,688</u>	0,691
	0,3			0,815	0,799	0,777	<u>0,800</u>
	0,4			0,764	0,761	0,743	<u>0,763</u>
	0,5			0,721	<u>0,724</u>	0,709	<u>0,724</u>
	0,6			0,684	0,690	0,678	<u>0,689</u>
	0,8			0,622	0,628	<u>0,622</u>	0,627
0,159	0,5	0,623	0,618	0,718	<u>0,716</u>	0,706	0,730
	0,6			0,698	<u>0,699</u>	0,687	0,705
	0,8			0,652	0,659	<u>0,651</u>	0,659

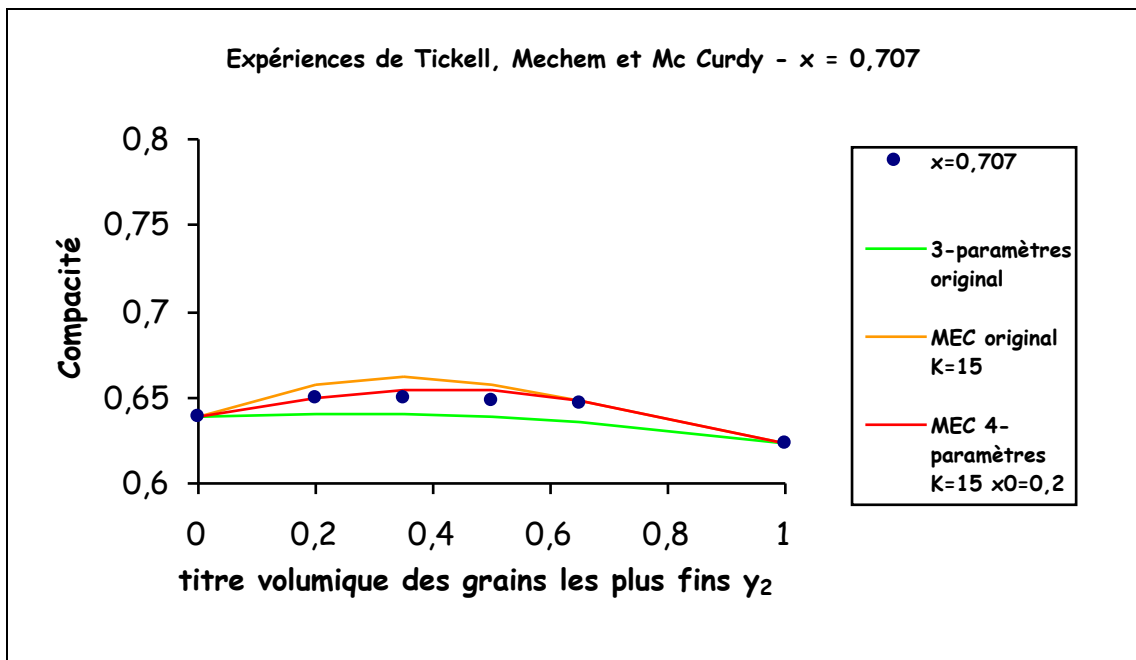
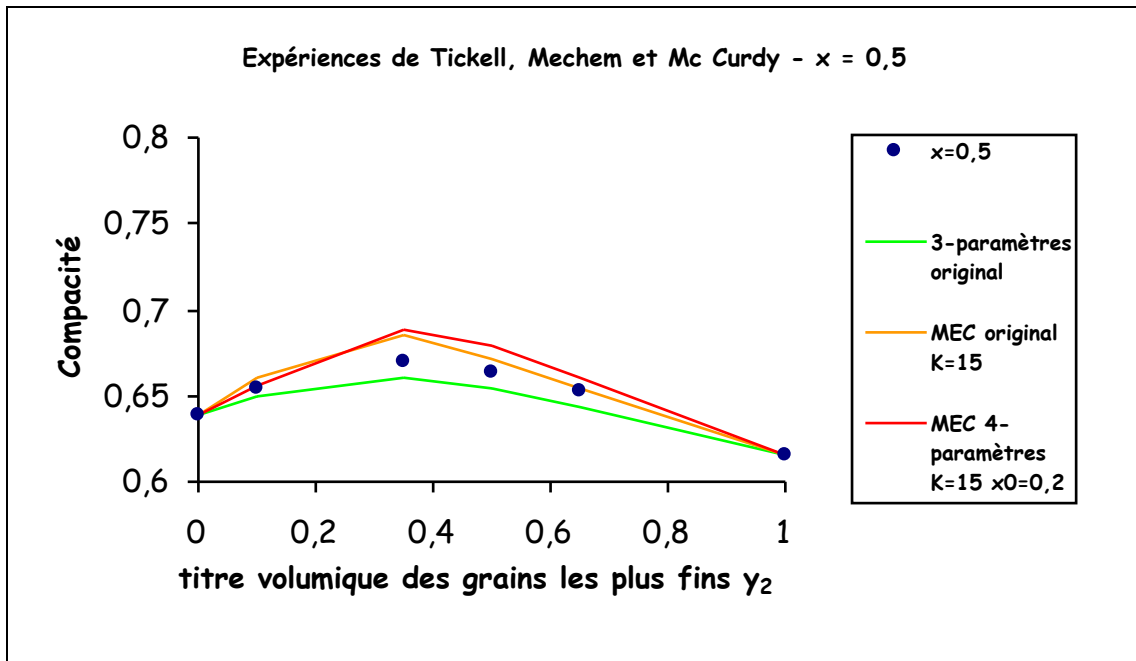
Tableau VII-5 : compacités expérimentales d'après Westman et Hugill [BENA70]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=15) et avec le MEC 4-paramètres (K=15 et $x_0=0,2$).

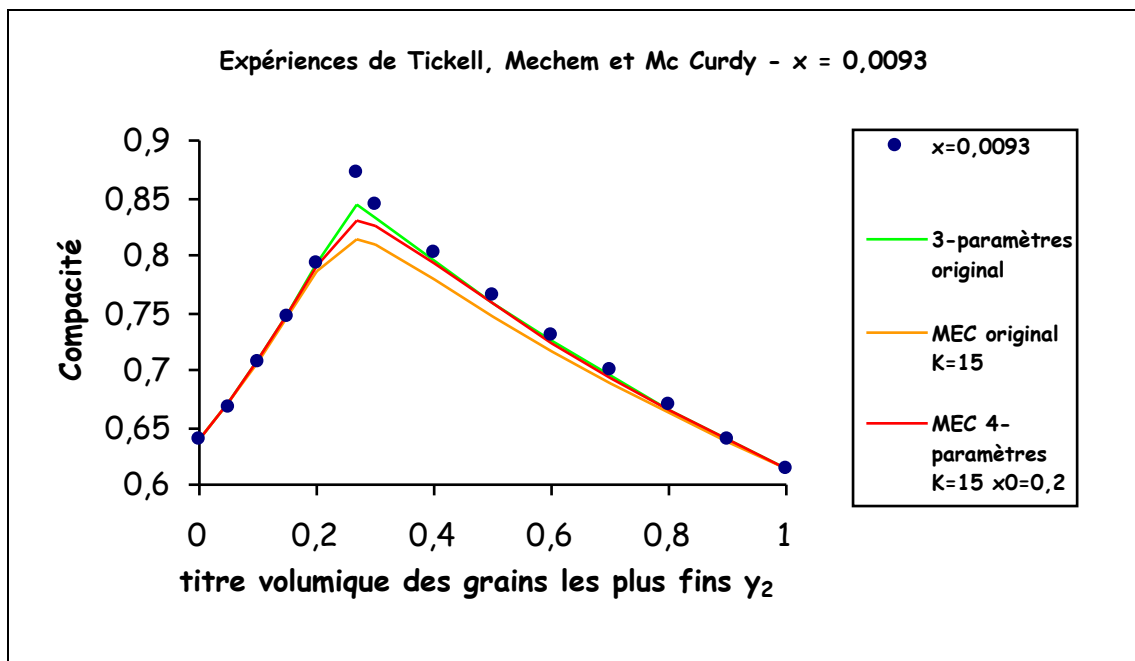
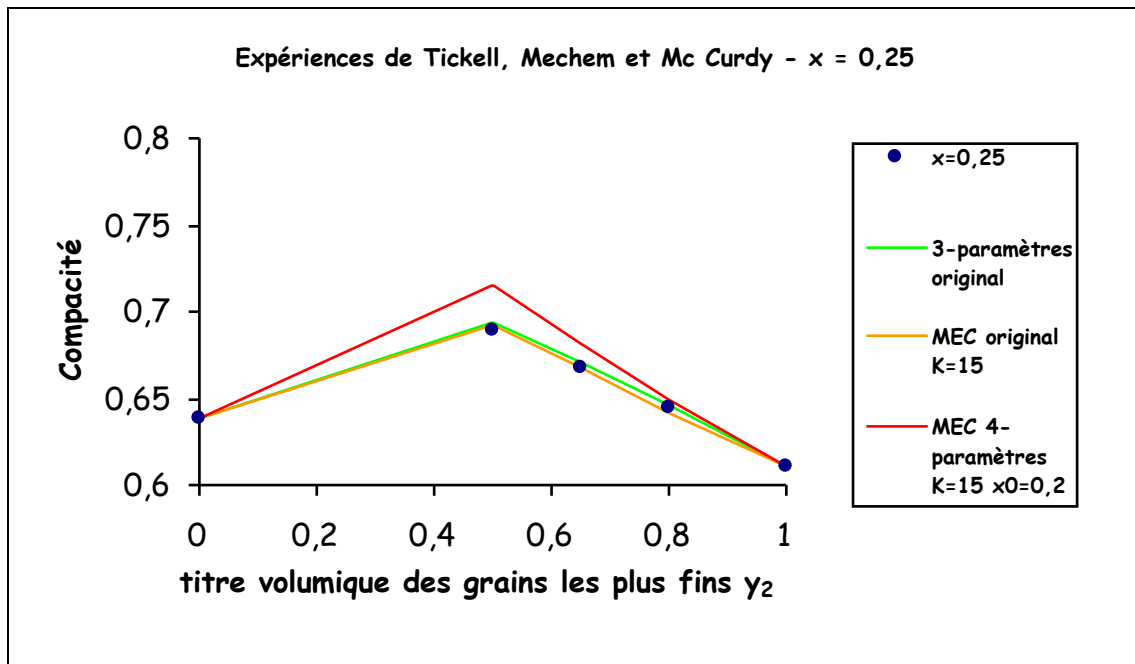


Figures VII-5 : expériences de Westman et Hugill. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=15$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=15$ et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 15$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ $K = 15$ a_{ROAD} b_{ROAD}
0,5	0,1	0,639	0,615	0,655	0,650	0,661	<u>0,656</u>
	0,35			0,669	<u>0,661</u>	0,686	0,688
	0,50			0,663	0,654	<u>0,671</u>	0,679
	0,65			0,652	0,644	<u>0,654</u>	0,660
0,707	0,2	0,639	0,624	0,649	0,641	0,657	<u>0,650</u>
	0,35			0,649	0,641	0,662	<u>0,655</u>
	0,50			0,648	0,639	0,657	<u>0,654</u>
	0,65			0,646	0,636	<u>0,648</u>	<u>0,648</u>
0,25	0,50	0,639	0,611	0,690	0,694	<u>0,693</u>	0,715
	0,65			0,668	0,671	<u>0,667</u>	0,681
	0,80			0,645	<u>0,646</u>	0,642	0,649
0,0093	0,05	0,639	0,615	0,668	<u>0,672</u>	<u>0,672</u>	<u>0,672</u>
	0,1			0,706	0,709	<u>0,707</u>	0,709
	0,15			0,746	0,749	<u>0,747</u>	0,749
	0,20			0,794	<u>0,793</u>	0,787	0,791
	0,27			0,871	<u>0,845</u>	0,815	0,830
	0,30			0,845	<u>0,833</u>	0,810	0,826
	0,40			0,802	<u>0,795</u>	0,778	0,793
	0,50			0,765	<u>0,759</u>	0,746	0,757
	0,60			0,730	<u>0,726</u>	0,716	0,724
	0,70			0,699	<u>0,695</u>	0,688	0,693
	0,80			0,669	<u>0,666</u>	0,662	0,665
	0,90			0,639	0,640	0,638	<u>0,639</u>

Tableau VII-6 : compacités expérimentales d'après Tickell, Mechem, Mc Curdy [BENA70]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=15) et avec le MEC 4-paramètres (K=15 et $x_0=0,2$).





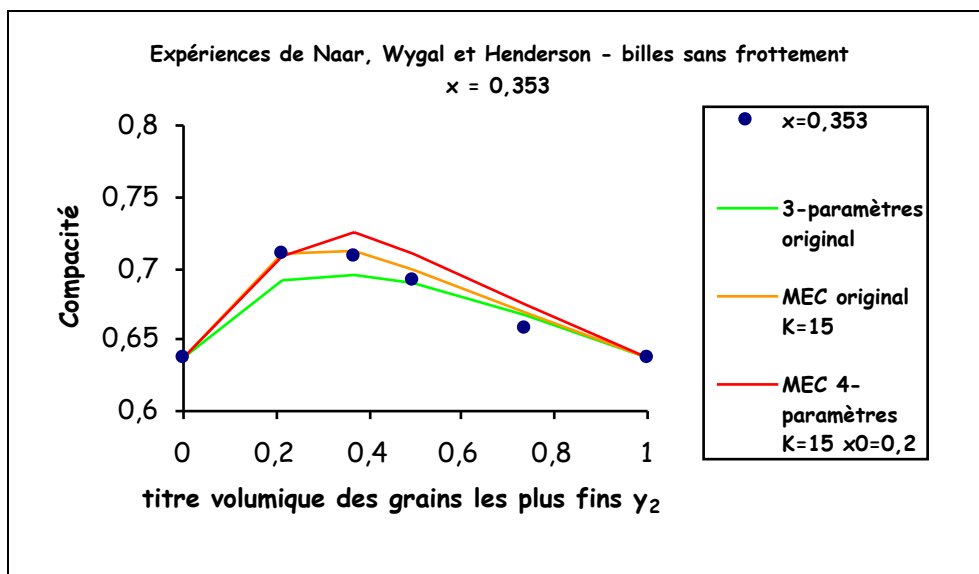
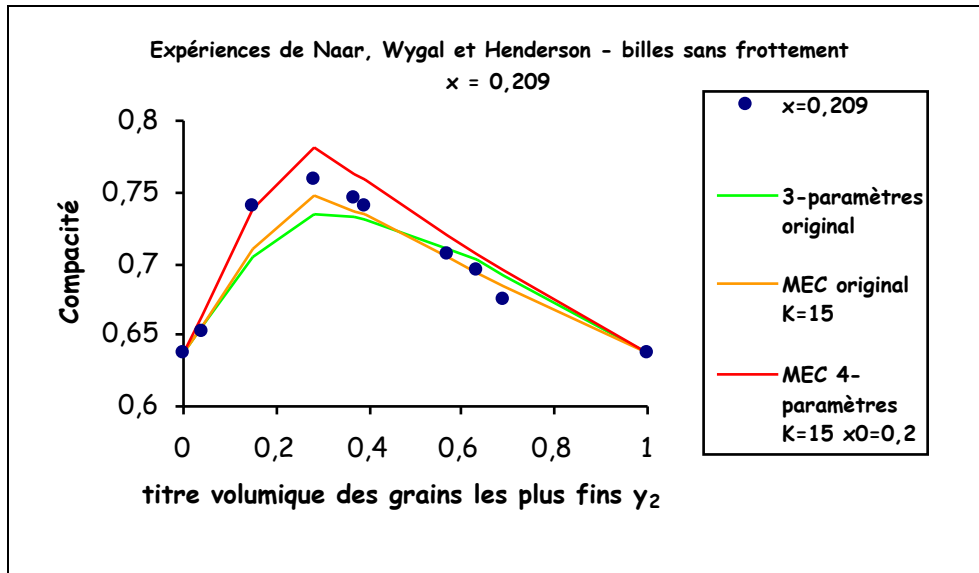
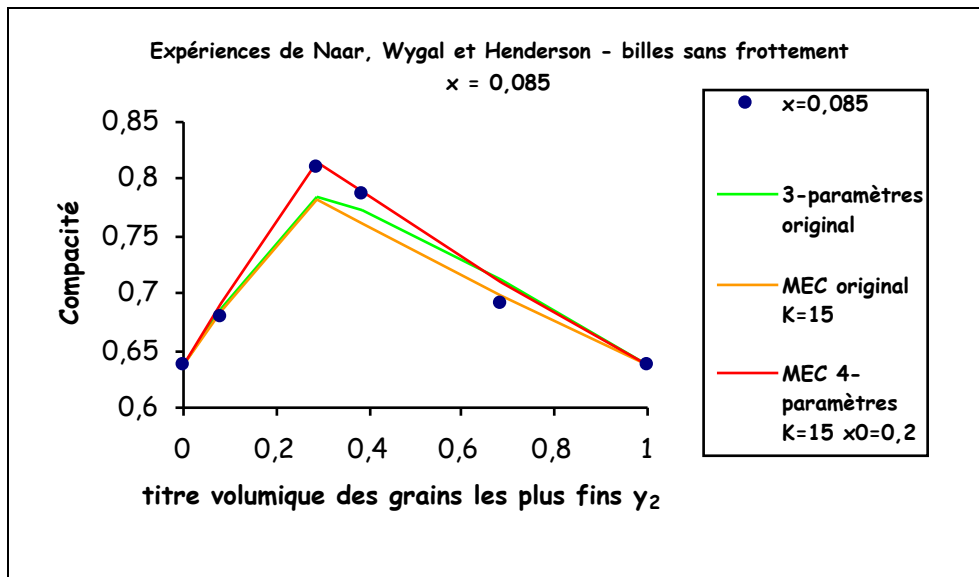
Figures VII-6 : expériences de Tickell, Mechem, Mc Curdy. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=15$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=15$ et $x_0=0,2$).

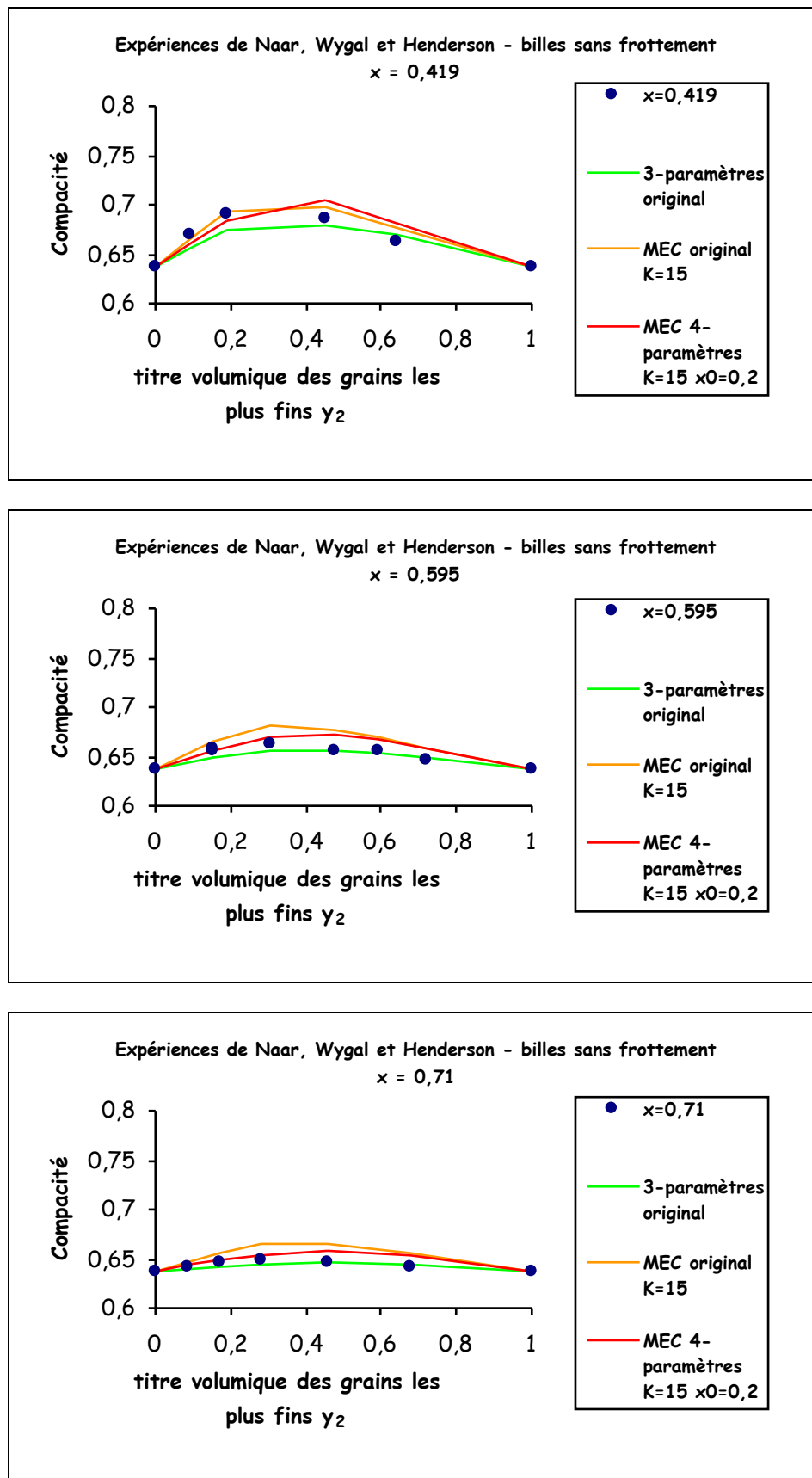
$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						K = 15 a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ K = 15 a_{ROAD} b_{ROAD}
0,062	0,274	0,638	0,638	0,831	0,801	0,792	<u>0,823</u>
	0,524			0,748	<u>0,753</u>	0,736	0,755
0,085	0,08	0,638	0,638	0,679	0,687	<u>0,685</u>	0,692
	0,285			0,810	0,784	0,782	<u>0,816</u>
	0,385			0,786	0,772	0,762	<u>0,790</u>
	0,685			0,690	0,711	<u>0,697</u>	0,709
0,209	0,04	0,638	0,638	0,653	<u>0,656</u>	<u>0,656</u>	0,663
	0,148			0,741	0,704	0,710	<u>0,739</u>
	0,279			0,759	0,735	<u>0,748</u>	0,781
	0,37			0,745	0,732	<u>0,737</u>	0,763
	0,39			0,740	0,731	<u>0,734</u>	0,759
	0,57			0,706	0,711	<u>0,704</u>	0,719
	0,63			0,695	0,702	<u>0,694</u>	0,707
	0,69			0,675	0,692	<u>0,684</u>	0,695
0,353	0,215	0,638	0,638	0,711	0,691	<u>0,711</u>	0,708
	0,370			0,708	0,696	<u>0,713</u>	0,726
	0,495			0,692	<u>0,690</u>	0,699	0,710
	0,735			0,658	<u>0,668</u>	0,669	0,675

Tableau VII-7 : compacités expérimentales d'après Naar, Wygal, Henderson [BENA70]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=15) et avec le MEC 4-paramètres (K=15 et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3- paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						K = 15	$x_0 = 0,2$ K = 15
				a_{L00}	a_{ROAD}		
				b_{L00}	b_{ROAD}		
0,419	0,09	0,638	0,638	0,669	0,656	<u>0,665</u>	0,660
	0,19			0,690	0,674	<u>0,693</u>	0,684
	0,45			0,685	<u>0,680</u>	0,697	0,704
	0,64			0,663	<u>0,669</u>	0,676	0,682
0,595	0,15	0,638	0,638	0,655	0,648	0,664	<u>0,655</u>
	0,155			0,659	0,648	0,664	<u>0,655</u>
	0,305			0,662	<u>0,655</u>	0,681	<u>0,669</u>
	0,475			0,655	<u>0,656</u>	0,676	0,673
	0,59			0,656	<u>0,653</u>	0,669	0,668
	0,720			0,646	<u>0,649</u>	0,659	0,659
0,71	0,085	0,638	0,638	0,643	0,640	0,647	<u>0,644</u>
	0,17			0,646	0,642	0,656	<u>0,649</u>
	0,28			0,648	<u>0,644</u>	0,664	0,654
	0,46			0,647	<u>0,646</u>	0,665	0,659
	0,675			0,641	<u>0,644</u>	0,656	0,654

Tableau VII-8 : compacités expérimentales d'après Naar, Wygal, Henderson [BENA70]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=15) et avec le MEC 4-paramètres (K=15 et $x_0=0,2$).

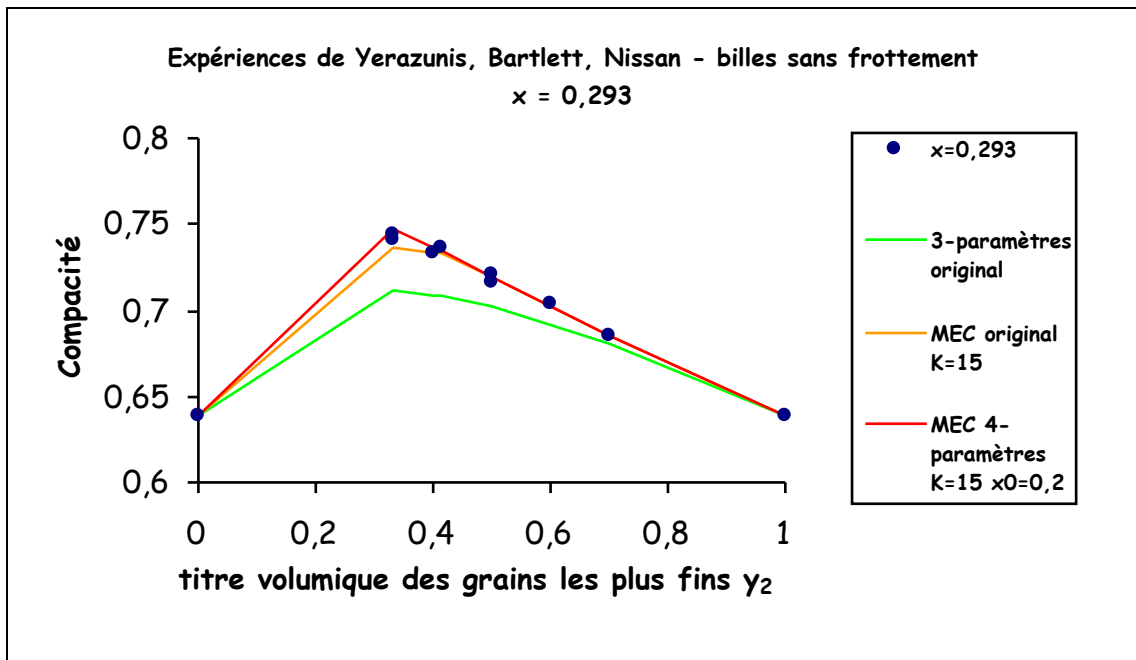
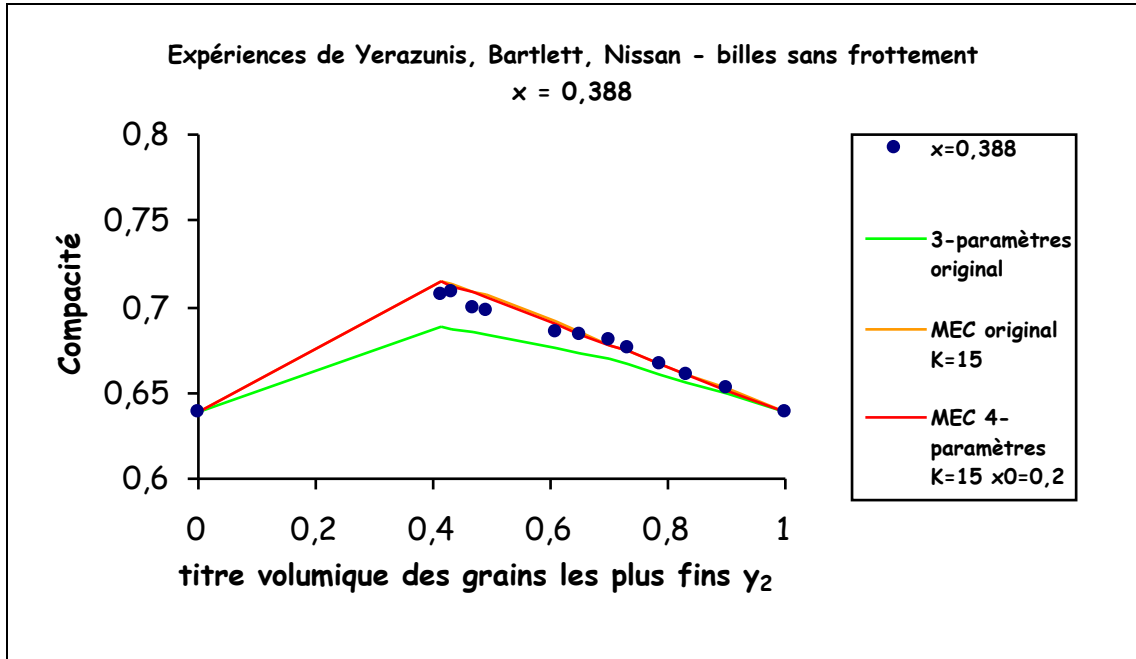


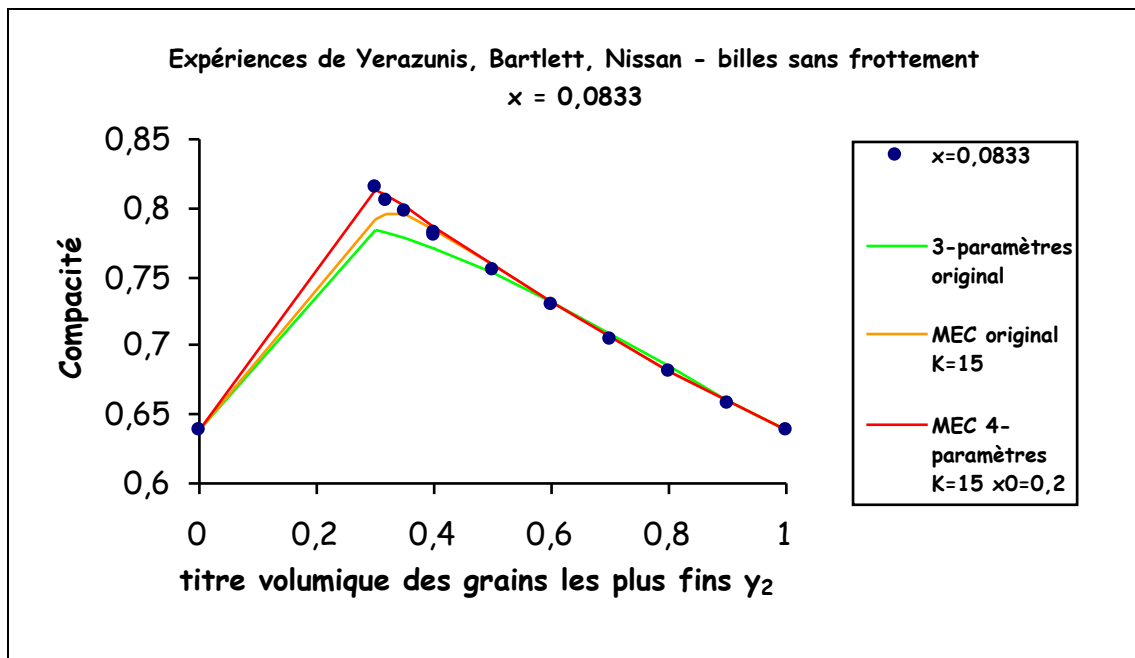
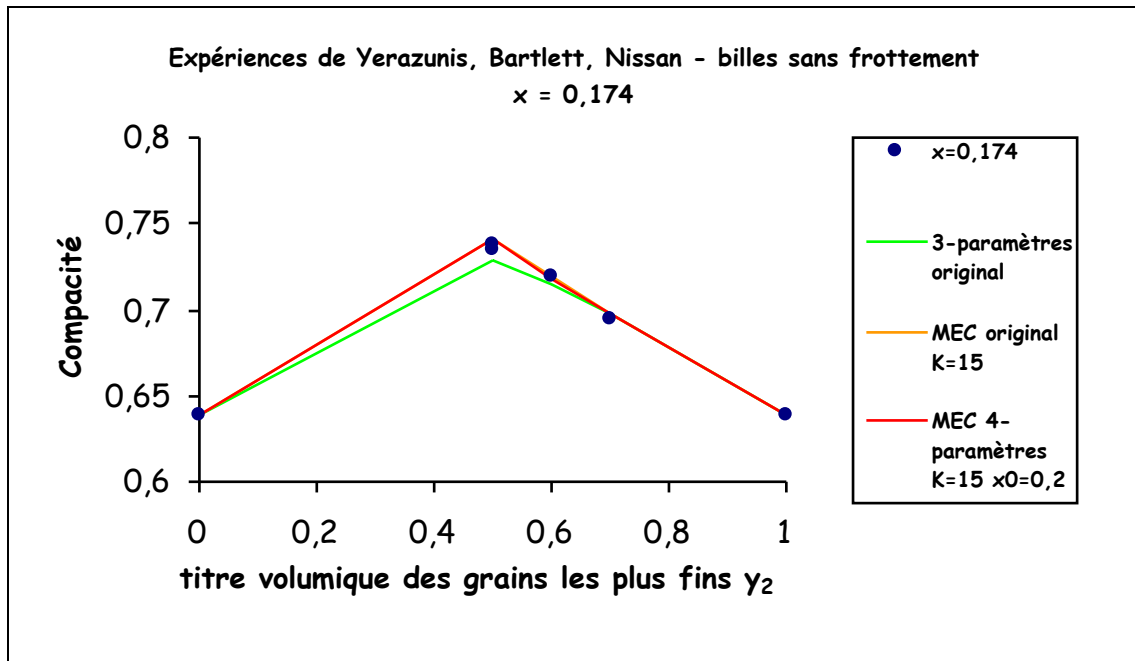


Figures VII-7 : expériences de Naar, Wygal, Henderson. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=15$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=15$ et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						K = 15	K = 15
				a_{L00}	a_{ROAD}		
				b_{L00}	b_{ROAD}		
0,388	0,415	0,639	0,639	0,707	0,688	<u>0,714</u>	<u>0,714</u>
	0,430			0,709	0,687	0,713	<u>0,712</u>
	0,470			0,699	0,686	0,709	<u>0,708</u>
	0,490			0,697	0,684	0,707	<u>0,705</u>
	0,610			0,685	0,676	0,691	<u>0,690</u>
	0,650			0,684	0,673	0,685	<u>0,684</u>
	0,700			0,680	0,669	<u>0,678</u>	<u>0,678</u>
	0,730			0,676	0,666	<u>0,674</u>	<u>0,674</u>
	0,785			0,667	0,661	<u>0,667</u>	0,666
	0,830			0,660	0,656	0,661	<u>0,660</u>
	0,900			0,653	0,649	<u>0,652</u>	0,651
0,293	0,33	0,639	0,639	0,744	0,712	0,736	<u>0,747</u>
	0,33			0,741	0,712	<u>0,736</u>	0,747
	0,40			0,734	0,709	<u>0,734</u>	0,737
	0,415			0,736	0,708	0,733	<u>0,735</u>
	0,50			0,721	0,702	<u>0,720</u>	<u>0,720</u>
	0,50			0,716	0,702	<u>0,720</u>	<u>0,720</u>
	0,60			0,704	0,692	<u>0,703</u>	<u>0,703</u>
	0,70			0,686	0,680	<u>0,686</u>	<u>0,686</u>
0,174	0,5	0,639	0,639	0,738	0,729	<u>0,741</u>	0,741
	0,5			0,735	<u>0,729</u>	<u>0,741</u>	<u>0,741</u>
	0,6			0,719	0,714	<u>0,719</u>	0,718
	0,7			0,694	<u>0,697</u>	<u>0,697</u>	<u>0,697</u>
0,0833	0,3	0,639	0,639	0,815	0,784	0,792	<u>0,814</u>
	0,32			0,805	0,782	0,796	<u>0,809</u>
	0,35			0,797	0,778	<u>0,795</u>	0,801
	0,40			0,783	0,771	<u>0,785</u>	0,787
	0,40			0,781	0,771	<u>0,785</u>	0,787
	0,50			0,755	<u>0,753</u>	0,758	0,759
	0,60			0,729	0,732	0,732	<u>0,731</u>
	0,70			0,704	0,709	<u>0,706</u>	<u>0,706</u>
	0,80			0,681	0,685	<u>0,682</u>	<u>0,682</u>
	0,90			0,658	0,661	<u>0,660</u>	<u>0,660</u>

**Tableau VII-9 : compacités expérimentales d'après Yerazunis et al. [BENA70].
Comparaison avec le modèle 3-paramètres original et avec le MEC.**





Figures VII-8 : expériences de Yerazunis, Bartlett, Nissan. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=15$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=15$ et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 4,1$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ $K = 4,7$ a_{ROAD} b_{ROAD}
B1B2 0,435	0,10	0,598	0,605	0,608	0,616	0,618	<u>0,611</u>
	0,20			0,621	0,632	0,635	<u>0,622</u>
	0,30			0,629	0,642	0,648	<u>0,630</u>
	0,40			0,631	0,643	0,654	<u>0,634</u>
	0,50			0,630	0,640	0,653	<u>0,634</u>
	0,60			0,626	0,635	0,647	<u>0,632</u>
	0,70			0,623	0,629	0,638	<u>0,627</u>
	0,80			0,616	0,622	0,628	<u>0,620</u>
	0,90			0,609	<u>0,613</u>	0,617	<u>0,613</u>
B1B3 0,272	0,10	0,595	0,605	0,627	0,631	0,623	<u>0,630</u>
	0,20			0,656	0,662	0,649	<u>0,661</u>
	0,30			0,672	0,679	<u>0,669</u>	0,680
	0,40			0,673	0,678	<u>0,677</u>	0,682
	0,50			0,669	<u>0,672</u>	0,674	0,673
	0,60			0,656	0,662	0,664	<u>0,661</u>
	0,70			0,648	<u>0,649</u>	0,650	<u>0,647</u>
	0,80			0,633	0,635	0,635	<u>0,633</u>
	0,90			0,621	<u>0,620</u>	<u>0,620</u>	0,619
B1B4 0,178	0,10	0,600	0,605	0,642	<u>0,647</u>	0,634	0,657
	0,20			0,686	<u>0,690</u>	0,666	0,708
	0,30			0,705	<u>0,711</u>	0,689	0,726
	0,40			0,706	<u>0,707</u>	0,697	0,716
	0,50			0,700	0,696	0,690	<u>0,698</u>
	0,60			0,683	<u>0,682</u>	0,676	0,679
	0,70			0,665	<u>0,664</u>	0,658	0,659
	0,80			0,642	<u>0,644</u>	<u>0,640</u>	<u>0,640</u>
	0,90			0,624	<u>0,624</u>	0,622	0,622

Tableau VII-10 : compacités expérimentales d'après Kwan, Chan, Wong [KWAN13]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=4,1) et avec le MEC 4-paramètres (K=4,7 et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3- paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0,2$
						$K = 4,1$ a_{L00} b_{L00}	$K = 4,7$ a_{ROAD} b_{ROAD}
B1B5 0,122	0,10	0,586	0,605	0,641	0,639	0,624	0,643
	0,20			0,696	0,690	0,661	0,699
	0,30			0,727	0,723	0,691	0,728
	0,40			0,725	0,720	0,703	0,722
	0,50			0,715	0,708	0,696	0,705
	0,60			0,694	0,691	0,680	0,684
	0,70			0,673	0,671	0,662	0,663
	0,80			0,645	0,649	0,643	0,643
	0,90			0,627	0,627	0,623	0,623
B1B6 0,091	0,10	0,590	0,605	0,638	0,647	0,630	0,647
	0,20			0,709	0,703	0,671	0,705
	0,30			0,750	0,742	0,702	0,736
	0,40			0,744	0,734	0,712	0,731
	0,50			0,730	0,719	0,703	0,711
	0,60			0,707	0,699	0,685	0,689
	0,70			0,680	0,676	0,665	0,667
	0,80			0,654	0,652	0,645	0,645
	0,90			0,628	0,628	0,624	0,625
B2B3 0,625	0,10	0,595	0,598	0,600	0,600	0,607	0,600
	0,20			0,602	0,605	0,616	0,604
	0,30			0,605	0,609	0,624	0,608
	0,40			0,606	0,611	0,627	0,610
	0,50			0,605	0,611	0,627	0,610
	0,60			0,604	0,610	0,624	0,610
	0,70			0,603	0,608	0,619	0,608
	0,80			0,600	0,605	0,613	0,605
	0,90			0,599	0,602	0,606	0,602

Tableau VII-11 : compacités expérimentales d'après Kwan, Chan, Wong [KWAN13]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=4,1) et avec le MEC 4-paramètres (K=4,7 et $x_0=0,2$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 4,1$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ $K = 4,7$ a_{ROAD} b_{ROAD}
B2B4 0,410	0,10	0,6	0,598	0,622	0,620	0,620	0,617
	0,20			0,637	0,637	0,638	0,631
	0,30			0,641	0,646	0,651	0,641
	0,40			0,645	0,646	0,656	0,645
	0,50			0,638	0,641	0,653	0,643
	0,60			0,631	0,635	0,646	0,637
	0,70			0,625	0,627	0,635	0,629
	0,80			0,613	0,618	0,623	0,619
	0,90			0,607	0,608	0,611	0,609
B2B5 0,281	0,10	0,586	0,598	0,623	0,620	0,613	0,621
	0,20			0,648	0,651	0,639	0,653
	0,30			0,660	0,668	0,659	0,674
	0,40			0,667	0,668	0,668	0,677
	0,50			0,659	0,662	0,665	0,669
	0,60			0,652	0,653	0,656	0,656
	0,70			0,636	0,641	0,642	0,642
	0,80			0,623	0,627	0,628	0,627
	0,90			0,609	0,612	0,613	0,612
B2B6 0,209	0,10	0,590	0,598	0,633	0,633	0,621	0,643
	0,20			0,671	0,672	0,651	0,692
	0,30			0,694	0,692	0,674	0,713
	0,40			0,691	0,690	0,683	0,706
	0,50			0,686	0,681	0,678	0,689
	0,60			0,667	0,668	0,665	0,670
	0,70			0,650	0,652	0,649	0,651
	0,80			0,631	0,634	0,632	0,633
	0,90			0,615	0,616	0,615	0,615

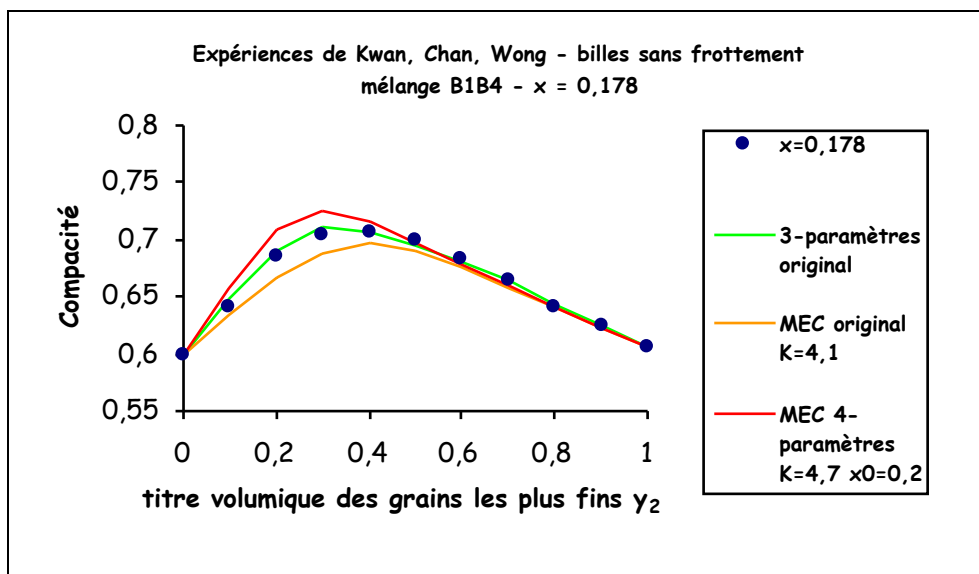
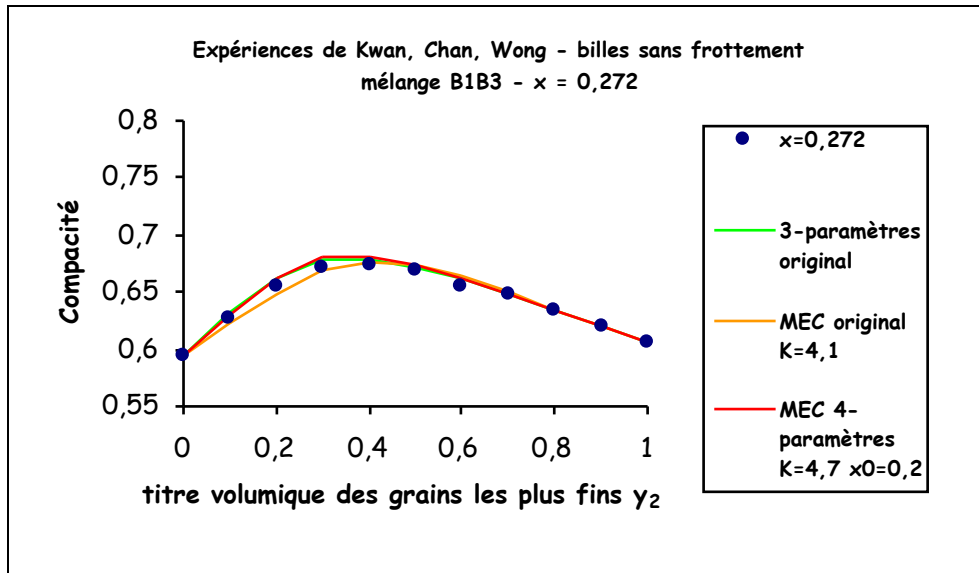
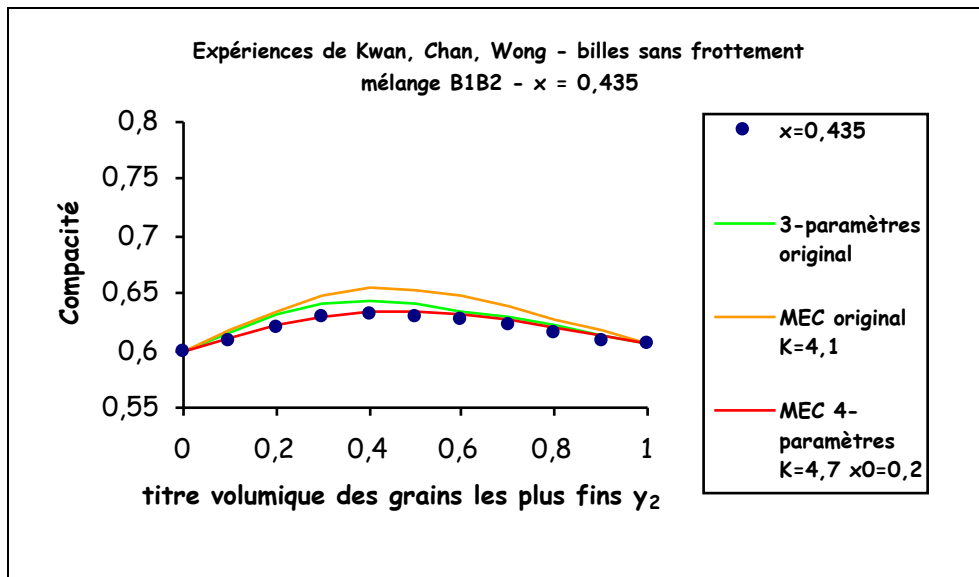
Tableau VII-12 : compacités expérimentales d'après Kwan, Chan, Wong [KWAN13]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=4,1) et avec le MEC 4-paramètres (K=4,7 et $x_0=0,2$).

