HAL
open science

Rhéologie des suspensions non Browniennes concentrées : une étude numérique

Michel Wone

To cite this version:

Michel Wone. Rhéologie des suspensions non Browniennes concentrées : une étude numérique. Autre [cond-mat.other]. Université Paris-Est, 2015. Français. NNT : 2015PEST1070 . tel-01223933

HAL Id: tel-01223933

https://pastel.hal.science/tel-01223933

Submitted on 3 Nov 2015

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.

RHÉOLOGIE DES SUSPENSIONS CONCENTRÉES NON COLLOIDALES ET NON BROWNIENNES : UNE ÉTUDE NUMÉRIQUE.

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

Michel Woné

Pour obtenir le titre de docteur de

l'UNIVERSITÉ DE PARIS-EST.

Spécialité : Physique.

Soutenue à Champs-sur-Marne le 25 Février 2015,
devant le jury composé de :

Mme.	Elizabeth	GUAZZELLI	Présidente du jury
M.	Pierre-Yves	LAGREE	Rapporteur
M.	Pierre	MILLS	Examinateur
M.	Anthony	WACHS	Rapporteur
M.	Anaël	LEMAITRE	Directeur de Thèse.

Remerciements.

Une thèse de doctorat est un travail de longue haleine, dont le bon déroulement n'a pu être possible que grâce à l'aide et aux encouragements apportés par mon entourage au cours de ces années.

Je souhaite tout d'abord remercier chaleureusement mon encadrant Anaël Lemaître. Tu as réussi, je trouve, à résoudre la difficile équation d'équilibre pour le suivi d'une thèse : aide et encadrement vs autonomie et liberté. Les travaux en simulation numérique ont ceci de particulier qu'absolument rien ne marche pendant un temps qui paraît bien trop long jusqu'à ce qu'un beau jour, en général au dernier moment, tout (suffisamment, disons) se mette à fonctionner, et que les résultats s'accumulent soudainement. Dans mon cas, cette transition aura généré son lot de stress qui se serait sans doute changé en panique sans la confiance et les encouragements que tu m'as prodigués. Pour cela, pour la qualité de l'encadrement que tu as fourni tout au long de ces trois ans, et pour ta grande disponibilité (surtout sur la fin, où les timings n'étaient pas évident à tenir) : merci.

Un grand merci également aux membres de mon jury : Anthony Wachs et Pierre-Yves Lagrée pour avoir accepté la lourde tâche de rapporter ce travail et d'apporter corrections et suggestions pour le document final ; Elizabeth Guazzelli pour avoir bien voulu présider avec bienveillance mon jury au cours de la soutenance ; Pierre Mills pour ses remarques, son expérience et les discussions édifiantes qui ont permis de dégager certains des résultats développés dans ce travail.

Je tiens également à remercier toutes les personnes travaillant au laboratoire Navier, trop nombreuses pour être ici toutes citées, pour leur accueil qui m'aura permis de travailler dans d'excellentes conditions pendant ces trois années.

J'adresse enfin mes derniers remerciements à ma famille pour m'avoir permis d'en arriver là, ma belle famille pour son soutien et sa bonne humeur, et bien entendu ma compagne Marion pour m'avoir supporté avec amour et stoïcisme savamment mêlés pendant cette période.

Résumé.

Les suspensions de grains rigides dans un fluide constituent une classe de fluides complexes présentant une rhéologie riche. Même dans les cas simples où le fluide est Newtonien, et les grains sphériques, non Browniens et non colloïdaux, les comportements macroscopiques observés restent mal compris, en particulier dans le cas de suspensions concentrées. Dans ces matériaux, la complexité de la dynamique provient de l'équilibre subtil qui se met en place entre les interactions de nature hydrodynamique portées par le fluide intersticiel et les forces de contact entre les grains.

Dans ce travail, ces questions sont abordées sous l'angle de la simulation numérique discrète, dans le cadre du cisaillement simple de suspensions concentrées 2D. Les efforts hydrodynamiques sont modélisés par des interactions de lubrification de paires, couplées à un modèle de contact éventuellement frottant. L'inertie des grains n'est pas négligée. Les coefficients du tenseur des contraintes sont mesurés, ce qui permet de calculer pression, contrainte de cisaillement de différence des contraintes normales, ainsi que leurs viscosités associées.

