Matériaux granulaires durs : représentation d'un matériau non-linéaire comme un graphe avec une dynamique linéaire

Nicolas Rivier

Institut de Physique — Université Louis Pasteur, 3, rue de l'Université, 67084 Strasbourg, France
nick@fresnel.u-strasbg.fr

Résumé. Un matériau granulaire sec est décrit naturellement par un graphe. Deux grains en contact répulsif sont représentés par deux sommets reliés par une arête. Il n'y a pas de forces attractives entre grains et la cohéesion de l'empilement est le fait de forces extérieures (la gravité et les bords du silo). Pour les matériaux granulaires secs durs - où la rigidité est beaucoup plus forte que la force appliquée, les forces entre grains, fortement non-linéaires, sont des contraintes géométriques. Elles sont booléenes - si eles s'appliquemnt, elles ont le même signe, répulsif, scalaires - dans la limite d'une friction tangentielle infinie entre grains, et donc représentées simplement par les arêtes du graphe. Les grains (lisses) roulant sans glisser les uns sur les autres *s'il le peuvent* , constituent les excitations élémentaires. Le matériau granulaire coule alors comme un fluide (sec) ou comme un roulement à billes tri-dimensionel. Sinon, il est bloqué (« jammed »). Les sommets du graphe représentent les grains, et les arêtes, les contacts booléens. Les circuits de grains en contact sont pairs ou impairs et le matériau est essentiellement discret (il n'a pas de limite continue sans défaut topologique, ni équation constitutive). Ses propriétés physiques sont données par les valeurs et vecteurs propres de la matrice d'adjacence (en fait, de la matrice dynamique, matrice d'adjacence avec la valence de chaque sommet sur la diagonale), donc par l'algèbre linéaire du graphe. Alors que la statique du matériau granulaire est non-linéaire, sa dynamique topologique et son comportement physique générique est donné par une algèbre linéaire, parce que nous avons remplacé les éléments matériels par des objets géométriques, avec une structure de graphe. Un matériau granulaire est donc un *métamatériau*, dont le comportement physique générique est donné par sa structure et non par la chimie ou la dureté de ses consistuents. La structure de graphe a trois caractéristiques essentielles : discontinuité (granularité), circuits impairs ("arches") et désordre. Les deux états possibles de la matière graulaire désordnnée, fluide sec [3,4] et solide bloqué fragile [5,6,8,9] résultent directement de la dynamique topologique du graphe : Les éléments responsables du blocage sont les circuits impairs. Sans circuits impairs, le matériau granulaire coule comme un fluie sec ; la rotation d'un grain sur l'autre est une connexion qui est alors pure jauge. Le matériau granulaire de n grains est bloqué par c circuits impairs qui frustrent la rotation sans glisser. La plus petite valeur propre de la matrice dynamique, $4c/n$ est le paramètre d'ordre du solide fragile. La vorticité impaire (le coeur des circuits impairs) forme des boucles fermées (R-boucles) qui ont la taille L du matériau granulaire *désordonné* (alors que dans un epilement cristallin, leur taille est limitée par la période). Le paramètre d'« ordre » $\frac{4c}{n} \sim \frac{1}{L}$ est petit, étendu sur tout le matériau et la transition de blocage (*jamming*) entre fluide sec et solide fragile est du second ordre, avec lois d'échelle. Il s'ensuit que le matériau désordonné a une densité élevée d'états de basses énergies, indépendante de sa taille et de la dimension de l'espace, et donc une capacié calorifique et une entropie suffisantes pour absorber l'éenergie libre lors du blocage. De plus, le désordre, avec ses grandes R-boucles, procure le mécanisme de la plasticité des granulaires sous cisaillement : la R-boucle rétrécit en *montant* à travers les contacts des circuits impairs deconnectés l'un après l'autre.