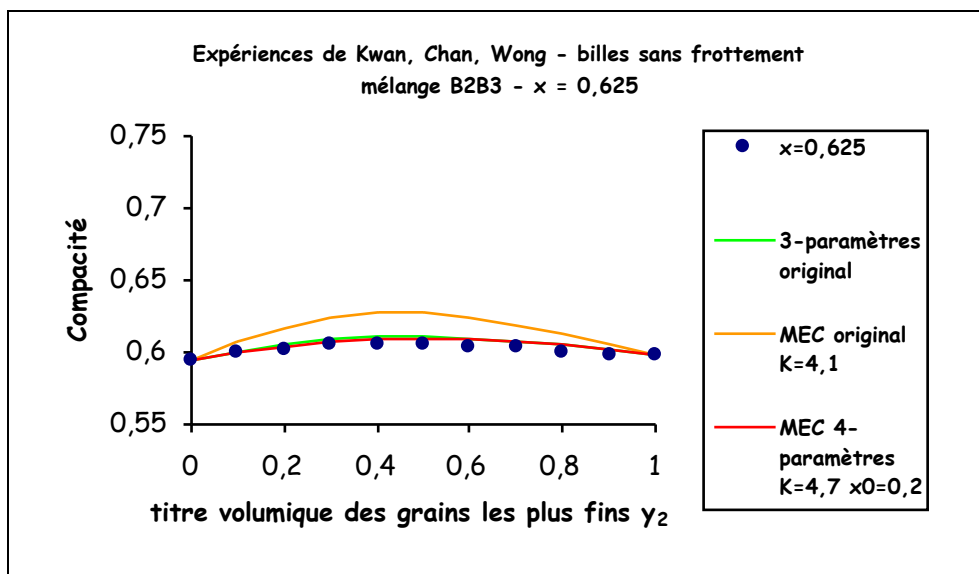
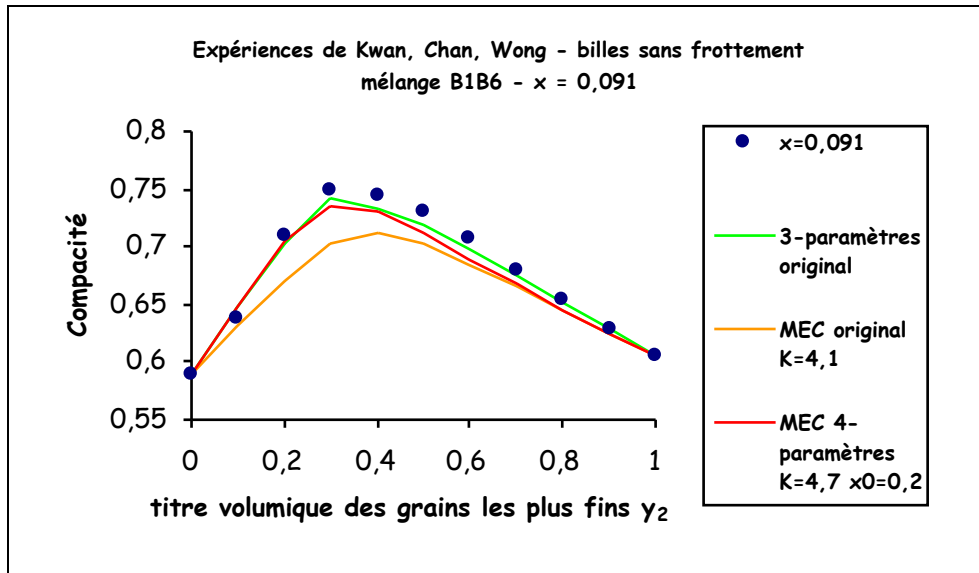
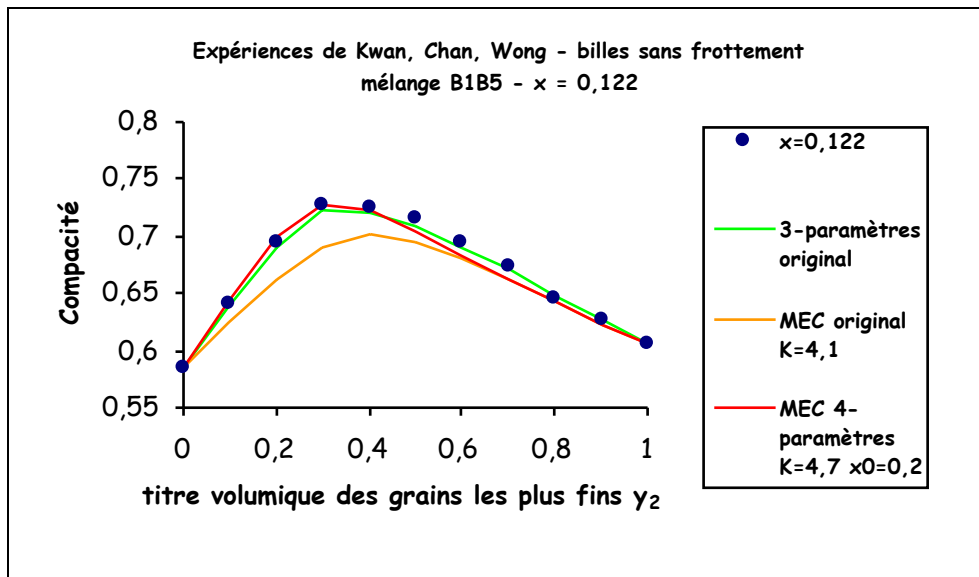
$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 4,1$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ $K = 4,7$ a_{ROAD} b_{ROAD}
B3B4 0,655	0,10	0,6	0,595	0,605	0,603	0,610	0,604
	0,20			0,610	0,607	0,618	0,607
	0,30			0,612	0,609	0,623	0,609
	0,40			0,614	0,610	0,626	0,610
	0,50			0,614	0,610	0,625	0,610
	0,60			0,614	0,608	0,622	0,608
	0,70			0,609	0,605	0,617	0,606
	0,80			0,606	0,602	0,610	0,603
	0,90			0,600	0,599	0,603	0,599
B3B5 0,449	0,10	0,586	0,595	0,612	0,603	0,605	0,601
	0,20			0,624	0,618	0,622	0,614
	0,30			0,630	0,628	0,635	0,624
	0,40			0,635	0,629	0,641	0,630
	0,50			0,637	0,627	0,641	0,630
	0,60			0,632	0,623	0,636	0,627
	0,70			0,625	0,617	0,627	0,620
	0,80			0,620	0,610	0,617	0,613
	0,90			0,610	0,603	0,606	0,604
B3B6 0,334	0,10	0,590	0,595	0,618	0,618	0,614	0,616
	0,20			0,643	0,642	0,636	0,640
	0,30			0,661	0,656	0,653	0,656
	0,40			0,664	0,655	0,660	0,661
	0,50			0,658	0,650	0,657	0,656
	0,60			0,649	0,642	0,649	0,647
	0,70			0,639	0,632	0,636	0,634
	0,80			0,624	0,620	0,623	0,621
	0,90			0,610	0,607	0,609	0,608

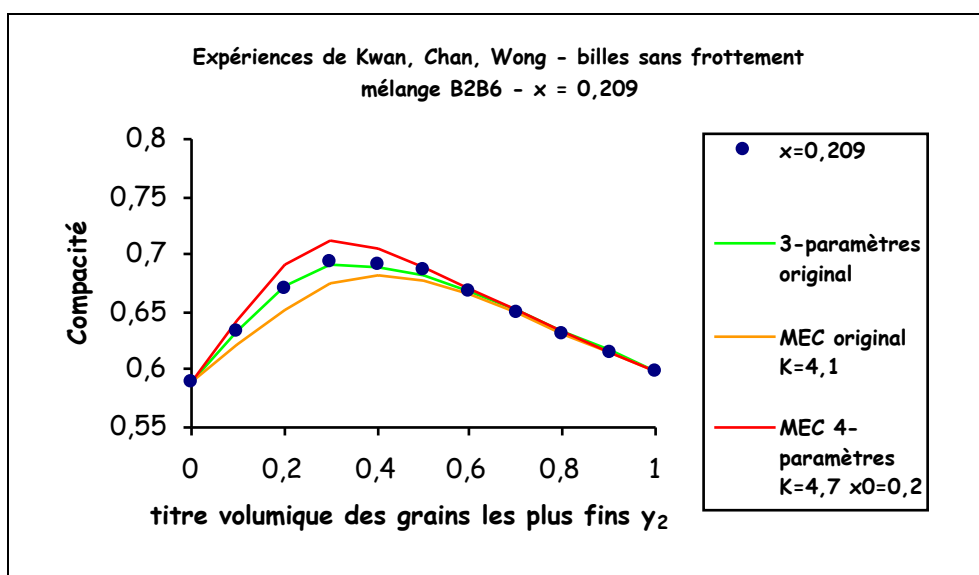
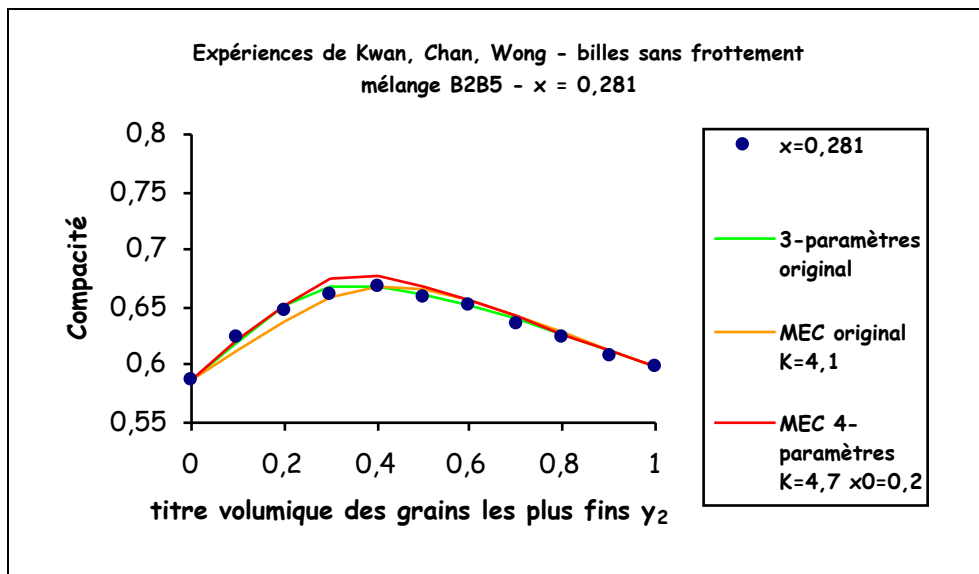
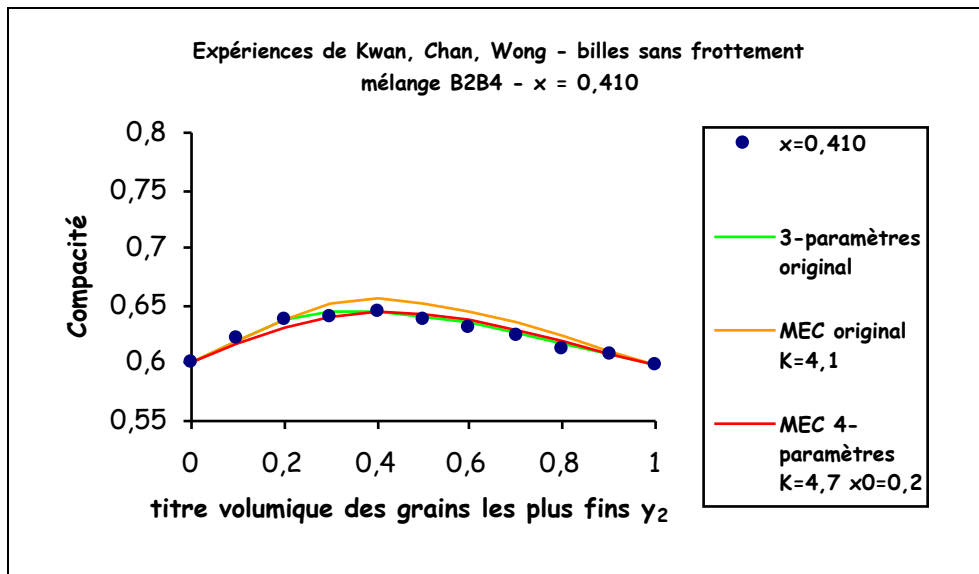
Tableau VII-13 : compacités expérimentales d'après Kwan, Chan, Wong [KWAN13]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=4,1) et avec le MEC 4-paramètres (K=4,7 et $x_0=0,2$).

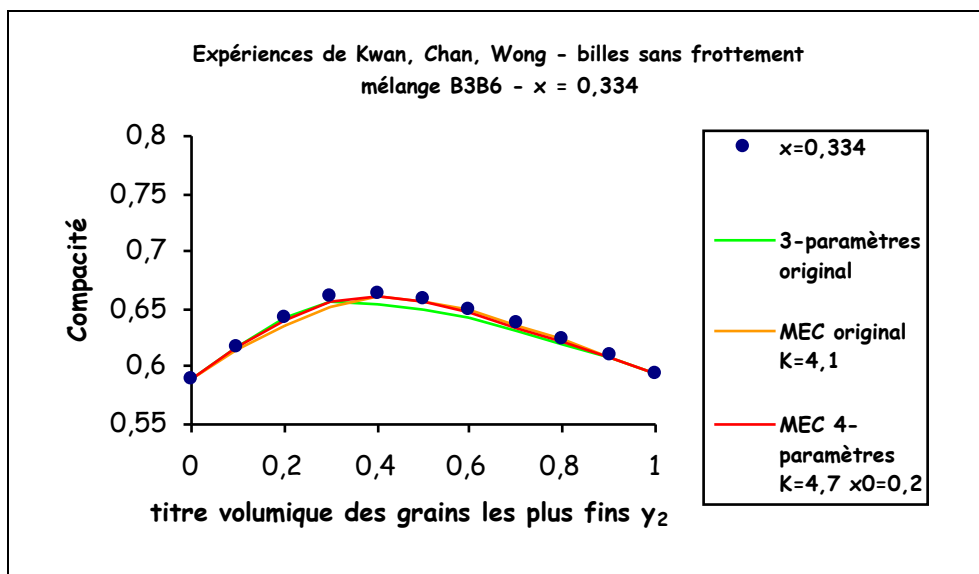
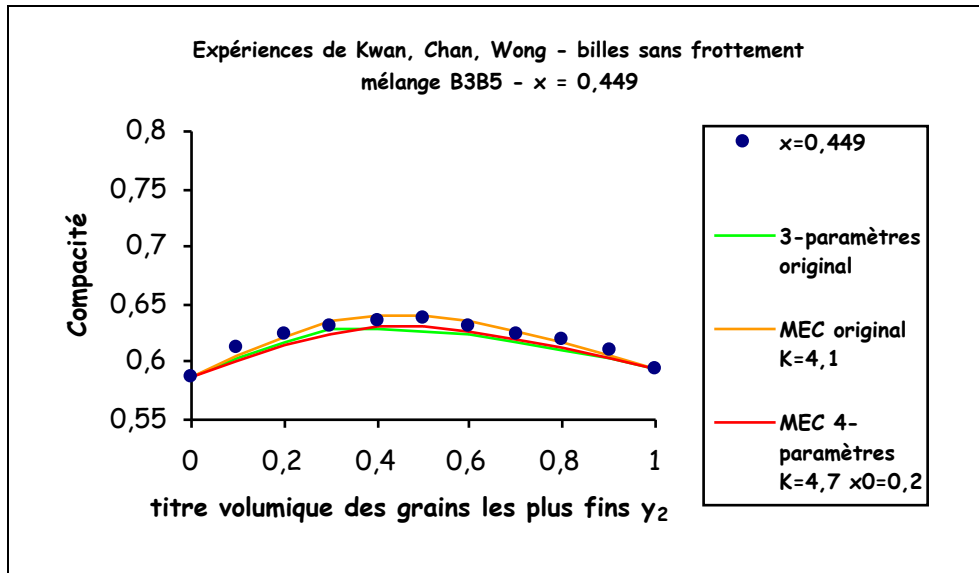
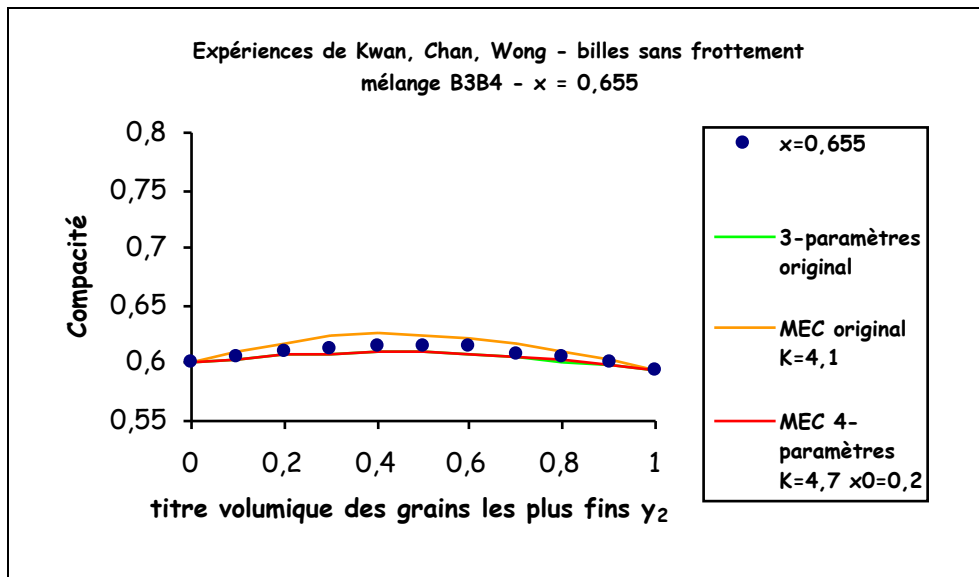
$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 4,1$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = 0,2$ $K = 4,7$ a_{ROAD} b_{ROAD}
B4B5 0,686	0,10	0,586	0,600	0,594	0,590	<u>0,596</u>	0,590
	0,20			0,600	0,594	<u>0,605</u>	0,594
	0,30			0,602	<u>0,598</u>	0,612	0,597
	0,40			0,605	<u>0,601</u>	0,616	0,600
	0,50			0,605	<u>0,603</u>	0,618	0,601
	0,60			0,606	<u>0,603</u>	0,617	0,602
	0,70			0,606	<u>0,603</u>	0,615	<u>0,603</u>
	0,80			0,603	<u>0,603</u>	0,611	0,602
	0,90			0,601	<u>0,601</u>	0,606	<u>0,601</u>
B4B6 0,510	0,10	0,590	0,600	0,605	0,602	<u>0,607</u>	0,600
	0,20			0,617	<u>0,613</u>	<u>0,621</u>	0,609
	0,30			0,621	<u>0,621</u>	0,632	0,616
	0,40			0,625	<u>0,624</u>	0,638	0,620
	0,50			0,621	0,623	0,638	<u>0,621</u>
	0,60			0,619	<u>0,620</u>	0,634	<u>0,620</u>
	0,70			0,615	<u>0,616</u>	0,627	0,617
	0,80			0,611	<u>0,611</u>	0,619	0,612
	0,90			0,607	<u>0,606</u>	0,610	<u>0,606</u>
B5B6 0,744	0,10	0,590	0,586	0,590	<u>0,591</u>	0,597	0,593
	0,20			0,590	<u>0,592</u>	0,602	0,595
	0,30			0,592	<u>0,593</u>	0,606	0,596
	0,40			0,593	<u>0,593</u>	0,608	0,597
	0,50			0,596	0,594	0,607	<u>0,596</u>
	0,60			0,592	<u>0,593</u>	0,605	0,596
	0,70			0,592	<u>0,592</u>	0,602	0,594
	0,80			0,591	<u>0,590</u>	0,597	<u>0,592</u>
	0,90			0,588	<u>0,588</u>	0,592	0,589

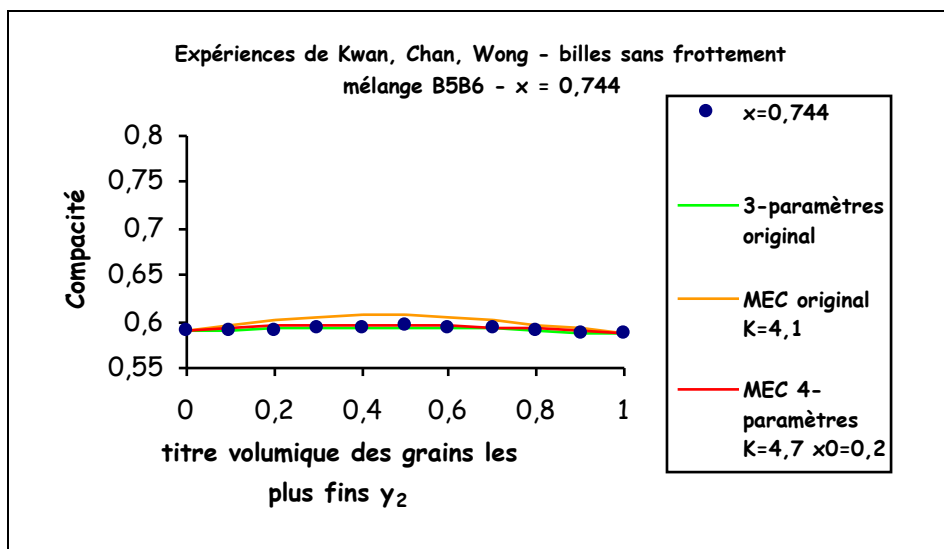
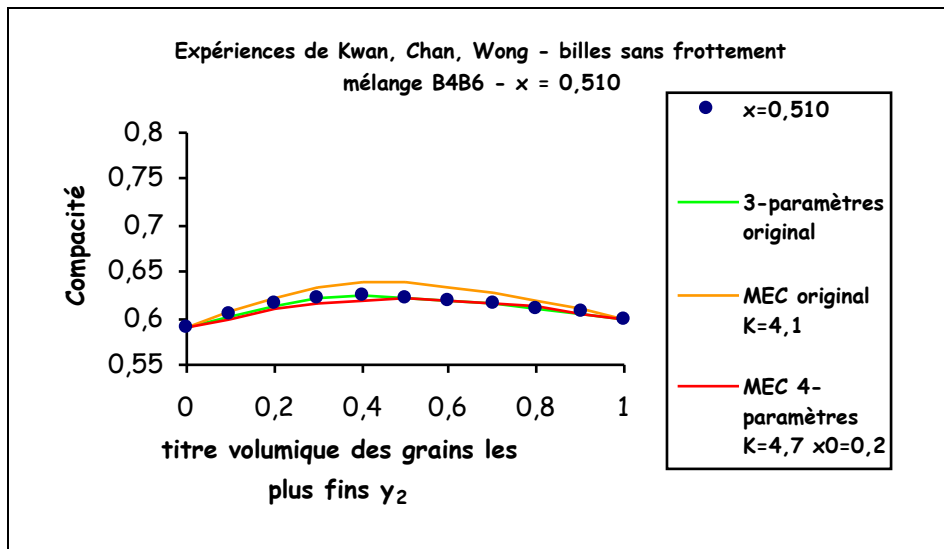
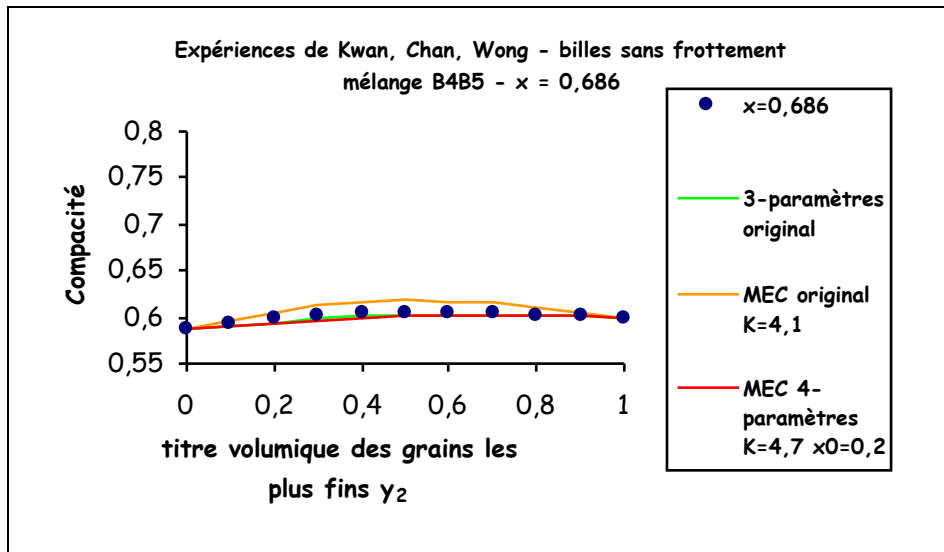
Tableau VII-14 : compacités expérimentales d'après Kwan, Chan, Wong [KWAN13]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=4,1) et avec le MEC 4-paramètres (K=4,7 et $x_0=0,2$).











Figures VII-9 : expériences de Kwan, Chan, Wong. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=4,1$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=4,7$ et $x_0=0,2$).

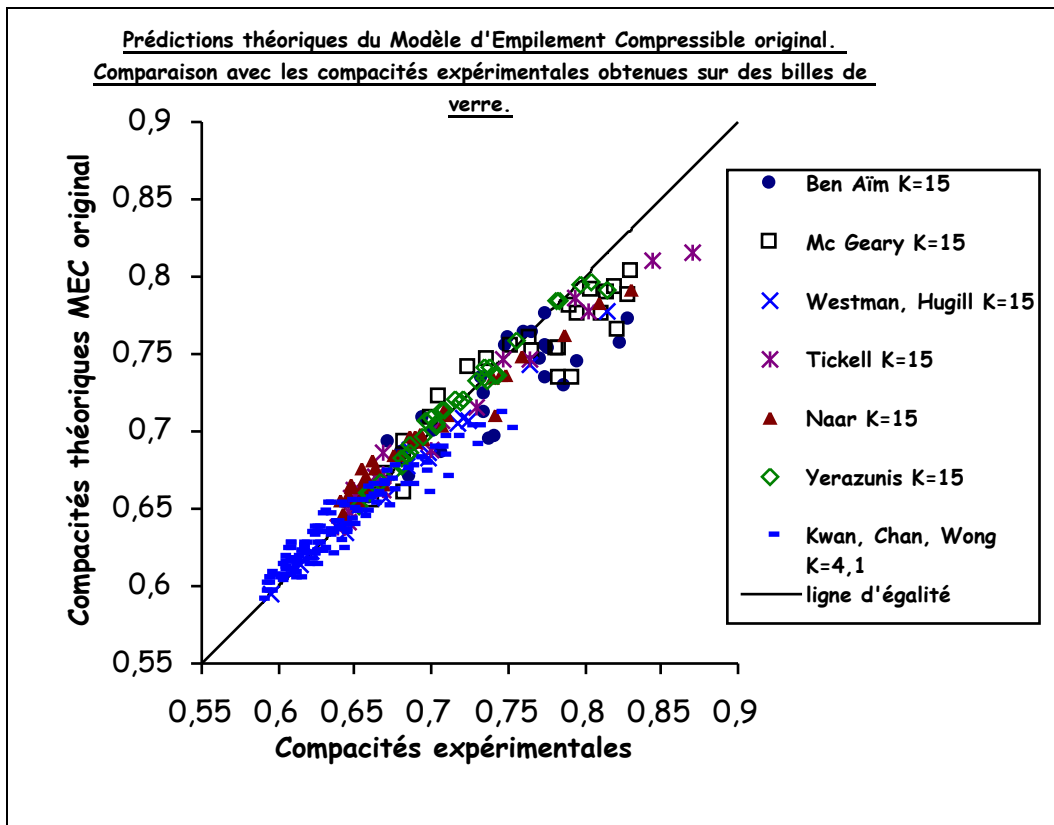


Figure VII-10 : Prédictions théoriques du MEC original versus résultats expérimentaux.

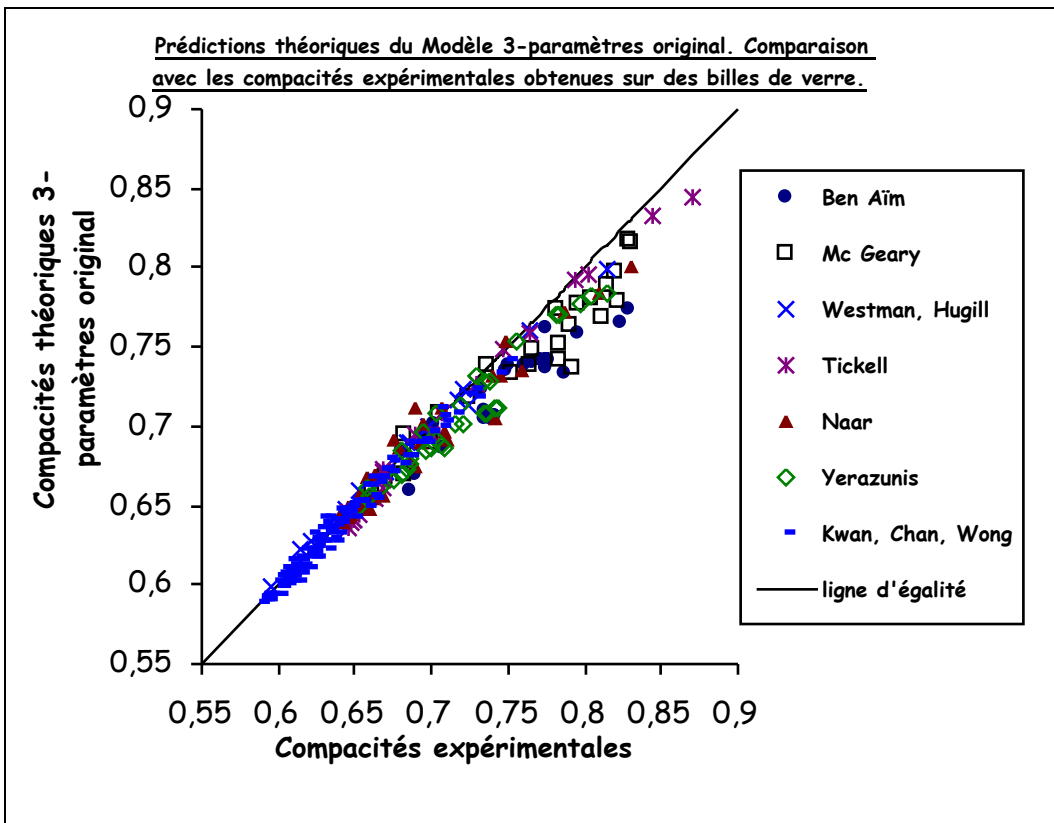


Figure VII-11 : Prédictions théoriques du modèle 3-paramètres original versus résultats expérimentaux.

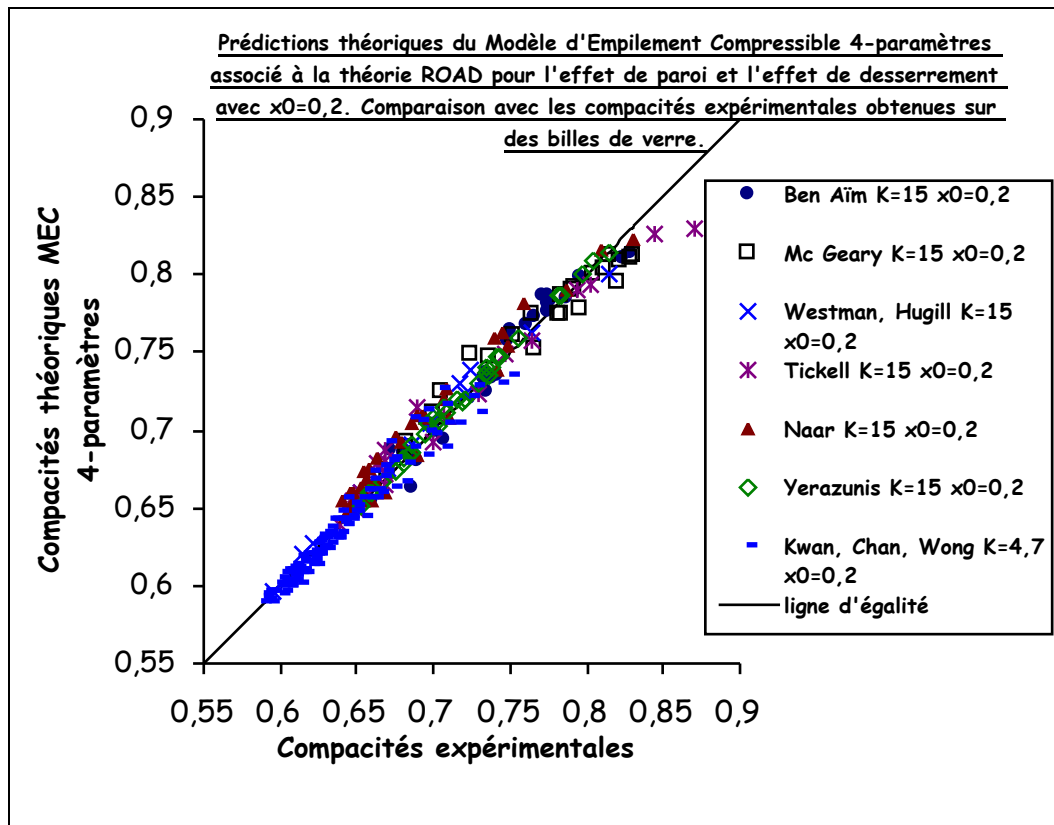


Figure VII-12 : Prédictions théoriques du MEC 4-paramètres versus résultats expérimentaux.

Pour évaluer les trois modèles testés sur les billes de verre, nous allons faire appel à trois indicateurs statistiques :

- la droite de régression: $\phi_{\text{théo}}^* = a^* \phi_{\text{exp}}^* + b^*$;
- l'écart-moyen: $\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\phi_{\text{exp},i}^* - \phi_{\text{théo},i}^*|$;
- le coefficient de corrélation r .

Les indicateurs statistiques sont dans le tableau suivant :

Modèle :		MEC original	3-paramètres original	MEC 4-paramètres
Expériences	Ben Aim	$\phi_{théo}^* = 0,632 \phi_{exp}^* + 0,256$ $\xi = 0,022$ $r = 0,8461$	$\phi_{théo}^* = 0,705 \phi_{exp}^* + 0,195$ $\xi = 0,025$ $r = 0,9517$	$\phi_{théo}^* = 1,009 \phi_{exp}^* - 0,006$ $\xi = 0,008$ $r = 0,9770$
	Mc Geary	$\phi_{théo}^* = 0,718 \phi_{exp}^* + 0,199$ $\xi = 0,022$ $r = 0,9241$	$\phi_{théo}^* = 0,801 \phi_{exp}^* + 0,133$ $\xi = 0,020$ $r = 0,9610$	$\phi_{théo}^* = 0,827 \phi_{exp}^* + 0,131$ $\xi = 0,011$ $r = 0,9824$
	Westman, Hugill	$\phi_{théo}^* = 0,845 \phi_{exp}^* + 0,097$ $\xi = 0,011$ $r = 0,9939$	$\phi_{théo}^* = 0,910 \phi_{exp}^* + 0,062$ $\xi = 0,005$ $r = 0,9967$	$\phi_{théo}^* = 0,953 \phi_{exp}^* + 0,037$ $\xi = 0,007$ $r = 0,9940$
	Tickell et al.	$\phi_{théo}^* = 0,793 \phi_{exp}^* + 0,141$ $\xi = 0,011$ $r = 0,9885$	$\phi_{théo}^* = 0,959 \phi_{exp}^* + 0,024$ $\xi = 0,006$ $r = 0,9955$	$\phi_{théo}^* = 0,857 \phi_{exp}^* + 0,101$ $\xi = 0,009$ $r = 0,9887$
	Naar et al.	$\phi_{théo}^* = 0,736 \phi_{exp}^* + 0,185$ $\xi = 0,012$ $r = 0,9858$	$\phi_{théo}^* = 0,847 \phi_{exp}^* + 0,101$ $\xi = 0,011$ $r = 0,9717$	$\phi_{théo}^* = 0,977 \phi_{exp}^* + 0,025$ $\xi = 0,011$ $r = 0,9835$
	Yerazunis et al.	$\phi_{théo}^* = 0,937 \phi_{exp}^* + 0,045$ $\xi = 0,004$ $r = 0,9916$	$\phi_{théo}^* = 0,872 \phi_{exp}^* + 0,080$ $\xi = 0,013$ $r = 0,9738$	$\phi_{théo}^* = 1,021 \phi_{exp}^* - 0,013$ $\xi = 0,003$ $r = 0,9977$
	Kwan, Chan, Wong	$\phi_{théo}^* = 0,719 \phi_{exp}^* + 0,180$ $\xi = 0,010$ $r = 0,9558$	$\phi_{théo}^* = 0,968 \phi_{exp}^* + 0,020$ $\xi = 0,004$ $r = 0,9908$	$\phi_{théo}^* = 0,993 \phi_{exp}^* + 0,005$ $\xi = 0,005$ $r = 0,9821$
Bilan global sur environ 300 résultats		$\xi = 0,012$ $r = 0,9754$	$\xi = 0,009$ $r = 0,9863$	$\xi = 0,007$ $r = 0,9904$

Tableau VII-15 : paramètres de régression linéaire, écart moyen ξ et coefficient de corrélation r pour les 3 modèles testés sur des expériences réalisées avec des billes de verre.

Concernant les mesures effectuées sur les billes de verre regroupant environ 300 valeurs, la précision des trois modèles est bonne avec un coefficient de corrélation supérieur à 0,975.

Le MEC original confirme, une fois de plus, toutes ses qualités étant donné qu'il n'a pas été conçu pour être appliqué sur des empilements de billes et que ses coefficients d'interaction a et b ont été calibrés sur des granulats roulés et concassés. Il fournit même d'excellents résultats sur les données de Yerazunis *et al.* où ses trois indicateurs statistiques sont très bons.

En revanche et avec les indices de serrage choisis, il pèche par pessimisme dans le domaine des fortes compacités lorsqu'il est comparé aux résultats obtenus par Ben Aim, par Mc Geary, par Tickell *et al.* et par Naar *et al.*. Pour ceux-ci, la pente de la droite de régression est en effet assez nettement inférieure à 1 alors que l'ordonnée à l'origine est assez sensiblement supérieure à 0. Cette dernière indication statistique prouve également que les « faibles compacités » sont plutôt surestimées. On peut effectuer le même genre de conclusion à partir de l'équation de la droite de régression qui concerne les données expérimentales de Kwan, Chan, Wong, même si les compacités en question se situent dans une gamme inférieure étant donné la mise en place du mélange par dépôt en couches successives. En résumé, le MEC original aura tendance à sous-estimer les compacités au voisinage de l'optimum lorsque celles-ci sont particulièrement élevées, comme on peut notamment l'observer sur les figures VII-3, VII-4, VII-6 et VII-7. Mais il n'en demeure pas moins un outil remarquable dans sa conception, tant les résultats fournis sur des billes de verre restent tout à fait satisfaisants pour un matériau situé en-dehors de son champ de prédilection.

Le modèle 3-paramètres original de Kwan, Chan et Wong permet d'affiner globalement les prévisions avec un coefficient de corrélation de 0,9863. Cela s'explique notamment par le fait que les trois coefficients d'interaction a , b et c qu'il prend en compte ont été ajustés à partir de leurs expériences qui concernent pratiquement la moitié des 300 données retenues. Il est également performant sur les expériences de Westman et Hugill et sur celles de Tickell *et al.*. En revanche, il a lui aussi tendance à sous-estimer les plus fortes compacités comme on peut le constater sur la figure VII-11 pour les expériences de Ben Aim, de Mc Geary et, à un degré moindre, de Naar *et al.* et de Yerazunis *et al.*. Pour celles-ci, il est possible que « l'effet de coïncement » (« wedging effect ») soit surestimé pour les rapports de tailles situés aux alentours de $x = 0,1$, $x = 0,2$, lorsque le serrage du mélange constitué de billes de verre est optimal et que les fines particules sont susceptibles de se glisser dans les cavernes disponibles entre les grosses.

Le MEC 4-paramètres, enfin, est le plus homogène des trois. Grâce à la prise en compte de deux indices de serrage K adaptés aux modes de remplissage et de compaction choisis, grâce à l'adoption d'un rapport de tailles de cavernes unique fixé à $x_0 = 0,2$ conformément à la théorie sur les cavernes tétraédriques, le taux de corrélation et l'écart moyen obtenus sont excellents : $r = 0,9904$, $\xi = 0,007$.

Les indications statistiques fournies par les équations des droites de régression sont également très satisfaisantes concernant les données de Ben Aïm, de Westman et Hugill, de Naar *et al.*, de Yerazunis *et al.* et de Kwan, Chan, Wong. En effet, les pentes sont très proches de 1 et les ordonnées à l'origine pratiquement nulles ce qui signifie que le modèle fournit des prévisions homogènes, aussi bien du côté des faibles compacités que des plus fortes. Seules les caractéristiques des droites de régression liées aux expériences de Mc Geary et de Tickell *et al.* sont légèrement moins favorables mais le coefficient de corrélation reste, dans les deux cas, supérieur à 0,98.

Enfin, le MEC 4-paramètres s'avère excellent dans la prédiction des compacités à l'optimum de chaque mélange comme le montre la figure VII-13. C'est particulièrement vrai dans le domaine des très fortes compacités où les rapports de tailles sont faibles et où un raisonnement « à l'eutectique » s'avère fructueux. Cela pourrait ouvrir de nouvelles perspectives d'application dans d'autres domaines que celui du génie civil.

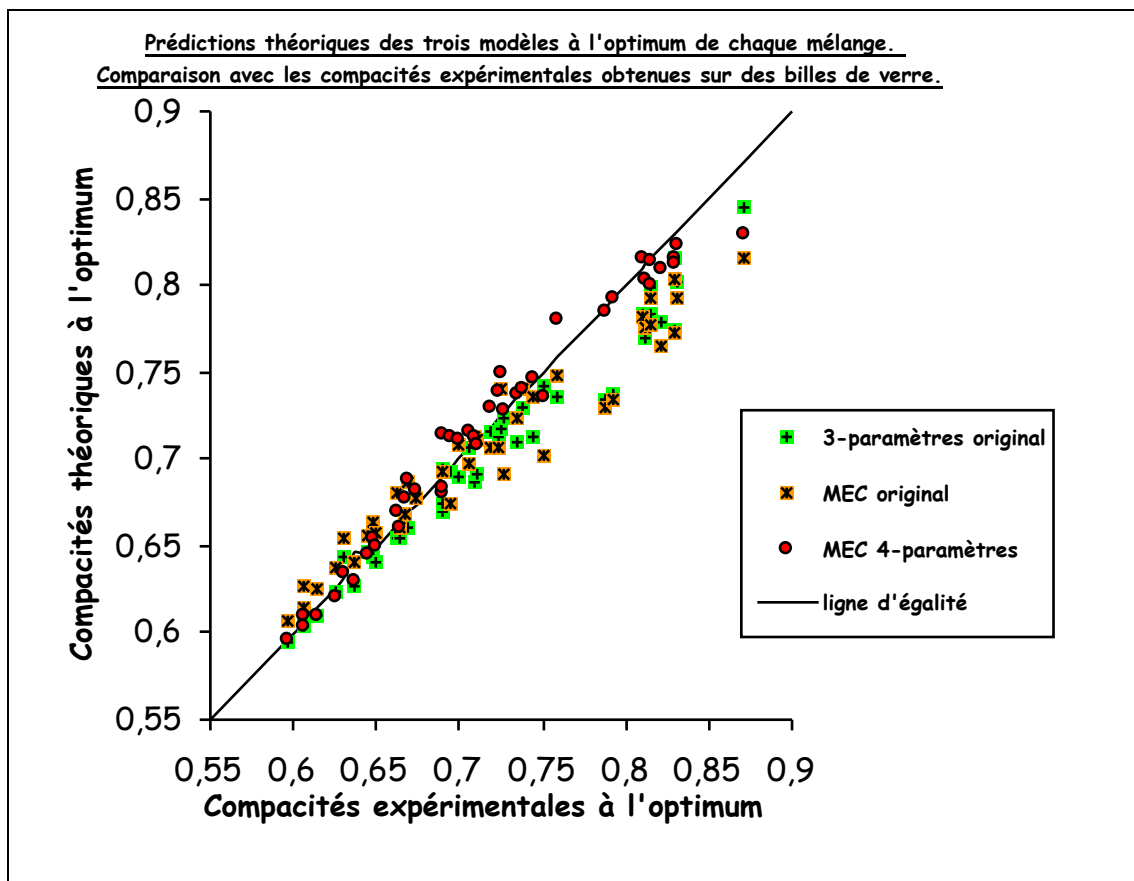
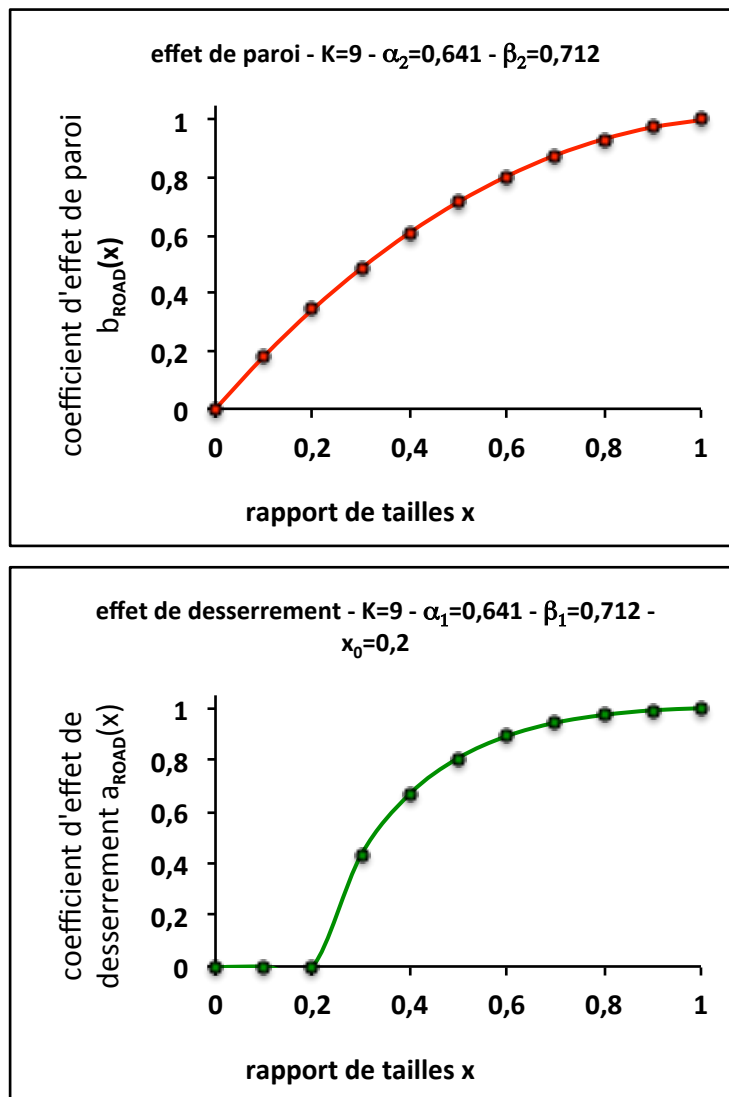


Figure VII-13 : Prédictions théoriques des trois modèles testés à l'optimum de chaque mélange constitué de billes de verre versus résultats expérimentaux.

7.2. VALIDATION AVEC LES RÉSULTATS ISSUS DE LA SIMULATION NUMÉRIQUE LS+DM.

Les résultats que nous avons obtenus par simulation numérique dans le chapitre 6 par la méthode LS+DM pour deux rapports de tailles $x = 0,2$ et $x = 0,4$ vont maintenant être exploités pour comparer les prévisions du MEC original, du modèle 3-paramètres original et du MEC 4-paramètres.

Nous avons retenu comme indice de serrage $K = 9$ correspondant à « vibration + pression », sans que l'étape de remplissage de la boîte de simulation n'ait été optimisée numériquement. Nous avons également conservé $x_0 = 0,2$ en référence aux cavernes tétraédriques. Pour une compacité propre réelle $\alpha = 0,641$, voici les courbes représentatives du coefficient d'effet de paroi et du coefficient d'effet de desserrement obtenues :

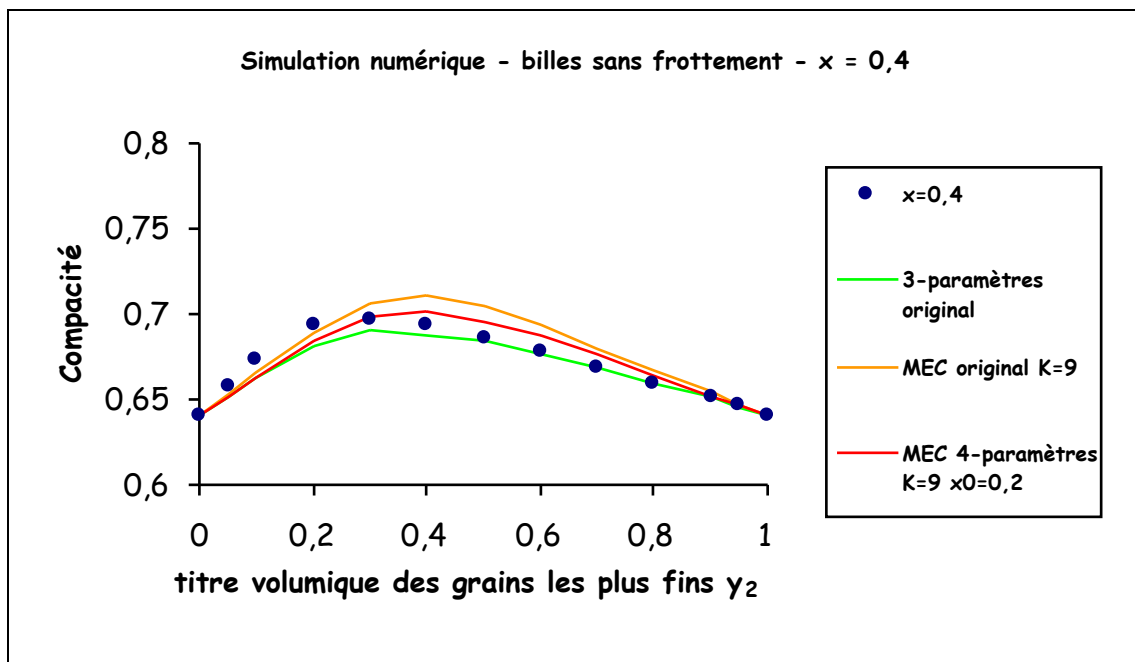
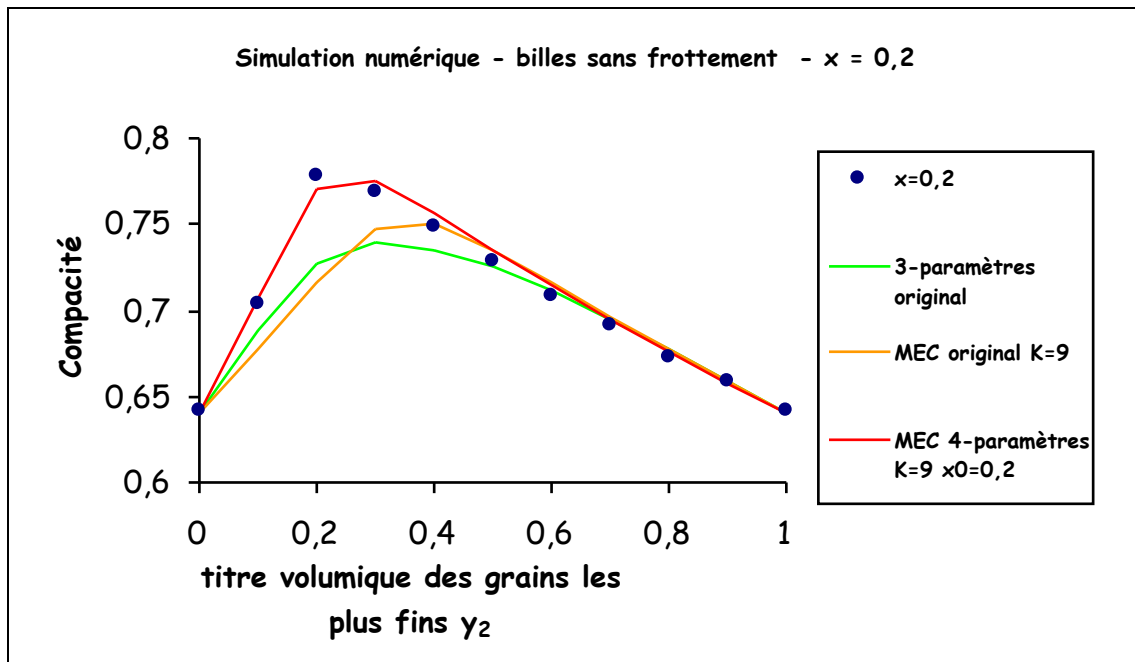


Figures VII-14 : coefficients d'effet de paroi et de desserrement pour une compacité propre réelle $\alpha = 0,641$, un indice de serrage $K=9$ et $x_0=0,2$.

Le modèle 3-paramètres retenu pour cette évaluation est l'original [KWAN13] car il s'agit de particules sphériques pour lesquelles il a été spécialement conçu.

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				Simulation numérique	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original K = 9 a_{L00} b_{L00}	4-paramètres $x_0 = 0,2$ K = 9 a_{ROAD} b_{ROAD}
0,2	0,1	0,641	0,641	0,704	0,688	0,678	<u>0,707</u>
	0,2			0,778	0,727	0,717	<u>0,770</u>
	0,3			0,769	0,740	0,747	<u>0,775</u>
	0,4			0,748	0,735	<u>0,750</u>	0,756
	0,5			0,729	<u>0,725</u>	0,735	0,735
	0,6			0,709	<u>0,711</u>	0,716	0,715
	0,7			0,691	<u>0,695</u>	0,696	<u>0,695</u>
	0,8			0,673	0,677	0,677	<u>0,676</u>
	0,9			0,659	<u>0,659</u>	<u>0,659</u>	0,658
0,4	0,05	0,641	0,641	0,657	0,652	<u>0,653</u>	0,652
	0,1			0,674	0,663	<u>0,666</u>	0,663
	0,2			0,693	0,682	<u>0,689</u>	0,684
	0,3			0,697	0,690	0,707	<u>0,699</u>
	0,4			0,693	<u>0,688</u>	0,711	0,702
	0,5			0,687	<u>0,684</u>	0,704	0,696
	0,6			0,679	<u>0,677</u>	0,693	0,687
	0,7			0,669	<u>0,669</u>	0,680	0,676
	0,8			0,660	<u>0,660</u>	0,667	0,664
	0,9			0,651	<u>0,651</u>	0,654	0,652
	0,95			0,646	<u>0,646</u>	0,647	0,647

Tableau VII-16 : compacités obtenues dans cette thèse par simulation numérique LS+DM sur des billes sans frottement. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,2$). Les résultats soulignés correspondent à la compacité théorique la plus proche de la compacité obtenue par simulation numérique.



Figures VII-15 : résultats de simulation numérique sur des billes sans frottement par Roux et Roquier. Mélanges binaires de rapports de tailles $x=0,2$ et $x=0,4$. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=9$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=9$ et $x_0=0,2$).