L'étude du cisaillement à volume constant permet de mettre en évidence l'existence d'une transition de rhéo-épaississement entre un régime visqueux à bas taux de cisaillement et un régime inertiel à haut taux de cisaillement, selon que la contraint est dominée par les interactions de lubrification ou l'inertie des grains. Le taux de cisaillement de transition mesuré est compatible avec un argument d'échelle pour la contrainte tenant compte de sa divergence avec la fraction volumique.

Des simulations de cisaillement à pression constante permettent ensuite d'explorer le comportement de suspensions très concentrées (jusqu'à 1% de la fraction volumique de blocage théorique) dans leur domaine d'écoulement visqueux. La rhéologie du mélange peut alors se décrire sous la forme d'une loi d'écoulement dépendante du seul nombre visqueux, construit comme le rapport entre un temps caractéristique de réarrangement local des grains sous l'effet des forces visqueuses et un temps typique de convection imposé par l'écoulement. Cette description permet de caractériser précisément la divergence de la contrainte avec la concentration en particules.

Enfin, la microstructure stationnaire développée dans l'écoumement est mesurée. Une anisotropie importante des contacts générés est mise en évidence, et l'évolution de cette distribution avec la concentration du mélange est discutée.

Abstract.

Suspensions of rigid grains in a fluid constitute a class of complex fluids that present a rich rheology. Even simpler cases of non-Brownian, non-colloidal spherical grains suspended in a Newtonian fluid feature macroscopic behaviours that are still not completely understood, especially when the concentration of particles is high. In these materials, the complexity of the dynamic is the result of the subtle balance that occurs between hydrodynamic interactions mediated by the interstitial fluid, and contact forces between grains.

In this work, we tackle those questions from the point of view of discrete numerical simulations, in the context of the simple shear of 2D concentrated suspensions. Hydrodynamic interactions are modelled by pair lubrication, coupled with a possibly frictional contact law. Grains inertia is not neglected. We have access to the whole stress tensor, allowing the measure of pressure, shear stress, and normal stress difference, as wall as their associated viscosities.

The study of constant volume simple shear shows the existence of a shear-thickening transition between a viscous regime at low shear rate and an inertial regime at high shear rate, depending on whether the stress is dominated by lubrication or grains inertia. The position of the measured transition shear rate is consistent with a scaling argument for the stress that takes into account its divergence with concentration.

Constant pressure simple shear simulations then let us explore the behaviour of very concentrated suspensions (up to 1% to the theoretical jamming fraction) in their viscous flow domain. We show that the rheology of the mix can then be described by a flow law that is only function of the viscous number, constructed as the ratio of a typical time for the local rearrangement of grains subjected to viscous forces and a convection time consistent with the imposed flow. This allows a precise characterization of the divergence of stress with particles concentration.

At last, we measure the stationary microstructure that develops within the flow. We show and important anisotropy of contacts, and discuss the evolution of this distribution with the concentration of the suspension.