Abstract. Dry granular matter is described naturally by a graph. Two grains in repulsive contact are represented by two vertices connected by an edge. There are no attractive, cohesive forces between grains and the packing is held together by external forces (gravity or boundaries). In hard dry granular materials - in the limit of large stiffness-to-load ratio, the forces between grains are highly nonlinear, but simple geometrical contacts, boolean - they exist or not, with the same sign, i.e. repulsive constraints, scalar - assuming an infinite tangential friction between grains. The elementary excitations are non-slip rotations of one (smooth) grain over the other, if it is permitted. Then, the granular material flows like a (dry) fluid or like a three-dimensional bearing. If not, it is jammed. In the graph, the vertices are the grains, and the edges, the boolean cotacts represented by the adacency matrix. Circuits of grains in contact can be even or odd, and the material is essentially discrete (there is no defect-free continuous limit). Its physical properties are given by the eigenvalues and eigeenvectors of the adjacency matrix (strictly, of the dynamical matrix that is the adjacency matrix with the valency of the vertex

on the diagonal), that is by linear algebra of the graph. Thus, whereas the statics is nonlinear, the topological dynamics, and the generic physical behaviour of the granular material is a problem of linear algebra, because we have replaced material elements by geometrical objects, in a structure that is a graph. A granular material is therefore a metamaterial, with generic physical behaviour given by its structure rather than by the chemistry or hardness of its constituents. The graph structure has the essential elements of discreteness (granularity), odd circuits ("arches") and disorder. There can be no defect-free, continuous model of granula material, no constitutive equation. The two possible states of (disordered) granular matter, dry fluid, and jammed, rigid but fragile solid, are direct results of the topological dynamics of the graph, where the elements responsible for the jammed state are odd circuits, circuits with a odd number of grains in contact. In the absence of odd circuits, the granular material behaves like a dry fluid. Non-slip rotation of a grain on the next is a connection that is pure-gauge. The granular material (n grains) is jammed by the c odd circuit that frustrate the non-slip rotation. The lowest eigenvalue of the dynamical matrix is $4c/n$. The core of odd circuits, odd vorticity forms closed ($R-$) loops, that are large in disordered granular materials of size L. (In ordered materials, their size is limited by the periodicity of the close-packed structure). The disordered granular material, is a fragile, jammed solid stabilized by odd circuits. The "order" parameter $\frac{4c}{n} \sim \frac{1}{L}$ is extended over the entire material, and jamming transition beween dry fluid and fragile solid is a second-order, scaling transition. As a consequence, the disordered material has a large density of states with low-eigenvalues, independent of the size of the material and of the space dimension, and thus a large specific heat and entropy available to absorb the free energy of the material upon jamming. Disorder, with large $R-$ loops, provides the mechanism for plasticity of granular material upon shear : the $R-$ loop shrinks, "climbing" by moving across successively broken odd circuits.

1 Représentation d'un matériau granulaire comme un graphe

Dans un matériau granulaire sec dur, où la rigidité est beaucoup plus importante que la force appliquée, les forces entre grains, fortement non-linéaires, sont des contraintes géométriques, des étais ("s-truts"). Elles sont booléennes (s'appliquant ou non), de même signe répulsif, scalaires (dans l limite d'une friction tangentielle infinie entre grains) et donc représentées simplement par les arêtes du graphe. Les n sommets représentent les grains (lisses), qui, en roulant (d'un angle θ) sans glisser les uns sur les autres en constituent les excitations élémentaires. Chaque arête (ij) est munie d'une énergie potentielle $V = (1/2)k(\theta_i + \theta_j)^2$. La force, toujours répulsive, est nulle si les deux grains en contact roulent l'un sur l'autre sans glisser $(\theta_i + \theta_j) = 0$.

2 Matrice d'adjacence $\boldsymbol{A}$ et dynamique d'un graphe

Le graphe de n sommets a une matrice d'adjacence $\boldsymbol{A}$, $A_{ij} = 1$ si les sommets i, j sont reliés par une arête (les grains sont en contact). Soit la matrice diagonale Δ,

$$\varDelta_{ij} = z_i \delta_{ij} \,,$$

avec $z_i = \sum_j A_{ij}$, le degré (valence) du sommet i. On définit la *matrice dynamique* $\boldsymbol{Q} = \Delta - \boldsymbol{A}$ du graphe [1], de rang $n-1$, et de déterminant 0. La matrice $\boldsymbol{Q}$ est la matrice dynamique d'un système physique sur le graphe, où les sommets sont des particules de même masse m et les arêtes, des ressorts de même raideur k, munis d'une énergie potentielle