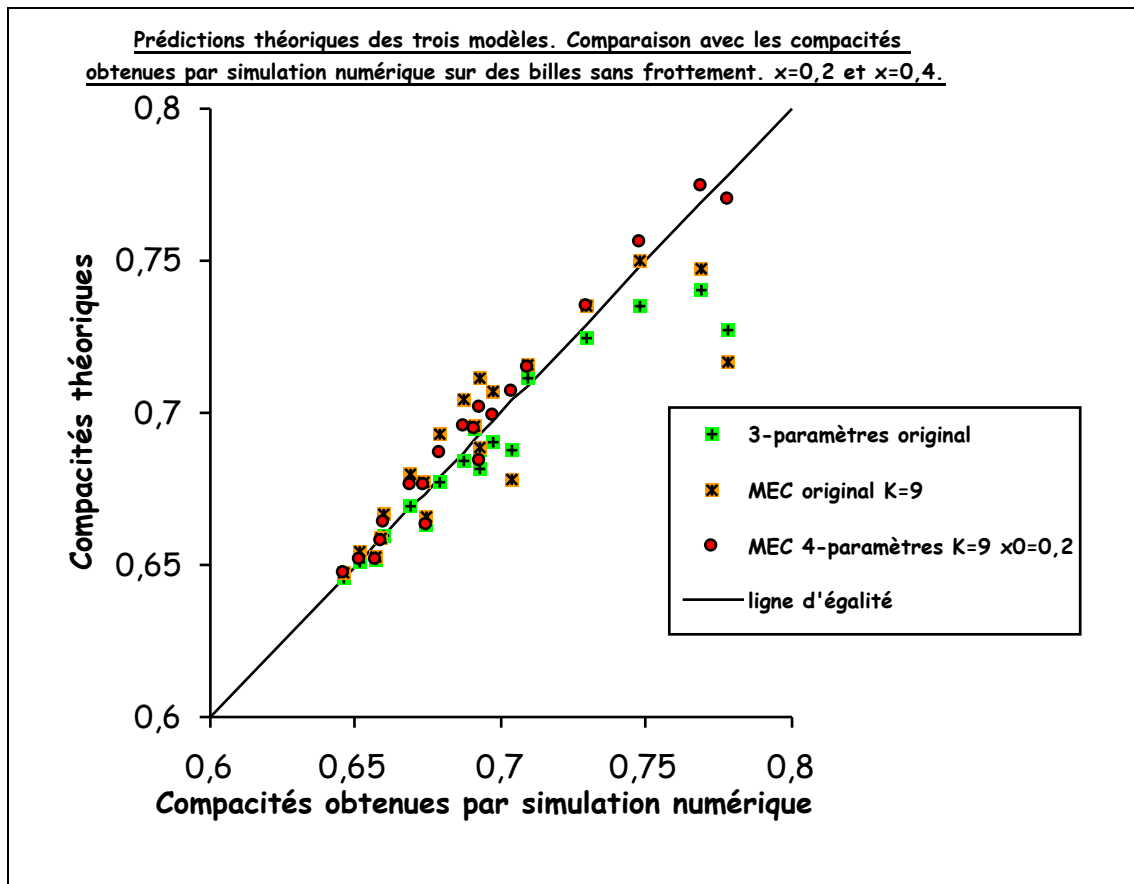


Figure VII-16 : Prédictions théoriques des trois modèles testés versus résultats obtenus par simulation numérique sur des billes sans frottement.

Les indicateurs statistiques sont dans le tableau suivant :

Modèle	MEC original	3-paramètres original	MEC 4-paramètres
Simulation numérique. Billes sans frottement. 20 résultats.	$\phi_{théo}^* = 0,723 \phi_{exp}^* + 0,191$ $\xi = 0,012$ $r = 0,8783$	$\phi_{théo}^* = 0,732 \phi_{exp}^* + 0,178$ $\xi = 0,008$ $r = 0,9598$	$\phi_{théo}^* = 1,013 \phi_{exp}^* - 0,007$ $\xi = 0,006$ $r = 0,9877$

Tableau VII-17 : paramètres de régression linéaire, écart moyen ξ et coefficient de corrélation r pour les 3 modèles testés sur des résultats obtenus par simulation numérique LS+DM sur des billes sans frottement.

Pour les deux rapports de tailles testés par simulation numérique ($x = 0,2$ et $x = 0,4$) sur des billes sans frottement, le MEC 4-paramètres fournit les prévisions les plus précises, comme le montrent les figures VII-15, particulièrement au voisinage de l'optimum. Les indicateurs statistiques recensés dans le tableau VII-17 viennent d'ailleurs confirmer ses excellentes prédispositions.

Ainsi, l'équation de la droite de régression linéaire ($\phi_{\text{théo}}^* = 1,013 \phi_{\text{exp}}^* - 0,007$) confirme qu'il est performant sur l'ensemble du spectre de compacités obtenues pour les deux rapports de tailles ayant fait l'objet de l'étude et son coefficient de corrélation demeure très élevé ($r = 0,9877$).

Le MEC original, quant à lui, a tendance à sous-estimer les compacités pour $x = 0,2$ et à les surestimer pour $x = 0,4$. Dans le premier cas, on observe que son coefficient d'effet de desserrement est trop élevé ce qui a pour conséquence de surévaluer le titre volumique des fines particules à l'optimum et de déprécier la compacité correspondante. En revanche, son coefficient d'effet de paroi est plutôt bien adapté. Dans le deuxième cas, ce dernier aurait plutôt tendance à être légèrement sous-estimé.

Le modèle 3-paramètres original, enfin, surestime à la fois l'effet de desserrement et très nettement « l'effet de coïncement » pour $x = 0,2$, ce qui le conduit à fournir une valeur de compacité à l'optimum très inférieure à celle fournie par la simulation numérique. Pour $x = 0,4$, ses prévisions sont légèrement pessimistes, en particulier du côté des « gros dominants ». En revanche, et pour les deux rapports de tailles testés, les résultats qu'il fournit du côté des « fins dominants » sont particulièrement fiables. Comme le nombre de mesures recensées dans cette zone ($y_2 \geq 0,50$) représente la moitié des valeurs, le coefficient de corrélation $r = 0,9598$ et l'écart moyen $\xi = 0,008$ obtenus restent satisfaisants.

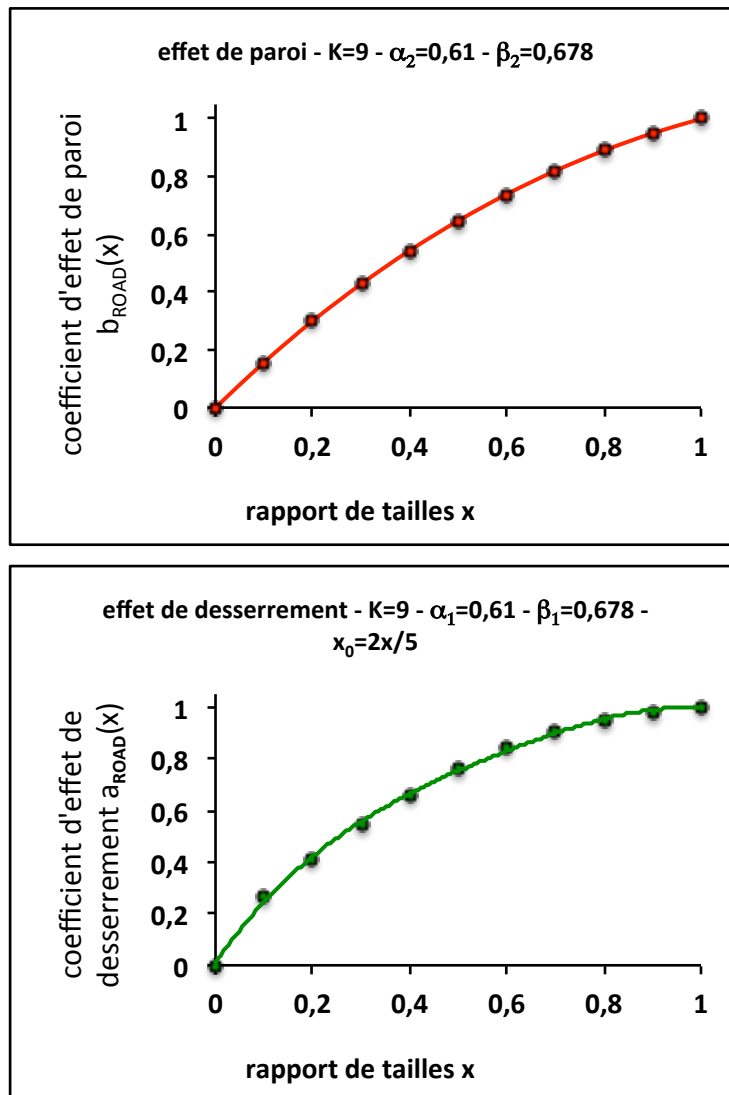
7.3. VALIDATION AVEC LES DONNÉES CONCERNANT DES GRAINS ROULÉS ARRONDIS : EXPÉRIENCES DE DE LARRARD, SEDRAN, ANGOT (1994) ET DE JOISEL (1952).

Nous allons exploiter, dans cette partie consacrée aux granulats roulés, deux sources de référence citées dans de nombreuses publications et qui vont représenter environ 125 données :

- celles de de Larrard, Sedran, Angot (1994) que nous avons déjà utilisées dans le chapitre consacré à l'ajustement des fonctions d'interaction à différents types de matériaux. Il s'agit d'un granulat roulé de la Loire (carrière Decize) aux formes plutôt arrondies ;
- celles de Joisel (1952) qui lui ont permis de mettre au point une méthode de composition de bétons. Il s'agit d'un granulat roulé de la Seine.

Concernant la première source, nous avons déjà présenté, chapitre 5, le matériau et le protocole opératoire choisis. S'agissant d'une mise en place « vibration + pression », nous avons naturellement opté pour l'indice de serrage $K = 9$. Par ailleurs, toujours dans le même chapitre, nous avons montré que, pour un granulat roulé, la « dimension » des cavernes dans la structure des gros grains pouvait être estimée en fonction du rapport de tailles x grâce à la relation linéaire très simple : $x_0 = \frac{2}{5} x$.

Pour une compacité propre moyenne $\alpha = 0,610$ mesurée sur les classes élémentaires du granulat roulé de la Loire, voici un exemple de représentation des courbes du coefficient d'effet de paroi b et du coefficient d'effet de desserrement a correspondantes. En réalité, il va de soi qu'à chaque nouveau mélange constitué de deux classes élémentaires, les compacités propres de la « fine » et de la « grosse » permettent d'aboutir respectivement à un coefficient b et à un coefficient a spécifiques.



Figures VII-17 : exemples de coefficients d'effet de paroi et de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des données issues des expériences de de Larrard, Sedran, Angot sur un granulat roulé de la Loire ($\alpha=0,61$, $K=9$ et $x_0=2x/5$).

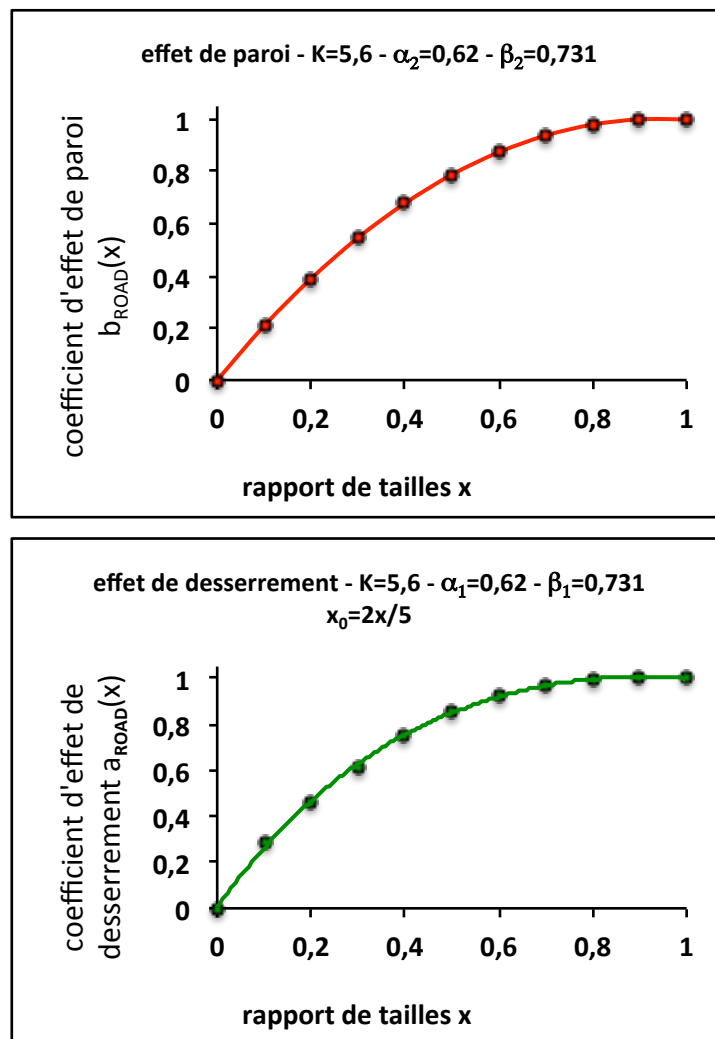
Concernant la deuxième source, Joisel s'est inspiré des travaux de Caquot pour tenter de répondre, expérimentalement, au problème de la granulométrie optimale [DELA88], [SEDR94] des bétons hydrauliques. Il a sélectionné six classes a-b-c-d-e-f d'un granulat roulé de la Seine pour obtenir, au final, 165 valeurs expérimentales. Les compacités étaient mesurées dans un récipient cubique de 14 cm de côté, vibré énergiquement.

La méthodologie suivie par Joisel a consisté à passer en revue certains mélanges binaires élémentaires « x-y » pour en déduire le mélange binaire optimal « xy ». Il a ensuite généré une deuxième série de mélanges binaires « xy-zt » pour parvenir à un optimum local « xy,zt ».

Il a répété cette opération une troisième fois afin d'aboutir à une supposée granularité se rapprochant de l'optimale : 1^{ère} composition de référence. La démarche a ensuite été reconduite deux fois dans sa globalité à partir de nouvelles combinaisons de classes élémentaires. Enfin, les trois compositions de référence ont, d'après son auteur qui en a fait la moyenne arithmétique, permis d'obtenir la composition optimale. Pour notre part, nous utiliserons les résultats concernant les mélanges binaires élémentaires.

Pour simuler ces expériences, on s'est fixé un indice de serrage K compris entre la valeur retenue pour un simple déversement ($K = 4,7$) et celle correspondant à « vibration + pression » ($K = 9$), Joisel s'étant « limité » à une vibration énergétique. Une valeur $K = 5,6$ s'est avérée adaptée.

Voici un exemple de représentation des courbes des coefficients b et a retenues pour les simulations sur les expériences de Joisel.



Figures VII-18 : exemples de coefficients d'effet de paroi et de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des résultats de Joisel ($\alpha=0,62$, $K=5,6$ et $x_0=2x/5$).

Le modèle 3-paramètres retenu pour cette évaluation est l'original [KWAN13] car les grains roulés arrondis ont une forme se rapprochant de celle des particules sphériques pour lesquelles il a été spécialement conçu.

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 9$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = \frac{2x}{5}$ $K = 9$ a_{ROAD} b_{ROAD}
R8R05 0,0625	0,05	0,628	0,592	0,657	<u>0,658</u>	<u>0,656</u>	0,653
	0,1			0,6865	<u>0,690</u>	0,681	0,680
	0,15			0,710	0,722	0,707	<u>0,708</u>
	0,2			0,729	0,751	<u>0,733</u>	0,736
	0,25			0,754	0,774	<u>0,756</u>	0,760
	0,3			0,758	0,773	<u>0,768</u>	0,771
	0,4			0,753	0,750	<u>0,754</u>	0,755
	0,5			0,7385	0,724	<u>0,725</u>	<u>0,725</u>
	0,6			0,7165	<u>0,697</u>	0,696	0,695
	0,7			0,680	<u>0,669</u>	0,668	0,666
	0,8			0,652	<u>0,642</u>	0,641	0,640
0,9	0,6195	0,616	<u>0,617</u>	0,615			
R8R1 0,125	0,05	0,628	0,609	0,6545	<u>0,655</u>	0,652	0,650
	0,1			0,6795	<u>0,683</u>	0,674	0,674
	0,15			0,707	<u>0,709</u>	0,696	0,698
	0,2			0,724	0,731	0,719	<u>0,722</u>
	0,25			0,742	0,746	0,739	<u>0,743</u>
	0,3			0,748	<u>0,747</u>	0,753	0,755
	0,4			0,7285	<u>0,736</u>	0,749	0,747
	0,5			0,7095	<u>0,719</u>	0,727	0,724
	0,6			0,6965	<u>0,699</u>	0,703	<u>0,699</u>
	0,7			0,677	<u>0,677</u>	0,678	0,675
	0,8			0,6585	0,654	<u>0,655</u>	0,651
0,9	0,635	0,631	<u>0,633</u>	0,630			

Tableau VII-18 : compacités expérimentales obtenues sur des grains roulés arrondis de la Loire d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0 = 2x/5$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 9$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = \frac{2x}{5}$ $K = 9$ a_{ROAD} b_{ROAD}
R4R05 0,125	0,05	0,6195	0,592	0,645	0,646	0,649	0,641
	0,1			0,6715	0,674	0,670	0,664
	0,15			0,689	0,699	0,692	0,688
	0,2			0,706	0,721	0,713	0,712
	0,25			0,7265	0,735	0,732	0,734
	0,3			0,7485	0,736	0,744	0,746
	0,4			0,736	0,723	0,738	0,738
	0,5			0,725	0,706	0,713	0,713
	0,6			0,7	0,685	0,687	0,686
	0,7			0,6745	0,662	0,662	0,660
	0,8			0,648	0,638	0,638	0,636
	0,9			0,614	0,614	0,615	0,613
R8R2 0,25	0,05	0,628	0,616	0,653	0,648	0,648	0,645
	0,1			0,682	0,667	0,664	0,662
	0,15			0,697	0,685	0,681	0,679
	0,2			0,714	0,699	0,697	0,696
	0,25			0,7235	0,708	0,712	0,710
	0,3			0,728	0,710	0,723	0,720
	0,4			0,723	0,704	0,725	0,720
	0,5			0,705	0,694	0,711	0,706
	0,6			0,689	0,681	0,692	0,687
	0,7			0,671	0,666	0,673	0,669
	0,8			0,646	0,649	0,655	0,650
	0,9			0,632	0,633	0,636	0,633

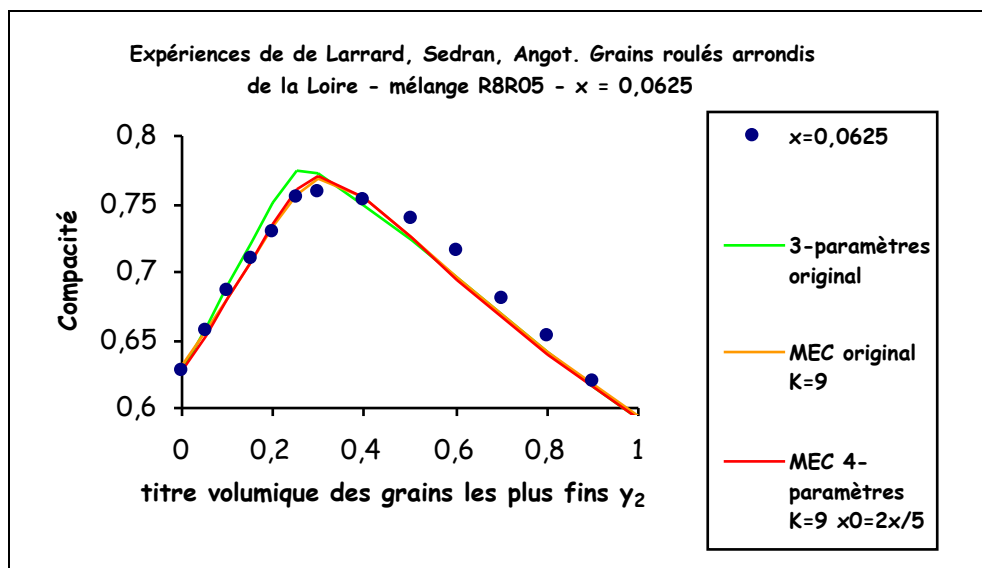
Tableau VII-19 : compacités expérimentales obtenues sur des grains roulés arrondis de la Loire d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0 = 2x/5$).

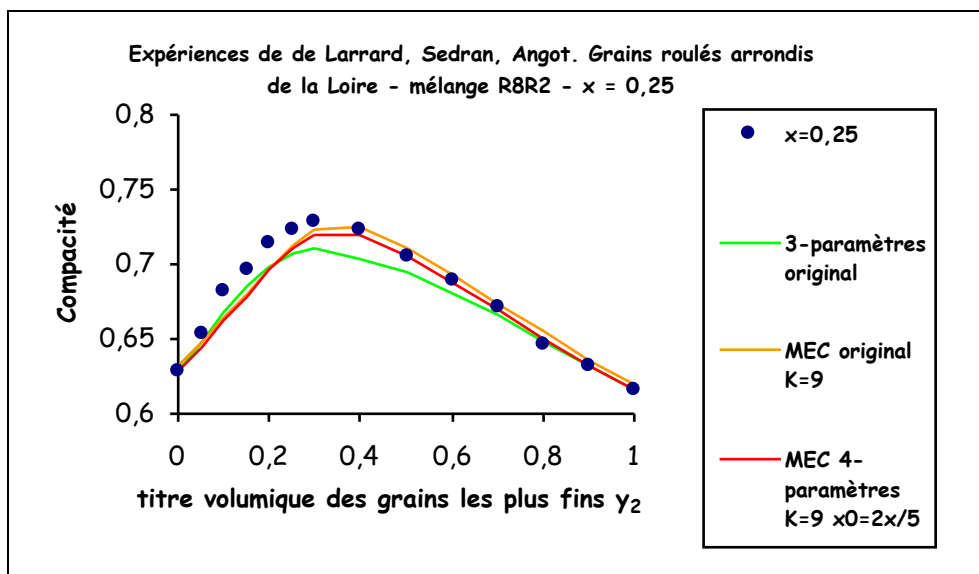
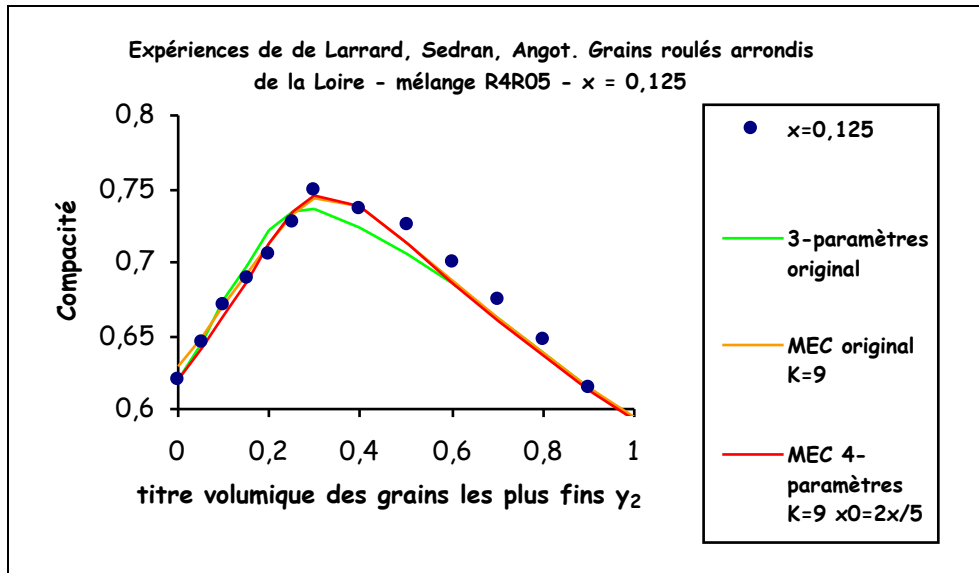
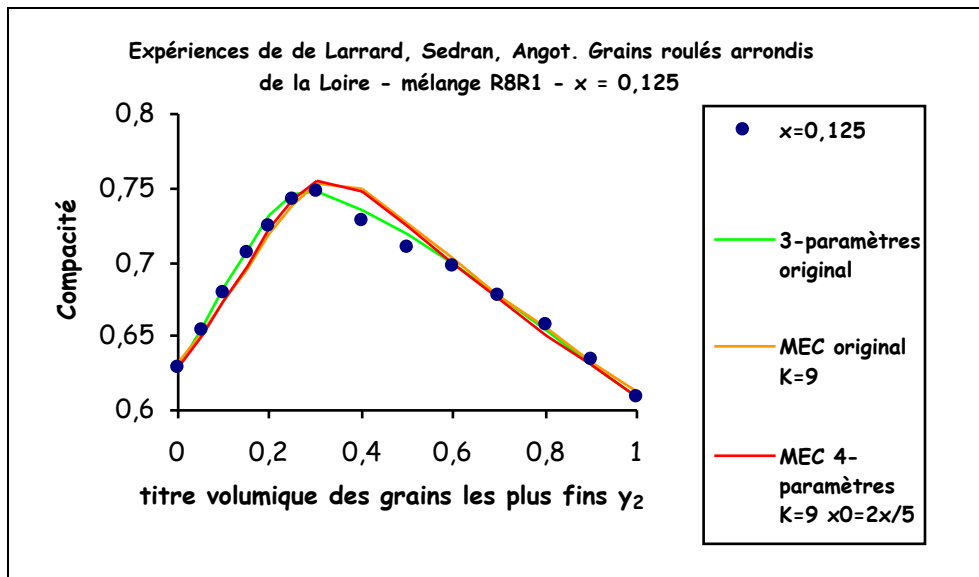
$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 9$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = \frac{2x}{5}$ $K = 9$ a_{ROAD} b_{ROAD}
R2R05 0,25	0,05	0,616	0,592	0,635	<u>0,635</u>	<u>0,635</u>	0,633
	0,1			0,663	<u>0,654</u>	0,651	0,650
	0,15			0,678	<u>0,671</u>	0,666	0,667
	0,2			0,692	<u>0,685</u>	0,682	0,684
	0,25			0,708	0,693	0,696	<u>0,699</u>
	0,3			0,718	0,694	0,706	<u>0,710</u>
	0,4			0,708	0,687	0,706	<u>0,709</u>
	0,5			0,693	0,675	0,691	<u>0,692</u>
	0,6			0,670	0,661	<u>0,671</u>	<u>0,671</u>
	0,7			0,656	0,645	<u>0,650</u>	<u>0,650</u>
	0,8			0,633	0,627	<u>0,630</u>	<u>0,630</u>
	0,9			0,613	0,609	<u>0,612</u>	0,610
R8R4 0,5	0,05	0,628	0,6195	0,6375	0,634	0,641	<u>0,635</u>
	0,1			0,643	0,640	0,651	<u>0,643</u>
	0,15			0,654	0,646	0,660	<u>0,650</u>
	0,2			0,660	0,651	0,669	<u>0,656</u>
	0,25			0,663	0,654	0,676	<u>0,662</u>
	0,3			0,6595	<u>0,656</u>	0,681	0,667
	0,4			0,6565	<u>0,655</u>	0,685	0,671
	0,5			0,6535	<u>0,652</u>	0,680	0,668
	0,6			0,649	<u>0,647</u>	0,672	0,660
	0,7			0,6445	<u>0,641</u>	0,661	0,651
	0,8			0,638	0,634	0,650	<u>0,641</u>
	0,9			0,629	0,627	0,639	<u>0,630</u>

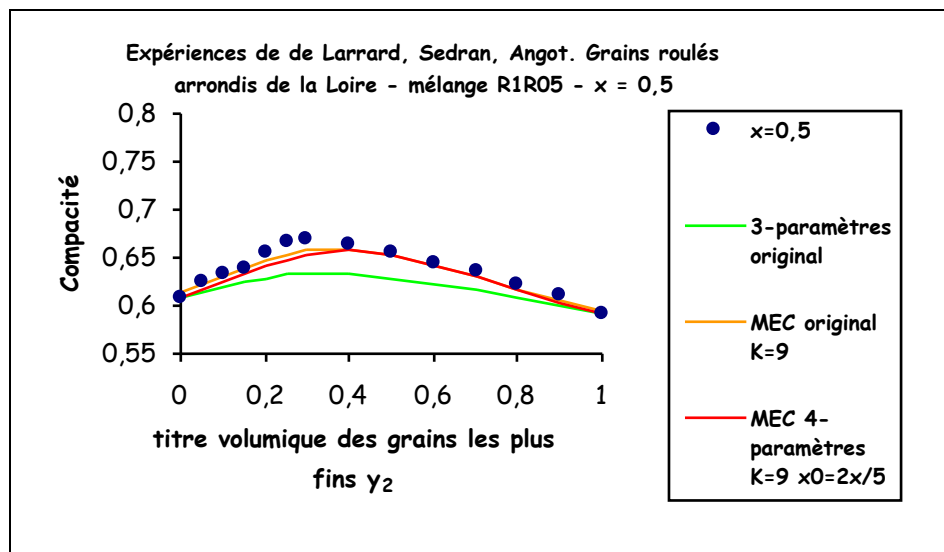
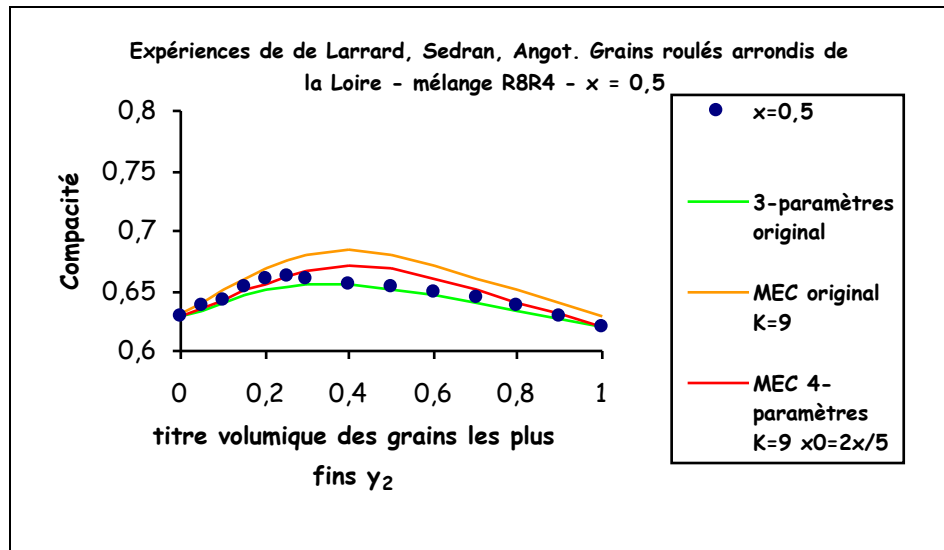
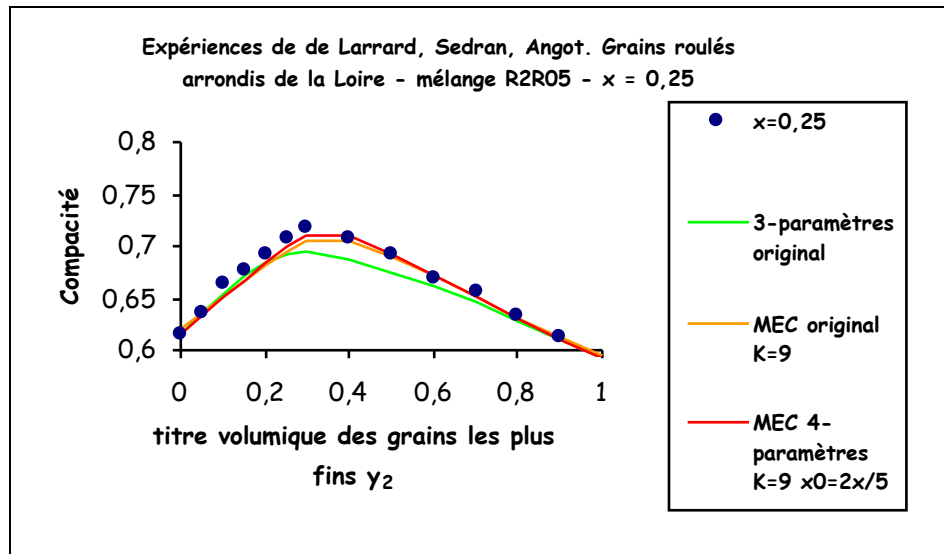
Tableau VII-20 : compacités expérimentales obtenues sur des grains roulés arrondis de la Loire d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=2x/5$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 9$ a_{L00} b_{L00}	$x_0 = \frac{2x}{5}$ $K = 9$ a_{ROAD} b_{ROAD}
R1R05 0,5	0,05	0,609	0,592	0,624	0,615	<u>0,621</u>	0,617
0,1	0,633			0,620	<u>0,630</u>	0,625	
0,15	0,640			0,625	<u>0,638</u>	0,633	
0,2	0,656			0,629	<u>0,646</u>	0,641	
0,25	0,666			0,633	<u>0,652</u>	0,647	
0,3	0,6705			0,634	<u>0,658</u>	0,652	
0,4	0,6635			0,633	<u>0,659</u>	0,657	
0,5	0,6545			0,628	<u>0,652</u>	<u>0,652</u>	
0,6	0,644			0,623	<u>0,642</u>	<u>0,642</u>	
0,7	0,636			0,616	<u>0,630</u>	<u>0,630</u>	
0,8	0,6215			0,608	<u>0,618</u>	0,617	
0,9	0,610			0,600	<u>0,606</u>	0,604	

Tableau VII-21 : compacités expérimentales obtenues sur des grains roulés arrondis de la Loire d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=2x/5$).







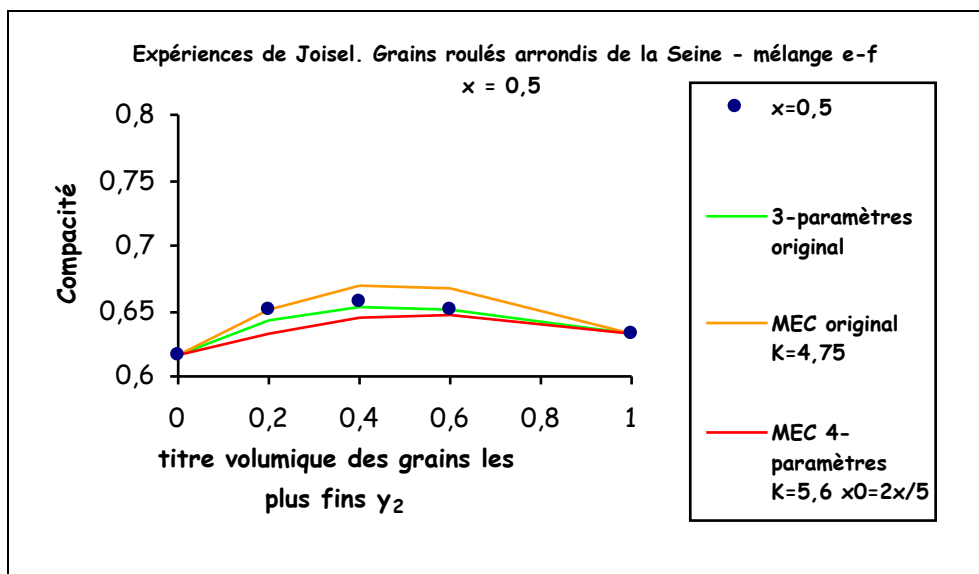
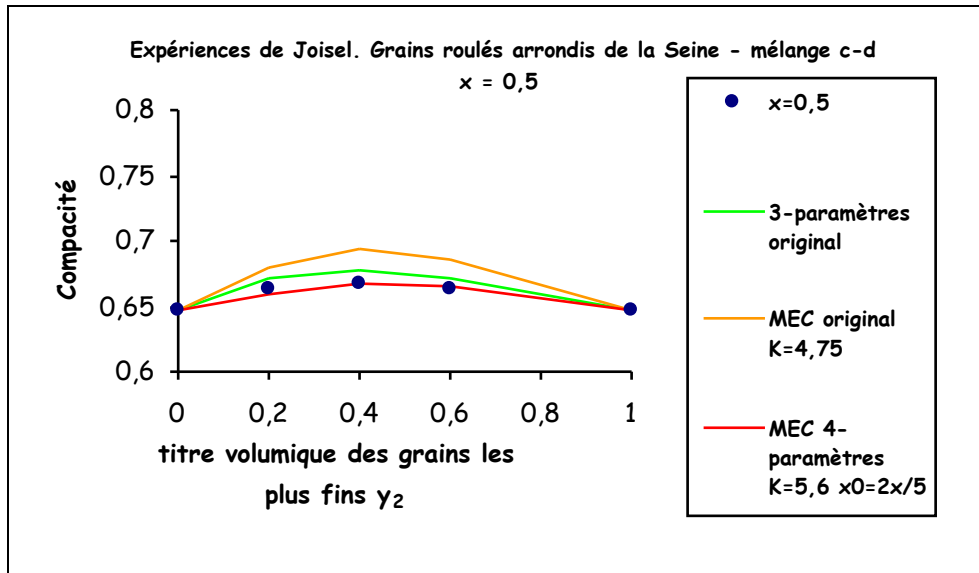
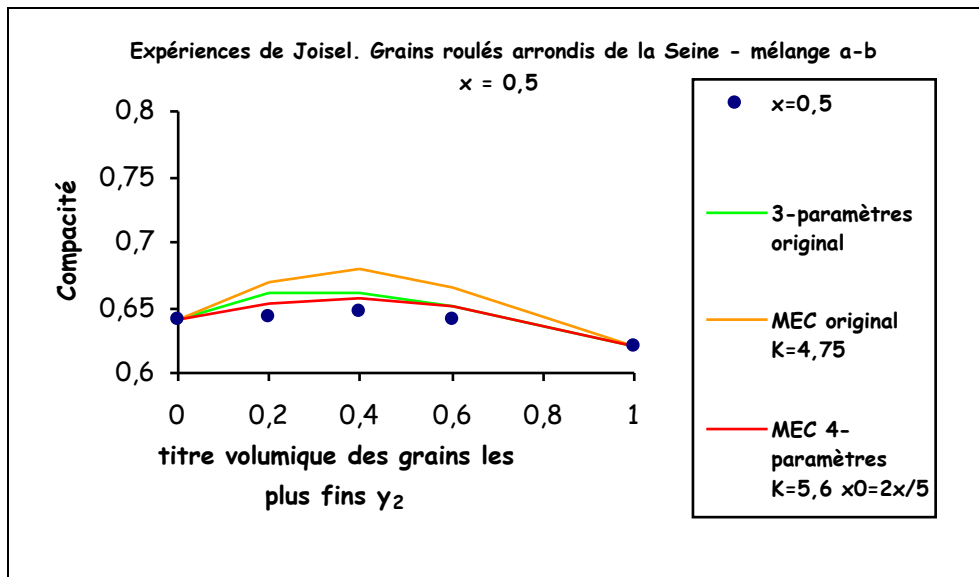
Figures VII-19 : expériences de de Larrard, Sedran, Angot. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=9$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=9$ et $x_0=2x/5$).

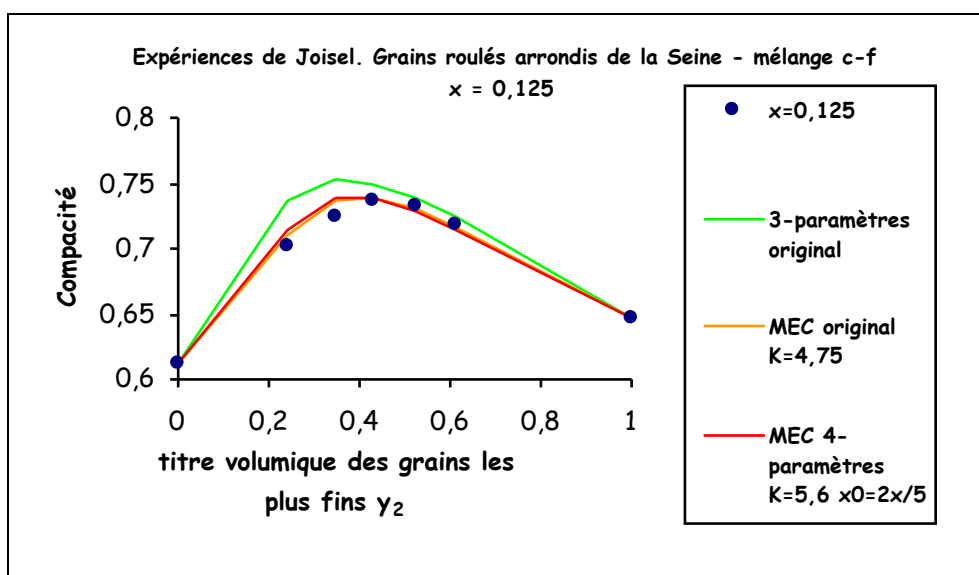
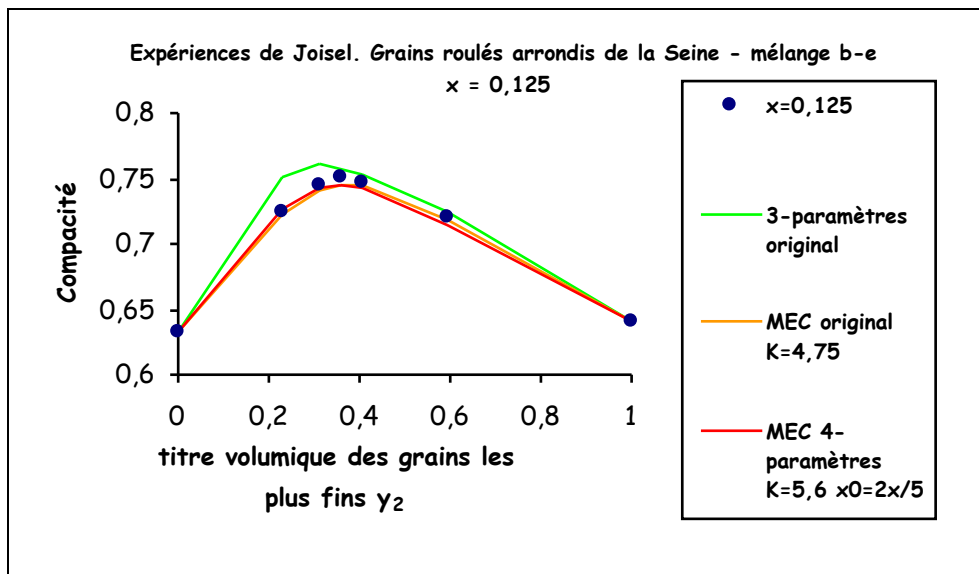
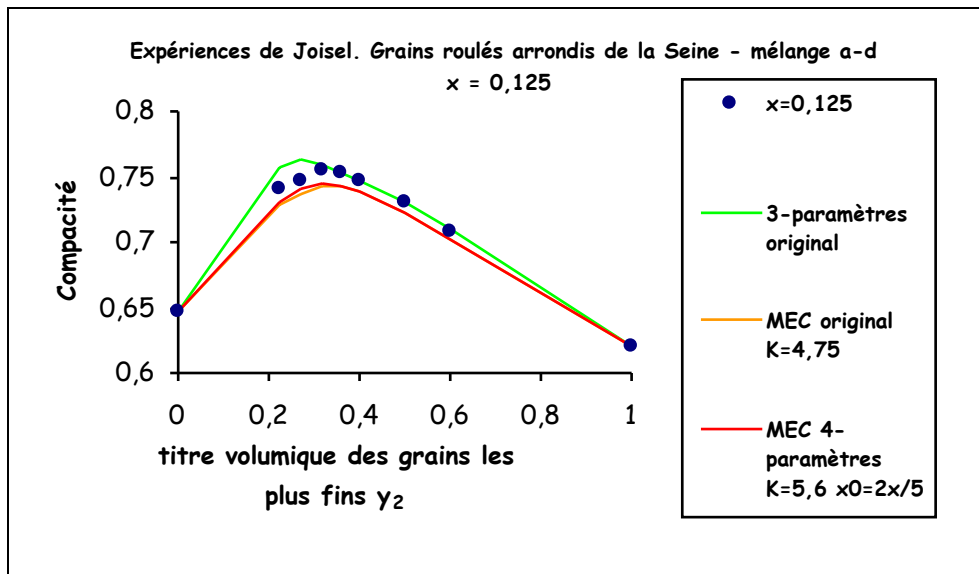
$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 4,75$	$x_0 = \frac{2x}{5}$ $K = 5,6$
				a_{L00}	a_{ROAD}		
				b_{L00}	b_{ROAD}		
a-b 0,5	0,2	0,6406	0,6202	0,6430	0,6612	0,6696	<u>0,6530</u>
	0,4			0,6468	0,6622	0,6787	<u>0,6567</u>
	0,6			0,6416	0,6513	0,6660	<u>0,6500</u>
c-d 0,5	0,2	0,6462	0,6478	0,6625	0,6711	0,6792	<u>0,6599</u>
	0,4			0,6668	0,6773	0,6938	<u>0,6670</u>
	0,6			0,6625	0,6711	0,6862	<u>0,6658</u>
e-f 0,5	0,2	0,6156	0,6327	0,6509	0,6424	<u>0,6508</u>	0,6333
	0,4			0,6567	<u>0,6537</u>	0,6700	0,6443
	0,6			0,6516	<u>0,6511</u>	0,6665	0,6463
a-d 0,125	0,225	0,6462	0,6202	0,7412	0,7571	0,7282	<u>0,7314</u>
	0,269			0,7468	0,7627	0,7377	<u>0,7408</u>
	0,316			0,7559	<u>0,7583</u>	0,7427	0,7449
	0,361			0,7526	<u>0,7529</u>	0,7425	0,7436
	0,4			0,7469	<u>0,7474</u>	0,7393	0,7394
	0,5			0,7316	<u>0,7303</u>	0,7234	0,7220
	0,6			0,7085	<u>0,7099</u>	0,7029	0,7012
b-e 0,125	0,232	0,6327	0,6406	0,7251	0,7515	0,7227	<u>0,7262</u>
	0,312			0,7449	0,7609	0,7413	<u>0,7436</u>
	0,356			0,7504	0,7581	0,7451	<u>0,7459</u>
	0,408			0,7475	0,7533	<u>0,7443</u>	0,7433
	0,593			0,7199	0,7253	<u>0,7179</u>	0,7148

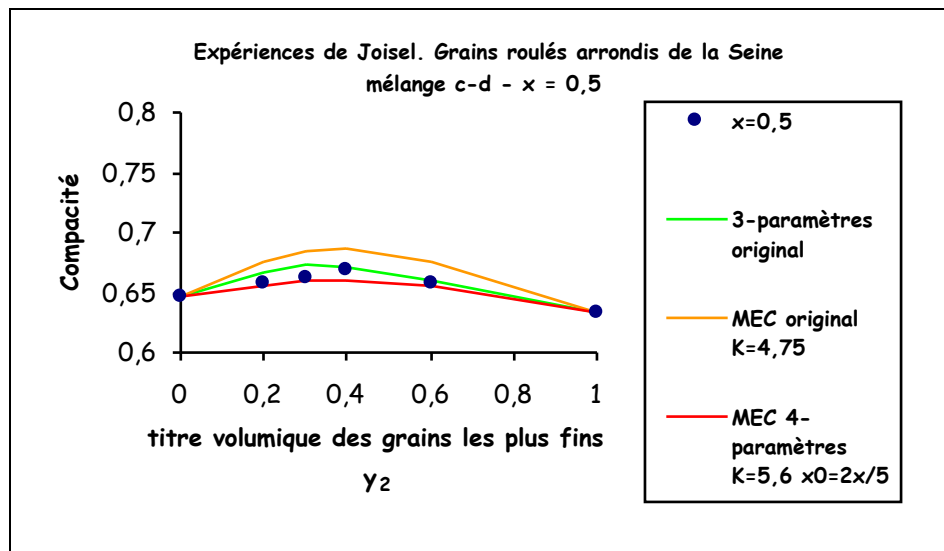
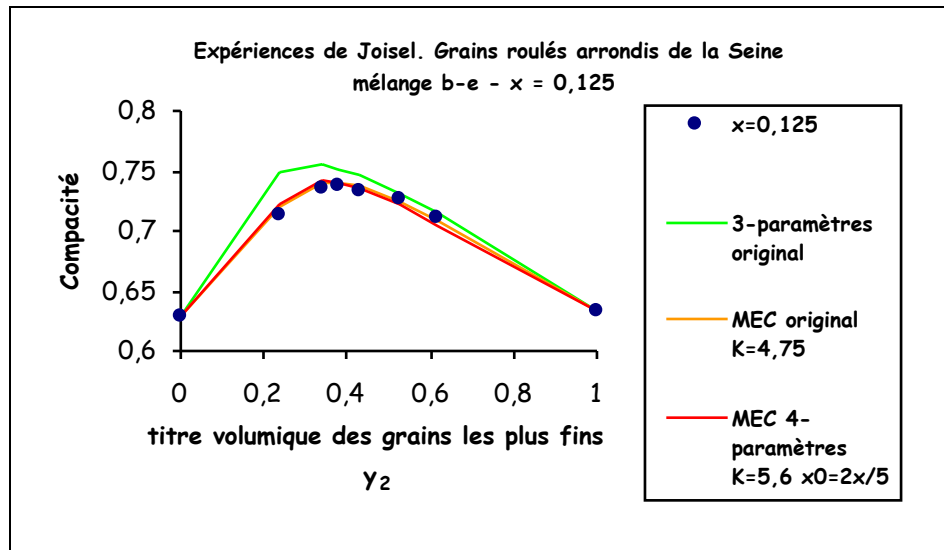
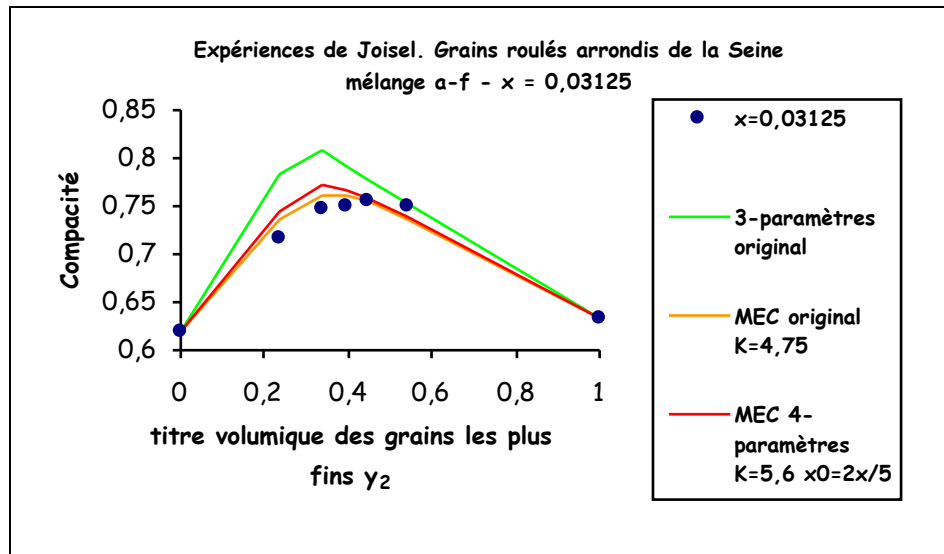
Tableau VII-22 : compacités expérimentales obtenues sur des grains roulés arrondis de la Seine d'après Joisel [SEDR94]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original (K=4,75) et avec le MEC 4-paramètres (K=5,6 et $x_0=2x/5$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres original	MEC	
						original	4-paramètres
						$K = 4,75$	$x_0 = \frac{2x}{5}$ $K = 5,6$
				a_{L00}	a_{ROAD}		
				b_{L00}	b_{ROAD}		
c-f 0,125	0,24	0,6126	0,6478	0,7011	0,7375	<u>0,7093</u>	0,7142
	0,348			0,7237	0,7530	<u>0,7363</u>	0,7390
	0,43			0,7358	0,7485	0,7394	<u>0,7386</u>
	0,523			0,7332	0,7383	<u>0,7307</u>	0,7278
	0,611			0,7189	0,7250	<u>0,7171</u>	0,7139
a-f 0,03125	0,234	0,6182	0,6325	0,7179	0,7832	<u>0,7357</u>	0,7453
	0,337			0,7479	0,8073	<u>0,7616</u>	0,7712
	0,392			0,7493	0,7929	<u>0,7609</u>	0,7679
	0,444			0,7567	0,7788	<u>0,7543</u>	0,7593
	0,541			0,7494	<u>0,7521</u>	0,7350	0,7377
b-e 0,125	0,235	0,6289	0,6338	0,7130	0,7479	<u>0,7192</u>	0,7232
	0,337			0,7359	0,7549	<u>0,7395</u>	0,7413
	0,376			0,7382	0,7517	<u>0,7407</u>	0,7410
	0,430			0,7326	0,7458	0,7377	<u>0,7363</u>
	0,523			0,7259	0,7322	<u>0,7249</u>	0,7221
	0,616			0,7122	<u>0,7153</u>	0,7079	0,7049
c-d 0,5	0,2	0,6456	0,6326	0,6588	0,6677	0,6760	<u>0,6565</u>
	0,3			0,6623	0,6723	0,6847	<u>0,6595</u>
	0,4			0,6681	<u>0,6704</u>	0,6869	0,6604
	0,6			0,657	0,6611	0,6759	<u>0,6561</u>

Tableau VII-23 : compacités expérimentales obtenues sur des grains roulés arrondis de la Seine d'après Joisel [SEDR94]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=4,75$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=5,6$ et $x_0=2x/5$).







Figures VII-20 : expériences de Joisel. Comparaison avec le modèle 3-paramètres original, avec le MEC original ($K=4,75$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=5,6$ et $x_0=2x/5$).