Table des matières

1 Introduction générale : De la rhéologie des suspensions. 11

1.1 De la rhéologie. 12

1.1.1 Rappels de mécanique des milieux continus. 12

1.1.2 Fluides Newtoniens. 15

1.2 Des suspensions. 16

1.2.1 Généralités. 16

1.2.2 Quelle physique ? 18

1.2.3 Éléments de rhéologie des suspensions. 20

2 Éléments de théorie. 27

2.1 Formalisation du problème de l'écoulement d'une suspension. 27

2.1.1 Équations de la dynamique. 27

2.1.2 Régime Stokésien et régime inertiel lubrifié. 29

2.1.3 Résolution formelle du problème de Stokes et résistance hydrodynamique. . . . 32

2.2 Problèmes à un ou deux corps. 36

2.2.1 Une particule dans un champ de cisaillement simple. 36

2.2.2 Deux particules dans un champ de cisaillement simple. 37

2.3 Notion de contrainte dans une suspension. 43

2.3.1 Contrainte particulaire. 43

2.3.2 Contrainte dans une suspension inertielle. 48

2.4 Contacts entre grains : Rôle et description. 48

2.4.1 Éléments de physique des contacts. 49

2.4.2 Contacts et rhéologie. 52

3 Un état de l'art des approches numériques. 55

3.1 Représentation explicite du fluide intersticiel. 55

3.1.1 Méthodes à maillage non structurés (*Arbitrary Euler-Lagrange*). 56

3.1.2 Méthodes à maillage structuré : Domaines fictifs et frontières immergées. . . . 57

3.1.3 Méthodes Boltzmann sur réseau. 57

3.1.4 Lubrification et contacts dans les méthodes directes. 58

3.2 Exploitation du caractère linéaire des équations de Stokes. 59

3.2.1 Dynamique Stokesienne. 60

3.2.2 Méthode de couplage de force. 62

3.3 Méthodes discrètes. 63

3.3.1 Méthodes de dynamique moléculaire 63

3.3.2 Suspensions lubrifiées 64

3.3.3 Régularisation de la lubrification par les contacts. 65
3.3.4 Couplage entre forces de contact et forces de lubrification. 68

4 Choix d'un modèle et implémentation numérique. 73
4.1 Dynamique d'écoulement d'une assemblée de particules. 74
4.1.1 Choix d'un modèle de forces hydrodynamiques. 74
4.1.2 Conditions limites de Lees-Edwards et équations SLLOD. 79
4.1.3 Asservissement en pression. 81
4.1.4 Préparation des systèmes. 82
4.2 Un premier algorithme : Dynamique des gaps. 83
4.2.1 Opérateur de rigidité et dynamique des gaps. 84
4.2.2 Discrétisation en temps. 86
4.3 Un second algorithme : Prise en compte des contacts. 89
4.3.1 Modèle de contact. 90
4.3.2 Discrétisation en temps. 93

5 Interlude : Le cisaillement d'une paire de particules. 97
5.1 Une solution analytique pour des particules lisses. 97
5.1.1 Trajectoires. 97
5.1.2 Fonction de distribution des paires. 102
5.2 Le cas de particules rugueuses. 105
5.2.1 Trajectoires. 105
5.2.2 Distribution des contacts. 106

6 Rhéologie des suspensions denses à volume constant 109
6.1 Calcul pratique du tenseur des contraintes. 109
6.2 Suspensions de particules lisses. 111
6.3 Suspensions de particules rugueuses non frottantes. 115
6.3.1 Étude paramétrique préliminaire. 115
6.3.2 Courbes d'écoulement à volume constant. 119

7 Rhéologie des suspensions denses à pression constante 127
7.1 Suspensions de particules rugueuses non frottantes. 127
7.1.1 Loi d'écoulement à pression constante. 127
7.1.2 Divergence de la contrainte en régime visqueux. 134
7.1.3 Différences des contraintes normales. 139
7.1.4 Recherche d'un comportement inertiel à pression contrôlée. 140
7.2 Suspensions de particules rugueuses frottantes. 141
7.2.1 Effets des frottements sur la loi d'écoulement. 141
7.2.2 Divergence de la contrainte en présence de frottements. 145

8 Données microstructurales. 149
8.1 Fonction de distribution de paire. 149
8.1.1 Calcul numérique de la fonction de distribution de paire. 149
8.1.2 Fonction de paire radiale. 150
8.1.3 Cartes bidimensionnelles. 154
8.2 Contacts. 156

8.3 Dynamique moyenne d'une paire dans la suspension. 159

9 Conclusion de ce travail. 167

A Formule de Irving-Kirkwood pour la contrainte granulaire. 171

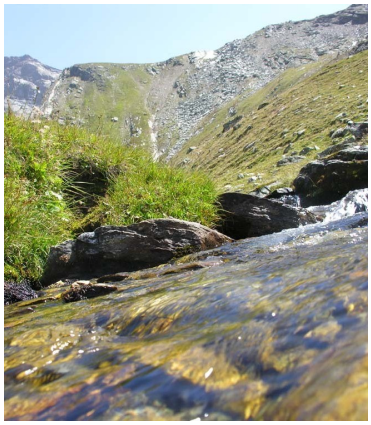
B Principe des méthodes de Runge-Kutta. 175

C Calcul des trajectoires du problème à deux corps avec un cutoff continu. 177

Chapitre 1

Introduction générale : De la rhéologie des suspensions.