$$V = \frac{1}{2} k (x_i - x_j)^2 \,.$$

L'interaction entre deux sommets reliés par une arête peut être répulsive ou attractive. En effet, l'équation du mouvement (Euler-Lagrange)

$$[-\lambda \boldsymbol{1} + (\Delta - \boldsymbol{A})]\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{1}$$

est l'équation aux valeurs propres $\lambda = m\omega^2/k$ de la matrice dynamique $\boldsymbol{Q}$, reliées aux fréquences ω des modes normaux d'oscillation [2]. La valeur propre la plus base est 0, avec vecteur propre correspondant $|\boldsymbol{j}\rangle = (1, 1, 1, ..., 1)^t$ (matrice de Woodstock, le petit oiseau, ami de Snoopy).

Par contre, la matrice dynamique d'un granulaire dur où les sommets sont des grains de même moment d'inertie et les arêtes, des étais munis d'une énerge potentielle

$$V = \frac{1}{2}k(\theta_i + \theta_j)^2$$

représentant deux grains roulant sans glisser l'un sur l'autre, est $\boldsymbol{K} = \Delta + \boldsymbol{A}$. L'interaction a un seul signe. En effet, l'équation du mouvement

$$[-\lambda \boldsymbol{1} + (\Delta + \boldsymbol{A})]\theta = \boldsymbol{0} \tag{2}$$

est l'équation aux valeurs propres de la matrice dynamique $\boldsymbol{K} = 2\Delta - \boldsymbol{Q}$ [8].

A cause du signe + ou - devant $\boldsymbol{A}$, les spectres des valeurs propres de $\boldsymbol{Q}$ et $\boldsymbol{K}$ sont essentiellement différents, s'il y a des *circuits impairs* de grains en contact. Avec des circuits pairs seulement, le graphe (de matrice dynamique notée $\boldsymbol{K}^0$) est bichromatique — deux couleurs suffisent à colorier le graphe, avec des couleurs différentes pour deux sommets séparés par une arête (grains en contact). $\boldsymbol{K}^0$ est changé en

$$\boldsymbol{K}'^0 = \boldsymbol{O}\boldsymbol{K}^0 O^{-1} = \Delta^0 - \boldsymbol{A}^0 = \boldsymbol{Q}^0$$

par une transformation unitaire

$$\boldsymbol{O}(O_{ij}) = (-1)^i \delta_{ij}$$

— qui change le signe des lignes et colonnes impaires. La valeur propre la plus basse de $\boldsymbol{K}^0$ est 0, avec comme vecteur propre correspondant

$$|\boldsymbol{a}\rangle = \boldsymbol{O}^{-1}|\boldsymbol{a}\rangle = (1, -1, 1, ..., -1)^t \,.$$

Un matériau granulaire avec circuits pairs seulement se comporte comme un roulement à billes, un liquide sec, où les grains roulent sans glisser les uns sur les autres [4,7], et la connection entre deux grains est indépendante du chemin (jauge pure).

3 Circuits impairs, blocage (« jamming »)

La vorticité impaire (le coeur des circuits impairs) forme des boucles fermées (R-boucles) qui ont la taille L du matériau granulaire d'esordonné (alors que dans un empilement cristallin, leur taille est limitée par la période) [10]. Il suffit de déconnecter une arête par circuit impair, pour obtenir un graphe ne contenant que des circuits pairs. Ce graphe bichromatique est connecté et touche tous les sommets (« spanning »). Il a une matrice d'adjacence $\mathbf{A^0}$. Les quelques arêtes fermant chaque circuit impair sont décrites par la matrice $\boldsymbol{A}^*$ qui n'a pratiquement que des 0 (« sparse »), avec un 1 si et seulement si l'ar$\hat{(e)}$te sépare deux sommets de même couleur (une par circuit impair). Donc, $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^0 + \boldsymbol{A}^*$, une décomposition de l'ensemble des arêtes réalisée algébriquement par les matrices 'adjacence et dynamique.