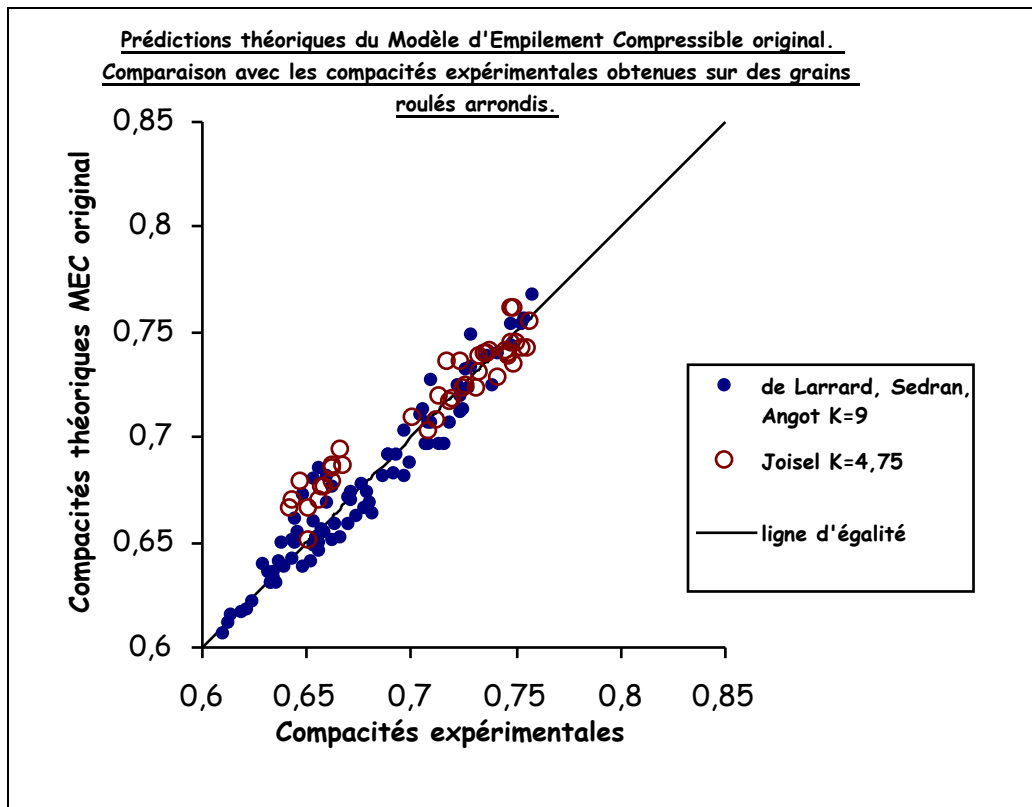


Figure VII-21 : Prédictions théoriques du MEC original versus résultats expérimentaux.

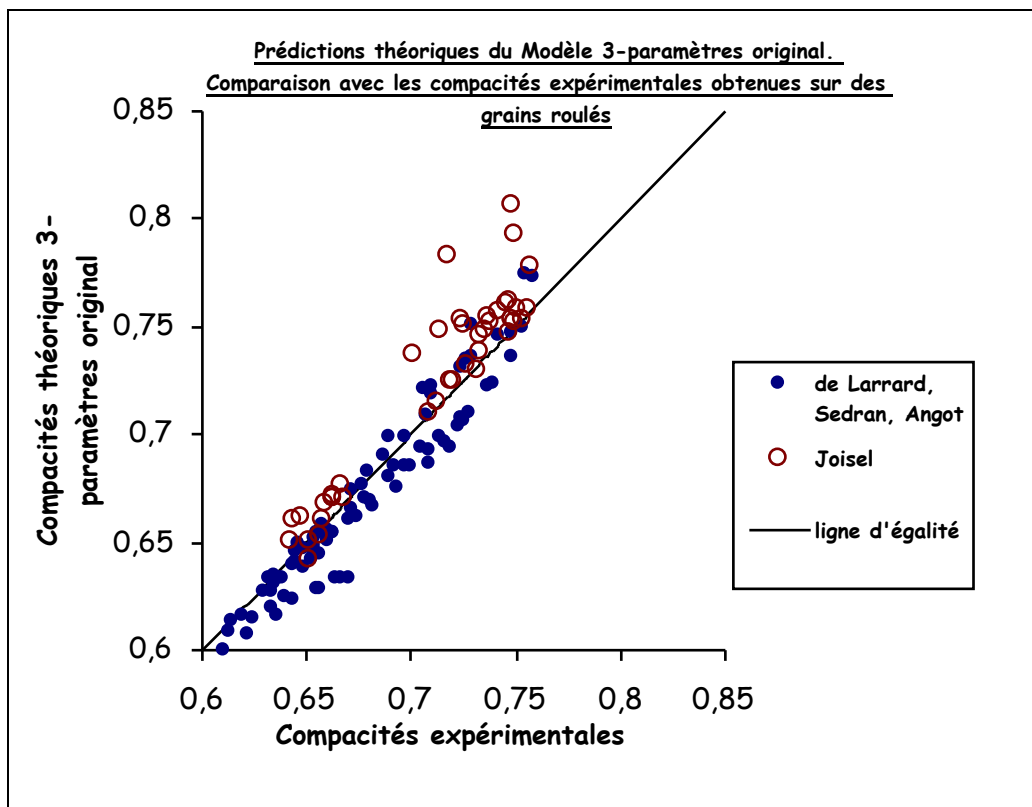
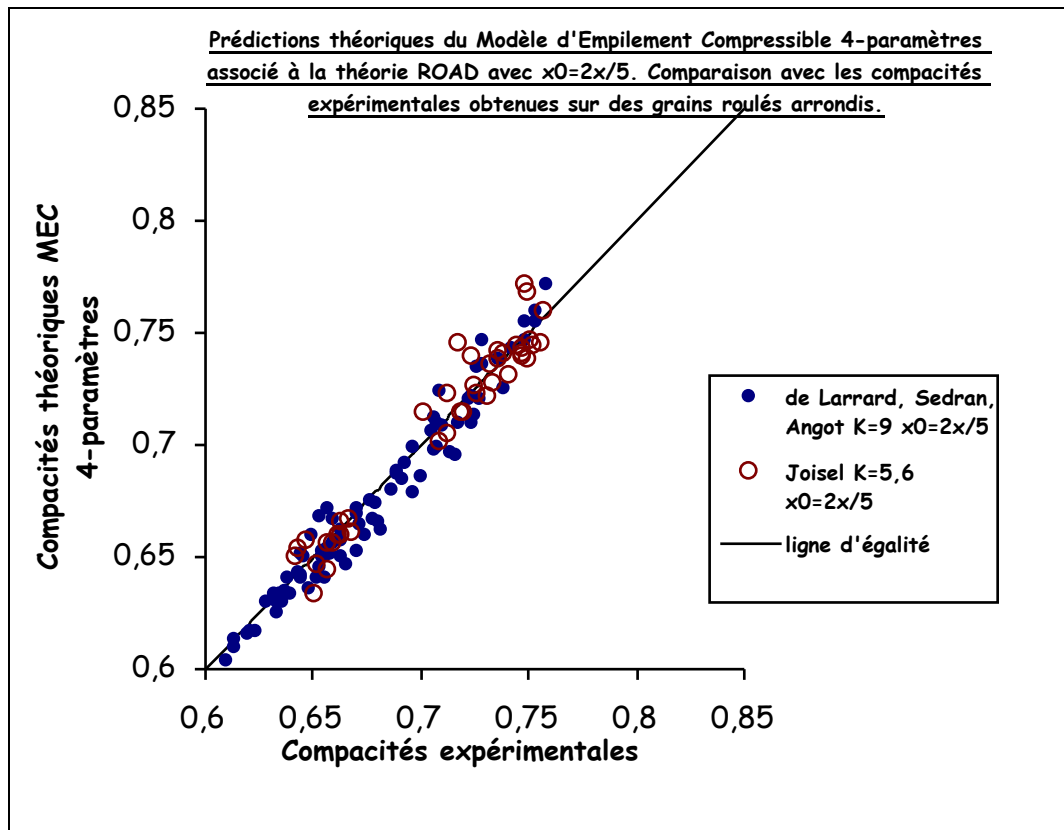


Figure VII-22 : Prédictions théoriques du modèle 3-paramètres original versus résultats expérimentaux.



Les indicateurs statistiques sont dans le tableau suivant :

Modèle :		MEC original	3-paramètres original	MEC 4-paramètres
Expériences	de Larrard, Sedran, Angot	$\phi_{théo}^* = 0,965 \phi_{exp}^* + 0,023$ $\xi = 0,008$ $r = 0,9658$	$\phi_{théo}^* = 1,046 \phi_{exp}^* - 0,038$ $\xi = 0,010$ $r = 0,9641$	$\phi_{théo}^* = 1,021 \phi_{exp}^* - 0,018$ $\xi = 0,007$ $r = 0,9786$
	Joisel	$\phi_{théo}^* = 0,747 \phi_{exp}^* + 0,185$ $\xi = 0,011$ $r = 0,9660$	$\phi_{théo}^* = 1,095 \phi_{exp}^* - 0,054$ $\xi = 0,014$ $r = 0,9425$	$\phi_{théo}^* = 1,002 \phi_{exp}^* - 0,002$ $\xi = 0,008$ $r = 0,9698$
Bilan global sur environ 125 résultats		$\xi = 0,009$ $r = 0,9619$	$\xi = 0,012$ $r = 0,9534$	$\xi = 0,007$ $r = 0,9788$

Tableau VII-24 : paramètres de régression linéaire, écart moyen ξ et coefficient de corrélation r pour les 3 modèles testés sur des expériences réalisées avec des grains roulés arrondis.

Le MEC 4-paramètres confirme maintenant son potentiel avec un matériau constitué de particules arrondies mais non complètement sphériques, que ce soit avec le procédé de serrage « vibration + pression » pour le granulat roulé de de Larrard, Sedran, Angot ou « vibration énergétique » pour celui de Joisel. Concernant ce dernier, l'équation de la droite de régression, avec une pente et une ordonnée à l'origine respectivement très proches de **1** (1,002) et de **0** (-0,002), montre la grande qualité des prévisions. Pour l'ensemble des 125 données analysées, le taux de corrélation atteint pratiquement $r = 0,98$ alors que l'écart moyen est équivalent à celui mesuré pour les 300 résultats expérimentaux répertoriés sur les billes de verre $\xi = 0,007$. Non seulement le MEC 4-paramètres permet d'estimer fidèlement la compacité à l'optimum comme le confirme la figure VII-24, mais il parvient également à cibler relativement précisément l'abscisse correspondante. Cela semble montrer que l'expression d'un rapport de tailles de cavernes $x_0 = \frac{2}{5} x$ proportionnel au rapport des tailles des particules semble licite. Finalement, appliqué à deux granulats dont on ne connaît précisément ni la forme, même si elle est arrondie, ni la granularité pour celui utilisé par Joisel, le MEC 4-paramètres prouve son efficacité sur une gamme de compacités moins élevées que celles atteintes avec les billes de verre.

Le MEC original arrive en 2^{ème} position quant aux qualités des prévisions ce qui confirme que l'introduction d'un indice de serrage est adaptée à l'estimation des compacités des mélanges granulaires. Concernant le granulat roulé de la Loire, il convient toutefois de préciser que celles-ci ont été obtenues en faisant appel à des compacités propres calculées par régression linéaire sur les mesures pratiquées sur les mélanges binaires [DELA00]. Concernant le granulat roulé de la Seine de Joisel, l'équation de la droite de régression ($\phi_{théo}^* = 0,747 \phi_{exp}^* + 0,185$) et l'examen de la figure VII-21 indiquent une surestimation des « faibles compacités ». Il n'en reste pas moins que les indicateurs statistiques globaux restent satisfaisants : $\xi < 0,010$ et $r > 0,96$.

Le modèle 3-paramètres original, enfin, a tendance à sous-estimer les « faibles compacités » et à surestimer assez nettement les plus « fortes » (figure VII-22) comme le confirme l'examen des équations des droites de régression correspondant aux deux séries de données : l'ordonnée à l'origine est en effet négative et la pente assez sensiblement supérieure à 1, notamment en ce qui concerne les résultats de Joisel.

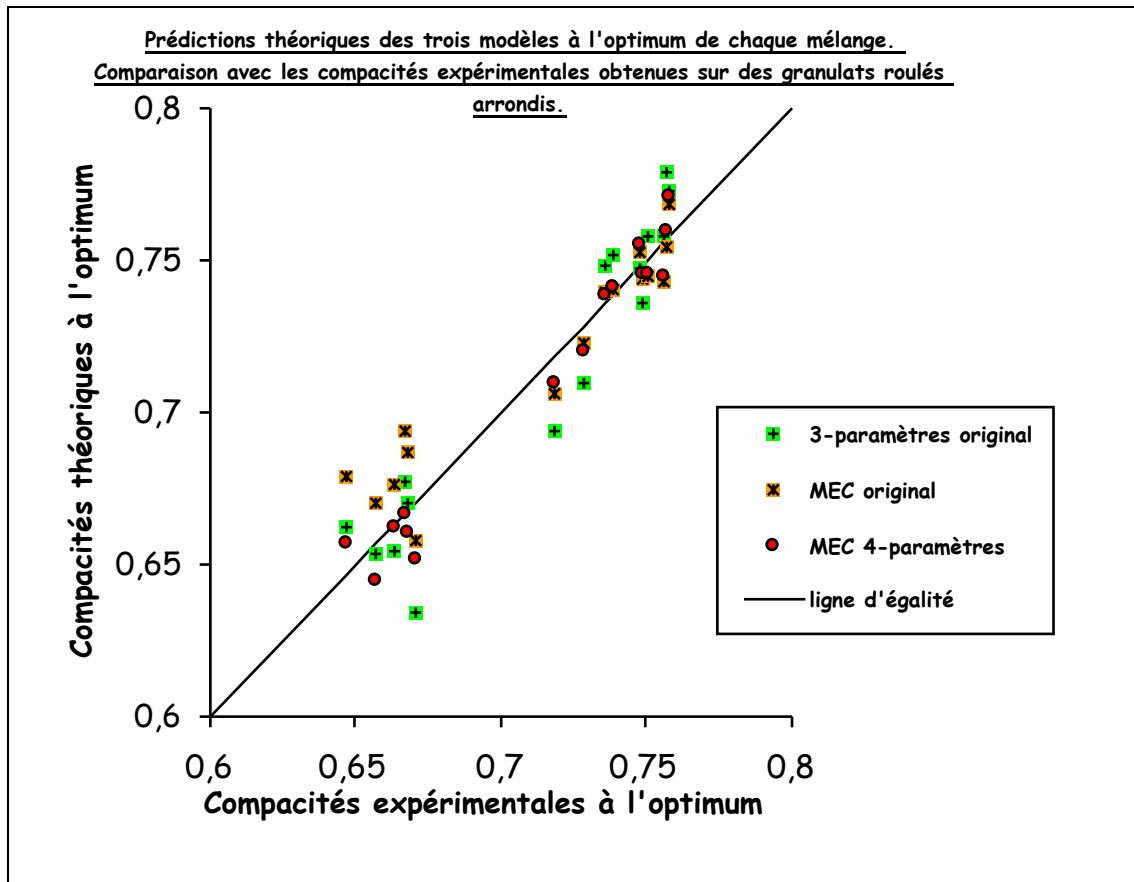


Figure VII-24 : Prédictions théoriques des trois modèles testés à l'optimum de chaque mélange constitué de granulats roulés versus résultats expérimentaux.

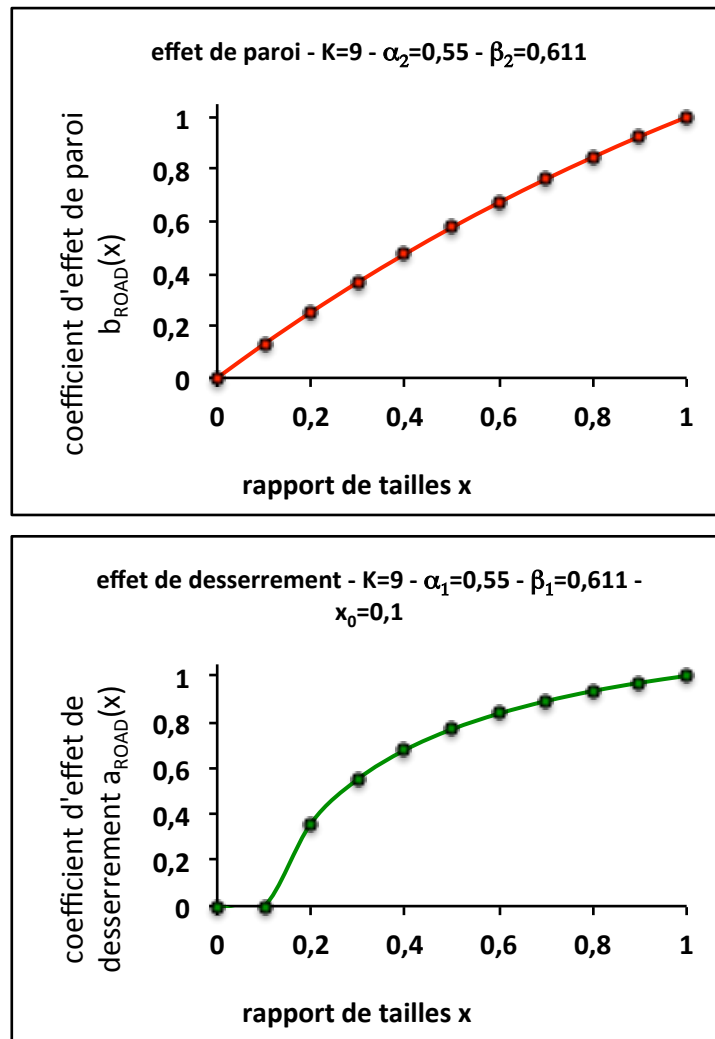
7.4. VALIDATION AVEC LES DONNÉES CONCERNANT DES GRAINS CONCASSÉS : EXPÉRIENCES DE DE LARRARD, SEDRAN, ANGOT (1994), DE LECOMTE ET ZENNIR (1997), DE HANINI (2012) ET DE KWAN, WONG, FUNG (2015).

Nous allons terminer cette évaluation avec une partie consacrée aux granulats concassés en utilisant quatre séries de données représentant environ 335 valeurs :

- celles de de Larrard, Sedran, Angot (1994) que nous avons également déjà utilisées. Il s'agit d'un granulats concassé anguleux d'une carrière de Arnay-le-Duc ;
- celles de Lecomte et Zennir (1997) qui, pour faire face à l'épuisement d'une ressource provenant des vallées de la Meurthe et de la Moselle, ont choisi de faire appel à un matériau de substitution: un calcaire « tendre » du Bajocien (Moselle) qui présente l'intérêt d'être économique [LECO97] ;
- celles de Hanini (2012) [HANI12] qui concernent un énorme gisement situé au Nord-Est de Tlemcen (Algérie) susceptible d'alimenter pendant 86,9 ans un concasseur produisant annuellement 500000 tonnes. Il s'agit d'un granulats calcaire concassé ;
- celles de Kwan, Wong, Fung (2015) [KWAN15] qui ont testé des granulats issus d'une roche granitique concassée de provenance inconnue.

La première source a déjà fait l'objet d'une présentation au chapitre 5. Le procédé de mise en place consistait en une vibration avec application d'une pression. C'est pourquoi nous avons retenu $K=9$. Par ailleurs, après avoir positionné les points représentatifs du coefficient d'effet de desserrement de ce matériau en fonction du rapport de tailles x sur un graphique où figuraient également les courbes correspondant à différentes tailles de cavernes, notre estimation nous a conduit à choisir pour ces dernières une dimension unique indépendante de x : $x_0 = 0,1$.

Voici un exemple de représentation des courbes des coefficients d'effet de paroi b et d'effet de desserrement a retenues pour les simulations sur les expériences de de Larrard, Sedran, Angot avec $\alpha = 0,55$.



Figures VII-25 : exemples de coefficients d'effet de paroi et de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des données issues des expériences de de Larrard, Sedran, Angot sur un concassé ($\alpha=0,55$, $K=9$ et $x_0=0,1$).

Concernant la deuxième source, Lecomte et Zennir [LECO97] ont testé un calcaire tendre du Bajocien lorrain dans le but de l'évaluer pour des compositions de béton. Il est, par ailleurs, également largement utilisé en techniques routières. Les auteurs soulignent que ce matériau développe une réaction granulaire plus forte que celui utilisé par de Larrard *et al.* vers les forts contrastes de tailles pour l'effet de desserrement. C'est pourquoi nous avons opté pour une taille unique de cavernes toujours indépendante du rapport de tailles x mais très proche de zéro : $x_0 = 0,02$. Nous vous présentons ci-dessous un exemple de courbe retenue pour a dans le but d'effectuer des simulations sur les expériences de Lecomte et Zennir avec $\alpha = 0,55$. Pour b , l'allure de la courbe précédente reste valable. Concernant K , le mode opératoire étant similaire à celui de de Larrard *et al.*, nous avons retenu $K = 9$.

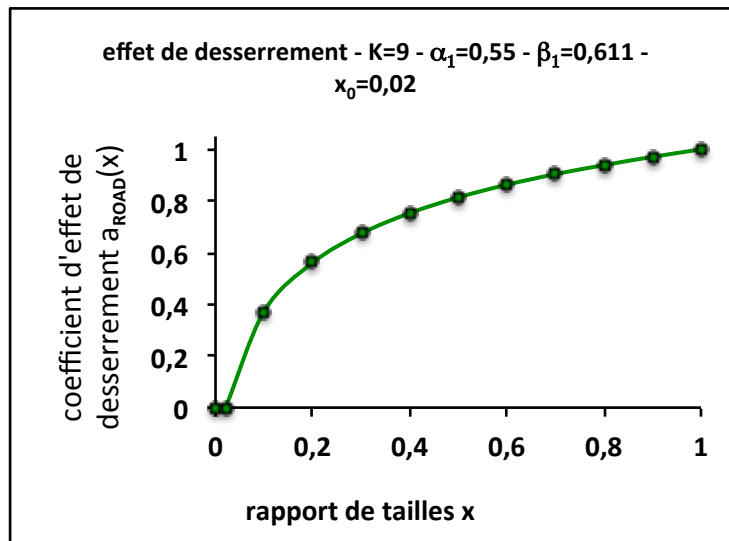


Figure VII-26 : exemple de coefficients d'effet de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des données issues des expériences de Lecomte et Zennir sur un concassé ($\alpha=0,55$, $K=9$ et $x_0=0,02$).

Dans la troisième source, Hanini [HANI12] utilise des concassés provenant d'un gisement qui contient principalement des calcaires massifs compacts à fines passées de calcite et des dolomies calcaires finement cristallines, massives et dures. D'après nos simulations, la réaction granulaire est encore plus forte que pour les calcaires lorrains pour l'effet de desserrement du côté des faibles rapports de tailles. C'est pourquoi nous avons choisi une taille de cavene nulle : $x_0 = 0$. On entend par là que les cavernes sont trop irrégulières pour pouvoir accueillir des particules fines sans provoquer un desserrement du squelette des éléments les plus grossiers.

Concernant la mise en place, Hanini fait appel à une table à secousses sur laquelle est positionné le moule. Le matériau est mis en place à l'intérieur de ce dernier en trois fois, chaque versement étant suivi d'une application de 20 secousses, à raison de 2 par seconde. Enfin, un piston est positionné au sommet du matériau qui subit alors 40 secousses supplémentaires. C'est pourquoi nous avons retenu une fois de plus : $K = 9$.

Voici un exemple de courbe obtenue pour a utilisée pour analyser les résultats de Hanini. Pour b , l'allure de la courbe de la figure VII-25 reste valable.

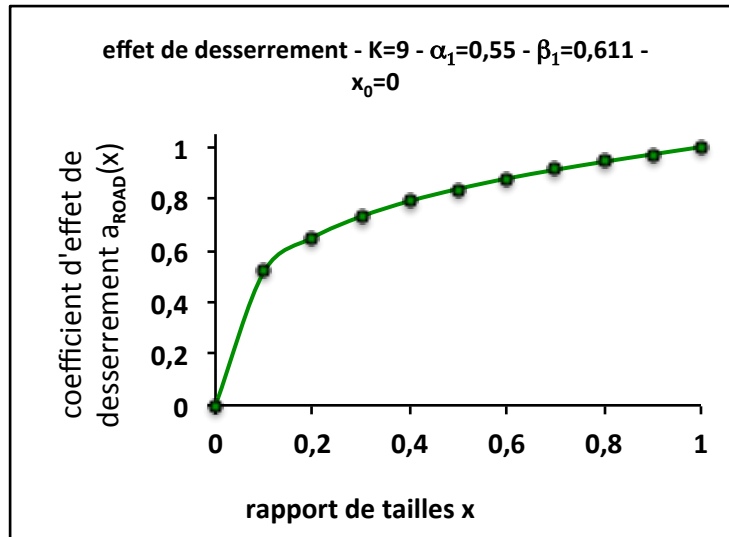


Figure VII-27 : exemple de coefficients d'effet de desserrement utilisés dans le MEC 4-paramètres pour l'analyse des données issues des expériences de Hanini sur un concassé ($\alpha=0,55$, $K=9$ et $x_0=0$).

Dans la quatrième source enfin, Kwan A.K.H., Wong V., Fung W.W.S. testent des granulats anguleux provenant d'une roche granitique concassée. Les résultats issus de la mise en place « compactée » sont exploités. L'échantillon est placé dans le récipient en 3 portions égales. Chaque couche est compactée par application de 30 coups répartis sur l'ensemble de la surface au moyen d'une tige prévue à cet effet, avec une hauteur de chute de 50 mm. Nous avons considéré $K = 5,6$ correspondant à un simple compactage. D'après nos premières analyses, le granulat anguleux semble présenter une forte réactivité granulaire dans le domaine des gros grains dominants, probablement due à une rugosité assez forte. Nous sélectionnerons là-aussi: $x_0 = 0$. L'allure des courbes de la figure VII-25 pour b et VII-27 pour a reste valable.

Passons maintenant à l'évaluation des trois modèles.

Pour le granulat concassé des expériences de de Larrard, Sedran, Angot, les compacités propres de chaque classe élémentaire ont été corrigées de façon à optimiser les prévisions de chaque modèle. Elles ont été obtenues par régression linéaire sur les mesures réalisées sur les mélanges binaires.

	C05		C1		C2		C4		C8	
	α	$\alpha_{\text{corrigée}}$	α	$\alpha_{\text{corrigée}}$	α	$\alpha_{\text{corrigée}}$	α	$\alpha_{\text{corrigée}}$	α	$\alpha_{\text{corrigée}}$
3-paramètres étendu	0,516	0,535	0,507	0,535	0,529	0,535	0,537	0,565	0,572	0,595
MEC original		0,523		0,528		0,525		0,557		0,585
MEC 4-paramètres		0,513		0,520		0,515		0,550		0,585

Tableau VII-25 : compacités propres et compacités propres corrigées des classes élémentaires utilisées dans les expériences de de Larrard, Sedran, Angot (1994).

Le modèle 3-paramètres retenu pour cette évaluation est le modèle étendu [KWAN15] car il s'agit de grains concassés anguleux pour lesquels il a été spécialement conçu.

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	Compacité ϕ^*			
		expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
				original	4-paramètres $x_0 = 0,1$
				$K = 9, a_{LOO}, b_{LOO}$	$K = 9, a_{ROAD}, b_{ROAD}$
C8C05 0,0625	0	0,572	0,595	0,585	0,585
	0,05	0,620	0,616	0,6066	0,615
	0,1	0,642	0,637	0,6295	0,647
	0,15	0,676	0,659	0,6535	0,681
	0,2	0,705	0,679	0,6779	0,715
	0,25	0,731	0,700	0,7001	0,738
	0,3	0,7365	0,712	0,7135	0,736
	0,4	0,723	0,690	0,6998	0,701
	0,5	0,6941	0,666	0,6666	0,662
	0,6	0,6585	0,640	0,6331	0,626
	0,7	0,616	0,613	0,6019	0,594
	0,8	0,583	0,586	0,5732	0,564
	0,9	0,5655	0,560	0,547	0,537
1	0,516	0,535	0,523	0,513	
C8C1 0,125	0	0,572	0,595	0,585	0,585
	0,05	0,613	0,610	0,6034	0,610
	0,1	0,646	0,624	0,6226	0,638
	0,15	0,6755	0,638	0,6425	0,666
	0,2	0,699	0,651	0,6624	0,694
	0,25	0,7215	0,664	0,6806	0,715
	0,3	0,7245	0,675	0,693	0,718
	0,4	0,7025	0,663	0,6861	0,692
	0,5	0,6705	0,644	0,6586	0,658
	0,6	0,638	0,623	0,629	0,625
	0,7	0,611	0,601	0,6008	0,596
	0,8	0,5965	0,579	0,5746	0,568
	0,9	0,5435	0,557	0,5504	0,543
1	0,507	0,535	0,528	0,520	

Tableau VII-26 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,1$).

$x = \frac{\sigma_2}{\sigma_1}$	Y_2	Compacité ϕ^*			
		expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
				original	4-paramètres $x_0 = 0,1$
				$K = 9, a_{L00}, b_{L00}$	$K = 9, a_{ROAD}, b_{ROAD}$
C4C05 0,125	0	0,537	0,565	0,557	0,550
	0,05	0,591	0,580	0,575	0,575
	0,1	0,6185	0,594	0,594	0,601
	0,15	0,638	0,608	0,6137	0,629
	0,2	0,669	0,622	0,634	0,658
	0,25	0,693	0,635	0,6536	0,684
	0,3	0,711	0,647	0,670	0,698
	0,4	0,691	0,654	0,6741	0,680
	0,5	0,667	0,637	0,6502	0,648
	0,6	0,640	0,619	0,6219	0,617
	0,7	0,603	0,598	0,5945	0,587
	0,8	0,571	0,577	0,5688	0,560
	0,9	0,545	0,556	0,545	0,536
1	0,516	0,535	0,523	0,513	
C8C2 0,25	0	0,572	0,595	0,585	0,585
	0,05	0,597	0,602	0,5986	0,599
	0,1	0,611	0,609	0,6125	0,613
	0,15	0,625	0,615	0,6264	0,627
	0,2	0,634	0,621	0,6398	0,640
	0,25	0,643	0,626	0,6516	0,652
	0,3	0,651	0,631	0,6594	0,660
	0,4	0,643	0,629	0,6554	0,655
	0,5	0,6335	0,615	0,6349	0,632
	0,6	0,6245	0,600	0,6111	0,606
	0,7	0,5975	0,584	0,5877	0,581
	0,8	0,5695	0,568	0,5654	0,557
	0,9	0,5435	0,551	0,5445	0,535
1	0,529	0,535	0,525	0,515	

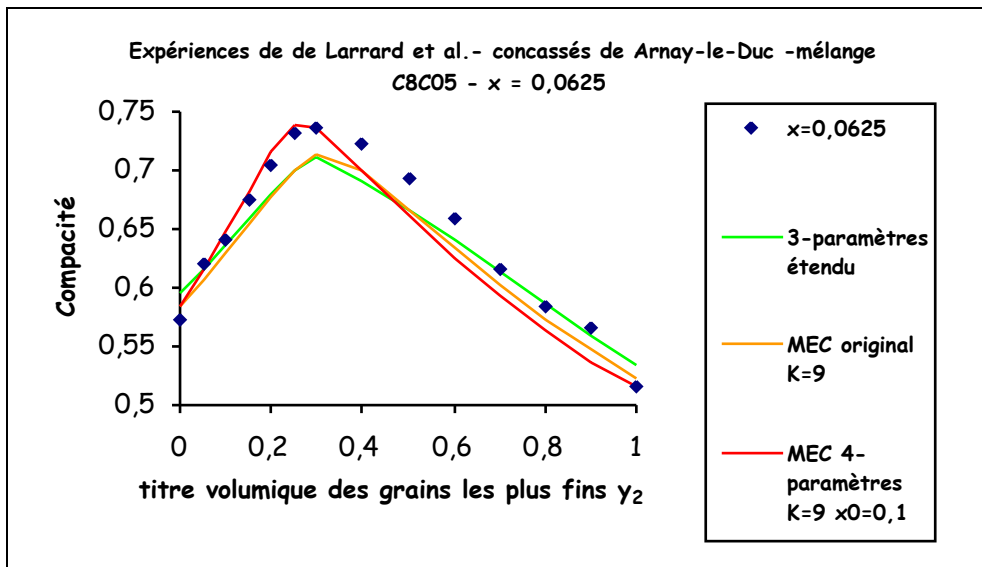
Tableau VII-27 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,1$).

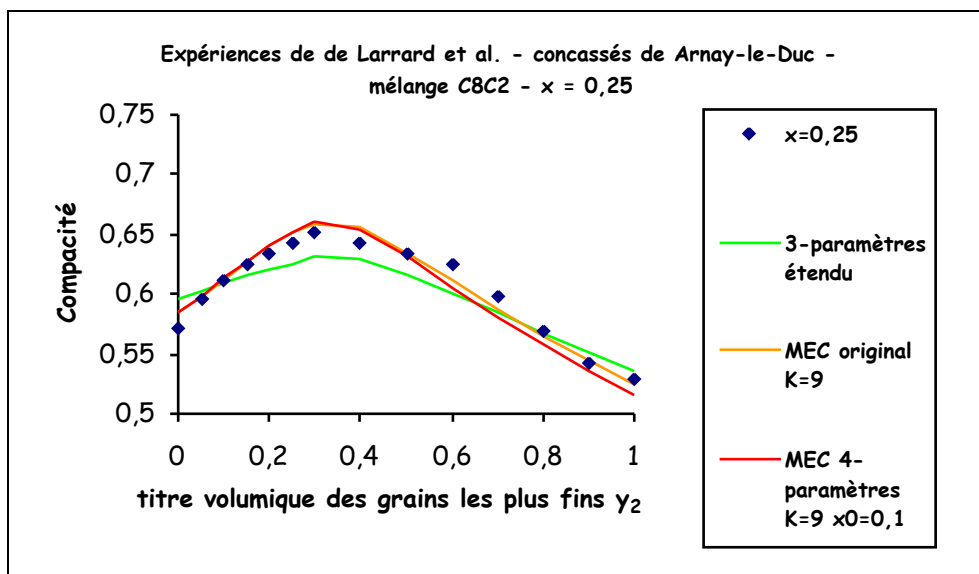
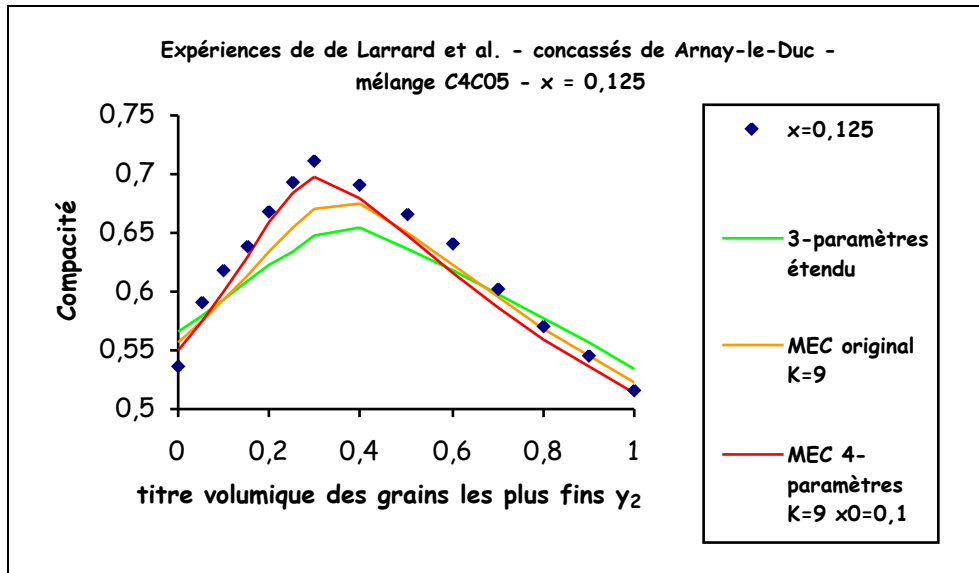
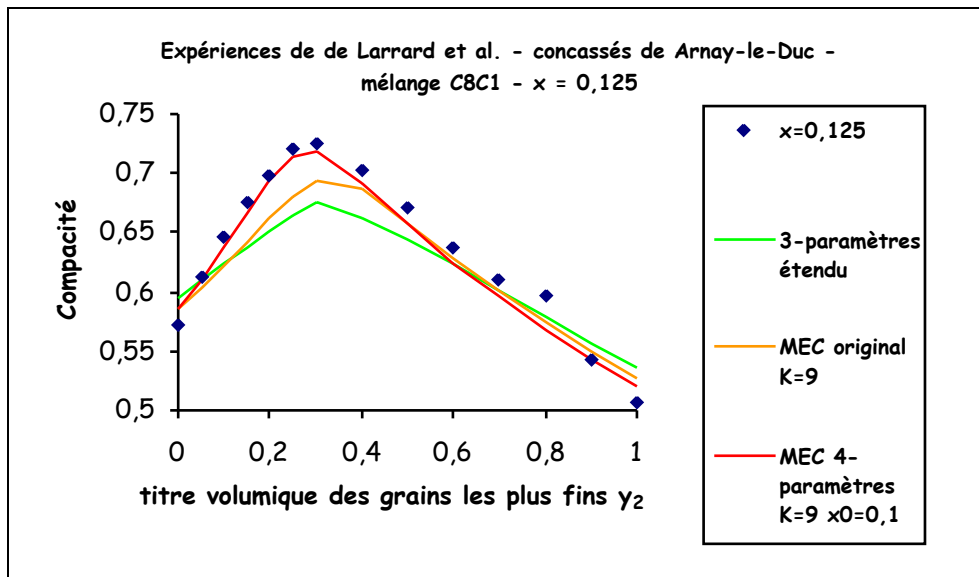
$x = \frac{\alpha_2}{\alpha_1}$	Y_2	Compacité ϕ^*			
		expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
				original	4-paramètres $x_0 = 0,1$
				$K = 9, a_{L00}, b_{L00}$	$K = 9, a_{ROAD}, b_{ROAD}$
C2C05 0,25	0	0,529	0,535	0,525	0,515
	0,05	0,540	0,544	0,5388	0,530
	0,1	0,552	0,552	0,5531	0,546
	0,15	0,5515	0,560	0,5679	0,562
	0,2	0,566	0,568	0,583	0,579
	0,25	0,573	0,575	0,5979	0,596
	0,3	0,594	0,582	0,6115	0,612
	0,4	0,588	0,594	0,626	0,627
	0,5	0,582	0,596	0,617	0,615
	0,6	0,579	0,586	0,5987	0,594
	0,7	0,568	0,574	0,5788	0,572
	0,8	0,5555	0,562	0,5593	0,551
	0,9	0,534	0,549	0,5406	0,532
	1	0,516	0,535	0,523	0,513
C8C4 0,5	0	0,572	0,595	0,585	0,585
	0,05	0,5825	0,597	0,5931	0,591
	0,1	0,5875	0,599	0,6011	0,597
	0,15	0,588	0,601	0,6087	0,602
	0,2	0,592	0,602	0,6158	0,608
	0,25	0,5955	0,603	0,6217	0,612
	0,3	0,594	0,604	0,6259	0,616
	0,4	0,5875	0,605	0,6271	0,620
	0,5	0,587	0,600	0,6198	0,615
	0,6	0,587	0,594	0,6084	0,605
	0,7	0,572	0,587	0,5956	0,592
	0,8	0,564	0,580	0,5825	0,578
	0,9	0,553	0,573	0,5696	0,564
	1	0,537	0,565	0,547	0,550

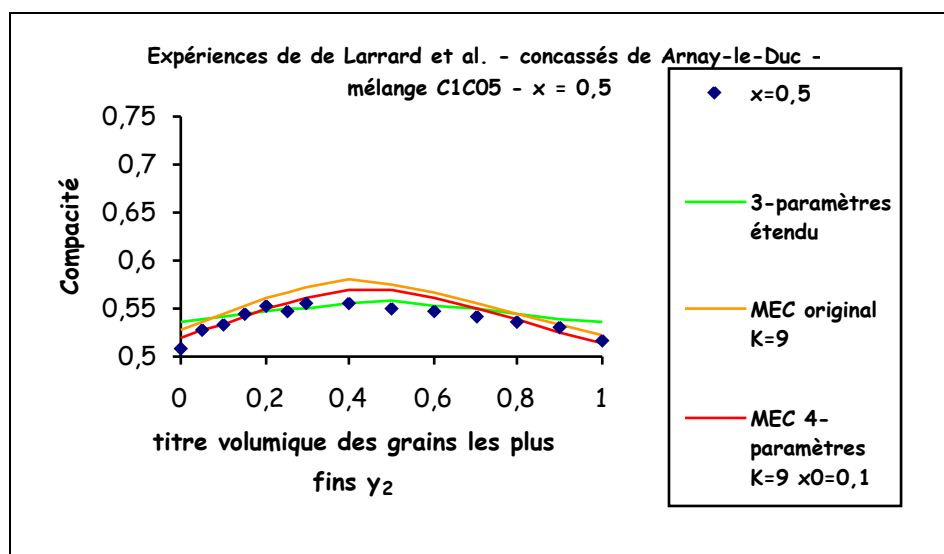
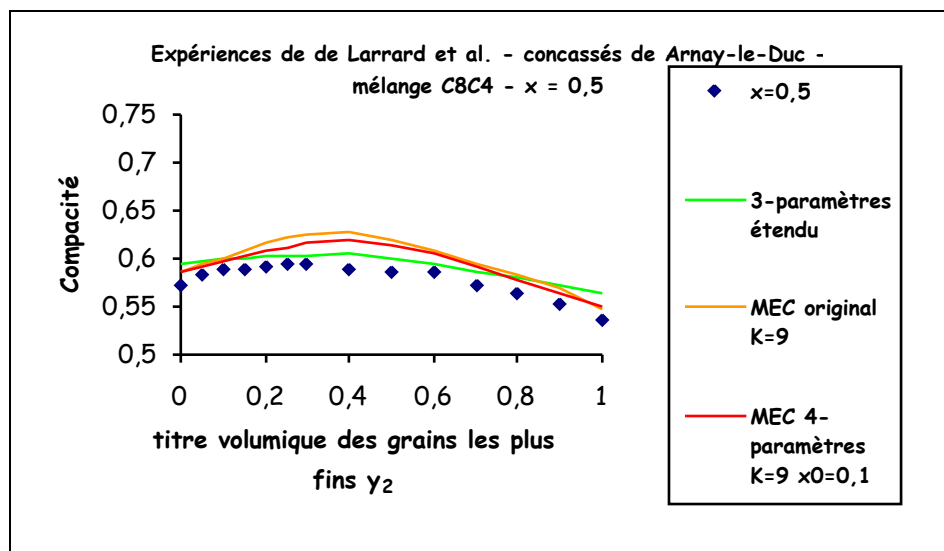
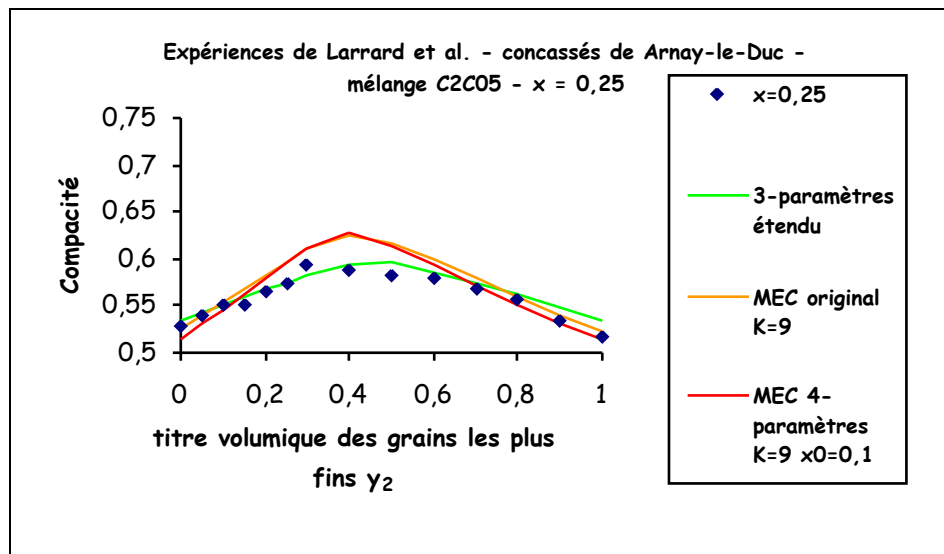
Tableau VII-28 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,1$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	y_2	Compacité ϕ^*			
		expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
				original	4-paramètres $x_0 = 0,1$
				$K = 9, a_{L00}, b_{L00}$	$K = 9, a_{ROAD}, b_{ROAD}$
C1C05 0,5	0	0,507	0,535	0,528	0,520
	0,05	0,527	0,538	0,5362	0,527
	0,1	0,532	0,541	0,5444	0,534
	0,15	0,545	0,544	0,5524	0,542
	0,2	0,552	0,547	0,5602	0,549
	0,25	0,5485	0,549	0,5673	0,555
	0,3	0,555	0,551	0,5733	0,561
	0,4	0,556	0,555	0,5792	0,570
	0,5	0,549	0,557	0,576	0,570
	0,6	0,546	0,554	0,5675	0,562
	0,7	0,5425	0,550	0,5567	0,551
	0,8	0,537	0,545	0,5455	0,538
	0,9	0,530	0,540	0,5341	0,525
1	0,516	0,535	0,523	0,513	

Tableau VII-29 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après de Larrard, Sedran, Angot [DELA00]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,1$).







Figures VII-28 : expériences de de Larrard, Sedran, Angot. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=9$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=9$ et $x_0=0,1$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0,02$
				$K = 9$ a_{L00}, b_{L00}	$K = 9$ a_{ROAD}, b_{ROAD}		
0,4/6,3 0,0635	0,1	0,565	0,567	0,603	<u>0,607</u>	0,610	0,610
	0,2			0,656	0,651	0,661	<u>0,660</u>
	0,3			0,705	0,693	0,711	<u>0,710</u>
	0,4			0,708	<u>0,704</u>	0,722	0,723
	0,5			0,708	0,685	0,698	<u>0,699</u>
	0,6			0,700	0,664	0,669	<u>0,670</u>
	0,7			0,654	0,641	0,641	<u>0,642</u>
	0,8			0,626	<u>0,616</u>	0,615	0,615
	0,9			0,595	<u>0,592</u>	0,590	0,590
0,4/4 0,1	0,1	0,565	0,567	0,601	<u>0,600</u>	0,606	0,603
	0,2			0,633	<u>0,635</u>	0,652	0,645
	0,3			0,661	<u>0,668</u>	0,696	0,686
	0,4			0,700	0,683	0,710	<u>0,705</u>
	0,5			0,704	0,669	<u>0,690</u>	<u>0,690</u>
	0,6			0,692	0,651	0,663	<u>0,664</u>
	0,7			0,654	0,631	0,637	<u>0,638</u>
	0,8			0,613	0,610	<u>0,612</u>	<u>0,612</u>
	0,9			0,595	<u>0,589</u>	<u>0,589</u>	<u>0,589</u>
0,4/3,15 0,125	0,1	0,552	0,567	0,600	0,583	<u>0,591</u>	0,587
	0,2			0,620	0,614	0,634	<u>0,625</u>
	0,3			0,657	0,642	0,677	<u>0,664</u>
	0,4			0,688	0,667	0,696	<u>0,689</u>
	0,5			0,688	0,657	<u>0,681</u>	<u>0,681</u>
	0,6			0,674	0,642	<u>0,658</u>	<u>0,658</u>
	0,7			0,643	0,625	0,633	<u>0,634</u>
	0,8			0,623	0,606	<u>0,610</u>	<u>0,610</u>
	0,9			0,599	0,587	<u>0,588</u>	<u>0,588</u>

Tableau VII-30 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés rugueux d'après Lecomte et Zennir [LECO97]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,02$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0,02$
						$K = 9$ a_{L00}, b_{L00}	$K = 9$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
0,4/2,5 0,16	0,1	0,548	0,567	0,589	0,575	<u>0,584</u>	0,579
	0,2			0,626	0,601	<u>0,624</u>	0,613
	0,3			0,650	0,625	0,663	<u>0,648</u>
	0,4			0,682	0,646	<u>0,683</u>	0,673
	0,5			0,668	0,644	0,672	<u>0,671</u>
	0,6			0,661	0,632	0,651	<u>0,652</u>
	0,7			0,641	0,617	0,629	<u>0,630</u>
	0,8			0,618	0,601	0,607	<u>0,608</u>
	0,9			0,592	0,584	0,586	<u>0,587</u>
0,5/2,5 0,2	0,1	0,548	0,554	0,583	0,570	<u>0,581</u>	0,575
	0,2			0,623	0,591	<u>0,616</u>	0,604
	0,3			0,653	0,610	<u>0,650</u>	0,633
	0,4			0,667	0,625	<u>0,666</u>	0,654
	0,5			0,661	0,624	<u>0,655</u>	0,652
	0,6			0,643	0,613	<u>0,635</u>	<u>0,635</u>
	0,7			0,627	0,599	0,613	<u>0,614</u>
	0,8			0,608	0,585	<u>0,593</u>	<u>0,593</u>
	0,9			0,583	0,570	<u>0,573</u>	<u>0,573</u>
0,4/1,6 0,25	0,1	0,554	0,567	0,589	0,573	<u>0,584</u>	0,578
	0,2			0,607	0,590	0,617	<u>0,604</u>
	0,3			0,629	0,606	0,647	<u>0,629</u>
	0,4			0,654	0,620	0,663	<u>0,648</u>
	0,5			0,650	0,622	0,655	<u>0,651</u>
	0,6			0,640	0,613	<u>0,638</u>	<u>0,638</u>
	0,7			0,629	0,603	0,620	<u>0,621</u>
	0,8			0,613	0,592	<u>0,602</u>	<u>0,602</u>
	0,9			0,586	0,580	<u>0,584</u>	<u>0,584</u>

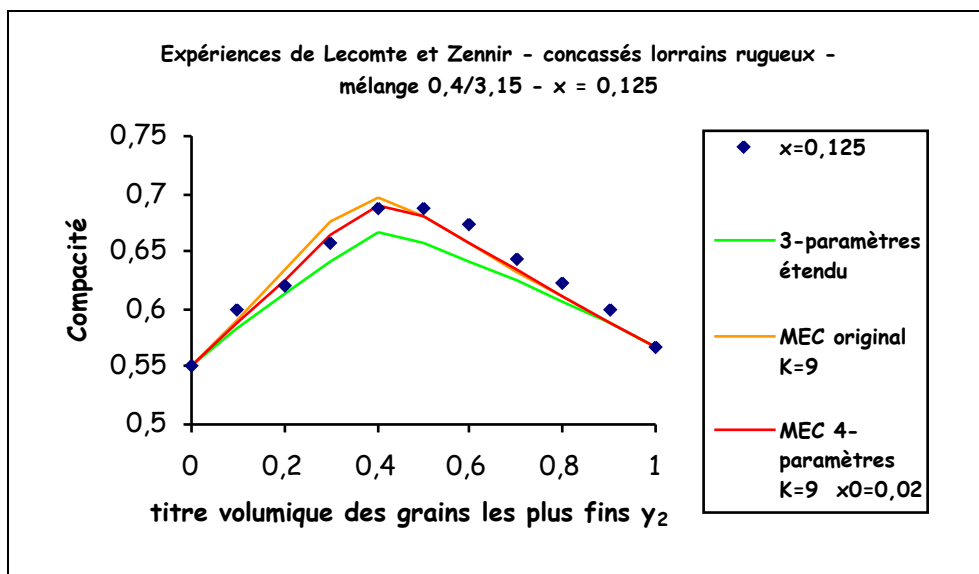
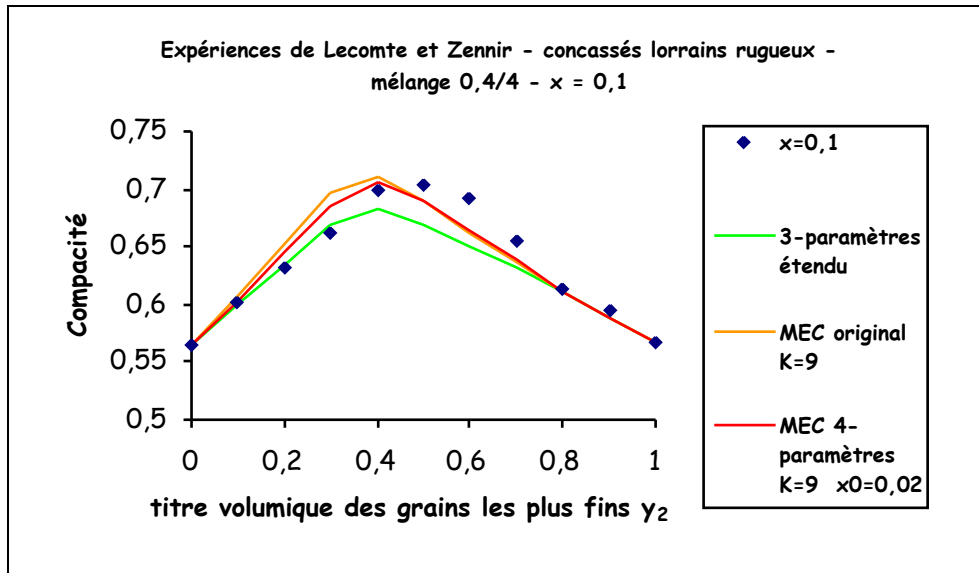
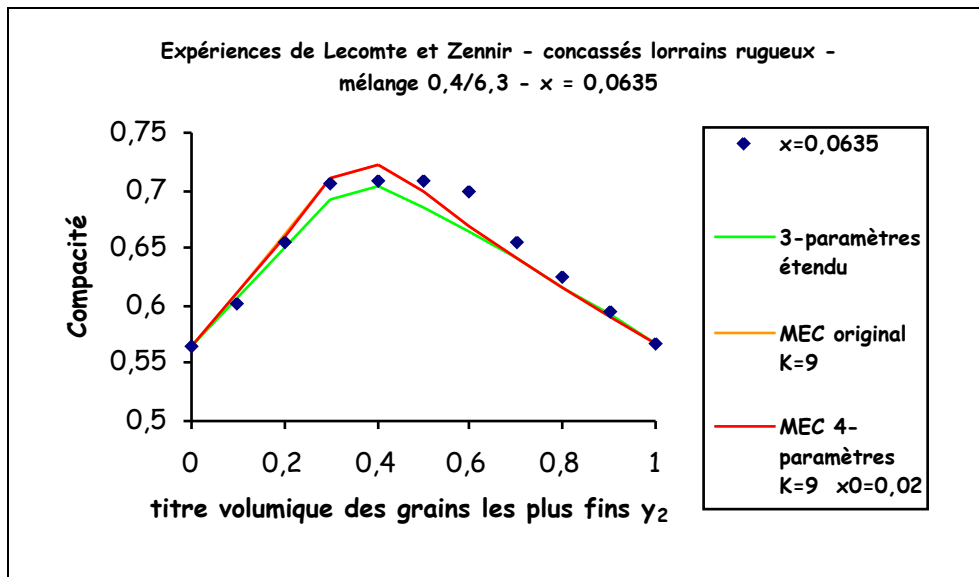
Tableau VII-31 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés rugueux d'après Lecomte et Zennir [LECO97]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,02$).