Vidons un sceau d'eau sur un plan incliné : l'eau s'écoule sans histoire et sans surprise jusqu'au bas de la pente. Rajoutons à cette même eau des sédiments, de l'argile, ou d'autres particules minérales de taille micronique, jusqu'à obtenir de la boue. Versons cette boue sur la même pente : par rapport à l'eau claire, l'écoulement est fortement ralenti. Rien d'étonnant à cela, il est parfaitement admis par l'expérience commune que la boue est plus épaisse que l'eau dont elle est issue. Cet épaississement, s'il n'est pas spectaculaire en soi, est une modification explicite du comportement mécanique du liquide dû à la mise en suspension de particules en son sein.



(a) Torrent d'eau claire en Savoie.

(b) Volcan de boue à Berca, en Roumanie (photographie G. Boyer, 2008).

FIGURE 1.1 – Une boue à base d'eau est bien plus « épaisse » que l'eau claire dans des conditions d'écoulement comparables.

La boue est une suspension de particules limoneuses dans de l'eau. Bien d'autres suspensions peuvent être rencontrées dans de nombreux domaines. En plus des boues naturelles dont la description précise de l'écoulement est de première importance dans la prévention des glissements de terrain, mentionnons également les laves torrentielles en géophysique, les boues de forage dans l'industrie pétrolière ou minière, le béton frais dans la construction, les boues résiduaires dans les stations d'épurations, les

peintures, les enduits, les pâtes diverses qui sont impliquées dans nombre de procédés industriels. Notons aussi la présence de suspensions dans l'industrie agroalimentaire (lait, crèmes et sauces), dans le secteur des cosmétiques et en biologie (sang).

En première approximation, tous ces matériaux si divers se ramènent à une suspension de particules solides dans un liquide porteur. La question de savoir comment s'écoule une suspension, et pourquoi, a été largement étudiée au cours des cinquante dernières années. Dans ce travail de thèse, j'aborde à nouveau ce problème, du point du vue du rôle des contacts interparticulaires dans la suspension en écoulement.

Ce chapitre une introduction générale à la rhéologie des suspensions. Une première section présente succintement les enjeux et le vocabulaire de base de la rhéologie. Cela nous permet d'introduire les notations et les termes utilisés par la suite de manière à chasser toute ambigüité de la discussion. Ensuite, dans une seconde section, nous détaillons ce qu'est une suspension, comment on peut la décrire, et quels sont les principaux phénomènes physiques qui y ont cours. Cela nous permet de nous pencher plus en détail sur les spécificités rhéologiques des suspensions mises en évidence par l'expérience (et les simulations).

1.1 De la rhéologie.

Compte-tenu des sollicitations auxquelles un matériau est soumis, comment celui-ci s'écoule-t'il ? comment change-t'il de forme ?

Pour décrire en toute généralité la déformation d'un matériau à l'échelle de l'observateur, il faut décrire sa déformation et les efforts auxquels il est soumis de façon continue. Dans le cas des fluides simples comme les liquides ou les gaz moléculaires, une description continue est intuitive car les constituants élémentaires du fluides (atomes et molécules) vivent à une échelle microscopique, bien en deça de ce qui est accessible à nos sens. De fait, des descriptions mathématiques continues du comportement mécanique des solides, liquides et gaz ont été développées historiquement bien avant que la nature atomique de la matière n'ait été établie.
Dans le cas des suspensions, une seconde échelle de granulosité du matériau intervient : un fluide (dont on oublie la nature atomique) s'écoule entre des grains à une échelle mésoscopique, intermédiaire entre l'échelle microscopique des atomes et l'échelle macroscopique de l'observateur. Néanmoins, la séparation entre les échelles méso et macro est suffisamment importante pour qu'une description continue qui oublie la granulosité de la suspension soit valable.

1.1.1 Rappels de mécanique des milieux continus.

Notion de déformation d'un matériau.