Sous transformation $\mathbf{O}$, bfA^0 change de signe, contrairement à $\boldsymbol{A}^*$, et $\boldsymbol{K}$ devient $\boldsymbol{K}' = \boldsymbol{Q}^0 + \boldsymbol{J}^*$, où $\boldsymbol{J}^*$ est une matrice avec des 0 partout sauf 1 entre deux sommets de même couleur et sur la diagonale correspondante. Le principe variationnel de Rayleigh-Ritz sur

$$\boldsymbol{K}' = \boldsymbol{Q}^0 + \boldsymbol{J}^*$$

alors

$$\boldsymbol{Q}^0|j\rangle = 0$$

donne une borne supérieure à la valeur propre la plus basse λ_1 de $\boldsymbol{K}$,

$$0 < \lambda_1 \leq \frac{\langle \boldsymbol{j}|\boldsymbol{K}'|\boldsymbol{j}\rangle}{\langle \boldsymbol{j}\rangle} = \frac{\langle \boldsymbol{a}|\boldsymbol{K}|\boldsymbol{a}\rangle}{\langle \boldsymbol{a}\rangle} = \frac{\langle \boldsymbol{j}|\boldsymbol{J} * |\boldsymbol{j}\rangle}{\langle \boldsymbol{j}\rangle} = \frac{4c}{n} \tag{3}$$

où $c \sim L^{D-1}$ est le nombre de circuits impairs dans le graphe de $n \sim L^D$ sommets et de taille L. En effet, c est donné par l'aire du film tendu sur les R-boucles. Donc,

$$\lambda_1 = \frac{4c}{n} \sim \frac{1}{L}$$

mesure la frustration engendrée par les circuits impairs et diluée dans tout le graphe (comme le vecteur propre $\approx |\boldsymbol{a}\rangle$ et la déformation) Le matériau granulaire est rigide mais fragile, les contraintes sont concentrées sur quelques « arches ». les circuits impairs, qui s'écroulent en déconnectant une seule de leurs arêtes. Le paramètre d'« ordre » $\frac{4c}{n} \sim \frac{1}{L}$ est petit, étendu sur tout le matériau et la transition de blocage (« jamming ») entre fluide sec et solide fragile est du second ordre, avec lois d'échelle [5,6,8,9].

En poursuivant le procédé de déconnection, on obtient $\sim c$ modes de basses valeurs propres $\sim 1/L$, avec une densité élevée

$$D(\lambda) \sim \frac{c}{\lambda L^D} \sim L^0 \, ,$$

indépendante de λ, de la taille du matèriau et de la dimension de l'espace [5,6,9]. On dèconnecte $\boldsymbol{A}^0$ en c « blobs » (sous-graphes bichromatiques) de même taille environ, reliés l'un à l'autre par une arête de $\boldsymbol{A}^*$, sur lesquels on construit des fonctions de Bloch [9].

Le désordre joue une rôle essentiel : En imposant des grandes R-boucles, il assure la fragilité du matèriau granulaire, et une transition de blocage du second ordre, avec un mècanisme de plasticitè (montèe de la R-boucle sous cisaillement).

Références

1. N. Biggs, *Algebraic Graph Theory*, Cambridge University Press, (1974).
2. J. F. Sadoc, *European Physical Journal E*, **18**, 321 (2005).
3. D. Lohse, R. Rauhé, R. Bergmann & D. van der Meer, *Nature* **432**, 689 (2004).
4. R. Mahmoodi-Baram, H.J. Herrmann & N. Rivier, *Physical Review Letters*, **93**, 044301 (2004).
5. C. S. O'Hern, S. A. Langer, A. J. Liu & S. R. Nagel, *Physical Review Letters*, **88**, 075507 (2002).
6. M. Wyart, S. R. Nagel & T. A. Witten, *Europhysical Letters*, **72**, 486 (2005).
7. N. Rivier, in *Powder and Grains*, R. Garcia-Rojo, H.J. Herrmann, S. McNamara, eds., Balkema (Leiden), p. 29, (2005).
8. N. Rivier, *Journal of Non-cryst. Solids*, **352**, 4505 (2006).
9. N. Rivier, *European Physical Journal E*, à paraître.
10. N. Rivier, *Philosophical Magazine*, **4**, 859 (1979).