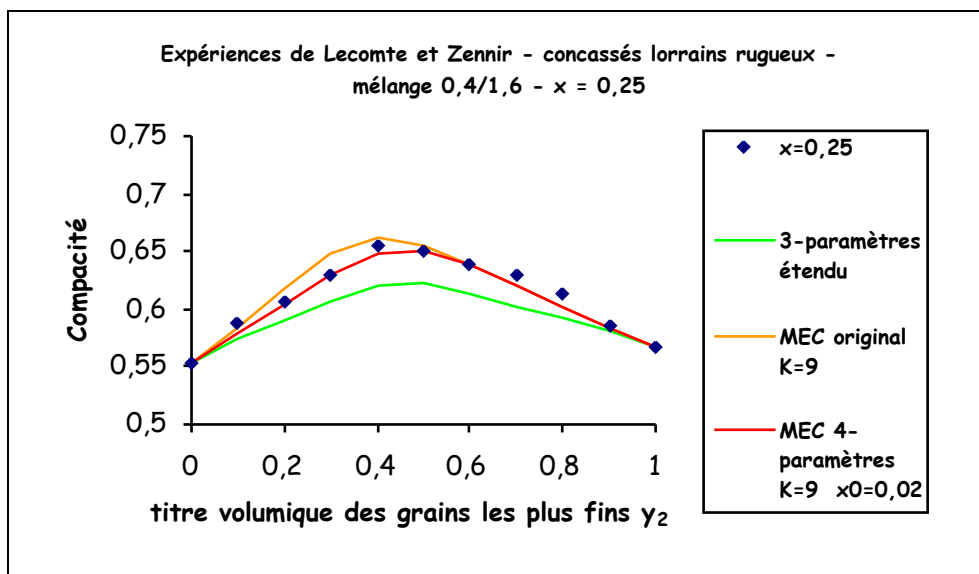
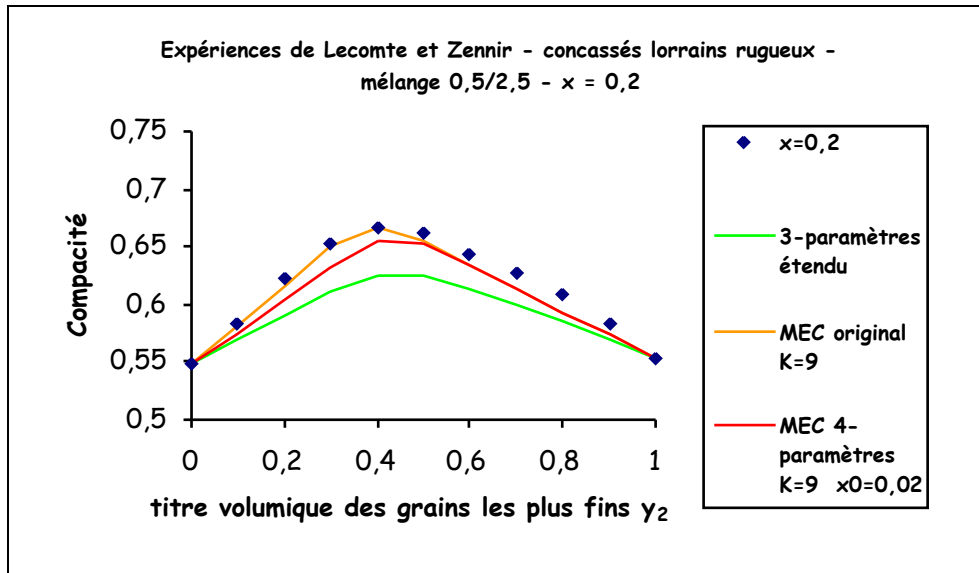
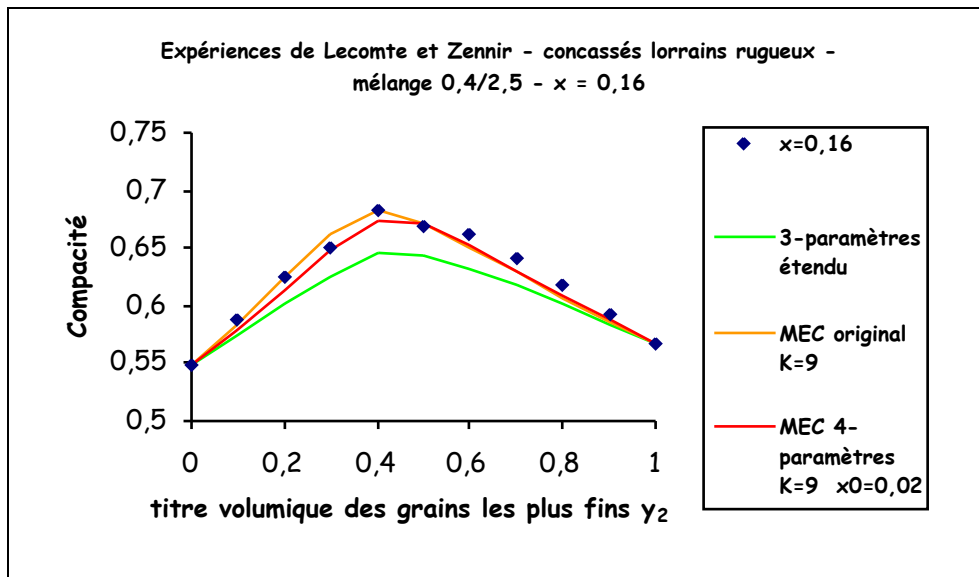
$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0,02$
				$K = 9$ a_{L00}, b_{L00}	$K = 9$ a_{ROAD}, b_{ROAD}		
0,5/1,6 0,3125	0,1	0,554	0,554	0,575	0,568	0,580	<u>0,574</u>
	0,2			0,608	0,581	<u>0,607</u>	0,594
	0,3			0,612	0,592	0,632	<u>0,614</u>
	0,4			0,630	0,601	0,643	<u>0,629</u>
	0,5			0,620	0,602	0,635	<u>0,630</u>
	0,6			0,615	0,594	<u>0,620</u>	<u>0,620</u>
	0,7			0,610	0,585	0,603	<u>0,604</u>
	0,8			0,597	0,575	0,586	<u>0,587</u>
	0,9			0,575	0,565	<u>0,570</u>	<u>0,570</u>
0,5/1,25 0,4	0,1	0,554	0,554	0,566	<u>0,564</u>	0,576	0,570
	0,2			0,587	0,573	0,598	<u>0,586</u>
	0,3			0,601	0,581	0,617	<u>0,601</u>
	0,4			0,608	0,587	0,625	<u>0,613</u>
	0,5			0,601	<u>0,588</u>	0,620	0,615
	0,6			0,601	0,583	0,609	<u>0,608</u>
	0,7			0,592	0,577	<u>0,595</u>	0,596
	0,8			0,575	<u>0,570</u>	0,581	0,582
	0,9			0,568	0,562	0,567	<u>0,568</u>
0,5/1 0,5	0,1	0,555	0,554	0,566	0,561	0,572	<u>0,567</u>
	0,2			0,583	0,567	0,589	<u>0,580</u>
	0,3			0,595	0,572	0,603	<u>0,591</u>
	0,4			0,601	0,575	0,609	<u>0,599</u>
	0,5			0,598	0,577	0,606	<u>0,601</u>
	0,6			0,589	0,573	<u>0,597</u>	<u>0,597</u>
	0,7			0,583	0,569	<u>0,587</u>	0,588
	0,8			0,572	0,564	<u>0,576</u>	0,577
	0,9			0,566	0,559	0,565	<u>0,566</u>

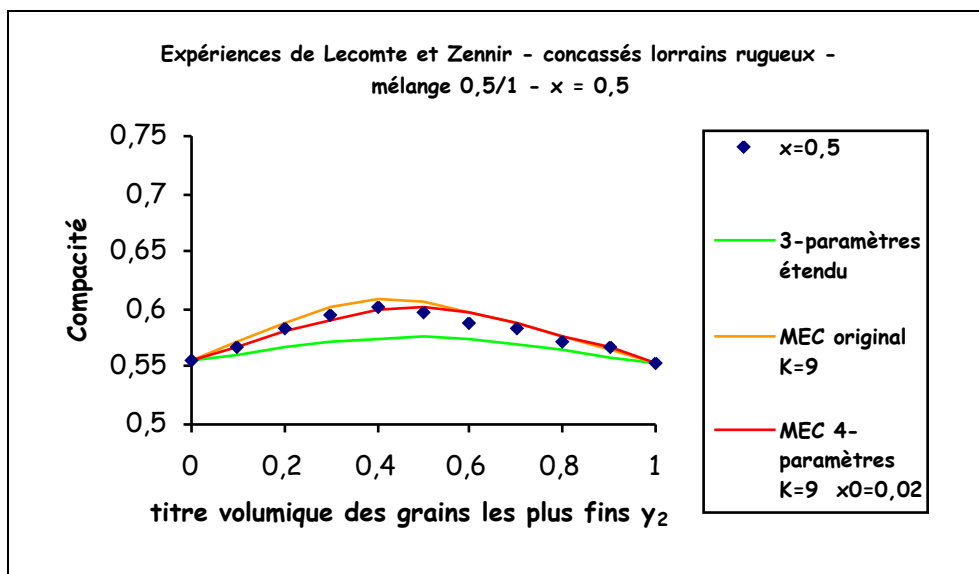
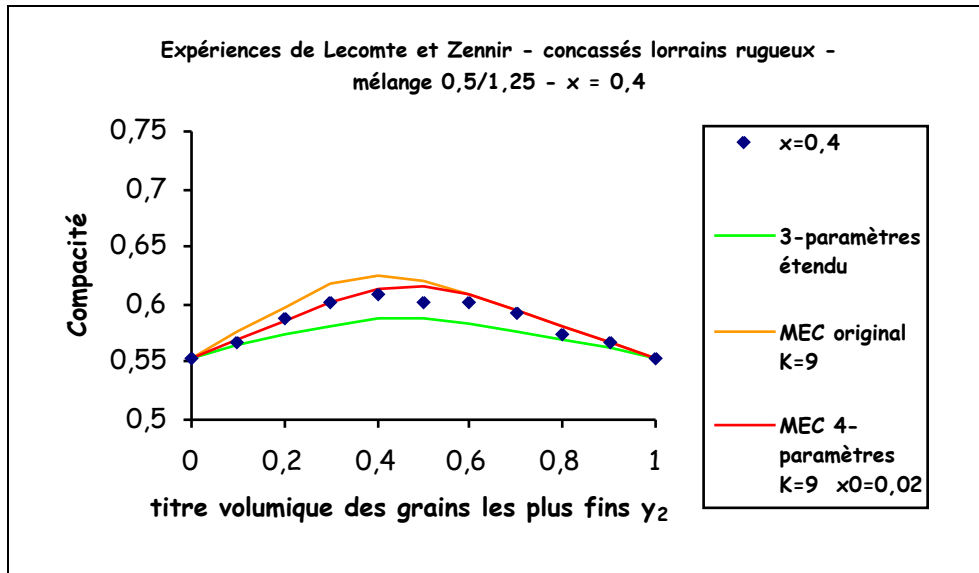
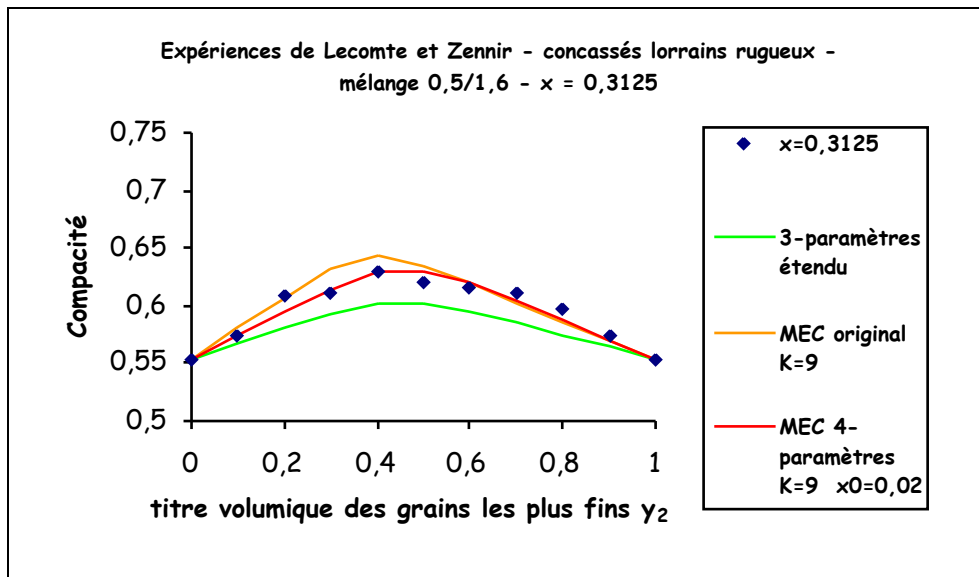
Tableau VII-32 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés rugueux d'après Lecomte et Zennir [LECO97]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,02$).

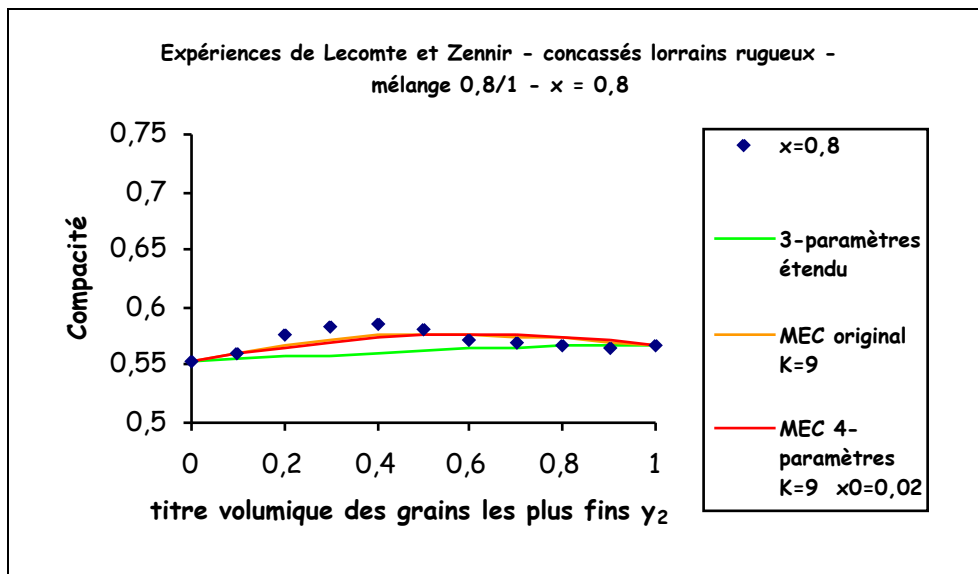
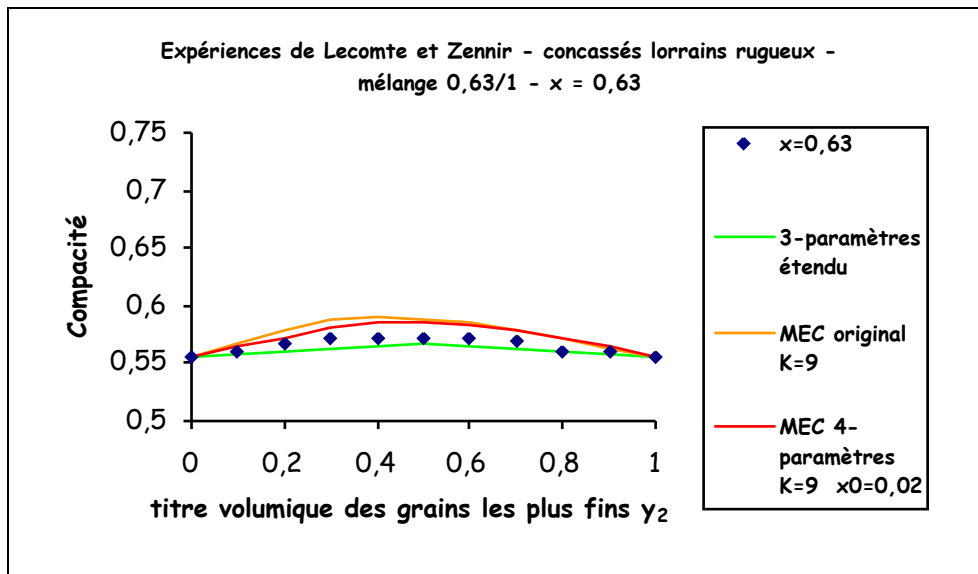
$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original $K = 9$ a_{L00}, b_{L00}	4-paramètres $x_0 = 0,02$ $K = 9$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
0,63/1 0,63	0,1	0,555	0,555	0,561	<u>0,558</u>	0,567	<u>0,564</u>
	0,2			0,566	<u>0,561</u>	0,578	0,572
	0,3			0,572	0,563	0,587	<u>0,580</u>
	0,4			0,572	<u>0,565</u>	0,591	0,585
	0,5			0,572	<u>0,566</u>	0,589	0,586
	0,6			0,572	<u>0,565</u>	0,585	0,584
	0,7			0,569	<u>0,562</u>	0,578	0,579
	0,8			0,561	<u>0,560</u>	0,571	0,572
	0,9			0,561	0,558	<u>0,563</u>	0,564
0,4/0,5 0,8	0,1	0,554	0,567	0,561	0,556	<u>0,561</u>	0,560
	0,2			0,577	0,558	<u>0,568</u>	0,565
	0,3			0,583	0,559	<u>0,572</u>	0,570
	0,4			0,586	0,561	<u>0,576</u>	0,574
	0,5			0,581	0,562	<u>0,577</u>	0,576
	0,6			0,572	0,564	<u>0,577</u>	<u>0,577</u>
	0,7			0,569	<u>0,565</u>	0,575	0,576
	0,8			0,566	<u>0,566</u>	0,573	0,574
	0,9			0,564	<u>0,566</u>	0,570	0,571

Tableau VII-33 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés rugueux d'après Lecomte et Zennir [LECO97]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0,02$).









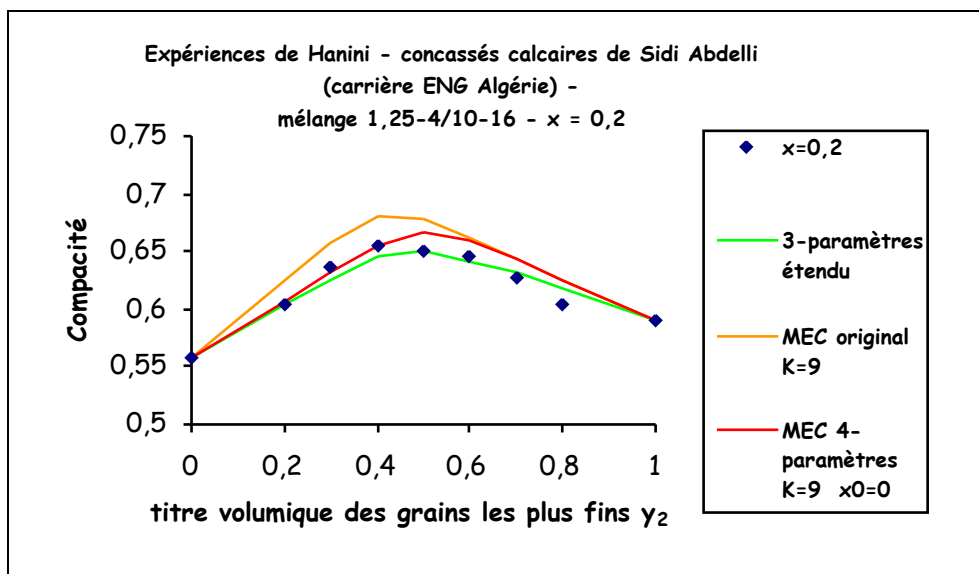
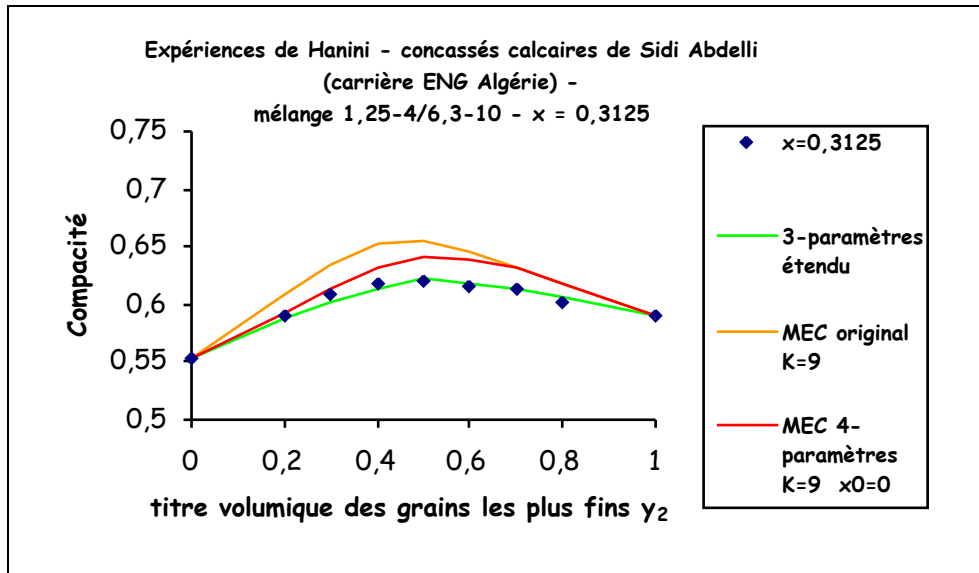
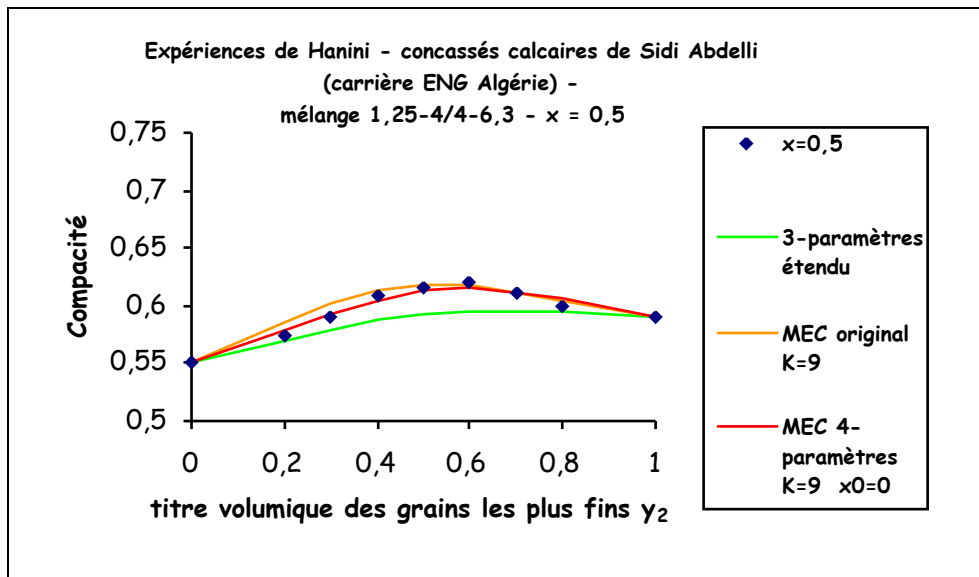
Figures VII-29 : expériences de Lecomte et Zennir. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=9$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=9$ et $x_0=0,02$).

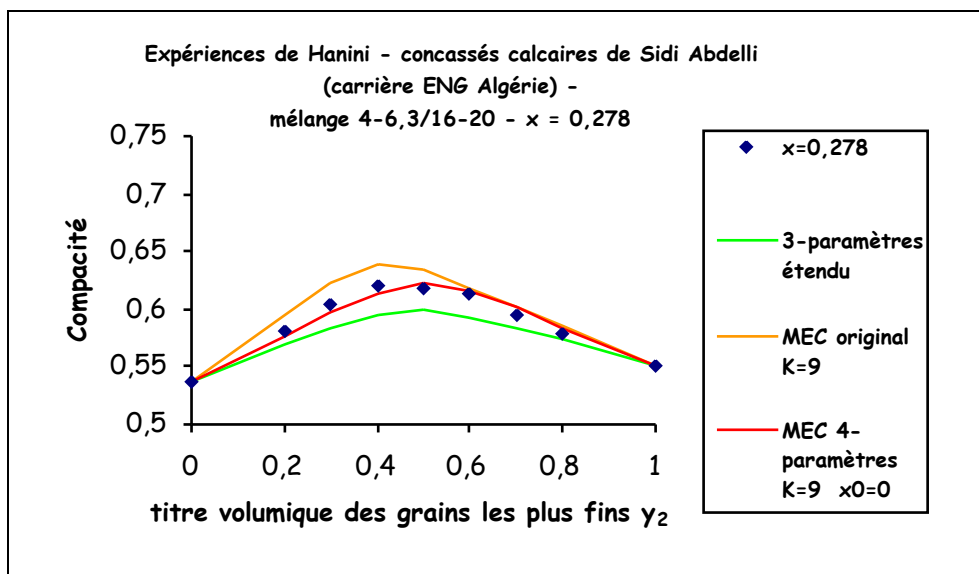
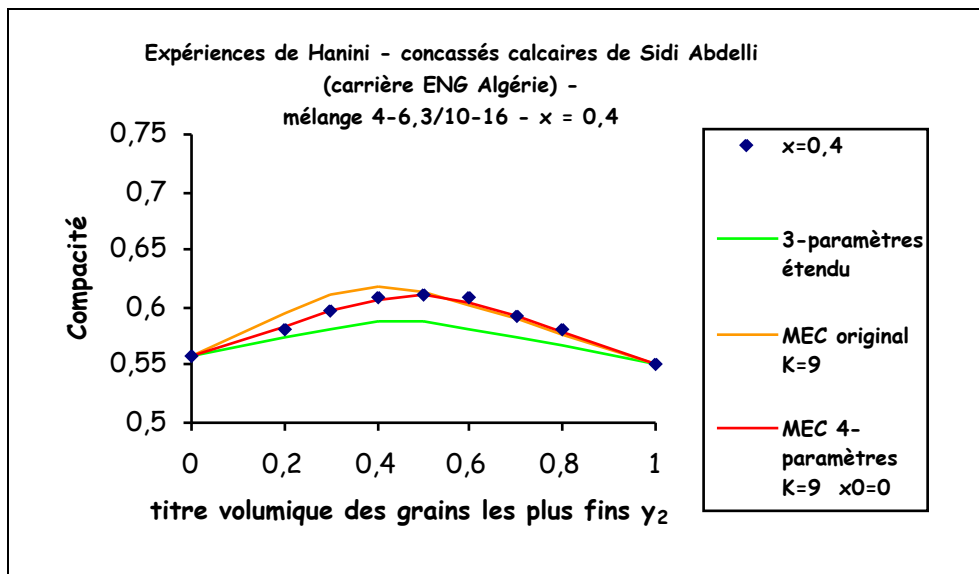
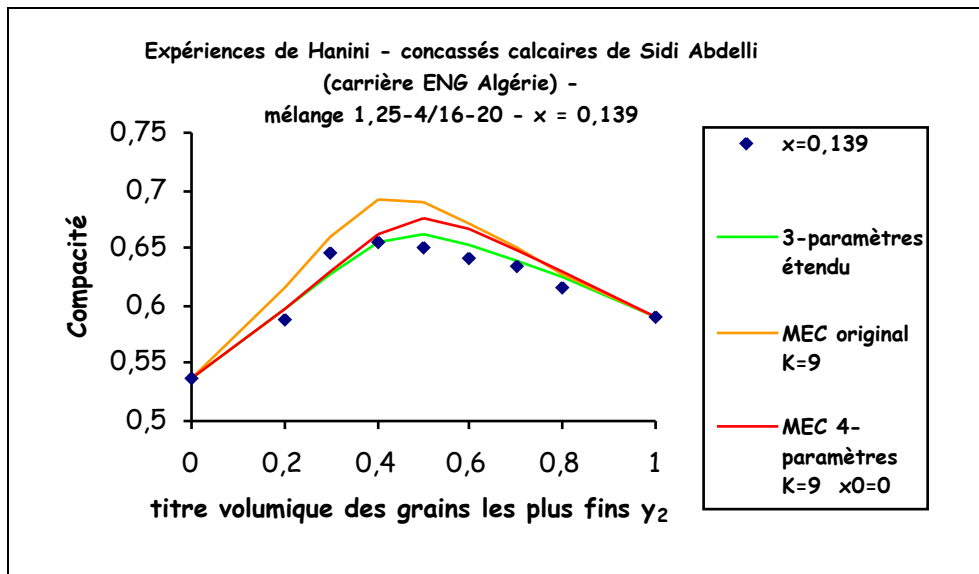
$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0$
						$K = 9$ a_{L00}, b_{L00}	$K = 9$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
1,25-4 / 4-6,3 x=0,5	0,2	0,551	0,591	0,575	0,570	0,585	<u>0,579</u>
	0,3			0,591	0,579	0,601	<u>0,593</u>
	0,4			0,609	0,587	<u>0,613</u>	<u>0,605</u>
	0,5			0,615	0,593	0,618	<u>0,613</u>
	0,6			0,620	0,595	<u>0,617</u>	0,615
	0,7			0,610	0,595	<u>0,612</u>	<u>0,612</u>
	0,8			0,599	<u>0,594</u>	0,605	0,606
1,25-4 / 6,3-10 x=0,3125	0,2	0,554	0,591	0,590	<u>0,587</u>	0,608	<u>0,593</u>
	0,3			0,608	0,601	0,635	<u>0,613</u>
	0,4			0,618	<u>0,614</u>	0,653	0,631
	0,5			0,621	<u>0,623</u>	0,655	0,641
	0,6			0,616	<u>0,619</u>	0,645	0,640
	0,7			0,613	<u>0,614</u>	0,632	0,631
	0,8			0,601	<u>0,607</u>	0,617	0,618
1,25-4 / 10-16 x=0,2	0,2	0,557	0,591	0,605	<u>0,604</u>	0,624	0,607
	0,3			0,636	0,626	0,658	<u>0,632</u>
	0,4			0,655	0,645	0,681	<u>0,656</u>
	0,5			0,650	<u>0,650</u>	0,678	0,666
	0,6			0,645	<u>0,641</u>	0,662	0,659
	0,7			0,628	<u>0,631</u>	0,643	0,643
	0,8			0,605	<u>0,618</u>	0,624	0,626
1,25-4 / 16-20 x=0,139	0,2	0,537	0,591	0,589	0,598	0,616	<u>0,597</u>
	0,3			0,646	0,627	<u>0,660</u>	0,630
	0,4			0,654	<u>0,654</u>	0,692	0,661
	0,5			0,651	<u>0,663</u>	0,690	0,676
	0,6			0,642	<u>0,653</u>	0,672	0,667
	0,7			0,635	<u>0,640</u>	0,650	0,649
	0,8			0,615	<u>0,625</u>	0,628	0,629

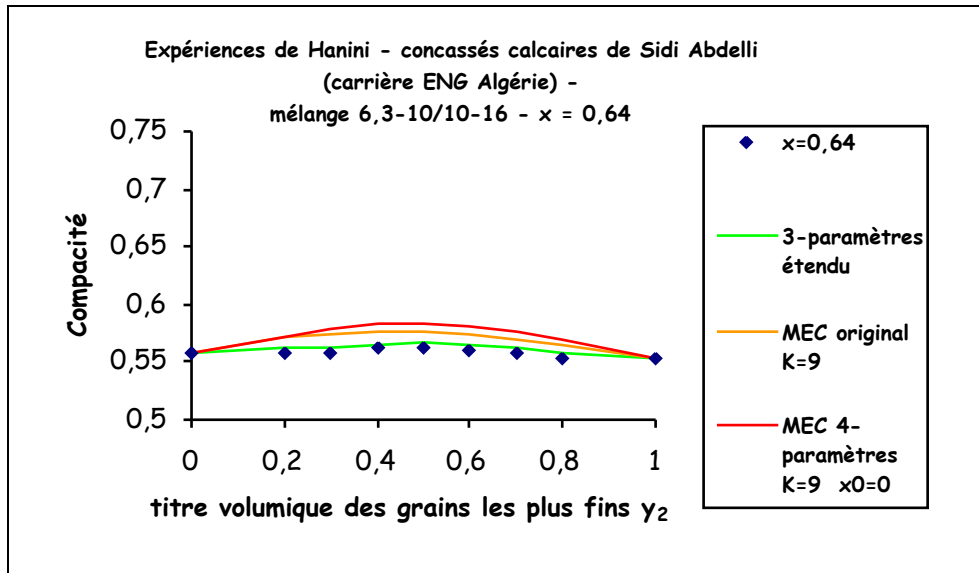
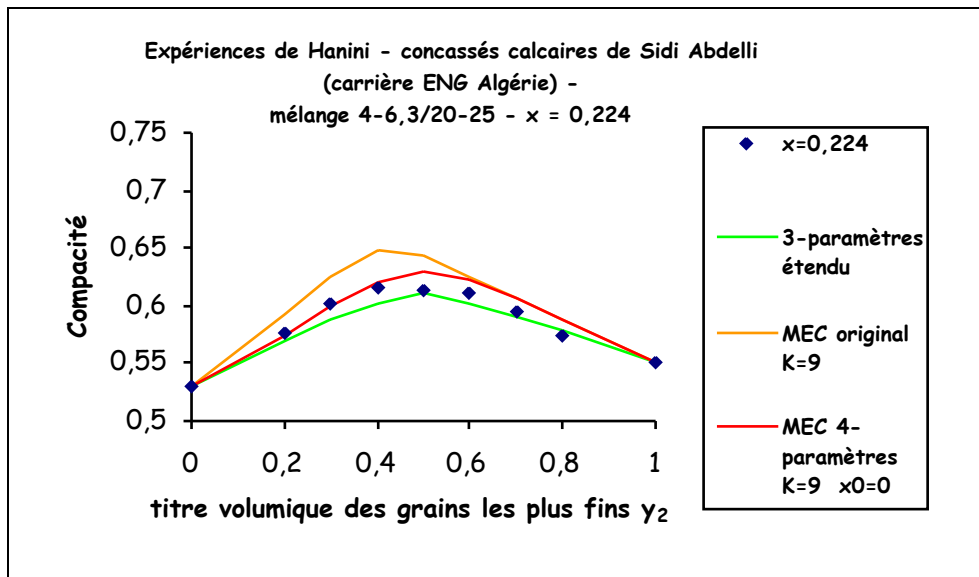
Tableau VII-34 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après Hanini [HANI12]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				expérience	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original $K = 9$ a_{L00}, b_{L00}	4-paramètres $x_0 = 0$ $K = 9$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
4-6,3 / 10-16 $x=0,4$	0,2	0,557	0,551	0,582	0,575	0,595	<u>0,584</u>
	0,3			0,598	0,582	0,610	<u>0,597</u>
	0,4			0,609	0,588	0,617	<u>0,607</u>
	0,5			0,611	0,588	0,613	<u>0,610</u>
	0,6			0,608	0,582	0,603	<u>0,604</u>
	0,7			0,592	0,575	0,590	<u>0,593</u>
	0,8			0,581	0,567	0,577	<u>0,579</u>
4-6,3 / 16-20 $x=0,278$	0,2	0,537	0,551	0,580	0,569	0,594	<u>0,577</u>
	0,3			0,605	0,583	0,622	<u>0,597</u>
	0,4			0,621	0,595	0,638	<u>0,614</u>
	0,5			0,619	0,600	0,634	<u>0,622</u>
	0,6			0,613	0,593	0,619	<u>0,615</u>
	0,7			0,595	0,584	0,602	<u>0,601</u>
	0,8			0,579	<u>0,574</u>	0,585	<u>0,584</u>
4-6,3 / 20-25 $x=0,224$	0,2	0,529	0,551	0,576	0,569	0,593	<u>0,575</u>
	0,3			0,603	0,587	0,626	<u>0,599</u>
	0,4			0,616	0,602	0,647	<u>0,620</u>
	0,5			0,614	<u>0,610</u>	0,643	0,630
	0,6			0,610	<u>0,601</u>	0,626	0,622
	0,7			0,594	<u>0,590</u>	0,607	0,606
	0,8			0,575	<u>0,578</u>	0,587	0,587
6,3-10 / 10-16 $x=0,64$	0,2	0,557	0,554	0,558	<u>0,562</u>	0,571	0,572
	0,3			0,559	<u>0,563</u>	0,575	0,578
	0,4			0,562	<u>0,565</u>	0,577	0,583
	0,5			0,562	<u>0,566</u>	0,577	0,584
	0,6			0,561	<u>0,564</u>	0,574	0,582
	0,7			0,557	<u>0,562</u>	0,570	0,577
	0,8			0,554	<u>0,559</u>	0,565	0,570

Tableau VII-35 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après Hanini [HANI12]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original (K=9) et avec le MEC 4-paramètres (K=9 et $x_0=0$).







Figures VII-30 : expériences de Hanini. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=9$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=9$ et $x_0=0$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				Expérience (valeurs lues dans [KWAN15])	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0$
						$K = 4,75$ a_{L00}, b_{L00}	$K = 5,6$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
F1C1 0,119	0,1	0,57	0,54	0,59	0,600	0,606	<u>0,598</u>
	0,2			0,63	<u>0,630</u>	0,642	0,625
	0,3			0,65	0,656	0,668	<u>0,649</u>
	0,4			0,66	0,661	0,670	<u>0,660</u>
	0,5			0,65	0,644	0,654	<u>0,650</u>
	0,6			0,63	0,625	0,631	<u>0,630</u>
	0,7			0,60	<u>0,604</u>	0,607	0,607
	0,8			0,58	<u>0,583</u>	<u>0,583</u>	0,584
	0,9			0,56	<u>0,561</u>	<u>0,561</u>	<u>0,561</u>
F2C1 0,236	0,1	0,57	0,54	0,58	<u>0,587</u>	0,598	0,590
	0,2			0,60	<u>0,602</u>	0,624	0,609
	0,3			0,61	<u>0,615</u>	0,642	0,624
	0,4			0,62	<u>0,625</u>	0,645	0,632
	0,5			0,61	<u>0,614</u>	0,634	0,628
	0,6			0,60	<u>0,600</u>	0,617	0,615
	0,7			0,59	<u>0,586</u>	0,597	0,597
	0,8			0,57	<u>0,571</u>	0,578	0,577
	0,9			0,56	0,556	<u>0,558</u>	<u>0,558</u>
F3C1 0,486	0,1	0,57	0,54	0,58	0,574	0,585	<u>0,580</u>
	0,2			0,58	<u>0,577</u>	0,597	0,588
	0,3			0,58	<u>0,580</u>	0,605	0,594
	0,4			0,58	<u>0,581</u>	0,606	0,597
	0,5			0,58	<u>0,577</u>	0,600	0,594
	0,6			0,57	<u>0,570</u>	0,591	0,588
	0,7			0,57	<u>0,563</u>	0,579	0,578
	0,8			0,56	<u>0,556</u>	0,566	0,566
	0,9			0,55	<u>0,548</u>	0,553	0,553

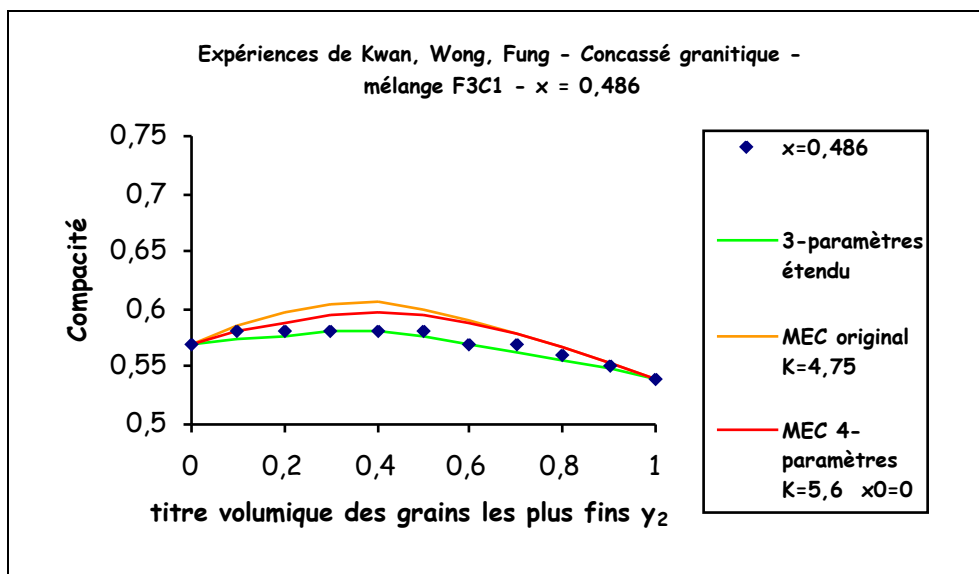
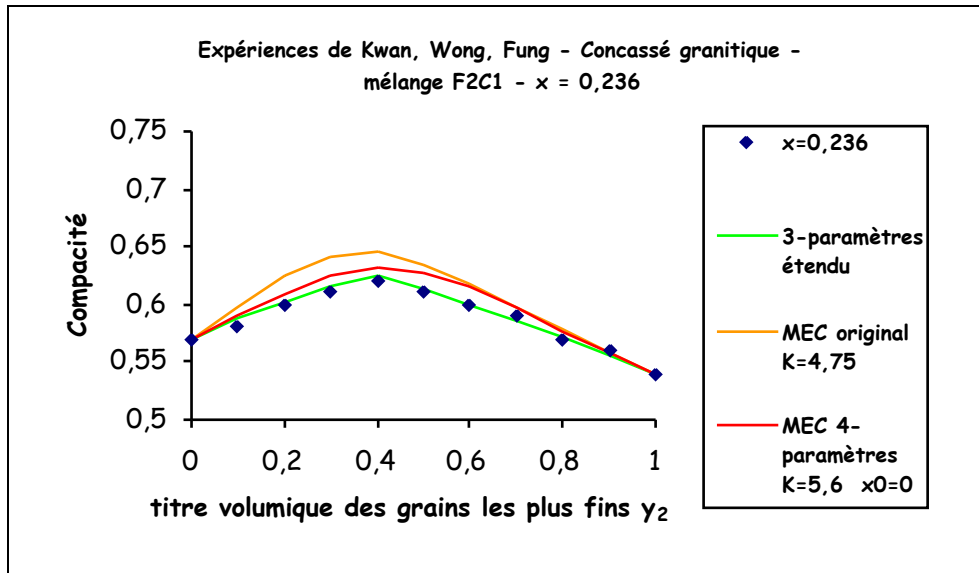
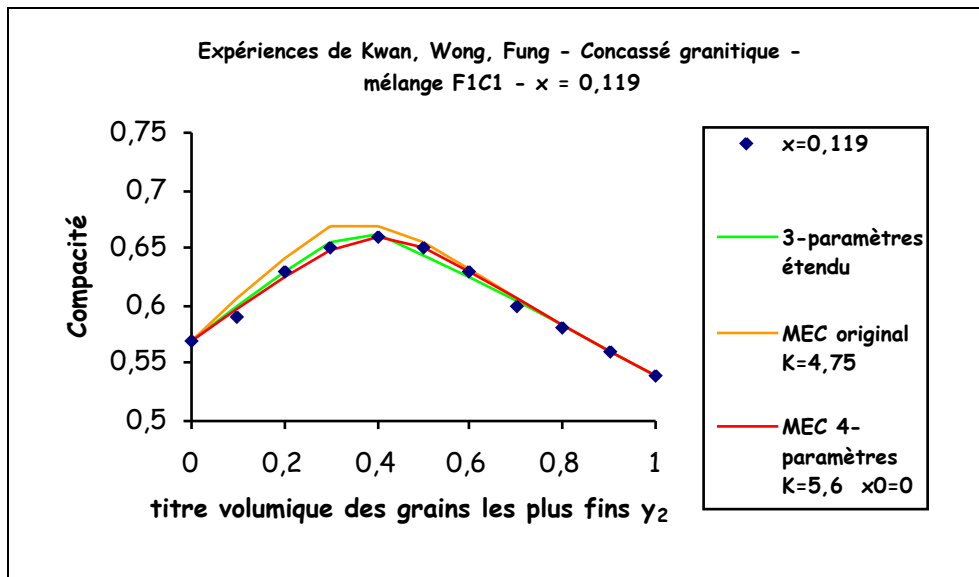
Tableau VII-36 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après Kwan, Wong, Fung [KWAN15]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=4,75$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=5,6$ et $x_0=0$).

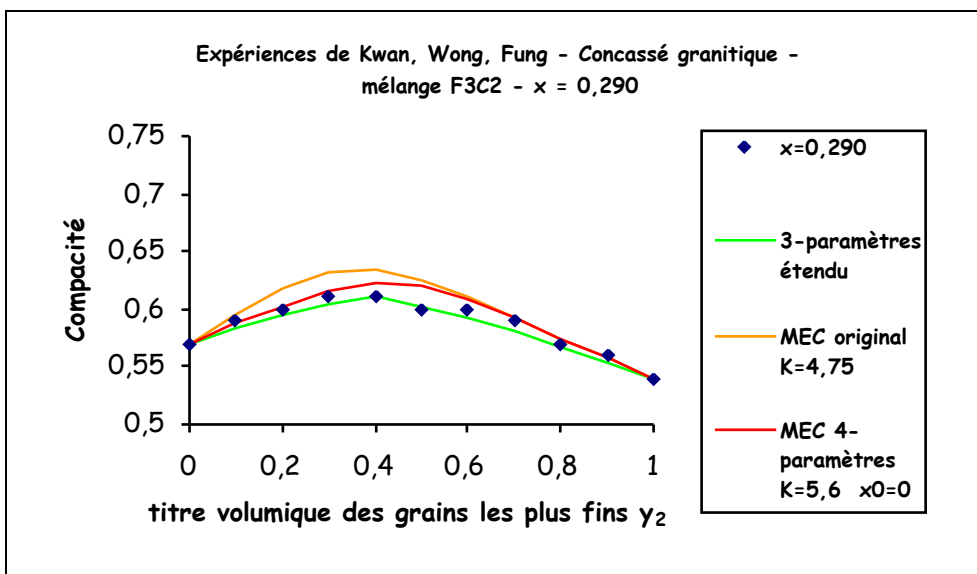
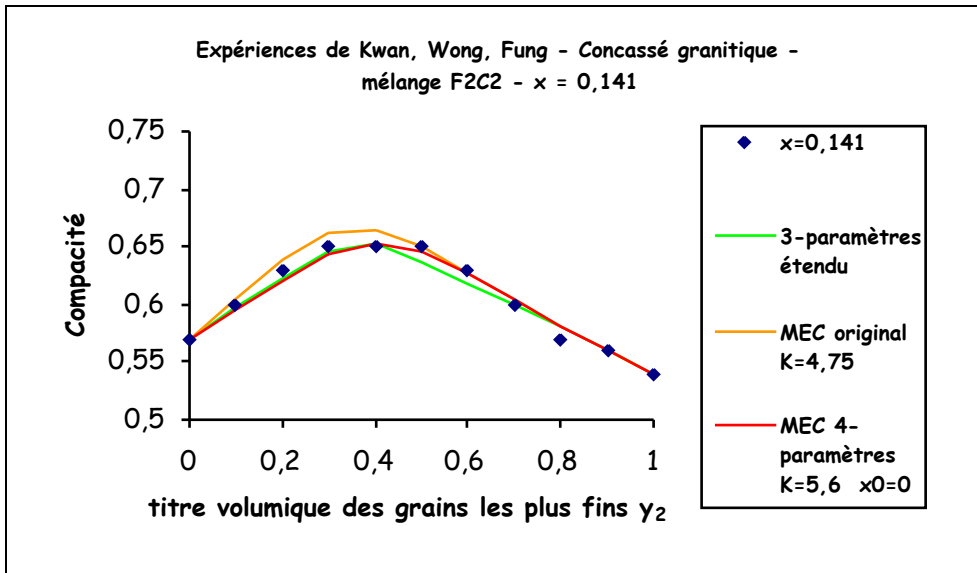
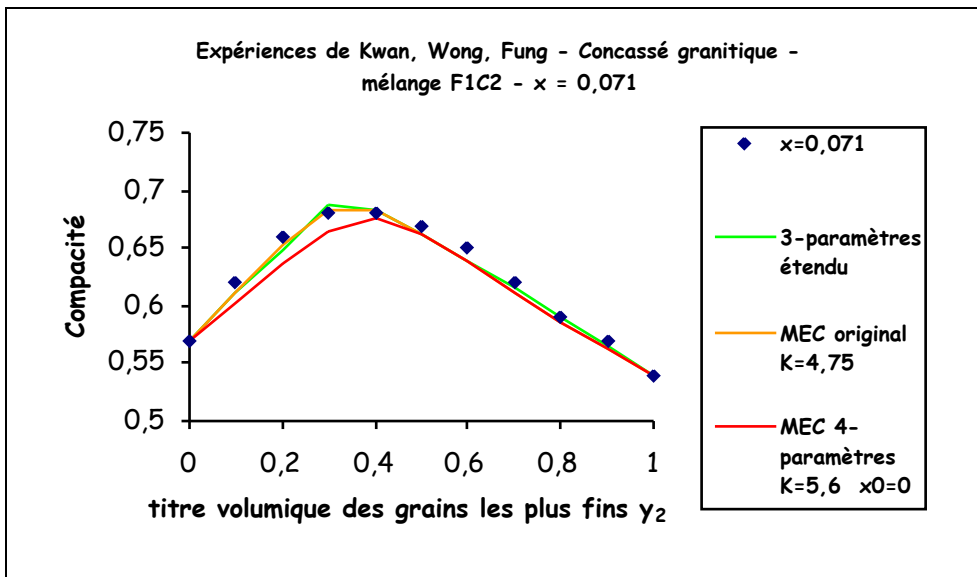
$x = \frac{d_2}{d_1}$	Y_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				Expérience (valeurs lues dans [KWAN15])	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original	4-paramètres $x_0 = 0$
						$K = 4,75$ a_{L00}, b_{L00}	$K = 5,6$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
F1C2 0,071	0,1	0,57	0,54	0,62	0,610	<u>0,611</u>	0,603
	0,2			0,66	0,649	<u>0,652</u>	0,636
	0,3			0,68	0,687	<u>0,682</u>	0,665
	0,4			0,68	<u>0,683</u>	<u>0,683</u>	0,675
	0,5			0,67	0,662	<u>0,663</u>	0,662
	0,6			0,65	<u>0,639</u>	0,638	0,638
	0,7			0,62	<u>0,615</u>	0,611	0,612
	0,8			0,59	<u>0,590</u>	0,586	0,586
	0,9			0,57	<u>0,564</u>	0,562	0,562
F2C2 0,141	0,1	0,57	0,54	0,60	<u>0,597</u>	0,604	0,596
	0,2			0,63	<u>0,623</u>	0,638	0,621
	0,3			0,65	<u>0,646</u>	0,662	0,643
	0,4			0,65	<u>0,653</u>	0,665	<u>0,653</u>
	0,5			0,65	0,637	<u>0,650</u>	0,646
	0,6			0,63	0,619	<u>0,628</u>	0,627
	0,7			0,60	<u>0,600</u>	0,605	0,605
	0,8			0,57	<u>0,580</u>	0,582	0,582
	0,9			0,56	<u>0,560</u>	0,561	0,561
F3C2 0,290	0,1	0,57	0,54	0,59	0,583	0,594	<u>0,587</u>
	0,2			0,60	0,595	0,617	<u>0,603</u>
	0,3			0,61	<u>0,604</u>	0,633	<u>0,616</u>
	0,4			0,61	<u>0,611</u>	0,635	0,623
	0,5			0,60	<u>0,603</u>	0,626	0,620
	0,6			0,60	<u>0,592</u>	0,611	<u>0,608</u>
	0,7			0,59	0,580	0,593	<u>0,592</u>
	0,8			0,57	<u>0,567</u>	0,575	0,575
	0,9			0,56	0,553	<u>0,557</u>	<u>0,557</u>

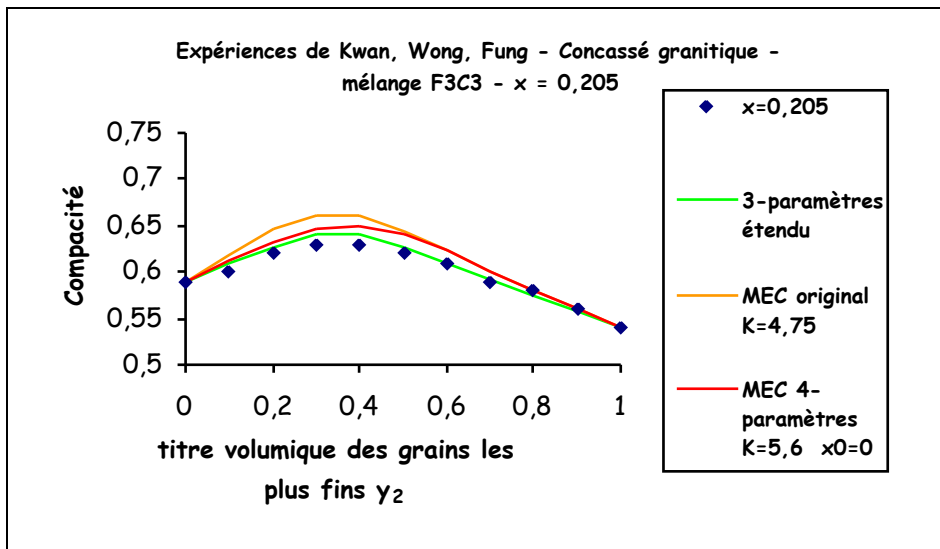
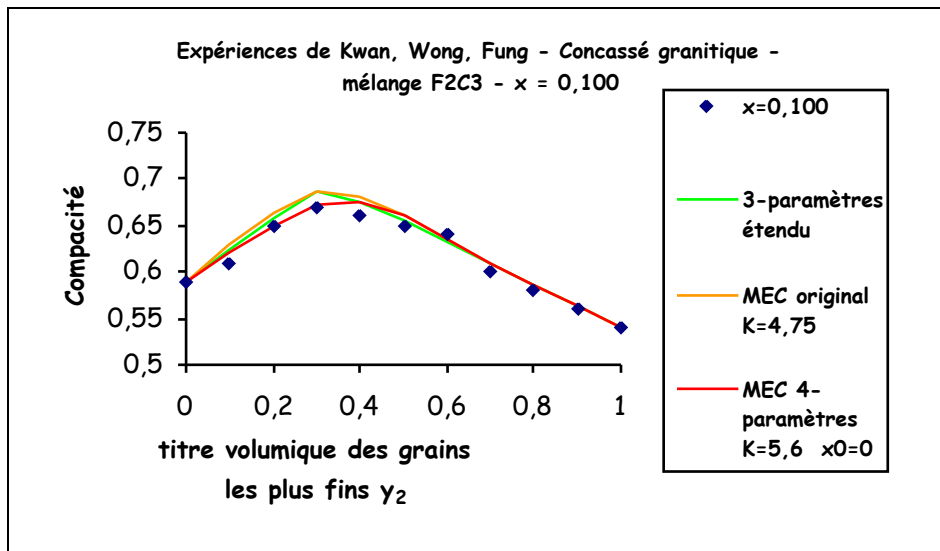
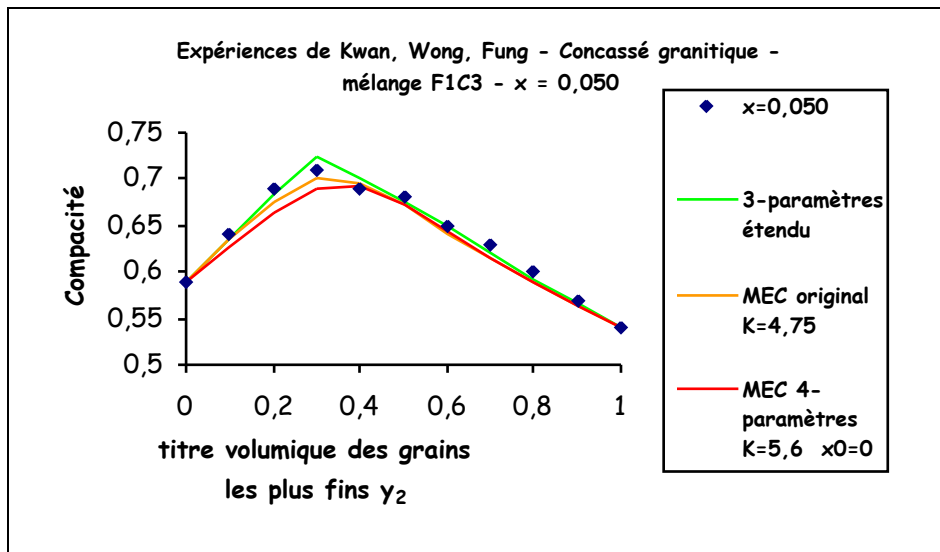
Tableau VII-37 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après Kwan, Wong, Fung [KWAN15]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=4,75$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=5,6$ et $x_0=0$).

$x = \frac{d_2}{d_1}$	γ_2	α_1	α_2	Compacité ϕ^*			
				Expérience (valeurs lues dans [KWAN15])	Modèle 3-paramètres étendu	MEC	
						original $K = 4,75$ a_{L00}, b_{L00}	4-paramètres $x_0 = 0$ $K = 5,6$ a_{ROAD}, b_{ROAD}
F1C3 0,050	0,1	0,59	0,54	0,64	<u>0,636</u>	0,634	0,627
	0,2			0,69	<u>0,683</u>	0,676	0,664
	0,3			0,71	<u>0,725</u>	<u>0,702</u>	0,691
	0,4			0,69	0,702	0,695	<u>0,692</u>
	0,5			0,68	<u>0,676</u>	0,671	0,671
	0,6			0,65	<u>0,649</u>	0,642	0,643
	0,7			0,63	<u>0,621</u>	0,614	0,615
	0,8			0,60	<u>0,593</u>	0,588	0,588
	0,9			0,57	<u>0,566</u>	0,563	0,563
F2C3 0,100	0,1	0,59	0,54	0,61	0,624	0,628	<u>0,620</u>
	0,2			0,65	0,657	0,664	<u>0,649</u>
	0,3			0,67	0,686	0,686	<u>0,672</u>
	0,4			0,66	<u>0,674</u>	0,682	0,676
	0,5			0,65	<u>0,654</u>	0,662	0,660
	0,6			0,64	0,632	<u>0,636</u>	<u>0,636</u>
	0,7			0,60	<u>0,610</u>	<u>0,610</u>	<u>0,610</u>
	0,8			0,58	0,586	<u>0,585</u>	0,586
	0,9			0,56	0,563	<u>0,562</u>	<u>0,562</u>
F3C3 0,205	0,1	0,59	0,54	0,60	<u>0,609</u>	0,619	0,611
	0,2			0,62	<u>0,626</u>	0,646	0,631
	0,3			0,63	<u>0,640</u>	0,662	0,646
	0,4			0,63	<u>0,641</u>	0,660	0,650
	0,5			0,62	<u>0,626</u>	0,645	0,641
	0,6			0,61	<u>0,610</u>	0,624	0,623
	0,7			0,59	<u>0,593</u>	0,602	0,602
	0,8			0,58	0,575	<u>0,580</u>	<u>0,580</u>
	0,9			0,56	0,558	<u>0,560</u>	<u>0,560</u>

Tableau VII-38 : compacités expérimentales obtenues sur des grains concassés d'après Kwan, Wong, Fung [KWAN15]. Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=4,75$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=5,6$ et $x_0=0$).







Figures VII-31 : expériences de Kwan *et al.* Comparaison avec le modèle 3-paramètres étendu, avec le MEC original ($K=4,75$) et avec le MEC 4-paramètres ($K=5,6$ et $x_0=0$).

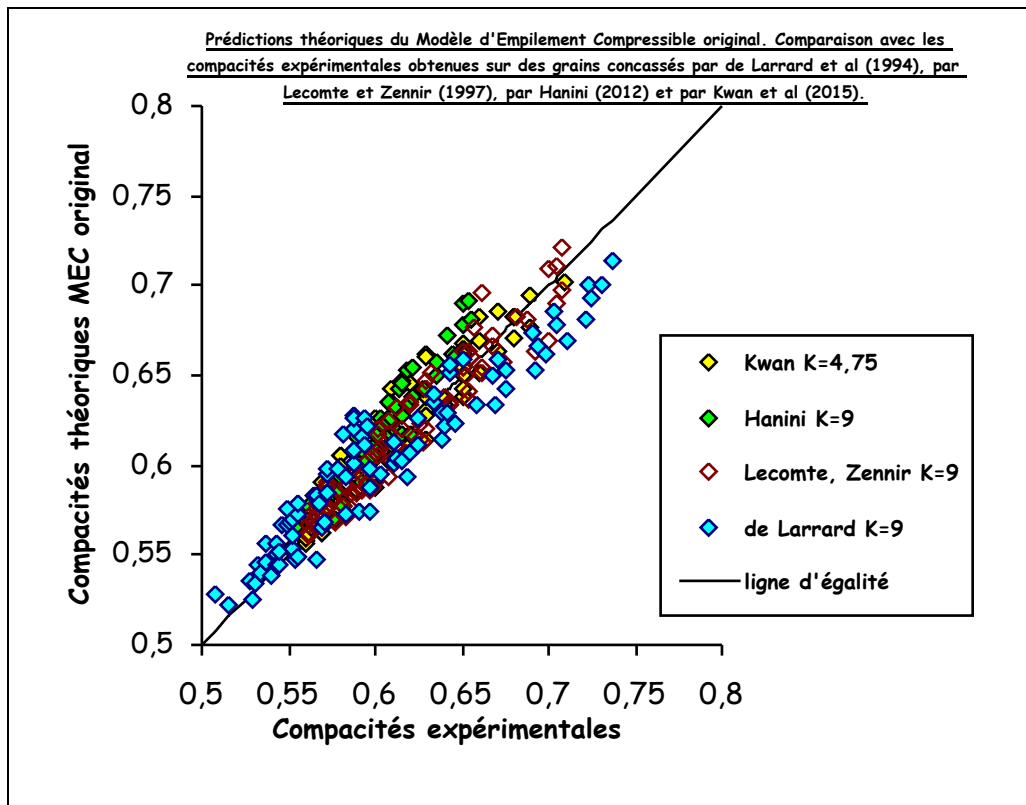


Figure VII-32 : Prédictions théoriques du MEC original versus résultats expérimentaux.

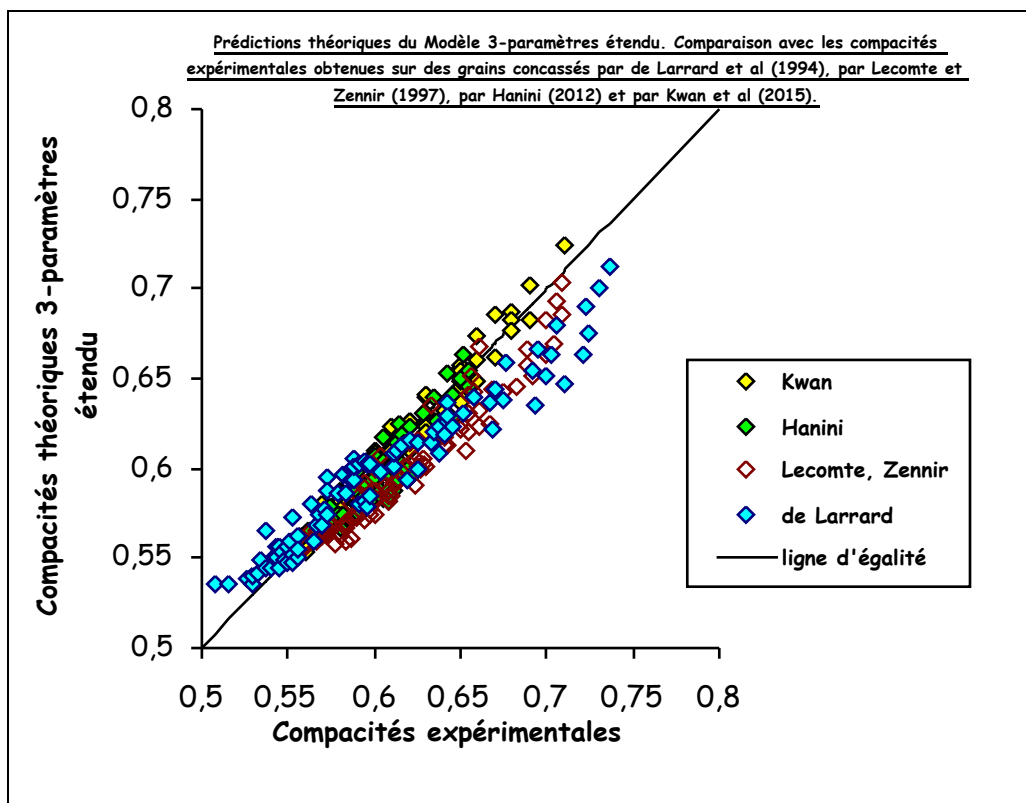


Figure VII-33 : Prédictions théoriques du modèle 3-paramètres étendu versus résultats expérimentaux.

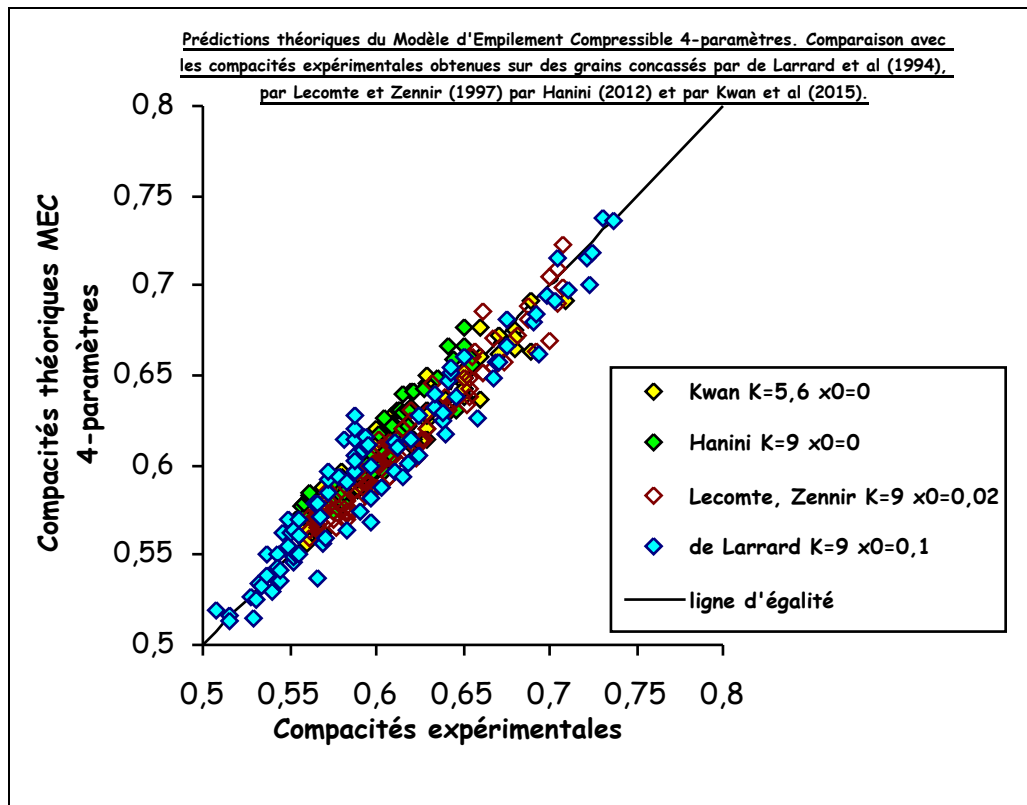


Figure VII-34 : Prédictions théoriques du MEC 4-paramètres versus résultats expérimentaux.

Les indicateurs statistiques sont dans le tableau suivant :

Modèle :		MEC original	3-paramètres étendu	MEC 4-paramètres
Expériences	de Larrard, Sedran, Angot	$\phi_{théo}^* = 0,757 \phi_{exp}^* + 0,146$ $\xi = 0,016$ $r = 0,9555$	$\phi_{théo}^* = 0,697 \phi_{exp}^* + 0,176$ $\xi = 0,016$ $r = 0,9700$	$\phi_{théo}^* = 0,924 \phi_{exp}^* + 0,045$ $\xi = 0,012$ $r = 0,9690$
	Lecomte, Zennir	$\phi_{théo}^* = 0,933 \phi_{exp}^* + 0,042$ $\xi = 0,009$ $r = 0,9611$	$\phi_{théo}^* = 0,843 \phi_{exp}^* + 0,080$ $\xi = 0,017$ $r = 0,9670$	$\phi_{théo}^* = 0,926 \phi_{exp}^* + 0,040$ $\xi = 0,008$ $r = 0,9724$
	Hanini	$\phi_{théo}^* = 1,186 \phi_{exp}^* - 0,097$ $\xi = 0,016$ $r = 0,9563$	$\phi_{théo}^* = 0,938 \phi_{exp}^* + 0,031$ $\xi = 0,010$ $r = 0,9183$	$\phi_{théo}^* = 0,951 \phi_{exp}^* + 0,030$ $\xi = 0,010$ $r = 0,9325$
	Kwan, Wong, Fung	$\phi_{théo}^* = 0,955 \phi_{exp}^* + 0,035$ $\xi = 0,012$ $r = 0,9501$	$\phi_{théo}^* = 1,027 \phi_{exp}^* - 0,016$ $\xi = 0,006$ $r = 0,9853$	$\phi_{théo}^* = 0,886 \phi_{exp}^* + 0,072$ $\xi = 0,009$ $r = 0,9630$
Bilan global sur environ 335 résultats		$\xi = 0,013$ $r = 0,9408$	$\xi = 0,013$ $r = 0,9455$	$\xi = 0,010$ $r = 0,9642$

Tableau VII-39 : paramètres de régression linéaire, écart moyen ξ et coefficient de corrélation r pour les 3 modèles testés sur des expériences réalisées avec des grains concassés anguleux plus ou moins rugueux.

Concernant les granulats concassés, les résultats sont plus hétérogènes que pour les roulés.

Le MEC original présente les caractéristiques les moins favorables avec un coefficient de corrélation pour l'ensemble des 335 résultats égal à $r=0,94$. Concernant le concassé de Arnay-le-Duc (expériences de de Larrard *et al.*), il a tendance à sous-estimer les fortes compacités pour les très faibles rapports de tailles x et à les surestimer dans le cas contraire. Concernant le calcaire algérien (Hanini), on note une propension générale à majorer les valeurs obtenues, notamment car les effets de desserrement et d'interférence ne sont pas suffisamment pris en compte. À l'optimum de chaque mélange enfin (figure VII-35), excepté pour les très fortes compacités, il surestime globalement les résultats car les expressions des coefficients d'interaction sont identiques à celles utilisées pour les roulés et ne sont pas, par conséquent, spécifiquement adaptées aux concassés.

Le modèle 3-paramètres étendu possède des capacités prédictives correctes pour le calcaire algérien et excellentes pour le concassé granitique (Kwan *et al.*), ce dernier ayant été utilisé pour son calibrage. En revanche, il se révèle moins performant pour les deux autres granulats, entraînant l'obtention d'un coefficient de corrélation global ($r=0,9455$) assez proche de celui résultant de l'analyse du MEC original. Concernant le calcaire lorrain (Lecomte, Zennir), sa tendance à sous-évaluer les compacités se remarque pour l'ensemble des valeurs testées. Elle est accentuée du côté des mélanges à forte densité, le phénomène s'amplifiant encore plus pour le concassé de Arnay-le-Duc. L'analyse des prédictions du modèle 3-paramètres à l'optimum (figure VII-35) montre effectivement qu'il pêche par pessimisme dans les zones où les mélanges binaires sont les plus compacts, c'est-à-dire celles qui intéressent en priorité l'ingénieur.

Le MEC 4-paramètres, enfin, parvient partiellement à corriger ce défaut en adaptant le rapport de tailles de cavernes critique x_0 à la plus ou moins forte réaction granulaire développée par le granulat du côté des « gros dominants ». Mais là où x_0 a été calibré comme étant proportionnel au rapport des tailles x pour les roulés, il semble ici que l'adoption d'une valeur constante de x_0 par type de matériau, mais évolutive (de 0,1 à 0) en fonction de la rugosité que chacun d'entre eux développe, soit la mieux adaptée à un granulat anguleux.

Au final, le MEC 4-paramètres est celui qui fournit le coefficient de corrélation le plus fort ($r = 0,9642$) et l'écart moyen le plus faible ($\xi = 0,010$) sur la globalité des 335 résultats recueillis sur les concassés de Arnay-le-Duc, du Bajocien lorrain, de la région de Tlemcen et ceux utilisés par Kwan A.K.H., Wong V., Fung W.W.S.. Les résultats qu'il fournit à l'optimum de chaque mélange (figure VII-35) sont également les plus homogènes.

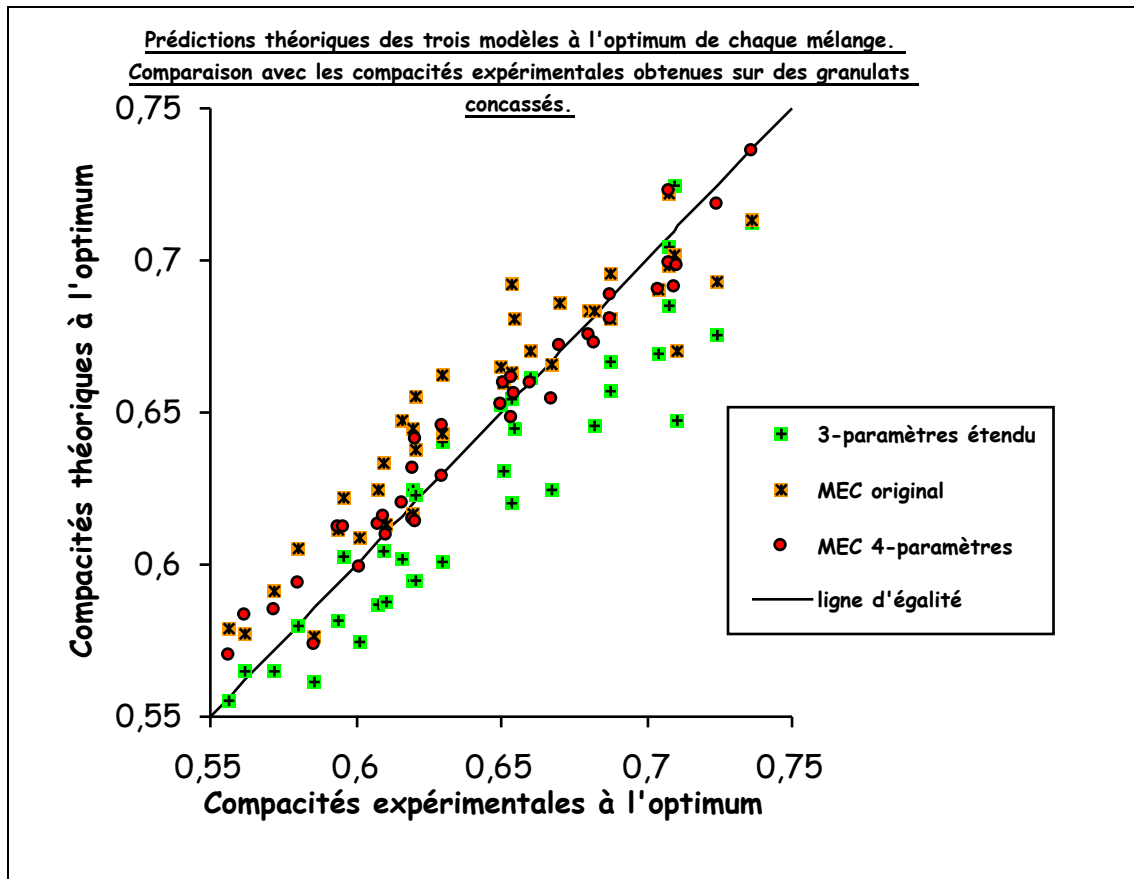


Figure VII-35 : Prédictions théoriques des trois modèles testés à l'optimum de chaque mélange constitué de granulats concassés versus résultats expérimentaux.

En conclusion, l'exactitude et l'applicabilité de trois modèles ont été évalués : le Modèle d'Empilement Compressible MEC original (avec les coefficients b , a et l'indice de serrage K), le modèle 3-paramètres original (pour les particules sphériques et les granulats roulés) ou étendu (pour les granulats concassés) (avec les coefficients b , a et c) et le MEC 4-paramètres (avec les coefficients b , a auquel on associe un rapport de tailles de cavernes critique x_0 et l'indice de serrage K).

Pour cela, nous avons confronté leurs prévisions de compacités avec 300 valeurs concernant des particules sphériques, 20 valeurs obtenues par simulation numérique sur des billes sans frottement, 125 liées à deux granulats roulés et 335 à quatre granulats concassés, soit un total d'environ 780 valeurs.

Les comparaisons ont été conduites en représentant graphiquement, pour chaque type de particules, les compacités théoriques en fonction des résultats expérimentaux. Trois indicateurs statistiques ont ensuite été utilisés : la droite de régression, l'écart moyen et le coefficient de corrélation.

L'une des faiblesses du MEC original, qui consistait tantôt à sous-évaluer les fortes compacités à l'optimum pour les faibles rapports de tailles pour des éléments sphériques (alors que son prédécesseur, le modèle linéaire de compacité, les surestimait), tantôt à les surévaluer pour les concassés, a ainsi été corrigée dans le MEC 4-paramètres grâce à l'introduction d'un rapport de tailles de caverne critique. L'un des points forts de ce nouveau modèle est en effet qu'il résulte d'un cheminement ayant permis d'aboutir à une théorie sur l'effet de paroi, l'effet de desserrement et, par extension, l'effet d'interférence, qui montre qu'il n'y a pas une courbe unique pour chacun des coefficients d'interaction. Et même si son domaine de prédilection reste celui des empilements de billes, nous avons montré qu'il pouvait s'appliquer avec efficacité sur les granulats réellement utilisés dans les compositions de béton.

En effet, pour l'ensemble des matériaux testés dans des mélanges binaires dont les rapports de tailles évoluent entre 0,0093 et 0,8, le MEC 4-paramètres est celui qui fournit les estimations les plus fiables avec un coefficient de corrélation et un écart moyen respectifs de $r=0,9904$ et $\xi=0,007$ pour les empilements réels de billes, $r=0,9877$ et $\xi=0,006$ pour les empilements simulés numériquement, $r=0,9788$ et $\xi=0,007$ pour les mélanges de granulats roulés et $r=0,9642$ et $\xi=0,010$ pour les mélanges de granulats concassés.

CHAPITRE 8

MODÈLE DE VISCOSITÉ ASSOCIÉ AU MODÈLE D'EMPILEMENT COMPRESSIBLE 4-PARAMÈTRES.

Une multitude de matériaux hétérogènes, tels que les bétons, les enrobés à base de bitume, sont d'autant plus faciles à mettre en œuvre qu'ils présentent une faible viscosité. Parallèlement, on cherche à composer un mélange compact, non seulement pour obtenir une bonne résistance, mais également dans le but de diminuer la perméabilité du matériau durci aux gaz et aux fluides afin d'assurer une plus grande pérennité à l'ouvrage.

La méthode de formulation d'un béton, par exemple, se décompose souvent en deux étapes [DELA88]. La première consiste à élaborer le « meilleur » matériau à partir des constituants dont on dispose. Le béton peut alors être appréhendé comme une suspension concentrée dont on souhaite maximiser la compacité (diminution du dosage en eau) pour une consistance donnée que l'on va relier, de façon très simplifiée, à la viscosité. La deuxième étape concerne la minimisation du coût tout en s'assurant que le béton continue à satisfaire les exigences demandées : on cherche alors à réduire la quantité du composant le plus cher (liant, fumée de silice) tout en jouant sur le dosage en eau ou en fluidifiant pour obtenir la maniabilité désirée.

Cet objectif très ambitieux conduit nécessairement à faire appel à des matériaux modèles. Nous allons donc nous intéresser à une suspension « idéalisée » composée de particules sphériques, rigides (même si, en simulation numérique, la loi de Hertz a été utilisée au chapitre 6) et inertes, disposées dans un fluide newtonien.

Dans le domaine des très faibles concentrations, la solution au problème a été trouvée par Einstein [EINS06] lui-même en 1905.

Pour les suspensions concentrées à plusieurs classes de grains, les modèles dits « auto-cohérents » sont les plus aptes à donner une expression de la viscosité en fonction de la concentration en solide sous forme analytique. C'est notamment le cas du modèle de Mooney [MOON50], que nous avons déjà présenté, et qui a la particularité de contenir un modèle d'empilement dans son modèle de viscosité. Sedran et de Larrard [SEDR94] l'ont ensuite fait évoluer vers un modèle de suspension solide qui n'a malheureusement pas fourni les résultats escomptés.

Pourtant, l'idée de combiner un modèle d'empilement à une loi de viscosité demeure toujours très attrayante, notamment dans le domaine de la formulation des bétons où l'on pourrait rechercher le matériau optimal (1^{ère} étape précédemment présentée) tout en cherchant à réduire son coût (2^{ème} étape précédente).

8.1. LE CONCEPT DE FARRIS.

Farris [FARR68] a proposé une méthode de détermination de la viscosité d'une suspension de sphères polydisperses sans interactions granulaires, c'est-à-dire avec des diamètres de classes élémentaires successives infiniment éloignés ($d_1 \gg d_2 \dots \gg d_n$) les uns des autres, donnant un caractère « fractal » au mélange. Dans ce cas, toutes les sphères de plus petit diamètre ajoutées au liquide suspendant se comportent vis-à-vis des plus grosses comme une phase visqueuse continue.

Farris commence tout d'abord par généraliser la loi d'Einstein en considérant que la viscosité d'une suspension de sphères de taille unique ne dépend que de la viscosité du liquide suspendant η_0 et de la concentration en solide ϕ :

$$\text{VIII-1} \quad \eta = \eta_0 H(\phi)$$

Effectuons la suite du raisonnement [STOV87] sur un mélange binaire de diamètres $d_1 \gg d_2$ et de volumes partiels ϕ_1 et ϕ_2 , ϕ_0 représentant la porosité de l'empilement :

$$\phi_0 = \frac{V_0}{V_0 + V_1 + V_2} ; \phi_1 = \frac{V_1}{V_0 + V_1 + V_2} ; \phi_2 = \frac{V_2}{V_0 + V_1 + V_2}$$

On commence par introduire la tranche la plus fine dans le liquide de suspension. Sa viscosité η_2 s'exprime alors de la façon suivante :

$$\text{VIII-2} \quad \eta_2 = \eta_0 H(\psi_2, \psi_2^{\text{MAX}}) \text{ où } \psi_2 = \frac{V_2}{V_0 + V_2} = \frac{\phi_2}{1 - \phi_1}$$

Dans ce cas précis, ψ_2^{MAX} correspond à la valeur maximale de la fraction volumique de l'empilement du solide constitué d'une taille unique de particules.

Ajoutons maintenant le constituant de taille d_1 . La viscosité du mélange devient :

$$\text{VIII-3} \quad \eta_1 = \eta_2 H(\psi_1, \psi_1^{\text{MAX}}) \text{ soit } \eta_1 = \eta_0 H(\psi_1, \psi_1^{\text{MAX}}) H(\psi_2, \psi_2^{\text{MAX}})$$

$$\text{où } \psi_2 = \frac{V_2}{V_0 + V_2} = \frac{\phi_2}{1 - \phi_1} \text{ et } \psi_1 = \frac{V_1}{V_0 + V_1 + V_2} = \phi_1.$$

ψ_1^{MAX} correspond alors à la valeur maximale de la concentration de la tranche 1 compte tenu de la présence de la tranche 2 : $\psi_1^{\text{MAX}} = \text{fonction}(\psi_2)$.

Généralisons ce raisonnement aux n constituants :

$$\text{VIII-4} \quad \eta = \eta_0 \prod_{i=1}^n H(\psi_i, \psi_i^{\text{MAX}})$$

en observant bien que ψ_i^{MAX} dépend de la présence des tranches les plus fines :

$$\psi_i^{\text{MAX}} = \text{fonction}(\psi_{i+1}, \dots, \psi_n)$$

Définissons maintenant la loi caractérisant $\eta_r = H(\phi)$.

8.2. CHOIX D'UNE APPROCHE PAR ÉQUATION FONCTIONNELLE.

Dans un excellent article, Pabst [PABS04] présente les principales formules permettant de calculer la viscosité relative sous un angle nouveau : il établit une distinction très nette entre celles établies à partir d'une exponentielle (type Mooney) et celles faisant appel à une loi de puissance (type Krieger). En basant sa démarche sur une approche par équation fonctionnelle, il explique pourquoi la seconde est préférable à la première.

Commençons par le raisonnement lié à la relation exponentielle de Mooney.

Si des sphères toutes de même diamètre sont incorporées dans un fluide suspendant en deux fractions ϕ_a et ϕ_b , l'addition de la seconde fraction dans la phase visqueuse préalablement constituée avec la première, provoque un accroissement de viscosité dans le volume inoccupé par ϕ_a . Dans ce dernier, la concentration ϕ_b y est égale à :

$\phi_{ba} = \frac{\phi_b}{1 - \phi_a}$. Seulement, selon Mooney, l'encombrement des fractions ϕ_a et ϕ_b devient

mutuel. L'introduction de ϕ_b réduit le volume accessible à ϕ_a dont la concentration

devient $\phi_{ab} = \frac{\phi_a}{1 - \phi_b}$.

Calculons maintenant la fraction volumique totale dans la suspension $\phi_{ba} + \phi_{ab}$:

$$\phi_{ba} + \phi_{ab} = \frac{\phi_b}{1 - \phi_a} + \frac{\phi_a}{1 - \phi_b} = \frac{(\phi_a + \phi_b) - (\phi_a^2 + \phi_b^2)}{1 - (\phi_a + \phi_b) + \phi_a \phi_b}$$

Si nous considérons la limite $\phi_a + \phi_b \rightarrow 1$, nous obtenons : $\phi_{ba} + \phi_{ab} \xrightarrow{\phi_a + \phi_b \rightarrow 1} 2$ soit 2 fois la compacité mono-modulaire.

Continuons par le raisonnement lié à la relation « loi de puissance » de Krieger. Cette fois-ci, il peut être argumenté que la modification engendrée par l'addition de la seconde fraction dans la phase visqueuse préalablement constituée avec la première, concerne seulement la seconde fraction volumique.

Dans ce cas, la fraction volumique totale dans la suspension s'écrit :

$$\phi_a + \phi_{ba} = \phi_a + \frac{\phi_b}{1 - \phi_a} = \frac{(\phi_a + \phi_b) - \phi_a^2}{1 - \phi_a}$$

Si nous considérons la limite $\phi_a + \phi_b \rightarrow 1$, nous obtenons : $\phi_a + \phi_{ba} \xrightarrow{\phi_a + \phi_b \rightarrow 1} 1 + \phi_a$ soit

$$1 \leq \phi_a + \phi_{ba} \leq 2.$$

On peut voir que le raisonnement conduisant à la relation de Mooney est basé sur une décomposition des fractions volumiques qui, dans la limite des hautes concentrations, aboutit à un résultat physiquement inacceptable ($\phi \rightarrow 2$).

En revanche, la relation de type Krieger s'appuie sur une analyse qui peut permettre d'obtenir une fraction volumique approximativement égale à 1, tout du moins lorsque $V_b \gg V_a$. C'est pourquoi elle semble préférable pour la prédiction des viscosités.

8.3. VISCOSITÉ PAR ASSOCIATION DU CONCEPT DE FARRIS ET DE LA RELATION DE TYPE KRIEGER.

Évidemment, une fraction volumique égale à l'unité ne peut jamais être approchée dans les suspensions réelles. Il existe en effet une fraction volumique critique ϕ^* qui ne peut pas être dépassée. Lorsque cette dernière est atteinte, la suspension perd sa capacité d'écoulement et devient un empilement : le récipient atteint sa limite de remplissage.

Dans ce cas, en faisant appel à l'approche par équation fonctionnelle selon une relation de type Krieger, la viscosité relative d'une suspension constituée d'une seule taille de particules s'exprime sous la forme :

$$\text{VIII-5} \quad \eta_r = H(\phi) = \left(1 - \frac{\phi}{\phi^*}\right)^{-B\phi^*}$$

La constante B s'obtient en effectuant un développement limité de cette expression au voisinage de $\phi = 0$, pour une suspension fortement diluée. On obtient $B = C_E = 2,5$ en accord avec la relation d'Einstein.

Nous admettons maintenant, pour les suspensions polydisperses, que cette loi de viscosité peut s'appliquer à chaque tranche élémentaire i prise individuellement tout en appliquant le concept de Farris. La viscosité se calcule alors grâce à la relation générale suivante :

$$\text{VIII-6} \quad \eta = \eta_0 \prod_{i=1}^n \left(1 - \frac{\psi_i}{\psi_i^{\text{MAX}}} \right)^{-C_E \beta}$$

où β représente la fraction volumique de l'empilement virtuel (pour être en accord avec la théorie du MEC 4-paramètres) du solide monodimensionnelle.

8.3.1. Mélange à une seule taille de particules.

Dans le cas unimodal ($n=1$), on obtient $\phi_1^* = \beta$ soit $\psi_1^{\text{MAX}} = \beta$ alors que $\psi_1 = \phi$, β représentant la compacité propre virtuelle de la classe unimodale :

$$\text{VIII-7} \quad \eta = \eta_0 \left(1 - \frac{\phi}{\beta} \right)^{-C_E \beta}$$

8.3.2. Mélange binaire sans interactions.

Lorsque les « gros » dominent, ils remplissent le volume sans être gênés par les fins :

$$\phi_1^* = \beta$$

Lorsque les « petits » dominent, ils occupent la porosité des grosses particules :

$$\phi_2^* = \beta(1 - \phi_1)$$

On en déduit :

$$\psi_2 = \frac{\phi_2}{1 - \phi_1} \text{ et } \psi_2^{\text{MAX}} = \frac{\phi_2^*}{1 - \phi_1} = \beta$$

$$\psi_1 = \phi_1 \text{ et } \psi_1^{\text{MAX}} = \phi_1^* = \beta.$$

8.3.3. Mélange binaire avec interactions.

Il s'agit maintenant de parvenir à associer le Modèle d'Empilement Compressible (MEC) mis au point par de Larrard et Sedran qui prend en compte les interactions granulaires avec le concept de Farris et la « loi de puissance » de type Krieger. Nous allons pour cela suivre la démarche proposée par Bournonville, Coussot et Chateau [BOUR05].

L'approche initiée dans [STOV87] est en effet incomplète dans la mesure où les proportions de chaque tranche granulaire ne changent pas tandis que l'on cherche à quantifier le volume partiel maximal de chaque classe provoquant le blocage. Or, lors de cette opération, une certaine quantité de fluide va être supprimée, la phase solide de la suspension demeurant identique. Le raisonnement élaboré s'avère donc inapproprié avec le concept de Farris qui procède par incorporation de chaque classe les unes après les autres. L'écoulement peut alors se retrouver bloqué lors de l'introduction d'une tranche supplémentaire si un nombre suffisant de particules est rajouté.

Pour que le concept de Farris reste applicable, il faut conserver constants les volumes des tranches granulaires déjà présentes lorsqu'on rajoute un volume δV_i d'une nouvelle classe i , laquelle est appréciée comme étant la dominante.

Tant que le blocage ne se produit pas, la phase solide ne peut pas être considérée comme un empilement. On vérifie alors :

$$\text{VIII-8} \quad \phi_1 \leq \phi_1^* = \beta \left(1 - \frac{a_{12}}{\beta} \phi_2 \right) = \beta - a_{12} \phi_2$$

$$\phi_2 \leq \phi_2^* = \beta \left(1 - b_{21} \left(\frac{1}{\beta} - 1 \right) \frac{\phi_1}{1 - \phi_1} \right) (1 - \phi_1) = \beta (1 - \phi_1) - (1 - \beta) b_{21} \phi_1$$

où a_{12} désigne le coefficient d'effet de desserrement, b_{21} le coefficient d'effet de paroi, β_1 et β_2 les compacités virtuelles de chaque classe 1 et 2 prises séparément.

$$\text{avec : } \phi_1 = \frac{V_1 + \delta V_1}{V_0 + V_1 + V_2 + \delta V_1} \quad \text{et} \quad \phi_2 = \frac{V_2}{V_0 + V_1 + V_2 + \delta V_1} \quad \text{si la classe 1 domine ;}$$

$$\phi_2 = \frac{V_2 + \delta V_2}{V_0 + V_1 + V_2 + \delta V_2} \quad \text{et} \quad \phi_1 = \frac{V_1}{V_0 + V_1 + V_2 + \delta V_2} \quad \text{si la classe 2 domine.}$$

A partir des relations précédentes, on en déduit le volume maximal ΔV_i de particules de la classe i à rajouter pour engendrer un blocage :

$$\text{VIII-9} \quad \Delta V_1 = \frac{1}{1-\beta} \left(\beta \sum_{j=0}^{n-2} V_j - V_2 a_{12} - V_1 \right) \text{ si la classe 1 domine ;}$$

$$\Delta V_2 = \frac{1}{1-\beta} \left(\beta \sum_{j=0}^{n-2} V_j - V_1 (\beta + (1-\beta) b_{21}) - V_2 \right) \text{ si la classe 2 domine.}$$

La valeur ΔV_1 ci-dessus prend en compte l'effet de desserrement exercé par les particules plus fines de la classe 2 sur celles de la classe 1.

La valeur ΔV_2 prend en compte l'effet de paroi exercé par les particules plus grosses de la classe 1 sur celles de la classe 2.

Il est ainsi possible de donner une définition mathématique aux volumes partiels intervenant dans le calcul de la viscosité :

$$\text{VIII-10} \quad \psi_1 = \phi_1$$

$$\psi_2 = \frac{\phi_2}{1-\phi_1}$$

$$\psi_1^{\text{MAX}} = \frac{V_1 + \Delta V_1}{V_0 + V_1 + V_2 + \Delta V_1}$$

$$\psi_2^{\text{MAX}} = \frac{V_2 + \Delta V_2}{V_0 + V_2 + \Delta V_2}$$

Compte-tenu des valeurs de ΔV_1 et ΔV_2 fournies plus haut, on aboutit à :

$$\psi_1^{\text{MAX}} = \frac{\beta V_0 + V_2 (\beta - a_{12})}{V_0 + V_2 (1 - a_{12})}$$

$$\psi_2^{\text{MAX}} = \frac{\beta V_0 - V_1 b_{21} (1 - \beta)}{V_0 - V_1 b_{21} (1 - \beta)}$$

que l'on préfère écrire sous la forme :

$$\psi_1^{\text{MAX}} = \frac{\beta \phi_0 + \phi_2 (\beta - a_{12})}{\phi_0 + \phi_2 (1 - a_{12})}$$

$$\psi_2^{\text{MAX}} = \frac{\beta \phi_0 - \phi_1 b_{21} (1 - \beta)}{\phi_0 - \phi_1 b_{21} (1 - \beta)}$$

Sachant que $\phi_0 = 1 - \phi$ représente la porosité du mélange, que $\phi_1 = \phi \gamma_1$, que $\phi_2 = \phi \gamma_2$ (γ_1 et γ_2 étant les proportions volumiques des grosses et fines particules), on peut exprimer ψ_1^{MAX} et ψ_2^{MAX} en fonction de la compacité du mélange ϕ :

$$\text{VIII-11} \quad \psi_1^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - 1 \right) + \gamma_2 (\beta - \alpha_{12})}{\frac{1}{\phi} - 1 + \gamma_2 (1 - \alpha_{12})}$$

$$\psi_2^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - 1 \right) - \gamma_1 b_{21} (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - 1 - \gamma_1 b_{21} (1 - \beta)}$$

Rappelons maintenant les expressions permettant de calculer la compacité virtuelle dans le domaine des « gros dominants » et dans le domaine des « petits dominants » avec $\beta_1 = \beta_2 = \beta$:

$$\text{I-65} \quad \gamma_1 = \frac{\beta}{1 - (1 - \alpha_{12}) \gamma_2}$$

$$\text{I-66} \quad \gamma_2 = \frac{\beta}{1 - (1 - \beta) (1 - b_{21}) \gamma_1}$$

En combinant les relations VIII-11, I-65, I-66, il est possible d'obtenir ψ_1^{MAX} et ψ_2^{MAX} en fonction des compacités virtuelles γ_1 , γ_2 , β , de la compacité du mélange ϕ et des proportions volumiques γ_1 et γ_2 :

$$\text{VIII-12} \quad \psi_1^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_1} \right) + \gamma_1 (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - \frac{\beta}{\gamma_1}}$$

$$\psi_2^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_2} \right) + \gamma_2 (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - \frac{\beta}{\gamma_2} - (1 - \beta) \gamma_1}$$

Les expressions de ψ_1 et ψ_2 peuvent également être réécrites sous la forme suivante :

$$\text{VIII-13} \quad \psi_1 = \phi \gamma_1 \text{ et } \psi_2 = \frac{\gamma_2}{\frac{1}{\phi} - \gamma_1}$$

Voici donc le récapitulatif des expressions définitives :

$$\eta = \eta_0 \left(1 - \frac{\psi_1}{\psi_1^{\text{MAX}}} \right)^{-C_E \beta} \left(1 - \frac{\psi_2}{\psi_2^{\text{MAX}}} \right)^{-C_E \beta} \text{ avec } d_1 > d_2$$

$$\psi_1 = \phi \gamma_1 \qquad \psi_2 = \frac{\gamma_2}{\frac{1}{\phi} - \gamma_1}$$

$$\psi_1^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_1} \right) + \gamma_1 (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - \frac{\beta}{\gamma_1}} \qquad \psi_2^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_2} \right) + \gamma_2 (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - \frac{\beta}{\gamma_2} - (1 - \beta) \gamma_1}$$

L'avantage des relations VIII-12 est de faire apparaître la fraction volumique de solide ϕ et de pouvoir lier directement cette dernière à la viscosité η . Conformément à l'approche adoptée par Bournonville, Coussot et Chateau [BOUR05] basée sur un changement d'échelle de type Farris et sur l'utilisation d'une relation de type Krieger, il est maintenant possible de créer une suspension dont la phase solide est composée de façon identique à un matériau granulaire sec dont on peut prévoir la compacité grâce au Modèle d'Empilement Compressible 4-paramètres. Lorsque cette dernière est maximale grâce à l'optimisation du squelette granulaire, la valeur de la fraction solide critique est atteinte, l'écoulement est bloqué et la suspension devient empilement.

Cette association compacité-viscosité peut également permettre de perfectionner la formulation d'un béton en suivant les deux étapes décrites en préambule : minimiser la porosité du mélange total, c'est-à-dire le volume d'eau par unité de volume, à viscosité fixée mais pas infinie.

8.3.4. Mélange quelconque.

Étudions maintenant le cas d'un mélange constitué de n tranches granulaires. Supposons la classe i dominante en prenant en compte l'effet de paroi exercé par les particules plus grosses et l'effet de desserrement provoqué par les particules plus fines. Sa fraction volumique se calcule de la façon suivante :

$$\text{VIII-14} \quad \phi_i^* = \beta_i \left(1 - \sum_{j=1}^{i-1} \left(1 - b_{ij} \left(1 - \frac{1}{\beta_j} \right) \right) \phi_j - \sum_{j=i+1}^n \frac{a_{ij}}{\beta_j} \phi_j \right)$$

et dans le cas où $\beta_i = \beta_j = \beta$:

$$\phi_i^* = \beta - \sum_{j=1}^{i-1} \left(\beta + b_{ij} (1 - \beta) \right) \phi_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} \phi_j$$

où a_{ij} désigne le coefficient d'effet de desserrement et b_{ij} le coefficient d'effet de paroi.

Il convient de rappeler ici que les résultats obtenus par simulation numérique en utilisant le concept de « pressions partielles » ont permis de montrer que la notion de classe dominante devait s'appliquer avec précaution. En particulier, nous avons pu mettre en évidence pour un mélange binaire que s'il existait bien une zone des « gros dominants » et une zone des « fins dominants », une zone mixte que nous avons dénommée zone de « synergie du squelette porteur » était bien présente aux alentours de l'optimum de compacité, du moins pour les deux rapports de tailles testés. L'hypothèse d'une classe dominante ne pourra donc être clairement justifiée que si les particules la composant sont majoritaires et celles des autres classes suffisamment disséminées dans le mélange.

Lorsque la classe i domine, ϕ_i et ϕ_j se calculent de la façon suivante:

$$\phi_i = \frac{V_i + \delta V_i}{\sum_{k=0}^n V_k + \delta V_i} \quad \text{et} \quad \phi_{j \neq i} = \frac{V_j}{\sum_{k=0}^n V_k + \delta V_i}$$

On en déduit le volume maximal de particules de la classe i que l'on peut rajouter dans la suspension pour provoquer le blocage :

$$\text{VIII-15} \quad \Delta V_i = \frac{1}{1 - \beta} \left(\beta \sum_{j=0}^n V_j - \sum_{j=1}^{i-1} V_j \left(\beta + (1 - \beta) b_{ij} \right) - \sum_{j=i+1}^n V_j a_{ij} - V_i \right)$$

La valeur ΔV_i ci-dessus prend à la fois en compte l'effet de desserrement exercé par les particules appartenant aux classes plus fines que la classe i et l'effet de paroi engendré par les particules faisant partie des classes plus grosses.

Il est maintenant possible de donner une définition mathématique aux volumes partiels intervenant dans le calcul de la viscosité :

$$\text{VIII-16} \quad \psi_i = \frac{V_i}{V_0 + \sum_{j=i}^n V_j} = \frac{\phi_i}{\phi_0 + \sum_{j=i}^n \phi_j} = \frac{\phi_i}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} \phi_j}$$

$$\psi_i^{\text{MAX}} = \frac{V_i + \Delta V_i}{V_0 + \sum_{j=i}^n V_j + \Delta V_i}$$

Compte-tenu de la valeur de ΔV_i fournie plus haut, on aboutit à :

$$\psi_i^{\text{MAX}} = \frac{\beta V_0 + \sum_{j=i+1}^n V_j (\beta - \alpha_{ij}) - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) V_j b_{ij}}{V_0 + \sum_{j=i+1}^n V_j (1 - \alpha_{ij}) - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) V_j b_{ij}}$$

que l'on peut écrire :

$$\psi_i^{\text{MAX}} = \frac{\beta \phi_0 + \sum_{j=i+1}^n \phi_j (\beta - \alpha_{ij}) - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) \phi_j b_{ij}}{\phi_0 + \sum_{j=i+1}^n \phi_j (1 - \alpha_{ij}) - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) \phi_j b_{ij}}$$

Toujours en tenant compte du fait que $\phi_0 = 1 - \phi$, que $\phi_j = \phi \gamma_j$ (γ_j étant la proportion volumique de la classe j), on peut exprimer ψ_i^{MAX} en fonction de la compacité du mélange ϕ :

$$\text{VIII-17} \quad \psi_i^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - 1 \right) + \sum_{j=i+1}^n \gamma_j (\beta - \alpha_{ij}) - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) \gamma_j b_{ij}}{\frac{1}{\phi} - 1 + \sum_{j=i+1}^n \gamma_j (1 - \alpha_{ij}) - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) \gamma_j b_{ij}}$$

Rappelons maintenant l'expression permettant de calculer la compacité virtuelle lorsque $\beta_i = \beta_j = \beta$:

$$\text{I-106} \quad \gamma_i = \frac{\beta}{1 - \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \beta) (1 - b_{ij}) \gamma_j - \sum_{j=i+1}^n (1 - \alpha_{ij}) \gamma_j}$$

En combinant les relations VIII-17, I-106, on obtient ψ_i^{MAX} en fonction des compacités virtuelles γ_i et β , de la compacité du mélange ϕ et des proportions volumiques γ_i et γ_j :

$$\text{VIII-18} \quad \psi_i^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_i} \right) + \gamma_i (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - \frac{\beta}{\gamma_i} - (1 - \beta) \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j}$$

L'expression de ψ_i peut également être réécrite sous la forme :

$$\text{VIII-19} \quad \psi_i = \frac{\gamma_i}{\frac{1}{\phi} - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j}$$

Voici le récapitulatif des relations obtenues :

$$\eta = \eta_0 \prod_{i=1}^n \left(1 - \frac{\psi_i}{\psi_i^{\text{MAX}}} \right)^{-C_E \beta}$$

$$\psi_i = \frac{\gamma_i}{\frac{1}{\phi} - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j} \quad \text{et} \quad \psi_i^{\text{MAX}} = \frac{\beta \left(\frac{1}{\phi} - \frac{1}{\gamma_i} \right) + \gamma_i (1 - \beta)}{\frac{1}{\phi} - \frac{\beta}{\gamma_i} - (1 - \beta) \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_j}$$

Rappelons que ϕ est le volume solide du mélange dans un volume total unité, γ_i la compacité virtuelle atteinte par le mélange vidé de son liquide lorsque la classe i , de compacité propre virtuelle β , domine et $C_E = 2,5$ la constante d'Einstein. L'expression diverge lorsqu'il existe i pour lequel $\phi^* = \gamma_i$: la suspension devient empilement. Cependant, il faut bien être conscient du paradoxe suivant susceptible de se produire [BOUR05] : le concept de Farris suppose des ajouts de classes successives par changement d'échelle. La divergence peut donc se produire au moment de l'introduction de la classe i car celle-ci atteint sa fraction volumique maximale, les classes suivantes n'ayant pas encore été introduites. Or, le volume ΔV_i s'obtient en prenant en compte les interactions géométriques avec l'ensemble des classes granulaires, y compris celles non encore présentes dans la suspension au moment de la divergence. Il faut donc être vigilant quant à l'utilisation de l'expression permettant la détermination de la viscosité de la suspension.

8.4. VÉRIFICATIONS EXPÉRIMENTALES DU MODÈLE DE VISCOSITÉ PROPOSÉ OBTENU PAR ASSOCIATION AVEC LE MEC 4-PARAMÈTRES.

Les données expérimentales que nous allons utiliser sont celles présentées par Stovall, Buil et Such dans [STOV87].

Elles ont été obtenues avec des billes de verre classées en tranches granulaires plutôt étroites.

Tranche granulométrique (μm)	0-50	40-70	70-110	180-300
1-12	5,3			
16	2,0			
24	3,7			
32	20,4	3,8		
48	47,1	15,6		
64	21,5	39,0	4,1	
96		41,5	68,5	
128			27,3	10,4
192				24,4
250				64,1
315				1,1
classe	D	A	B	C

Tableau VIII-1 : distribution granulométrique des lots de billes de verre A, B, C, D.

Le liquide de suspension est constitué d'une huile de silicone avec une viscosité élevée à 20°C : 17,9 Pa.s. Elle présente un comportement newtonien.

Les suspensions sont préparées en bécher puis dégazées sous vide. Les mesures sont effectuées en cylindres coaxiaux équipés d'entrefers de 1 ou 2 mm.

La viscosité est obtenue en faisant appel à une large gamme de vitesses de cisaillement. Trois températures ont été passées en revue : 10°C, 20°C, 40°C.

Les mélanges étudiés sont des mélanges binaires. Les résultats sont portés dans les tableaux VIII-2 à VIII-4. Les coefficients d'effet de paroi b_{21} et d'effet de desserrement a_{12} ont été déterminés grâce à la théorie ROAD. Concernant β , les valeurs ont été optimisées pour chaque catégorie de mélange.

ϕ	y_2	y_1	$\eta_{r,exp}$			β	b_{21}	a_{12}	ψ_1	ψ_1^{MAX}	ψ_2	ψ_2^{MAX}	$\eta_{r,th}$
			10°C	20°C	40°C								
0,580	0,138	0,862	28,3	25,8	23,6	0,600	0,252	0,000	0,499	0,600	0,162	0,546	24,5
	0,224	0,776	24,7	22,3	20,4				0,452	0,600	0,233	0,551	18,7
	0,862	0,138	63,1	53,5	49,2				0,081	0,600	0,543	0,592	52,0
0,600	0,167	0,833	35,5	31,7	29				0,498	0,600	0,203	0,543	28,8
	0,250	0,750	27,8	25,6	23,3				0,450	0,600	0,273	0,549	22,4
	0,833	0,167	93,7	84	73				0,102	0,600	0,555	0,589	91,9
0,620	0,194	0,806	42,4	39	34,5				0,502	0,600	0,237	0,538	36,2
	0,274	0,726	28,8	27	25,9				0,453	0,600	0,306	0,545	28,2
	0,806	0,194	166	149	130				0,118	0,600	0,569	0,587	262,4
0,660	0,242	0,758	46,4	41,8	38				0,502	0,600	0,318	0,530	59,4
	0,318	0,682	69	62	56				0,449	0,600	0,383	0,539	51,0
	0,545	0,455	141	120	105				0,304	0,600	0,512	0,560	112,7
	0,758	0,242	702	637	511				0,158	0,600	0,596	0,580	∞
0,700	0,286	0,714	134	119	107				0,497	0,600	0,404	0,520	133,1
	0,357	0,643	152	135	118				0,448	0,600	0,457	0,529	154,6
	0,571	0,429	915	803	644	0,301	0,600	0,571	0,555	∞			

Tableau VIII-2 : viscosités relatives des mélanges de billes C et D ($x=0,2$). Coefficients b_{21} et a_{12} déterminés par la théorie ROAD (rapport de tailles de cavernes $x_0=0,2$).

ϕ	y_2	y_1	$\eta_{r,exp}$			β	b_{21}	a_{12}	ψ_1	ψ_1^{MAX}	ψ_2	ψ_2^{MAX}	$\eta_{r,th}$
			10°C	20°C	40°C								
0,52	0,135	0,865	34,6	30,6	26,5	0,590	0,762	0,870	0,450	0,539	0,128	0,420	24,3
	0,423	0,577	29,2	26,4	22,2				0,300	0,436	0,314	0,490	25,3
0,550	0,091	0,909	70	60	49,1				0,500	0,551	0,100	0,372	53,2
	0,182	0,818	58	51	42				0,450	0,513	0,182	0,404	53,3
	0,455	0,545	62	54	42,5				0,300	0,405	0,357	0,482	53,5
	0,545	0,455	61	54	40				0,250	0,371	0,400	0,504	53,5
	0,818	0,182	67	60	43				0,100	0,275	0,500	0,559	53,3
0,580	0,138	0,862	156	131	107				0,500	0,524	0,160	0,347	238,6
	0,224	0,776	172	147	122				0,450	0,484	0,236	0,384	206,9
	0,483	0,517	177	144	115				0,300	0,371	0,400	0,472	181,9

Tableau VIII-3 : viscosités relatives des mélanges de billes A et B ($x=0,7$). Coefficients b_{21} et a_{12} déterminés par la théorie ROAD (rapport de tailles de cavernes $x_0=0,2$).

ϕ	γ_2	γ_1	$\eta_{r,exp}$			β	b_{21}	a_{12}	ψ_1	ψ_1^{MAX}	ψ_2	ψ_2^{MAX}	$\eta_{r,th}$						
			10°C	20°C	40°C														
0,580	0,138	0,862	49	44	39,7	0,615	0,475	0,576	0,500	0,576	0,160	0,508	40,3						
	0,224	0,776	45	40	35				0,450	0,554	0,236	0,521	33,0						
	0,862	0,138	81	74	63				0,080	0,439	0,543	0,601	50,1						
0,620	0,194	0,806	122	129	107				0,615	0,475	0,576	0,500	0,553	0,240	0,493	101,8			
	0,274	0,726	94	80	70							0,450	0,532	0,309	0,509	75,3			
	0,806	0,194	246	240	241							0,120	0,428	0,568	0,591	239,8			
0,660	0,242	0,758	292	264	223							0,615	0,475	0,576	0,500	0,528	0,320	0,473	521,1
	0,318	0,682	350	252	240										0,450	0,506	0,382	0,492	291,5
	0,545	0,455	382	377	355										0,300	0,453	0,514	0,541	541,2
	0,758	0,242	647	471	431										0,160	0,414	0,595	0,579	∞

Tableau VIII-4 : viscosités relatives des mélanges de billes B et D ($x=0,4$). Coefficients b_{21} et a_{12} déterminés par la théorie ROAD (rapport de tailles de cavernes $x_0=0,2$).

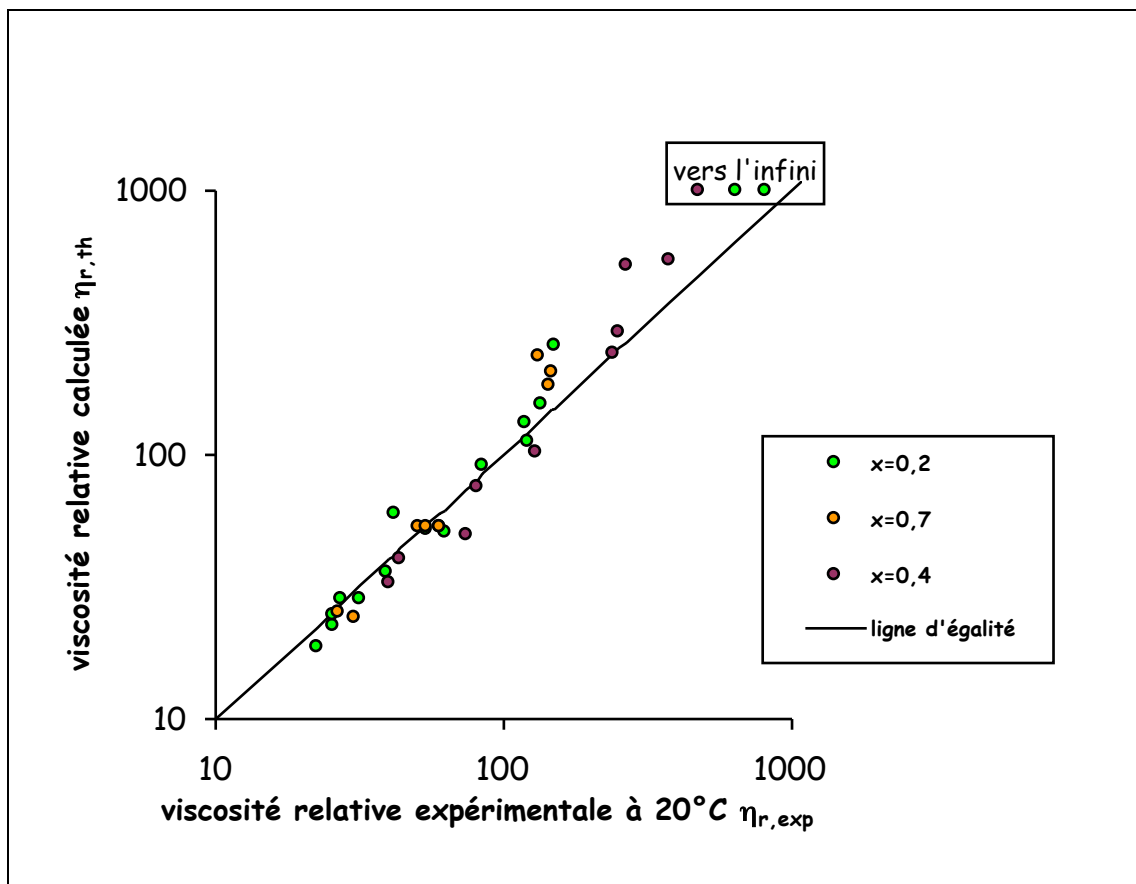


Figure VIII-1 : comparaison des valeurs de viscosités relatives prédites par le modèle de viscosité associant le concept de Farris, la relation de Krieger et le MEC 4-paramètres avec les valeurs expérimentales de Stovall, Buil et Such [STOV87].

Les prédictions du modèle de viscosité (figure VIII-1) sont, pour les mélanges étudiés, très bonnes si l'on tient compte du fait que les incertitudes expérimentales sont élevées pour la gamme de concentrations testées. Pour celles-ci, l'exposant de la loi de Krieger, égal à $C_e \beta$, semble approprié.

Il est également possible d'observer l'évolution des volumes partiels maximaux des grosses ψ_1^{MAX} et fines particules ψ_2^{MAX} intervenant dans le concept de Farris associé à la relation de Krieger en fonction de la fraction volumique de solide (figure VIII-2). La suspension est constituée d'un mélange binaire de sphères de rapports de tailles $x=0,2$, $x=0,4$ et $x=0,7$ pour des proportions volumiques constantes égales à $y_2=0,30$ pour les éléments fins et $y_1=0,70$ pour les éléments grossiers. β vaut 0,6.

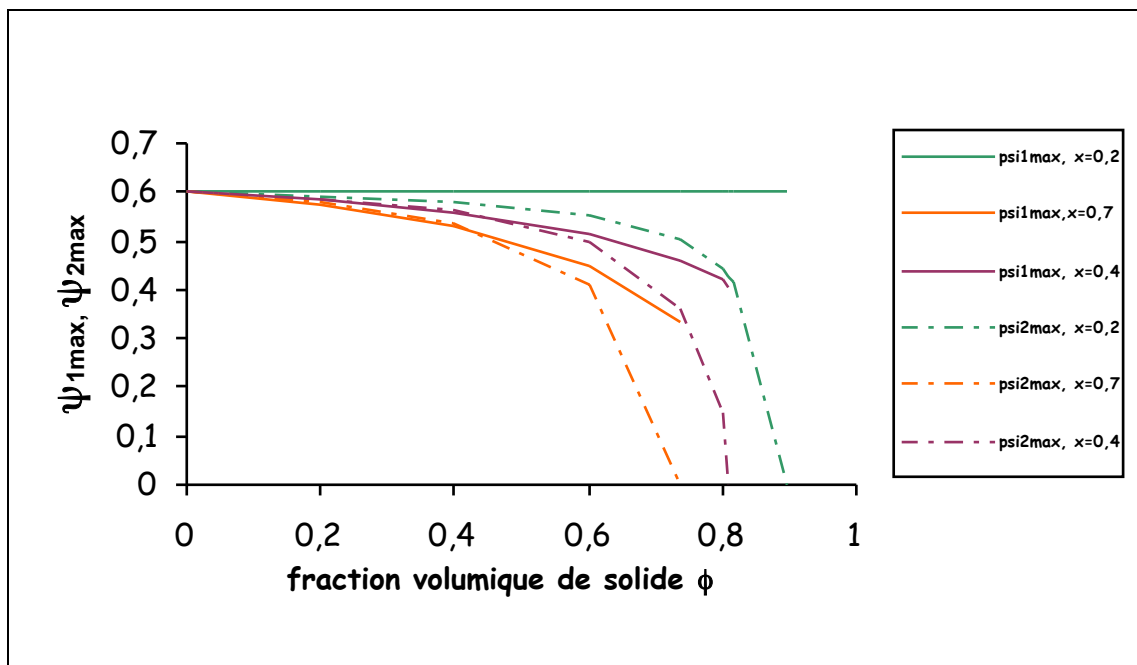


Figure VIII-2 : évolution du volume partiel maximal de grosses particules ψ_1^{MAX} et de fines particules ψ_2^{MAX} en fonction de la fraction volumique de solide ϕ . La proportion volumique de fines particules est $y_2=0,30$. β vaut 0,6.

Pour une fraction volumique de solide se rapprochant de zéro, les volumes partiels maximaux ψ_i^{MAX} tendent vers β , conformément au modèle de Farris conçu initialement pour une seule dimension de particules.

ψ_1^{MAX} reste même constant et égal à β pour le mélange des billes de rapport de tailles $x = 0,2$ quelle que soit la fraction volumique. L'effet de desserrement a_{12} est en effet nul car le contraste des diamètres est suffisamment important pour que les fines soient en mesure de se glisser dans les interstices disponibles entre les grosses. Dans le cas des très fortes concentrations en solide, on observe une décroissance assez nette des ψ_1^{MAX} :

- plus forte pour les fines particules (ψ_2^{MAX}) que pour les grosses (ψ_1^{MAX}) à rapport de tailles x constant, notamment car ces dernières sont en proportion beaucoup plus importante ($y_1 = 0,70$ contre $y_2 = 0,30$). Pour que $\psi_1^{\text{MAX}} = 0$, il faudrait que $\frac{1}{y_1} - \frac{1}{\phi} = \frac{1-\beta}{\beta} y_1 \approx 0,467$ ce qui apparaît difficilement envisageable !
- d'autant plus précoce que le contraste de tailles est faible (i.e. x fort), à fraction volumique de solide constante. Ainsi, on remarque pour les éléments fins que $\psi_{2,x=0,7}^{\text{MAX}} < \psi_{2,x=0,4}^{\text{MAX}} < \psi_{2,x=0,2}^{\text{MAX}}$. En effet, plus le rapport des diamètres x est petit, plus la compacité du mélange binaire γ_2 augmente et plus la divergence va se produire pour une valeur de ϕ importante.

Représentons maintenant la viscosité relative fournie par le modèle en fonction de ϕ , toujours sur le même exemple que précédemment.

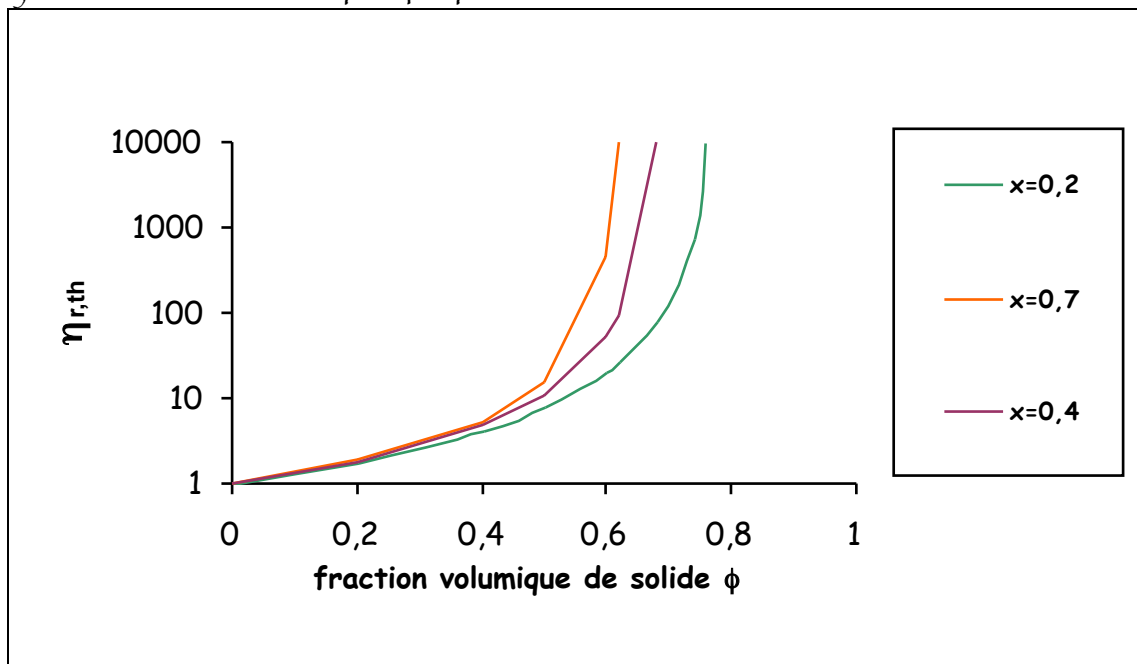


Figure VIII-3 : évolution de la viscosité relative en fonction de la fraction volumique de solide. La proportion volumique de fines particules est $y_2=0,30$. β vaut 0,6.

Comme attendu, la viscosité relative est une fonction croissante de ϕ . Elle tend vers l'infini pour une abscisse qui augmente avec le contraste de tailles.

Si maintenant on choisit de la représenter en fonction du terme $\frac{\phi}{\phi^*}$, rapport entre la fraction volumique de solide et la compacité du squelette solide, les résultats cadrent assez bien avec une courbe unique, du moins avec la proportion des deux constituants et les rapports de tailles pris en considération. Le terme $\frac{\phi}{\phi^*}$ peut être appelé « concentration solide relative » [DELA00].

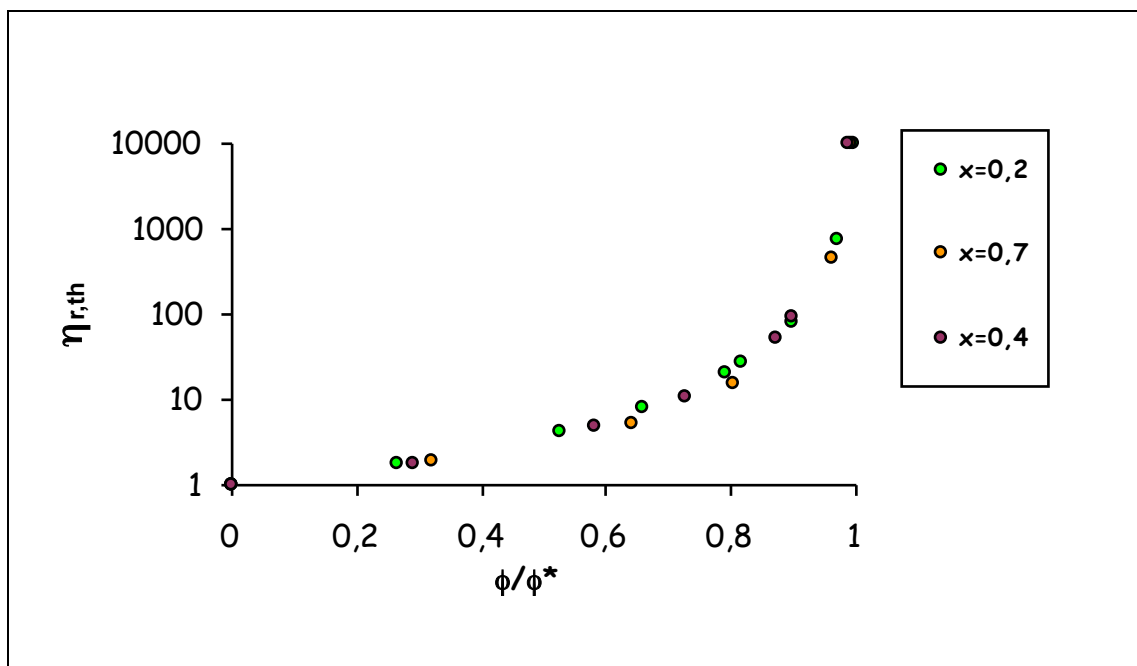


Figure VIII-4 : évolution de la viscosité relative en fonction du rapport ϕ/ϕ^* pour trois rapports de tailles. La proportion volumique de fines particules est $\gamma_2=0,30$. β vaut 0,6.

8.5. MISE EN ÉVIDENCE D'OPTIMA DANS LES FORMULATIONS DE BÉTONS PAR RÉFÉRENCE AU MODÈLE APOLLONIEN.

Ici prend place un modèle analytique simplifié afin de mieux dégager les tendances rencontrées dans le domaine de la formulation des bétons.

La référence sera le mélange apollonien, du nom du géomètre de l'Antiquité grecque Apollonius de Perga cité par [DELA00], dont les classes granulaires présentent des tailles très différentes.

Une liste de questions liées à l'industrie du béton est ensuite posée et des éléments de réponse sont apportés à la lumière du modèle de référence apollonien. La trame suivie provient de [AGRE91].

Dans un volume unité, on distingue les volumes de « vide » (eau+air) ϕ_0 , de ciment ϕ_3 , de sable ϕ_2 et de gravillon ϕ_1 .

Les volumes partiels intervenant dans le calcul de la viscosité sont alors :

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \phi_1 \\ \psi_2 &= \frac{\phi_2}{1 - \phi_1} \\ \psi_3 &= \frac{\phi_3}{1 - \phi_1 - \phi_2}\end{aligned}$$

Quant aux volumes partiels maximaux, si nous considérons $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \beta$ pour simplifier les calculs, ils s'expriment, conformément au cadre de référence apollonien, sous la forme :

$$\text{VIII-20} \quad \psi_1^{\text{MAX}} = \psi_2^{\text{MAX}} = \psi_3^{\text{MAX}} = \beta$$

La viscosité devient alors :

$$\begin{aligned}\text{VIII-21} \quad \eta &= \eta_0 \text{H}\left(\frac{\phi_1}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{\phi_2}{\beta(1 - \phi_1)}\right) \text{H}\left(\frac{\phi_3}{\beta(1 - \phi_1 - \phi_2)}\right) \\ \eta &= \eta_0 \left(1 - \frac{\phi_1}{\beta}\right)^{-c_E \beta} \left(1 - \frac{\phi_2}{\beta(1 - \phi_1)}\right)^{-c_E \beta} \left(1 - \frac{\phi_3}{\beta(1 - \phi_1 - \phi_2)}\right)^{-c_E \beta}\end{aligned}$$

A noter que si le béton est lui-même formulé selon le modèle apollonien pour atteindre une résistance maximale, on a $\phi_1 = \beta$ et $\eta = \infty$: un béton de résistance maximale a, dans ce cadre, une viscosité infinie.

1/ Quelle est la composition du béton le plus résistant permettant d'atteindre une viscosité η^* finie ?

Supposons tout d'abord que la résistance mécanique est une fonction monotone décroissante de la grandeur $\frac{\phi_0}{\phi_3}$. Si l'on souhaite garder la viscosité d'ensemble constante tout en introduisant un granulat dans la pâte, il est nécessaire de faire décroître la viscosité intrinsèque de cette dernière. La conséquence est la diminution de la résistance. Le béton le plus résistant de viscosité η^* est donc constitué d'une pâte pure. Cette remarque permet de comprendre pourquoi les bétons fibrés à hautes performances ne contiennent pas de granulat autre que du sable très fin. On obtient donc :

$$\text{VIII-22} \quad \eta^* = \eta_0 \left(1 - \frac{\phi_3}{\beta} \right)^{-C_E \beta}$$

ce qui permet d'aboutir aux volumes de ciment et de vide suivants :

$$\text{VIII-23} \quad \phi_3 = \beta \left(1 - \exp \left(- \frac{1}{C_E \beta} \ln \left(\frac{\eta^*}{\eta_0} \right) \right) \right) \text{ et } \phi_0 = 1 - \phi_3$$

2/ En fixant la viscosité et la résistance (par l'intermédiaire du rapport e/c), quelles sont les proportions qui minimisent le coût ?

Pour répondre à cette question, nous allons considérer le coût comme étant une fonction monotone croissante de ϕ_3 .

Si l'on fixe la résistance, la composition de la pâte et sa viscosité sont imposées :

$$\frac{\phi_0}{\phi_3} = \left(\frac{e}{c} \right)^*$$

$$\frac{\phi_3}{\phi_0 + \phi_3} = \frac{1}{1 + \left(\frac{e}{c} \right)^*} \text{ et}$$

$$\eta_3 = \eta_0 H \left(\frac{1}{\beta \left(1 + \left(\frac{e}{c} \right)^* \right)} \right)$$

On effectue un premier changement de variable :

$$\phi_0' = \phi_0 + \phi_3 \text{ (volume de pâte)}$$

$$\phi_2' = \phi_2 \text{ (sable)}$$

$$\phi_1' = \phi_1 \text{ (gravillon)}$$

On se ramène ainsi à deux phases granulaires. Minimiser le coût revient à rechercher le béton de viscosité donnée ayant la moindre teneur en pâte. Le problème d'optimisation s'écrit maintenant :

$$\text{Min } \phi_0' \text{ avec } \eta^* = \eta_3 \eta_0 \text{H}\left(\frac{\phi_1'}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{\phi_2'}{\beta(1-\phi_1')}\right)$$

Un deuxième changement de variable est nécessaire.

Posons :

$$1 - \Phi_1 = \phi_1'$$

$$1 - \Phi_2 = \frac{\phi_2'}{1 - \phi_1'}$$

On montre facilement que : $\Phi_1 \Phi_2 = \phi_0'$

d'où le nouveau problème d'optimisation :

$$\text{Min } (\Phi_1 \Phi_2) \text{ avec } \text{H}\left(\frac{1-\Phi_1}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{1-\Phi_2}{\beta}\right) = \frac{\eta^*}{\eta_3 \eta_0}$$

Une seule contrainte étant à respecter, on ajoute un seul multiplicateur de Lagrange. Le problème consiste à minimiser le Lagrangien :

$$\mathcal{L}(\Phi_1, \Phi_2, \lambda) = \Phi_1 \Phi_2 + \lambda \left(\text{H}\left(\frac{1-\Phi_1}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{1-\Phi_2}{\beta}\right) - \frac{\eta^*}{\eta_0 \eta_3} \right) = 0$$

On cherche maintenant à annuler le Gradient du Lagrangien, soit : $\nabla \mathcal{L} = 0$.

Cela nous conduit au système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_1} = \Phi_2 + \lambda \text{H}'\left(\frac{1-\Phi_1}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{1-\Phi_2}{\beta}\right) = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_2} = \Phi_1 + \lambda \text{H}'\left(\frac{1-\Phi_2}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{1-\Phi_1}{\beta}\right) = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = \text{H}\left(\frac{1-\Phi_1}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{1-\Phi_2}{\beta}\right) - \frac{\eta^*}{\eta_0 \eta_3} = 0 \end{array} \right.$$

Des deux premières équations, on déduit :

$$\Phi_1 \frac{H' \left(\frac{1 - \Phi_1}{\beta} \right)}{H \left(\frac{1 - \Phi_1}{\beta} \right)} = \Phi_2 \frac{H' \left(\frac{1 - \Phi_2}{\beta} \right)}{H \left(\frac{1 - \Phi_2}{\beta} \right)}$$

En considérant que la fonction :

$$x \rightarrow x \frac{H' \left(\frac{1 - x}{\beta} \right)}{H \left(\frac{1 - x}{\beta} \right)}$$

est bi-univoque sur $[0,1]$, on aboutit au résultat simple suivant : $\Phi_1 = \Phi_2 = \Phi$.

On reprend l'équation des viscosités $\left[H \left(\frac{1 - \Phi}{\beta} \right) \right]^2 = \frac{\eta^*}{\eta_3 \eta_0}$ pour trouver la constante Φ :

$$\Phi = 1 - \beta H^{-1} \left[\sqrt{\frac{\eta^*}{\eta_3 \eta_0}} \right]$$

Mais compte-tenu de la loi de viscosité choisie, il est préférable d'utiliser l'expression :

$$\Phi = 1 - \beta \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{1}{2 C_\epsilon \beta} \ln \left(\frac{\eta^*}{\eta_3 \eta_0} \right) \right] \right\}$$

Le calcul des ϕ_i' donne :

$$\phi_0' = \Phi^2 \text{ (volume de pâte)}$$

$$\phi_1' = 1 - \Phi \text{ (gravillon)}$$

$$\phi_2' = \Phi (1 - \Phi) \text{ (sable)}$$

d'où finalement :

$$\phi_0 = \Phi^2 \frac{\left(\frac{e}{c} \right)^*}{1 + \left(\frac{e}{c} \right)^*} \text{ (eau+air)} \quad \phi_3 = \frac{\Phi^2}{1 + \left(\frac{e}{c} \right)^*} \text{ (ciment)}$$

$$\phi_2 = \Phi (1 - \Phi) \text{ (sable)}$$

$$\phi_1 = 1 - \Phi \text{ (gravillon)}$$

Il est aisé de constater que la quantité Φ représente le rapport sable/gravillon. Il dépend à la fois de la viscosité recherchée (η^*) et de la résistance par l'intermédiaire du rapport $\left(\frac{e}{c}\right)^*$ figurant dans l'expression de η_3 . Φ croît lorsque la viscosité baisse et/ou lorsque la résistance augmente.

3/ En fixant les teneurs en eau et en ciment, quelles sont les proportions qui minimisent la viscosité ?

Fixer les teneurs en eau et en ciment revient à imposer le volume de pâte. Le nouveau problème d'optimisation s'écrit :

$$\text{Min } \eta_3 \eta_0 H\left(\frac{\phi_1'}{\beta}\right) H\left(\frac{\phi_2'}{\beta(1-\phi_1')}\right) \text{ avec } \phi_0' = \phi_0'^* \text{ (fixé)}$$

La dérivation du Lagrangien conduit aux mêmes équations que précédemment. On en déduit :

$$\phi_0 = \phi_0^* \text{ (fixé)}$$

$$\phi_3 = \phi_3^* \text{ (fixé)}$$

$$\phi_2 = \Phi(1 - \Phi) \text{ (sable)}$$

$$\phi_1 = 1 - \Phi \text{ (gravillon)}$$

où Φ est solution de l'équation :

$$\Phi^2 = \phi_0^* + \phi_3^*$$

Finalement, un béton optimisé de résistance et de viscosité données peut être appréhendé comme le matériau de teneur en pâte minimale ou le matériau de viscosité minimale à teneur et nature de pâte fixées.

4/ Pour une viscosité fixée, quelle est la composition du béton le plus durable ?

Pour répondre à cette question, nous allons considérer la durabilité comme étant une fonction monotone décroissante de ϕ_0 .

Le nouveau problème d'optimisation s'écrit :

$$\text{Min } \phi_0 \text{ avec } \eta^* = \eta_0 \text{H}\left(\frac{\phi_1}{\beta}\right) \text{H}\left(\frac{\phi_2}{\beta(1-\phi_1)}\right) \text{H}\left(\frac{\phi_3}{\beta(1-\phi_1-\phi_2)}\right)$$

Les calculs sont identiques à ceux de la question 2.

On aboutit à :

$$\phi_0 = \Phi^3$$

$$\phi_3 = \Phi^2 (1 - \Phi) \text{ (ciment)}$$

$$\phi_2 = \Phi (1 - \Phi) \text{ (sable)}$$

$$\phi_1 = 1 - \Phi \text{ (gravillon)}$$

$$\text{avec } \Phi = 1 - \beta \text{H}^{-1}\left[\sqrt[3]{\frac{\eta^*}{\eta_0}}\right]$$

Toujours compte-tenu de la loi de viscosité adoptée, on peut utiliser l'expression suivante :

$$\Phi = 1 - \beta \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{1}{3 C_E \beta} \ln\left(\frac{\eta^*}{\eta_0}\right)\right] \right\}$$

Le rapport eau/ciment s'écrit :

$$\frac{e}{c} = \frac{\Phi}{(1-\Phi)} = \frac{1}{\beta \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{1}{3 C_E \beta} \ln\left(\frac{\eta^*}{\eta_0}\right)\right] \right\}} - 1$$

Le béton le plus durable n'atteint donc pas une résistance maximale car nous avons montré que, dans ce cas, sa viscosité était infinie.

5/ Combien vaut la porosité minimale d'un béton possédant un nombre infini de classes ?

Si l'on généralise le raisonnement précédent pour un nombre infini n de classes, on obtient :

$$\phi_0 = \Phi^n$$

$$\phi_1 = 1 - \Phi$$

$$\phi_2 = \Phi (1 - \Phi)$$

$$\phi_3 = \Phi^2 (1 - \Phi)$$

$$\phi_n = \Phi^{n-1} (1 - \Phi)$$

avec $\Phi = 1 - \beta H^{-1} \left[\sqrt[n]{\frac{\eta^*}{\eta_0}} \right]$

Avec la loi de viscosité adoptée, on utilisera :

$$\Phi = 1 - \beta \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{1}{n C_E \beta} \ln \left(\frac{\eta^*}{\eta_0} \right) \right] \right\}$$

La porosité minimale d'un béton de viscosité relative η^* / η_0 pour un nombre infini de classes s'écrit donc :

$$\pi \left(\frac{\eta^*}{\eta_0} \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[1 - \beta \left\{ 1 - \exp \left[- \frac{1}{n C_E \beta} \ln \left(\frac{\eta^*}{\eta_0} \right) \right] \right\} \right]^n$$

$$\pi \left(\frac{\eta^*}{\eta_0} \right) = \exp \left(- \frac{\ln \left(\frac{\eta^*}{\eta_0} \right)}{C_E} \right)$$

Dans un cadre de référence apollonien, la porosité minimale d'un béton constitué d'un nombre infini de classes n'est pas nulle, sauf si sa viscosité est infinie. Par exemple, pour une viscosité relative $\eta_r = 1152$, elle serait égale à $\pi(1152) = 0,060$ soit 60 l/m^3 à condition que le comportement du matériau soit visqueux newtonien et que les tailles des tranches granulaires soit nettement distinctes les unes des autres.

A viscosité fixée, on comprend pourquoi l'introduction de la fumée de silice dans les bétons hautes performances dans les années 1980 a permis de diminuer la demande en eau. Toutefois, si on était tenté d'appliquer une tranche granulaire encore plus fine que la fumée de silice, la surface spécifique deviendrait tellement importante que l'on serait confronté à une sur-consommation de fluidifiant.

8.6. CONCLUSION.

Finalement, en développant le travail de Bournonville, Coussot et Chateau, nous avons pu mettre au point un modèle de viscosité reliant celle-ci et la fraction volumique de solide ϕ qui, lorsqu'elle devient critique, correspond à la compacité du squelette solide ϕ^* . Cette dernière est déterminée à l'aide du Modèle d'Empilement Compressible (MEC) 4-paramètres. La théorie est compatible avec le calcul développé par Einstein pour les suspensions très diluées. Il prend en compte les interactions granulaires géométriques (effet de paroi et effet de desserrement) existant entre particules lorsqu'elles ne sont pas de tailles infiniment éloignées, comme c'est le cas dans le concept initial de Farris. La fonction $H(\phi)$ choisie est de type loi de puissance de Krieger.

Les premiers résultats sont encourageants car ils permettent d'estimer relativement précisément les viscosités relatives obtenues par Stovall, Buil et Such sur des suspensions contenant des billes de verre avec trois rapports de tailles différents.

Enfin, un modèle simplifié, le modèle apollonien, basé sur l'existence de classes granulaires de tailles très différentes, constitue un outil de compréhension intéressant dans un domaine, la formulation des bétons, où l'empirisme a longtemps régné.

CONCLUSION GÉNÉRALE

L'objectif de cette étude était d'élaborer une théorie permettant de quantifier l'effet de paroi et l'effet de desserrement dans les mélanges granulaires et de combler un « vide » dans ce domaine là.

La réalisation d'un tel projet nous a d'abord conduit à fixer le cadre théorique dans lequel ces travaux pouvaient être menés. C'est pourquoi nous avons commencé par faire le point sur la manière dont sont prises en compte les interactions granulaires dans les modèles d'empilement. L'un des plus élaborés à l'heure actuelle est le modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard *et al.*. Celui-ci ayant fait preuve d'une bonne efficacité démontrée par plusieurs études concordantes, nous avons naturellement choisi ce support comme cadre de référence. Il s'agit en réalité d'une évolution d'un modèle d'empilement contenu dans le modèle de viscosité de Mooney (1950).

Le MEC prévoit, dans un premier temps, le calcul d'une compacité virtuelle qui représente un idéal inaccessible mais dont la prévision constitue une étape incontournable. Dans un second temps, la compacité réelle est obtenue en faisant appel à un indice de serrage K caractérisant le processus de construction de l'empilement. K est une grandeur scalaire représentative du protocole de mise en place et de compactage choisis par analogie avec le modèle de viscosité de Mooney. Les procédures de calibration menées par de Larrard ont notamment conduit à une valeur $K = 9$ pour une mise en place du type « vibration + pression 10 kPa ».

Dans le domaine virtuel, le cas binaire distingue deux domaines, celui des « petits dominants » et celui des « gros dominants ». A la frontière se situe la compacité virtuelle maximale qui serait obtenue si chaque grain pouvait être déposé un par un à son emplacement idéal par un maçon qui empilerait, non pas des pierres sèches pour former un mur, mais des particules pour remplir au mieux un coffrage ou un conteneur. Cette latitude laissée à un opérateur virtuel pour constituer cet agencement tendant vers la perfection justifie la création de cellules élémentaires juxtaposées. Dans ce cadre, il est plausible de déterminer les interactions granulaires à partir d'une étude localisée autour d'une particule « intruse ».

Dans le domaine des « petits dominants », une grosse particule est entourée de plus fines qui viennent se plaquer contre sa paroi. Cet obstacle naturel entraîne la présence d'un surcroît de vides à l'interface : c'est l'effet de paroi.

Dans le domaine des « gros dominants », une petite particule, si elle n'est pas suffisamment fine pour se nicher dans les cavernes existantes, vient écarter les grosses particules : c'est l'effet de desserrement.

Chaque particule « intruse », entourée de grains de l'autre classe, est alors suffisamment éloignée d'une congénère pour faire apparaître des cellules élémentaires distinctes justifiant ainsi une disjonction des zones perturbées par les effets de paroi ou de desserrement. Ce faisant, la classe dominante subit une interaction linéaire et additive de la classe dominée : l'analyse de systèmes binaires suffit à généraliser la démarche au cas poly-dispersé.

Intéressons-nous, dans un premier temps, à l'effet de paroi.

Une étude bibliographique approfondie laisse apparaître que le modèle de Caquot constitue une borne inférieure du coefficient correspondant à cette interaction granulaire. En n'effectuant aucune hypothèse concernant l'arrangement des grains et en ne tenant pas compte de la courbure de la paroi, on peut penser que les valeurs qu'il obtient sont plutôt sous estimées par rapport à ce qu'elles devraient être pour un empilement virtuel parfaitement ordonné et compact.

Le modèle de l'empilement hexagonal compact (EHC) déduit des travaux de Dodds, quant à lui, semble plutôt constituer une borne supérieure dans la mesure où les particules sphériques sont considérées en contact parfait (gapless packing) grâce à une étude menée dans des cellules tétraédriques sur des arrangements parfaits.

La modélisation proposée ici fait appel à un matériau constitué de sphères. Elle s'appuie, pour délimiter le contour extérieur de la zone perturbée par l'effet de paroi, sur l'utilisation d'une cellule sphérique de référence, concentrique à une grosse particule « intruse » et dérivée de celle mise au point par Ben Aïm. Seulement, l'option retenue par ce dernier ne permet pas de respecter une des conditions aux limites concernant le coefficient d'effet de paroi. Là où Ben Aïm choisit son diamètre de telle façon que les points de contact entre chaque petite particule positionnée contre une grosse soient situés à sa surface, nous proposons une cellule sphérique à diamètre ajustable non seulement en fonction du rapport des diamètres fins/gros mais également de la compacité des petits grains en pleine masse. Cette originalité justifie l'appellation de notre théorie : théorie ROAD pour ROund ADjustable cell. Il s'avère alors que l'effet engendré par une hétérogénéité locale (la grosse particule) se fait sentir sur une épaisseur de zone perturbée qui augmente avec la qualité de l'empilement des petites sphères en pleine masse. En d'autres termes, plus l'agencement de ces dernières est soigné, plus la distance à parcourir pour relier une zone à compacité localement nulle contre la paroi à une zone à compacité élevée en pleine masse est importante.

Pour déterminer la compacité des petites sphères dans l'espace affecté par l'effet de paroi ainsi délimité, il s'est avéré nécessaire de déterminer le nombre de coordination, c'est à dire le nombre de petites sphères en contact avec une sphère centrale de diamètre différent. A notre grande surprise, il n'existe pas un grand nombre de théories valables pour un rapport de diamètres fins/gros quelconque.

En continuant à nous positionner dans le cadre des empilements virtuels et en vue d'atteindre cet objectif, nous avons élaboré une nouvelle théorie, dite théorie des carrés sphériques. Chacun d'entre eux, convexe, matérialise l'emprise, sur le contour de la cellule sphérique de Ben Aim, de chacune des petites billes plaquées contre la paroi d'une grosse. Le pavage ainsi formé doit être le plus dense possible. On reprend un concept utilisé en topologie structurale, la densité de juxtaposition, pour obtenir le nombre de coordination. Le modèle élaboré permet de retrouver la solution du fameux « kissing number problem » (KNP) en dimension 3 : 12 sphères peuvent entourer une sphère centrale de même diamètre.

Enfin, l'expression permettant le calcul du coefficient d'effet de paroi ne présente pas de difficulté théorique et figurait déjà dans la thèse de François de Larrard soutenue en 1987 (à la dimension de la cellule de référence près).

La courbe théorique obtenue pour le coefficient d'effet de paroi en fonction du rapport des diamètres fins/gros, lorsque la compacité des petits grains en pleine masse vaut **0,65**, est bien située à proximité de la borne inférieure de Caquot. Puis, au fur et à mesure que l'environnement mono-dispersé de la sphère « intruse » devient plus dense pour atteindre une compacité de **0,734**, les courbes obtenues s'approchent effectivement de la borne supérieure déduite de la théorie de Dodds correspondant à un empilement hexagonal compact (EHC).

Les vérifications expérimentales ont été effectuées à partir de 4 sources puisées dans la littérature, l'une d'entre elles regroupant les résultats de plusieurs publications. Les manipulations ont été effectuées avec des billes de verre et des granulats roulés ou concassés. Les courbes extrêmes de la théorie ROAD (associée au modèle des carrés sphériques), obtenues rappelons-le avec des compacités virtuelles en pleine masse des petites sphères variant entre **0,65** et **0,734**, encadrent remarquablement bien les points expérimentaux du coefficient d'effet de paroi lorsque les particules possèdent une forme sphérique.

Pour les grains roulés de la Loire, à rapports de tailles fins/gros constants, on enregistre bien, dans deux cas sur trois, un accroissement du coefficient d'effet de paroi avec la compacité résiduelle des petits grains, le troisième cas laissant apparaître une stagnation.

La théorie ROAD s'avère moins efficace lorsqu'un « anti-effet de paroi » se manifeste pour les forts contrastes de tailles en raison du rôle de vibrateurs internes tenu par les gros grains à l'égard des plus fins.

Cependant, pour une compacité virtuelle des petites sphères valant $\beta_2 = 0,68$, on note une parfaite concordance entre la courbe théorique et la courbe choisie par François de Larrard dans la dernière version du MEC pour lisser au mieux les données expérimentales de l'effet de paroi. Or, ces dernières ont notamment été obtenues sur les grains roulés de la Loire dont la compacité propre réelle vaut $\alpha_2 \approx 0,61$ qui correspond précisément à $\beta_2 = 0,68$ en virtuel avec le protocole de compactage adopté ($K = 9$).

Enfin, dans le cas de l'effet exercé par une paroi plane, des mesures effectuées il y a quelques années montrent que la théorie ROAD est plus précise que la théorie de Ben Aïm qui était, jusqu'à présent, considérée comme référence.

Intéressons-nous, dans un deuxième temps, à l'effet de desserrement.

Tout d'abord, une distinction est effectuée entre effet de desserrement et effet d'interférence. En partant de la zone des « gros dominants », l'effet de desserrement est vraiment localisé autour d'une particule insuffisamment fine pour pouvoir se nicher dans l'interstice situé entre plusieurs grosses particules sans les écarter. En partant de la zone des « fins dominants », l'effet des gros grains se réduit à celui de leur paroi s'ils sont suffisamment disséminés dans le granulat fin. Si leur proportion augmente, leurs parois trop rapprochées vont interagir sur l'arrangement des éléments fins : c'est l'effet d'interférence, plus global.

Le modèle utilisé comme support est le modèle de décompaction locale qui n'est pas de notre cru puisqu'il figurait dans la thèse de François de Larrard. Il fait appel à un rapport de tailles critique. Si le rapport des diamètres fins/gros lui est inférieur, un petit grain peut s'insérer dans une cavité disponible sans déstructurer la matrice de la classe dominante constituée d'éléments grossiers. S'il lui est supérieur, le squelette de ces derniers subit localement une dilatation.

Au fur et à mesure de l'introduction des éléments fins, il est soumis à une augmentation de sa porosité jusqu'au basculement dans la zone des « petits dominants » à un point dénommé l'eutectique.

D'un point de vue mathématique, la compacité du mélange à l'intérieur de la zone des « gros dominants » est obtenue en exprimant la décompaction progressive du squelette des grosses particules en fonction du volume partiel des petites relativement au volume partiel que ces dernières occupent à l'eutectique.

L'écriture des équations à la frontière des « petits dominants » et des « gros dominants » implique tout d'abord la prise en compte du coefficient d'effet de paroi dans la détermination du coefficient d'effet de desserrement : une première liaison entre les deux interactions granulaires est ainsi établie.

Elle nécessite également de déterminer la différence de la compacité des grosses particules « en zone courante » et de leur compacité en « zone perturbée par l'effet d'interférence ».

Dans la publication originale, cette dernière est évaluée grâce à l'hypothèse de dilatation isotrope des grosses sphères autour d'une petite dans une cellule tétraédrique puis transposée à la zone plus globale subissant l'effet d'interférence grâce à l'insertion d'un paramètre analogue à un coefficient de dilatation thermique linéaire.

Dans le modèle présenté, nous proposons de conserver la cellule de référence sphérique de la théorie ROAD en assurant la continuité avec celle utilisée pour étudier l'effet de paroi lorsque le rapport de tailles fins/gros vaut 1 : une deuxième liaison entre les deux interactions granulaires est à nouveau établie. La compacité des grosses particules dilatées est calculée dans un premier temps dans cette cellule sphérique. On détermine dans un deuxième temps leur compacité dans la zone plus globale subissant l'effet d'interférence en tenant compte de la taille de la cavité et en écrivant précisément qu'aucun desserrement ne doit se produire lorsque le rapport de tailles est inférieur au rapport de tailles critique. Dans la première phase et comme pour l'effet de paroi, il est nécessaire de déterminer le nombre de grosses sphères en contact avec une sphère centrale de diamètre inférieur. Le modèle des carrés sphériques continue à prouver son efficacité dans la mesure où un nouveau résultat remarquable est obtenu. Après l'établissement de la solution du « kissing number problem » en dimension 3, on démontre qu'il est possible de positionner 4 grosses sphères contre une sphère centrale d'un diamètre 0,222 fois plus petit. Cette valeur est à comparer avec celle de 0,224 obtenue dans une cellule tétraédrique.

Les courbes théoriques de la théorie **ROAD** relatives à l'effet de desserrement ont ensuite été tracées pour différentes compacités des gros grains en pleine masse et pour différents rapports de tailles critiques (tailles de cavités par abus de langage).

Les vérifications expérimentales sont conduites à partir des 4 sources déjà utilisées pour l'effet de paroi et qui comprennent des résultats obtenus avec des billes de verre et des granulats roulés et concassés.

Pratiquement tous les points qui en sont tirés se situent entre les courbes correspondant à des rapports de tailles critiques de 0 et de 0,4.

Pour des particules sphériques, les points sont bien répartis autour de la courbe correspondant à une taille de cavene de 0,2, très proche de 0,222 ou 0,224 qui sont les valeurs évoquées plus haut.

Pour différents types de formes de granulats et pour les forts contrastes de tailles, il semble que le desserrement soit davantage marqué pour les concassés et les roulés par rapport aux sphères en raison de tailles de cavernes plus faibles. La morphologie plus accidentée des grosses particules pourrait en être la cause.

Enfin, en retenant comme pour l'effet de paroi une compacité résiduelle de la classe dominante de 0,68, et pour chaque point expérimental recueilli sur le granulat roulé de la Loire, nous avons associé, à un rapport de tailles fins/gros donné, une taille de cavene par interpolation entre les différentes courbes représentatives de cette dernière (de 0 à 0,4). Nous avons ensuite établi une courbe de tendance linéaire des tailles de cavene en fonction du rapport des tailles fins/gros uniquement valable pour un granulat roulé. En insérant cette équation dans la théorie ROAD, on note une bonne concordance entre la courbe théorique représentative du coefficient d'effet de desserrement pour le granulat de la Loire lorsque la compacité propre virtuelle est de 0,68 et la courbe choisie par François de Larrard pour lisser au mieux les données expérimentales et dont l'équation est utilisée dans la dernière version du MEC.

La partie suivante de ce travail est consacrée à la simulation numérique discrète, véritable banc d'essais ayant permis des avancées considérables dans le domaine du traitement de la matière granulaire dans des secteurs à haute valeur ajoutée.

Nous avons tout d'abord proposé une définition d'un état désordonné de compacité maximale : il correspond à un état bloqué d'une assemblée de particules sphériques parfaitement lisses ayant subi un double traitement. Initialement, le système est « liquide » : les particules sont de petit diamètre et sont disséminées aléatoirement dans l'espace disponible. Dans un premier temps, elles sont à la fois mélangées et compactées en se dilatant avec une vitesse suffisamment faible pour permettre au système d'explorer un maximum de configurations possibles. Dans un deuxième temps, elles sont soumises à une pression isotrope. L'apparition de germes cristallins devra rester négligeable. Les algorithmes respectifs correspondant à ces deux phases sont celui de Lubachevsky et Stillinger (LS) d'une part et celui de dynamique moléculaire (DM) d'autre part.

Avant d'aborder la quantification des coefficients d'interaction par simulation, les assemblées désordonnées de compacité maximale ont été étudiées pour des billes mono-dispersées et bi-dispersées de rapport $x = 0,2$ et $x = 0,4$.

Pour les mélanges comprenant une seule taille de particules, on obtient une compacité égale à **0,6413**. Ce résultat est cohérent et se situe dans la fourchette communément admise : $0,639 \leq \Phi^* \leq 0,646$.

Pour les mélanges binaires testés par simulation, la notion de classe dominante a pu être affinée grâce au concept de « pressions partielles » qui combine à la fois les aspects géométrique et mécanique. En réalité, trois zones sont à considérer : celle des « fins dominants », une zone mixte dénommée zone de « synergie du squelette porteur » et celle des « gros dominants ».

Pour le rapport de tailles $x = 0,2 < 0,22$, correspondant à la taille d'une cavité tétraédrique, le passage de la deuxième à la troisième zone se traduit par une forte augmentation d'une part de la proportion de particules fines flottantes libres de se mouvoir dans les cavités qui se sont créées et d'autre part de l'intensité des chaînes de forces et des pressions partielles entre grosses particules désormais beaucoup plus en contact les unes avec les autres. « L'eutectique » est assez clairement mis en évidence dans cette situation.

Dans le cas $x = 0,4 > 0,22$, la distinction n'est plus aussi nette même si le concept de « pressions partielles » fait également apparaître les trois zones précédemment citées. Sur le graphique « indices des vides » versus « proportion volumique des fines particules », les deux extrémités de la courbe sont toujours assimilables à des droites pour lesquelles les zones des « fins dominants » et des « gros dominants » demeurent identifiables. La simulation numérique fait apparaître un nombre proche de 4 contacts exercés par les grosses sur les fines particules lorsque ces dernières sont en faible proportion et que chacune d'entre elles a tendance à écarter ses voisines en raison d'une taille de cavité insuffisante. Notre modélisation de l'effet de desserrement, basée sur l'existence de ce rapport de dimensions critique et sur la notion de décompaction locale, s'en trouve confortée.

Les coefficients d'effet de paroi obtenus par simulation numérique LS + DM se situent entre la borne inférieure de Caquot et la borne supérieure déduite de la théorie de Dodds. Ils sont proches des résultats expérimentaux issus de la thèse de Ben Aim sur des billes de verre.

Par ailleurs, pour une compacité virtuelle des petites sphères valant $\beta_2 = 0,71$, on note une très bonne concordance entre la courbe théorique fournie par la théorie ROAD et la courbe choisie pour lisser au mieux les valeurs résultant de la simulation numérique. Or, ces dernières ont précisément été obtenues sur des billes dont la compacité propre réelle vaut $\alpha_2 \approx 0,64$ correspondant à $\beta_2 = 0,71$ avec l'indice de serrage $K = 9$. La zone perturbée par l'effet de paroi est, dans ce cas précis, délimitée par une cellule de référence sphérique identique à celle choisie par Ben Aïm ou Suzuki et Oshima.

Les coefficients d'effet de desserrement résultant de la simulation numérique LS + DM sont, eux aussi, parfaitement cohérents avec ceux présentés dans la thèse de Ben Aïm, toujours sur des billes de verre. Par ailleurs, pour les forts contrastes de tailles et toujours pour $\beta_1 = 0,71$, ils sont pratiquement confondus avec ceux fournis par la théorie ROAD lorsque la taille de caverne vaut $x_0 = 0,2$, très proche du rapport de diamètres correspondant à une caverne tétraédrique.

Compte-tenu de la nouvelle modélisation des interactions géométriques, le Modèle d'Empilement Compressible (MEC) évolue finalement vers un MEC 4-paramètres, qui sont : les coefficients d'effet de paroi et d'effet de desserrement, l'indice de serrage qui fait l'objet d'une nouvelle calibration et le rapport critique de tailles de caverne. Ce dernier vaut $x_0 = 0,2$ pour des éléments sphériques. Pour les granulats roulés, il est considéré comme étant proportionnel au rapport de tailles fins/gros. Pour chaque granulats concassés testés enfin, il est constant. Mais il est d'autant plus faible que la rugosité et l'angularité des grains sont importantes. C'est ainsi qu'il atteint une valeur nulle pour le concassé provenant d'un gisement du Nord-Est de Tlemcen (Algérie) et pour un concassé granitique. Le MEC 4-paramètres est ensuite comparé au MEC original et au modèle 3-paramètres (effets de paroi, de desserrement et de « coïncement ») de Kwan, Chan, Wong. Ses prévisions s'avèrent les plus précises sur un ensemble de 780 valeurs de compacité obtenues sur des mélanges binaires. Son coefficient de corrélation atteint **99%** pour les empilements réels de billes, **98,7%** pour les empilements simulés d'éléments sphériques, **97,8%** pour les granulats roulés et **96,4%** pour les concassés.

Enfin, un modèle de viscosité d'une suspension polydisperse est associé au MEC 4-paramètres. Il concerne une suspension « idéalisée » de particules sphériques, rigides et inertes disposées dans un fluide newtonien. Il fait appel à l'approche itérative de Farris et à une relation « loi de puissance » de type Krieger-Dougherty.

En accord avec un travail précédemment réalisé par Bournonville, Coussot, Chateau, tout en étant compatible avec la relation d'Einstein, il met en lumière une nouvelle relation entre viscosité relative et fraction volumique solide. Lorsque cette dernière atteint sa valeur critique, la suspension devient empilement. La compacité de celui-ci est estimée à partir du MEC 4-paramètres et de ses nouveaux coefficients d'interaction géométrique. Les prévisions de viscosité sont en bon accord avec des données expérimentales recueillies sur des mélanges binaires de billes de verre suspendues dans une huile de silicone.

Apports principaux :

Le modèle d'empilement compressible (MEC), utilisé comme support pour notre travail, et le modèle de décompaction locale, intervenant pour quantifier l'effet de desserrement, ne sont évidemment pas de notre cru.

Pour notre part, inspiré par les travaux de Ben Aïm, nous avons montré que l'emploi d'une cellule de référence sphérique concentrique à une particule « intruse » et commune aux deux types d'interaction granulaire pouvait convenir : il s'agit de la théorie ROAD.

D'autre part, la méthode de calcul du nombre de coordination est originale. Le modèle des carrés sphériques permet de retrouver deux résultats bien connus en topologie structurale tout en étant suffisamment simple d'un point de vue théorique. Concernant l'effet de paroi, la théorie élaborée aboutit à des résultats qui convergent vers la borne EHC à mesure que l'environnement mono-dispersé de la sphère « intruse » devient plus compact et vers la borne de Caquot dans le cas contraire. Applicable également contre une paroi plane qui constitue un cas limite, elle s'avère plus efficace que celle mise au point par Ben Aïm, présentée comme cadre de référence.

La simulation numérique apporte une validation des théories mises au point. Si elle confirme l'existence d'une zone des « fins dominants » et d'une zone des « gros dominants » aux deux extrémités du diagramme d'indice des vides où la linéarité de l'effet de paroi et de l'effet de desserrement est plutôt bien respectée, elle a permis de mieux cerner la notion de classe dominante en faisant apparaître une zone mixte appelée « zone de synergie du squelette porteur ». Elle semble également attester la notion de rapport critique de tailles de caverne.

Enfin, le modèle de viscosité d'une suspension concentrée polydispersée de particules sphériques suspendues par un fluide visqueux, conçu par Bournonville, Coussot et Chateau, a été développé et enrichi.

Axes d'amélioration possible :

Il convient ici de souligner que l'interrogation concernant la possibilité d'obtenir des coefficients d'interaction supérieurs à 1 reste toujours d'actualité. Nous avons montré que le coefficient d'effet de paroi est bien susceptible d'être supérieur à l'unité dans le cas de mélanges cimentaires non fluidifiés, mais que les phénomènes mis en jeu sont essentiellement d'ordre chimique et colloïdal alors que notre modèle est basé sur des considérations purement géométriques.

Par ailleurs, la simulation numérique constitue un outil puissant et très intéressant pour étudier les empilements à l'échelle des particules. Il conviendrait de tester des rapports de tailles supplémentaires par rapport à ceux déjà pris en compte pour mieux caractériser les mélanges binaires.

Enfin, il serait probablement opportun de développer le modèle de viscosité et de l'étendre à des suspensions non newtoniennes.

BIBLIOGRAPHIE

- [ABER92] ABERG B.**, «Void ratio of non-cohesive soils and similar materials», *J. Geotech. Eng.* 118(9) pp.1315-1334 (1992).
- [AGNO07] AGNOLIN I., ROUX J.N.**, «Internal states of model isotropic granular packings. I. Assembling process, geometry and contact networks». *Physical review*, volume E 76, number 6, 061302 (2007).
- [AGRE91]**, *Rapport de jurys de concours «Agrégation génie civil» concours externe*, Ministère de l'Education Nationale (1991).
- [AITC89] AITCIN P.C., ALBINGER J.M.**, «Les bétons à hautes performances, expériences nord-américaine et française» *Annales ITBTP*, n°473.
- [ALLE87] ALLEN M.P., TILDESLEY D.J.**, *Computer simulation of liquids*, Oxford University Press (1987).
- [ANDE93] ANDERSEN P.J., JOHANSEN V.**, *A guide for determining the optimal gradation of concrete aggregates*, (report SHRP-C-334). National Research Council, Washington, DC (1993).
- [ANDR30] ANDREASEN A.H.M., ANDERSEN J.**, «Über die beziehung zwischen kornabstufung und Zwischenraum in produkten aus losen Körnern», *Kolloid-Zeitschrift*, Vol.50 pp.217-228 (1930).
- [BARO82] BARON J.**, «Les principes de composition du béton de porosité minimale» in *le béton hydraulique*. Paris, Presses de l'Ecole Nationale des Ponts et Chaussées pp.143-159 (1982).
- [BECK03] BECK J.M., VOLPERT V.A.**, «Gapped gapless packing structures». *Journal of Colloid and Interface*, 262 pp.162-170 (2003).
- [BENA70] BEN-AÏM R.**, *Étude de la texture des empilements de grains. Application à la détermination de la perméabilité des mélanges binaires en régime moléculaire, intermédiaire, laminaire*. Thèse soutenue en 1970 à la Faculté des Sciences de l'Université de Nancy.
- [BIAZ09] BIAZZO I., CALTAGIRONE F., PARISI G., ZAMPONI F.**, «A theory of amorphous packings of binary mixtures of hard spheres». *arXiv:0903.5099v1 [cond-mat.dis-nn]*, 29 Mars 2009 (2009).
- [BOLO47] DREUX G., FESTA J.**, formulation de Bolomey datant de 1947 exposée dans *Nouveau guide du béton et de ses constituants*, huitième édition, 400 pages (1998).
- [BOUR05] BOURNONVILLE B., COUSSOT P., CHATEAU X.**, «Modification du modèle de Farris pour la prise en compte des interactions géométriques d'un mélange polydisperse de particules». *Rhéologie*, Vol.7, pp 1-8 (2005).
- [BOUT97] BOUTREUX T., DE GENNES P.G.**, «Compaction of granular mixtures: a free volume model». *Physica A*, 244, pp.59-67 (1997).
- [BOUV91] BOUVARD D., LANGE F.F.**, «Correlation between random dense parking and random dense packing for determining particle coordination number in binary systems». *Physical review*, volume 45, number 2 (1992).
- [BROU06] BROUWERS H.J.H.**, «Particle-size distribution and packing fraction of geometric random packings», *physical review E* 74,031309 pp.1-14.
- [CAQU37] CAQUOT A.**, «Le rôle des matériaux inertes dans le béton» in *Mémoires de la Société des Ingénieurs Civils de France*. (Juillet-août 1937) pp.562-582.

- [CHAN14] **CHAN K.W., KWAN A.K.H.**, «Evaluation of particle packing models by comparing with published test results», *Particuology* (2014), <http://dx.doi.org/10.1016/j.partic.2013.11.008>
- [CIAM10] **PICA CIAMARRA M., CONIGLIO A., DE CANDIA A.**, «Disordered jammed packings of frictionless spheres». *Soft Matter* 6, pp.2975-2981 (2010).
- [DELA88] **DE LARRARD F.**, «Formulation et propriétés des bétons à très hautes performances». *Rapport de recherche LPC n°149*, (Mars 1988).
- [DELA00] **DE LARRARD F.**, «Structures granulaires et formulation des bétons». *Etudes et recherches des laboratoires des ponts et chaussées*. Ouvrages d'art OA34. (2000).
- [DEWA99] **DEWAR J.D.**, *Computer modelling of concrete mixtures*. First published 1999 by E & FN Spon.
- [DING94] **DINGER D.R., FUNK J.E.**, *Predictive Process Control of crowded particulate suspensions applied to ceramic manufacturing*, Kluwer Academic Publishers (1994) Boston.
- [DODD80] **DODDS J.A.**, *J. Colloid Interface Sci.*, 77:317 (1979).
- [DROZ04] **DROZD J.J.**, *Computer simulation of granular matter: a study of an industrial grinding mill*. Thesis, University of Western Ontario, Canada (2004).
- [DURA97] **DURAN J.**, *Sables, poudres et grains*. Editions Eyrolles sciences (1997).
- [EGAM97] **EGAMI T.**, *Mater. Sci. Engng*, A226-A228, 261 (1997).
- [EINS06] **EINSTEIN A.**, «Investigation on the theory of the Brownian movement», *Annalen Der Physik* (4), 19, pp.289-306 (1906).
- [FARR68] **FARRIS R.J.**, «Prediction of the viscosity of Multimodal Suspensions from Unimodal Viscosity data», *Trans. Soc. Rheol.*, 12, (2), pp.281-301 (1968).
- [FAUR58] **FAURY J.**, *Le béton: influence de ses constituants inertes. Règles à adopter pour sa meilleure composition, sa confection et son transport sur les chantiers*, 3^{ème} édition, Paris, Dunod (1958).
- [FINN70] **FINNEY J.L.**, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 319:479 (1970).
- [FRED94] **FREDLUND M.D., FREDLUND D.G., WILSON G.W.**, «An equation to represent grain-size distribution», *Can. Geotech. J.* 37 pp.817-827 (2000).
- [FULL07] **FULLER W.B., THOMPSON S.E.**, «The laws of proportioning concrete». *Trans. Am. Soc. Civ. Eng.* 59 (1907).
- [FURN29] **FURNAS C.C.**, *Department of Commerce, Bureau of Mines, Report of Investigation Serial N°2894, 1928; Bulletin of US Bureau of Mines* 307 (1929).
- [GALL00] **GALLIAS J.L., BIGAS J.P.**, «Étude des empilements granulaires dans les mélanges cimentaires», *Colloque physique et mécanique des matériaux granulaires*, Tome 2, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (Septembre 2000).

BIBLIOGRAPHIE

[GOLT97] GOLTERMANN P., JOHANSEN V., PALBOL L., «Packing of aggregates: an alternative tool to determine the optimal aggregate mix». *ACI Materials journal*, 94(5), pp.435-443 (1997).

[HANI12] HANINI W., *Étude de l'incidence de la granularité sur la compacité des mélanges granulaires*. Mémoire en vue de l'obtention du diplôme de Magister en Génie Civil. Université Aboubekr Belkaid, Algérie, (2012).

[HERM10] HERMES M., DIJKSTRA M., «Jamming of polydisperse hard spheres : the effect of kinetic arrest». *EPL* 89 (2010).

[HOGE63] HOGENDIJK M.J., «Random dense packing of spheres with a discrete distribution of radii». *Philips Research Reports*, 18, 109 (1963).

[HUSK08] HÜSKEN G., BROUWERS H.J.H., «A new mix design concept for earth-moist concrete: a theoretical and experimental study». *Cement and Concrete Research* , 38, pp.1246-1259 (2008).

[JONE02] JONES M.R., ZHENG L., NEWLANDS M.D., «Comparison of particle packing models for proportioning concrete constituents for minimum voids ratio». *Matériaux et Constructions*, 35, pp.301-309 (2002).

[KECH09] KECHKAR C., CHERAIT Y., «Détermination expérimentale des fonctions d'interaction utilisées dans le modèle linéaire de compacité en utilisant des granulats locaux». *First International Conference on Sustainable Built Environment Infrastructures in Developing Countries*, ENSET Oran (Algeria), October 12-14, 2009 pp.199-206 (2009).

[KNIG95] KNIGHT J.B., FANDRICH C.G., LAU C.N., JAEGER H.M., NAGEL S.R., «Density relaxation in a vibrated granular material». *Physical review E*, 51, 5, may, pp.3957-3963 (1995).

[KRZA07] KRZAKALA F., KURCHAN J., «Landscape analysis of constraint satisfaction problems». *Physical review E*, 76(2) 21122 (2007).

[KWAN13] KWAN A.K.H., CHAN K.W., WONG V., «A 3-parameter particle packing model incorporating the wedging effect», *Powder Technology* 237, pp.172-179 (2013).

[KWAN15] KWAN A.K.H., WONG V., FUNG W.W.S., «A 3-parameter packing density model for angular rock aggregate particles», *Powder Technology* 274, pp.154-162 (2015).

[LECO97] LECOMTE A., ZENNIR A., «Modèle de suspension solide et formulation de bétons calcaires en Lorraine». *Bulletin des laboratoires des ponts et chaussées* n°211 pp.41-52 (1997).

[LECO99] LECOMTE A., MECHLING J.M., «Compacité des mélanges et propriétés des grains». *Bulletin des laboratoires des ponts et chaussées* n°220 pp.21-33 (1999).

[LECO01] LECOMTE A., DE LARRARD F., MECHLING J.M., «Résistance à la compression de bétons hydrauliques au squelette granulaire non optimisé». *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées* n°234 pp.89-105 (2001).

[LEE70] LEE D.I., *J. Paint Tech.* 42, 579.

[LEIT85] LEITZELEMENT M., LO C.S., DODDS J.A., «Porosity and permeability of ternary mixtures of particles», *Powder Technology* 41, pp.159-164 (1985).

[LEQU09] LE QUINIOU A., *Écoulement granulaire à haute vitesse sous l'action de la force centrifuge*. Thèse soutenue le 23 Novembre 2009 à l'Université Blaise Pascal de Clermont-Ferrand II.

[LUBA91] LUBACHEVSKY B.D., «How to simulate billiards and similar systems». *Journal of computational physics*, Volume 94, Issue 2 (May 1991).

[MANS00] MANSOUTRE S., VAN DAMME H., COLOMBET P., «Des suspensions concentrées aux milieux granulaires lubrifiés : étude de pâtes de silicate tricalcique», *Colloque physique et mécanique des matériaux granulaires*, Tome 2, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées (Septembre 2000).

[MARI11] MARI R., *Transition vitreuse et transition de blocage: les solides désordonnés entre champ moyen et dimension finie*. Thèse soutenue le 14 Juin 2011 à Paris.

[MASU06] MASUDA H., HIGASHITANI K., YOSHIDA H., *Powder Technology Handbook*, third edition (2006).

[MCGE61] McGEARY R.K., *Journal of American Ceramic Society* 44, 513.

[MIRA03] MIRACLE D.B., SANDERS W.S., SENKOV O.N., «The influence of efficient atomic packing on the constitution of metallic glasses». *Philosophical Magazine*, Vol.83, N°20, pp.2409-2428 (2003).

[MIRA06] MIRACLE D.B., LORD E.A., RANGANATHAN S., «Candidate atomic cluster configurations in metallic glass structures». *Materials transactions*, Vol.47, N°7, pp.1737-1742 (2006).

[MOON50] MOONEY M., «The viscosity of a concentrated suspension of spherical particles». *J. colloid Sci*, 6, 162 (1950).

[OEST98] OESTERLE J., «Densité maximale des empilements de sphères en dimension 3». *Séminaire Nicolas Bourbaki*, exp. N°863, pp.405-413 (1998-1999).

[OHER03] O'HERN C.S., SILBERT L.E., LIU A.J., NAGEL S.R., «Jamming at zero temperature and zero applied stress : the epitome of disorder». *Physical review E* 68, 011306 (2003).

[ONOD86] ONODA G.Y., LINIGER E.G., *Phys. Rev. A* 33, 715 (1986).

[PABS04] PABST W., «Fundamental considerations on suspension rheology». *Ceramics – Silikáty* 48 (1) pp. 6-13 (2004).

[PAVI47] PAVILLON A., «Cubicité et qualité des gravillons routiers». *I.T.B.T.P.*, circulaire n°20 (1947).

[PERO85] PERONIUS N., SWEETING T.J., «On the correlation of minimum porosity with particle size distribution». *Powder Technology* 42 pp.113-121 (1985).

[PEYN09] PEYNEAU P.E., *Étude du comportement et du compactage de pâtes granulaires par simulation numérique discrète*. Thèse soutenue le 2 Novembre 2009 à l'École Nationale des Ponts et Chaussées.

[POUL01] POULIOT N., SEDRAN T., DE LARRARD F., MARCHAND J., «Prédiction de la compacité des bétons compactés au rouleau à l'aide d'un modèle d'empilement compressible». *Bulletin des Laboratoires des Ponts et Chaussées* n°233.

[RADJ10] RADJAÏ F., DUBOIS F., «Modélisation numérique discrète des matériaux granulaires». Ouvrage collectif publié dans la collection *Mécanique et ingénierie des matériaux*. Editions Lavoisier (2010).

[RICH00] RICHARD P., *Étude de la géométrie de milieux granulaires modèles tridimensionnels par simulation numérique*. Thèse soutenue le 23 juin 2000 devant l'université de Rennes 1.

[RIDG68] RIDGWAY K., TARBUCK K.J., *Chem. Process. Eng.* 49 (1968).

[RINT96] RINTOUL M.D., TORQUATO S., «Metastability and crystallization in Hard-Sphere Systems». *Physical review*, 77, 20, November, pp.4198-4201 (1996).

[ROBI88] ROBIN P., *Contribution à la caractérisation de l'échantillonnage des mélanges granulaires en vue d'étudier les phénomènes de malaxage*. Thèse soutenue le 24 Octobre 1988 à l'Université Blaise Pascal de Clermont-Ferrand II.

[ROUX03] ROUX J.N., «La simulation numérique discrète dans l'étude des matériaux : l'exemple des assemblages de sphères». *Actes des journées sciences de l'ingénieur du réseau des laboratoires des ponts et chaussées* n°254 pp.525-534 (2003).

[ROUX05] ROUX J.N., CHEVOIR F., «Simulation numérique discrète et comportement mécanique des matériaux granulaires». *Bulletin des laboratoires des ponts et chaussées* n°254 pp.109-138 (2005).

[ROUX07] ROUX J.N., CHEVOIR F., TOUSSAINT F., «États de compacité maximale pour les mélanges binaires de grains sphériques : étude par simulation numérique». *Bulletin des laboratoires des ponts et chaussées* n°268-269 pp.141-152 (2007).

[ROUX10] ROUX J.N., COMBE G., «Méthodes quasi-statiques pour la simulation numérique discrète des assemblages granulaires». *arXiv:1011.2301v1 [cond-mat.soft]* 10 Novembre 2010 (2010).

[SCHA96] SCHÄFER J., DIPPEN S., WOLF D.E., «Force schemes in simulations of granular materials». *J. Phys. I France* 6 pp.5-20 (1996).

[SCHU53] SCHÜTTE K., VAN DER WAERDEN B.L., «Das problem der dreizehn kugeln». *Proc. London Math. Ann.* n°125 pp.325-334 (1953).

[SEDR94] SEDRAN T., DE LARRARD F., ANGOT D., «Prévision de la compacité des mélanges granulaires par le modèle de suspension solide». *Bulletin des laboratoires des ponts et chaussées* n°194 pp.59-86 (1994).

[STOV86] STOVALL T., DE LARRARD F., BUIL M., «Linear packing density model of grains mixtures». *Powder Technology* 48(1), 1 (1986).

[STOV87] STOVALL T., BUIL M., SUCH C., «Viscosité des suspensions multimodales». *Journées Physiques – Les milieux granulaires*, Les Arcs, pp. 73-78 (1987).

[SUZU83] SUZUKI M., OSHIMA T., «Estimation of the co-ordination number in a multi-component mixture of spheres». *Powder Technology*, 35, pp.159-166 (1983).

[SUZU85] SUZUKI M., OSHIMA T., «Verification of a model for estimating the void fraction in a three-component randomly packed bed». *Powder Technology*, 43, pp.147-153 (1985).

[TORQ10a] TORQUATO S., JIAO Y., «Robust algorithm to generate a diverse class of dense disordered and ordered sphere packings via linear programming». *Physical review E* 82, 061302 (2010).

[TORQ10b] TORQUATO S., STILLINGER F.H., *Rev. Mod. Phys* 82, 2633 (2010).

[TOUF77] TOUFAR W., BORN M., KLOSE E., «Contribution of optimization of components of different density in polydispersed particles systems» in *Freiberger Booklet A 558* (VEB Deutscher Verlag fur Grundstoffindustrie) 29-44 (in German) (1977).

BIBLIOGRAPHIE

[TOUR82] TOURENQ C., DENIS A., «Les essais de granulats». *Rapport de recherche LPC n°114*, (Juillet 1982).

[TSIR97] TSIREL S.V., «Methods of granular and fragmented material packing density calculation». *J. Rock Mech. Min. Sci.* n°34 (1997) pp.263-273.

[VOLK02] VOLKOV I., CIEPLAK M., KOPLIK J., BANAVAR J.R., «Molecular dynamics simulations of crystallization of hard spheres». *Physical review E*, 66 (6): 061401 (2002).

[WEST30] WESTMAN A.E.R., HUGILL H.R., *Journal of American Ceramic Society* 13, 767 (1930).

[WEST36] WESTMAN A.E.R., «The packing of particles: empirical equations for intermediate diameter ratios», *Journal of American Ceramic Society* 19 pp.127-129 (1936).

[WEYM33] WEYMOUTH cité par POWERS, *Properties of fresh concrete*, éditions Wiley (1968).

[WISE52] WISE M.E., «Dense random packing of unequal spheres», *Philips Res. Rept.* 7, 321 (1952).

[WOUT08] WOUTERSE A., *Random packing of colloids and granular matter*, thèse soutenue le 18 Février 2008 à l'Université d'Utrecht.

[WYAR05] WYART M., *Sur la rigidité des solides amorphes & Fluctuations des prix, conventions et microstructure des marchés financiers*. Thèse soutenue le 24 Novembre 2005 à l'Ecole Polytechnique.

[YERA62] YERAZUNIS S., BARTLETT J.W., NISSAN A.H., «Packing of binary mixtures of spheres and irregular particles», *Nature*, 195, 33 (1962).

[YUST87] YU A.B., STANDISH N., «Porosity calculations of multi-component mixtures of spherical particles», *Powder Technology*, 52, pp.233-241 (1987).

[YUST88] YU A.B., STANDISH N., «An Analytical-Parametric Theory of the Random Packing of Particles», *Powder Technology*, 55, pp.171-186 (1988).

[YUST90] YU A.B., STANDISH N., *Powder Technology*, 62 (1990).

[YUST93] YU A.B., STANDISH N., McLEAN A., «Porosity calculation of binary mixtures of non spherical particles», *Journal of American Ceramic Society* 76 [11] 2813-16 (1993).

[YUZO96] YU A.B., ZOU R.P., STANDISH N., «Modifying the linear packing model for predicting the porosity of nonspherical particle mixtures». *Industrial & Engineering Chemistry Research* 35 pp.3730-3741 (1996).

[ZHEN90] ZHENG J., JOHNSON P.F., REED J.S., *Journal of American Ceramic Society* 73, 1392 (1990).

[ZOK91] ZOK F., LANGE F.F., «Packing density of composite powder mixtures», *Journal of American Ceramic Society* 74 n°8, pp.1880-85 (1991).

LISTE DES SYMBOLES

a_i	volume apparent d'une classe mono-dispersée ayant un diamètre égal à d_i
a_{ij}	paramètre décrivant l'effet de desserrement exercé par la classe j sur la classe i dominante dans le modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard
$a(x)$	même paramètre, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{DL}(x)$	coefficient d'effet de desserrement selon le modèle de décompaction locale, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{GJP}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après Goltermann, Johansen, Palbol, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{L00}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après de Larrard en 2000, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{L88}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après de Larrard en 1988, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{LZ}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après Lecomte et Zennir en 1997, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{ROAD}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après la théorie ROund ADjustable cell (cellule sphérique à diamètre ajustable), considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_S(x)$	coefficient d'effet de desserrement selon la théorie de Stovall, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{SLA}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après Sedran, de Larrard, Angot en 1994, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{YS}(x)$	coefficient d'effet de desserrement selon la théorie de Yu et Standish, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$a_{YZS}(x)$	coefficient d'effet de desserrement d'après Yu, Zou et Standish en 1996, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
b_{ij}	paramètre décrivant l'effet de paroi exercé par la classe j sur la classe i dominante dans le modèle d'empilement compressible (MEC) de de Larrard
$b(x)$	même paramètre, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{BA}(x)$	coefficient d'effet de paroi selon la théorie de Ben-Aïm, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros

LISTE DES SYMBOLES

$b_c(x)$	coefficient d'effet de paroi selon la théorie de Caquot, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{EHC}(x)$	coefficient d'effet de paroi selon le modèle de l'Empilement Hexagonal Compact de Dodds, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{L00}(x)$	coefficient d'effet de paroi d'après de Larrard en 2000, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{L88}(x)$	coefficient d'effet de paroi d'après de Larrard en 1988, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{LZ}(x)$	coefficient d'effet de paroi d'après Lecomte et Zennir en 1997, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{ROAD}(x)$	coefficient d'effet de paroi d'après la théorie ROund ADjustable cell (cellule sphérique à diamètre ajustable), considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{SLA}(x)$	coefficient d'effet de paroi d'après Sedran, de Larrard, Angot en 1994, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{SO}(x)$	coefficient d'effet de paroi selon la théorie de Suzuki et Oshima, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{YS}(x)$	coefficient d'effet de paroi selon la théorie de Yu et Standish, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$b_{YZS}(x)$	coefficient d'effet de paroi d'après Yu, Zou et Standish en 1996, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
C_E	Constante d'Einstein dans son modèle de viscosité
c	compacité réelle d'un mélange poly-dispersé
c	paramètre décrivant « l'effet de coïncement » (« wedging effect ») dans le modèle 3-paramètres de Kwan, Chan, Wong
c_{gear}	coefficient de Gear
c_i	compacité réelle d'un mélange poly-dispersé, lorsque la classe i est dominante
$c(x)$	compacité réelle d'un mélange binaire, considérée comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
$\Delta c(x)$	accroissement de compacité réelle d'un mélange binaire par rapport à la compacité réelle d'un mélange mono-dispersé, considéré comme une fonction du rapport des tailles fins/gros
D ou D_{max}	grosseur maximale dans un mélange poly-dispersé

LISTE DES SYMBOLES

$D(\omega)$	densité des états en fonction de la pulsation des modes normaux de vibration des éléments constitutifs d'un réseau
d	diamètre des grains dans un granulat élémentaire
d	côté du cube modélisant une particule dans la théorie de Dewar
d ou d_{\min}	diamètre minimum dans un mélange poly-dispersé
d_{hyp}	diamètre hypothétique de la cellule de référence sphérique permettant l'étude de l'effet de paroi ou de l'effet de desserrement
d_i	diamètre des grains de la classe i . Lorsque $i > j$, $d_i < d_j$
$d_j(x)$	densité de juxtaposition des carrés sphériques matérialisant l'emprise des sphères de même diamètre en contact avec une sphère centrale de diamètre différent
d_{\min} / d_{\max}	dimensions minimale et maximale des particules constituant une classe granulaire
d_{\max}	diamètre maximum que peut atteindre une particule sans qu'il n'y ait recouvrement avec ses congénères dans un paysage pseudo-énergétique .
d_{moy}	dimension moyenne des particules constituant une classe granulaire
d_{50}	diamètre de grain caractéristique correspondant à 50% de tamisat
E	distance minimale séparant deux plans parallèles enserrant une particule réelle
E	module d'Young du matériau constituant une bille soumise à un contact
e	indice des vides d'un mélange granulaire
e^*	indice des vides final moyen obtenu après l'étape de calcul par DM (Dynamique Moléculaire) en simulation numérique
e_i	indice des vides d'une classe mono-dispersée ayant un diamètre égal à d_i
e_i	indice des vides réel d'un mélange poly-dispersé, lorsque la classe i est dominante
e''_i	indice des vides effectif des particules dilatées de la classe i dans la théorie de Dewar
e_N	coefficient de restitution normal en simulation numérique
$\left(\frac{e}{c}\right)^*$	rapport fixé eau/ciment en volume
$\text{erf}(z)$	fonction erreur

$\overline{\mathbf{F}}^{\text{ext}}$	vecteur des efforts extérieurs unique regroupant un effort externe sur chacun des grains et une force extérieure associée à chacun des degrés de liberté liés à la cellule de simulation numérique
$\overline{\Delta \mathbf{F}}^{\text{ext}}$	incrément de charge correspondant
$\overline{\mathbf{F}}_{ij}$	force transmise de la particule i vers la particule j
$F_{L_{kl}}$	« force généralisée » associée à L_{kl}
F_N	force normale agissant sur une bille
F_N^e	force normale élastique agissant sur une bille
F_N^v	force normale liée à viscosité du contact entre deux billes
$\langle F_{Nij} \rangle$	moyennes des forces normales de contact entre les particules des classes i et j
F_T	force tangentielle agissant sur une bille
f	constante empirique intervenant dans la fonction de distribution de Bolomey des tailles de particules
$\overline{\mathbf{f}}$	vecteur des forces liées aux contacts entre particules
$\overline{\Delta \mathbf{f}}$	vecteur incrément des forces de contact
f_{ij}	paramètre décrivant l'effet de desserrement exercé par la classe j sur la classe i dominante dans le modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard
f_{ij}^k	action intergranulaire normale entre les particules i et j
$f_{k\alpha}$	composante de la force de contact entre deux billes
\mathcal{G}	coefficient intervenant dans la théorie de Westman
\mathcal{G}	cote du plus petit tamis laissant passer une particule réelle
$\underline{\underline{\mathcal{G}}}$	matrice de rigidité que l'on associe aux particules et à leurs contacts
g_{ij}	paramètre décrivant l'effet de paroi exercé par la classe j sur la classe i dominante dans le modèle linéaire de compacité (MLC) de Stovall et de Larrard
$\underline{\underline{\mathbf{H}}}$	matrice permettant d'aboutir à une application linéaire $\overline{\mathbf{f}} \mapsto \overline{\mathbf{F}}^{\text{ext}}$: matrice transposée de $\underline{\underline{\mathcal{G}}}$
$H(\phi)$	fonction décrivant la contribution de la fraction volumique de la phase solide sur la viscosité d'une suspension
h	déflexion normale dans le cas du contact de deux billes

LISTE DES SYMBOLES

h	degré d'indétermination des forces d'une assemblée granulaire ou degré d'hyperstaticité
K	indice de serrage
$\underline{\underline{K}}$	matrice des raideurs locales liée aux contacts entre particules
$\underline{\underline{K}}_{ij}^e$	matrice des raideurs locales correspondant au contact élastique i, j
K_N	rigidité d'un ressort
K_N^{ij}	raideur normale associée au contact i, j
K_T^{ij}	raideur tangentielle associée au contact i, j
$\underline{\underline{K}}$	matrice des raideurs totales
$\underline{\underline{K}}^{(1)}$	matrice dynamique
$\underline{\underline{K}}^{(2)}$	matrice liée à l'évolution de la géométrie de l'empilement
k	degré d'indétermination des déplacements relatifs d'une assemblée granulaire ou degré d'hypostaticité
k_{int}	constante empirique intervenant dans la théorie de Dewar
k_L	rapport des compacités des gros grains en zone perturbée par l'effet d'interférence et en zone courante dans un mélange binaire
$k_{L_{DI}}$	coefficient k_L obtenu à partir du modèle de dilatation isotrope dans une cellule de référence tétraédrique
k_N	raideur normale de contact
k_p	constante empirique intervenant dans la théorie de Dewar
k_p	coefficient de perturbation intervenant dans la délimitation de la cellule de référence sphérique permettant l'étude de l'effet de paroi ou de l'effet de desserrement
k_w	rapport des compacités des petits grains en zone perturbée par l'effet de paroi et en zone courante dans un mélange binaire
k_{wBA}	coefficient k_w d'après la théorie de Ben-Aïm
k_{wROAD}	coefficient k_w d'après la théorie ROund ADjustable cell (ROAD)
L	distance maximale séparant deux plans parallèles enserrant une particule réelle
L	Lagrangien d'un système
∇L	Gradient du Lagrangien

$\underline{\underline{L}}$	matrice permettant le passage des coordonnées réduites aux coordonnées absolues des particules en simulation numérique
L_{kl}	composantes de la matrice $\underline{\underline{L}}$
L_1, L_2, L_3	dimensions d'une boîte parallélépipédique contenant les particules dans le cadre d'une simulation numérique
$\delta L_1, \delta L_2, \delta L_3$	variations infinitésimales des longueurs des côtés d'une boîte de simulation parallélépipédique
ℓ'_{ij}	composante du vecteur branche $\vec{\ell}$ reliant les centres de deux particules en contact i et j
$\ell_{l\alpha}$	composante du vecteur branche $\vec{\ell}$ reliant les centres de deux particules en contact
M	« masse » associée à l'inertie de la boîte parallélépipédique contenant les particules dans le cadre d'une simulation numérique
m	facteur d'espacement de Dewar
m_{eff}	masse effective d'une paire de grains de masses m_i et m_j
N	nombre de particules contenues dans un mélange
N^*	nombre de particules capables de porter des forces
N_0	nombre de particules flottantes dans une assemblée granulaire
N_1	nombre de grosses particules contenues dans un mélange binaire
N_1^*	nombre de grosses particules « porteuses » dans un mélange binaire
N_2	nombre de petites particules contenues dans un mélange binaire
N_2^*	nombre de petites particules « porteuses » dans un mélange binaire
NC	nombre de coordination, dans un mélange binaire, en tenant compte de la présence des particules flottantes
NC^*	nombre de coordination, dans un mélange binaire, sans tenir compte des particules flottantes
NC_{iso}^* N_{Ciso}	nombre de coordination isostatique déterminé de telle façon que le nombre de contraintes est juste suffisant pour que la structure de l'empilement soit rigide
N_c	nombre de coordination dans le cas d'un empilement mono-dispersé
N_c	nombre de connexions dans un mélange
N_{cij}	nombre de connexions entre particules i et j

N_{ij}, NC_{ij}	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j
$N_{ij,BL}^{\text{aléatoire}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie de Bouvard et Lange, pour un empilement aléatoire
$N_{ij,CS}^{\text{dense}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie des carrés sphériques, pour un empilement dense
$N_{ij,E}^{\text{dense}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie de Egami, pour un empilement dense
$N_{ij,MSS}^{\text{dense}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie de Miracle, Sanders, Senkov, pour un empilement dense
$N_{ij,MSS}^{\text{dense modifi}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie de Miracle, Sanders, Senkov modifiée d'après un article de Miracle, Lord, Ranganathan, pour un empilement dense
$N_{ij,SO}^{\text{aléatoire}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie de Suzuki et Oshima, pour un empilement aléatoire
$N_{ij,SO}^{\text{dense}}$	nombre de coordination représentant le nombre de contacts de la particule de diamètre d_i avec des particules de diamètre d_j , d'après la théorie de Suzuki et Oshima, pour un empilement dense
N_ℓ	nombre de degrés de liberté associé au système constitué d'une boîte parallélépipédique de simulation numérique et de N particules
n	porosité d'un mélange granulaire
n	nombre de classes de grains
n_{coll}	nombre de collisions par grain avant le passage à l'étape de dynamique moléculaire en simulation numérique
n_g	nombre de degrés de liberté associés aux parois d'une boîte parallélépipédique de simulation numérique

n_i	porosité associée à la classe de particules i dans la théorie de Suzuki et Oshima
n_{ij}	porosité de la cellule de référence de Suzuki et Oshima lorsqu'une particule de diamètre d_i est entourée par des particules de diamètre d_j
n_c	nombre de degrés de liberté d'une bille en simulation numérique
n_{mono}	porosité du milieu mono-dispersé dans la théorie de Suzuki et Oshima
n_{rr}	coefficient d'uniformité de Rosin-Rammler
p	pression isotrope exercée sur l'échantillon lors de l'étape de dynamique moléculaire
$P_{AA}(d)$	fonction de distribution de Andreasen et Andersen des tailles de particules
$P_B(d)$	fonction de distribution de Bolomey des tailles de particules
$P_{DF}(d)$	fonction de distribution de Dinger et Funk des tailles de particules
$P_{FT}(d)$	fonction de distribution de Fuller et Thompson des tailles de particules
$P_{LN}(d)$	fonction de distribution lognormale des tailles de particules
$P_{RR}(d)$	fonction de distribution de Rosin-Rammler des tailles de particules
$P_{SB}(d)$	fonction de distribution de Johnson des tailles de particules
p_0	proportion de grains flottants dans un mélange
p_{ij}	pressions partielles correspondant aux contacts des particules des classes i et j en simulation numérique
q	exposant intervenant dans la fonction de distribution de Andreasen et Andersen des tailles de particules ou dans celle de Dinger et Funk
q	nombre de coordination de surface intervenant dans la théorie de Miracle, Sanders, Senkov
r	rapport des volumes absolus de deux classes élémentaires de dimensions successives en progression géométrique appartenant à une distribution
r	coefficient de corrélation
\vec{r}_i	vecteur permettant de définir les coordonnées absolues d'une particule dans une boîte de simulation parallélépipédique
\vec{r}_{ij}	vecteur dont l'origine correspond au centre de la 1 ^{ère} sphère i et l'extrémité au centre de la plus proche image de la 2 ^{ème} sphère j compte tenu des conditions de périodicité adoptées en simulation numérique
S_{ai}	pourcentage surfacique de la classe i dans l'assemblée granulaire dans la théorie de Suzuki et Oshima

S_{vi}	pourcentage volumique de la classe i dans l'assemblée granulaire dans la théorie de Suzuki et Oshima
\vec{s}_i	vecteur permettant de définir les coordonnées réduites d'une particule dans une boîte de simulation parallélépipédique
t	côté du cube modélisant un volume de vides dans la théorie de Dewar
t''	côté du cube modélisant un volume de vides après dilatation de la structure des grosses particules par les petites dans la théorie de Dewar
t_c	temps de collision dans le cas d'une collision frontale entre deux particules en simulation numérique
Δt	portion du temps de collision t_c
\vec{U}	vecteur déplacement unique regroupant les coordonnées des déplacements de l'ensemble des particules en simulation numérique
\vec{u}_i	déplacement du centre d'une particule sphérique i exprimé de manière à satisfaire aux conditions de périodicité dans une boîte de simulation parallélépipédique
$\vec{\delta u}$	vecteur des déplacements relatifs liés aux contacts des particules
$\vec{\delta u}_{ij}$	déplacement relatif du point de contact de deux particules sphériques i et j
V	volume du domaine simulé
V_a	volume apparent d'un mélange poly-dispersé qui représente le volume nécessaire pour loger un volume absolu de particules égal à 1 unité
V_{ai}	volume apparent d'un mélange poly-dispersé, lorsque la classe i est dominante
$V_{CR}(x)$	volume de la cellule de référence dans laquelle s'étudie l'effet de desserrement
V_i	volume de la classe i
V_{ij}	volume apparent minimum du mélange binaire entre les classes i et j dans la théorie de Yu et Standish
$V_P(x)$	volume dans lequel l'empilement des petits grains est perturbé par l'effet de paroi
V_0	volume de vide
v_{ki}	composante de la vitesse non affine de la particule i dans la boîte de simulation numérique
x	rapport des tailles fins/gros

LISTE DES SYMBOLES

x^*	rapport des tailles fins/gros spécifique qui engendre une valeur de N_{ij} entière
x_0	rapport des tailles fins/gros critique permettant l'insertion d'un petit grain dans une cavité disponible entre les gros sans provoquer de desserrement
x_0^i	proportion des N_i particules d'une classe granulaire qui sont flottantes
y_i	volume partiel de la classe i , par rapport au volume solide total
y_i^*	volume partiel de la classe i à l'optimum de compacité du mélange binaire dans le modèle 3-paramètres
$y_{i\max}(x)$	volume partiel de la classe i à l'optimum de compacité du mélange binaire en fonction du rapport des tailles fins/gros
y_{ij}	volume partiel de la classe j lorsque le volume apparent du mélange binaire avec la classe i atteint son minimum dans la théorie de Yu et Standish
z	facteur de largeur des vides additionnels engendrés par la paroi des gros grains dans la théorie de Dewar
α ou α_{mono}	compacité réelle d'un mélange mono-dispersé
α_i	compacité réelle d'une classe mono-dispersée ayant un diamètre égal à d_i
$\bar{\alpha}_i$	valeur moyenne de α_i dans un mélange affecté par l'effet de paroi provenant du conteneur
α_{ij}	compacité réelle maximale du mélange binaire entre les classes i et j dans la théorie de Yu et Standish
α_N	proportion fixée de l'amortissement critique d'un oscillateur harmonique
β	compacité résiduelle (compacité virtuelle d'un mélange mono-dispersé)
β_i	compacité résiduelle d'une classe mono-dispersée ayant un diamètre égal à d_i
β'_i	compacité résiduelle d'une classe mono-dispersée ayant un diamètre égal à d_i dans la zone subissant l'effet de paroi ou l'effet d'interférence
β''_i	compacité résiduelle d'une classe mono-dispersée ayant un diamètre égal à d_i dans la cellule de référence utilisée pour étudier l'effet de desserrement
$\underline{\underline{\varepsilon}}$	tenseur de déformation d'une cellule de simulation numérique

LISTE DES SYMBOLES

Γ, γ	facteur de gonflement des particules dans l'algorithme LS (Lubachevsky-Stillinger)
γ	compacité virtuelle d'un mélange poly-dispersé
γ_i	compacité virtuelle d'un mélange poly-dispersé, lorsque la classe i est dominante
γ_i^*	compacité virtuelle d'un mélange poly-dispersé, lorsque la classe i est dominante, à l'eutectique
η	viscosité d'une suspension
η^*	viscosité fixée d'une suspension
η_r	viscosité d'une suspension relativement à la viscosité du fluide suspendant
$\eta_{r,exp}$	viscosité expérimentale d'une suspension relativement à la viscosité du fluide suspendant
$\eta_{r,th}$	viscosité théorique d'une suspension relativement à la viscosité du fluide suspendant
η_0	viscosité du fluide suspendant
κ	paramètre de raideur sans dimension
λ	paramètre permettant de définir un ellipsoïde modélisant une particule
λ	facteur d'encombrement (crowding factor) de la théorie de Mooney
$\lambda_{d,ij}$	facteur d'encombrement décrivant l'effet de desserrement exercé par la classe j sur la classe i dominante
$\lambda_{p,ij}$	facteur d'encombrement décrivant l'effet de paroi exercé par la classe j sur la classe i dominante
ν	coefficient de Poisson du matériau constituant une bille soumise à un contact
ν	paramètre utilisé dans le modèle de décompaction locale pour tenir compte du fait que la dilatation dans la cellule de référence tétraédrique est différente de celle obtenue en moyenne dans la zone perturbée par l'effet de desserrement
ξ	écart-moyen
ξ_N	coefficient d'amortissement normal
σ_{ga}	paramètre de la fonction de distribution lognormale des tailles de particules

LISTE DES SYMBOLES

σ_{ja}	paramètre de la fonction de distribution de Johnson des tailles de particules
$\underline{\underline{\sigma}}^{int}$	tenseur des contraintes internes associé aux particules contenues dans la boîte de simulation numérique
σ_{kl}^{int}	composantes du tenseur des contraintes internes
$Tr\left(\underline{\underline{\sigma}}^{int}\right)$	trace de la matrice $\underline{\underline{\sigma}}^{int}$
ϕ	volume solide d'un mélange granulaire, dans un volume total unité
ϕ^*	volume solide pour lequel la suspension devient empilement
ϕ^*	compacité finale moyenne obtenue après l'étape de calcul par DM (Dynamique Moléculaire)
$\Delta\phi^*$	écart-type de ϕ^*
ϕ_{exp}^*	compacité expérimentale
$\phi_{théo}^*$	compacité théorique
ϕ_c	volume solide correspondant au blocage d'un mélange
ϕ_i	proportion de la classe i (en volume), par rapport au volume total du conteneur
ϕ_i^*	proportion maximale de la classe i , pour des valeurs fixées pour les autres ϕ_j ($j \neq i$)
$\phi_{LS,init}$	compacité du mélange, dans la boîte de simulation, au début de l'étape LS (Lubachevsky-Stillinger)
$\phi_{LS \rightarrow DM}$	compacité du mélange lors du passage de l'étape LS (Lubachevsky-Stillinger) à l'étape DM (Dynamique Moléculaire)
ϕ_{RCP}	compacité d'un empilement dense aléatoire comprenant une seule taille de particules (RCP « Random Close Packing »)
ϕ_0	proportion de vide par rapport au volume total du conteneur
ϕ_0'	proportion de pâte de ciment par rapport au volume total du conteneur
$\phi_0'^*$	proportion fixée de pâte de ciment par rapport au volume total du conteneur
ψ	scalaire d'ordre métrique défini pour mesurer la quantité d'ordre dans un mélange
ψ_i	valeur de la concentration de la classe i par rapport au volume total occupé par la classe i , les classes plus fines que i et le vide

LISTE DES SYMBOLES

ψ_i^{MAX}	valeur maximale de la concentration de la classe i compte tenu de la présence des classes plus fines
ω	pulsation des modes normaux de vibration des éléments constitutifs d'un réseau
ω_0	pulsation propre dans le cas d'une collision frontale entre deux particules en tenant compte de l'élasticité du contact
ϖ	pulsation de l'oscillation amortie dans le cas d'une collision frontale entre deux particules en tenant compte de l'élasticité du contact et d'un coefficient d'amortissement normal
π	porosité minimale d'un béton