De manière générale, on définit le champ de déplacement $\vec{u}(\vec{r})$ comme le champ des vecteurs joignant un point $\vec{r}$ avant déformation à la position qu'il occupe après déformation. Dans le cadre des petites déformations, on écrit classiquement :

$$\vec{u}(\vec{r}) = \vec{u}_0 + \vec{\theta} \times \vec{r} + \vec{\vec{\varepsilon}} \cdot \vec{r} \,. \tag{1.1}$$

où $\vec{\theta} = (\theta_{23}, -\theta_{13}, \theta_{12})$ est le vecteur des angles de rotation, et le tenseur $\vec{\vec{\varepsilon}}$ est un tenseur 3×3 symétrique associé aux déformations :

$$\vec{\vec{\varepsilon}} = \frac{1}{2}\left[\vec{\nabla}\vec{u}_0 + \vec{\nabla}\vec{u}_0^{\mathsf{T}}\right] = \begin{bmatrix} \varepsilon_x & \gamma_{xy} & \gamma_{xz} \\ \gamma_{xy} & \varepsilon_y & \gamma_{yz} \\ \gamma_{xz} & \gamma_{yz} & \varepsilon_z \end{bmatrix} . \tag{1.2}$$

Les coefficients diagonaux sont associés au changement de volume pendant la transformation dans chaque direction pendant la déformation, tandis que chaque coefficient hors diagonale $\gamma_{\alpha\beta}$ représente le cisaillement (ou glissement) sans changement de volume dans le plan $(\vec{e}_\alpha, \vec{e}_\beta)$.

Une description cinématique nécessite d'introduire la dérivée en temps des déformations. On définit la vitesse de déformation $\vec{v}(\vec{r})$ au point $\vec{r}$ telle que :

$$\mathrm{d}\vec{u}(\vec{r}) = \vec{v}(\vec{r})\ \mathrm{d}t\ . \tag{1.3}$$

Tout comme le champ de déplacement se répartit entre déplacement de translation rigide, de rotation rigide, et de déformation, le champ de vitesse se décompose de même :

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}_0 + \vec{\omega} \times \vec{r} + \vec{\vec{E}} \cdot \vec{r}\ , \tag{1.4}$$

où $\vec{v}_0$ est la vitesse de translation, $\vec{\omega} = (\Omega_{23}, -\Omega_{13}, \Omega_{12})$ est le vecteur des vitesses de rotation, le tenseur $\vec{\vec{E}}$ est le tenseur des taux de déformation :

$$\vec{\vec{E}} = \frac{1}{2}\left[\vec{\nabla}\vec{v}_0 + \vec{\nabla}\vec{v}_0^{\mathsf{T}}\right] = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon}_x & \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\gamma}_{xz} \\ \dot{\gamma}_{xy} & \dot{\varepsilon}_y & \dot{\gamma}_{yz} \\ \dot{\gamma}_{xz} & \dot{\gamma}_{yz} & \dot{\varepsilon}_z \end{bmatrix} , \tag{1.5}$$

où $\dot{\varepsilon}_\alpha$ est le taux d'élongation dans la direction $\vec{u}_\alpha$ et $\dot{\gamma}_{\alpha\beta}$ est le taux de cisaillement dans le plan $(\vec{u}_\alpha, \vec{u}_\beta)$. Dans ce cadre, l'écoulement de cisaillement simple classiquement utilisé en rhéologie (et correspondant à l'exemple introductif de l'écoulement d'un fluide sur une pente) s'écrit :

$$\vec{v}(\vec{r}) = \dot{\gamma} y \vec{e}_x = \begin{bmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \vec{r} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\dot{\gamma}/2 \end{bmatrix} \times \vec{r} + \begin{bmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \vec{r}\ . \tag{1.6}$$

Un écoulement de cisaillement simple se décompose donc en une rotation en bloc et un écoulement élongationnel comportant un axe de dilatation à $45°$ et un axe de compression à $135°$ (voir figure 1.2). Le cisaillement simple est un écoulement de première importance en rhéologie car il est relativement facile à mettre en oeuvre expérimentalement et est souvent utilisé afin de sonder les propriétés d'écoulement des matériaux. Le paramètre $\dot{\gamma}$ s'appelle taux de cisaillement et donne une échelle du taux de déformation imposé au matériau.

Notion de contrainte.

Un matériau se déforme parce qu'il est soumis à des efforts, exercés soit par l'exterieur, soit par le matériau sur lui-même.

Depuis Cauchy (1827), on représente ces efforts par deux champs (1er postulat de Cauchy) : les forces en volume $\vec{f}(\vec{r})$, et les tractions $\vec{\tau}(\vec{r})$ (forces par unité de surface) qui agissent en tout point $\vec{r}$ d'une surface coupant le matériau, qu'elle soit réelle (par exemple une interface avec un autre matériau), ou

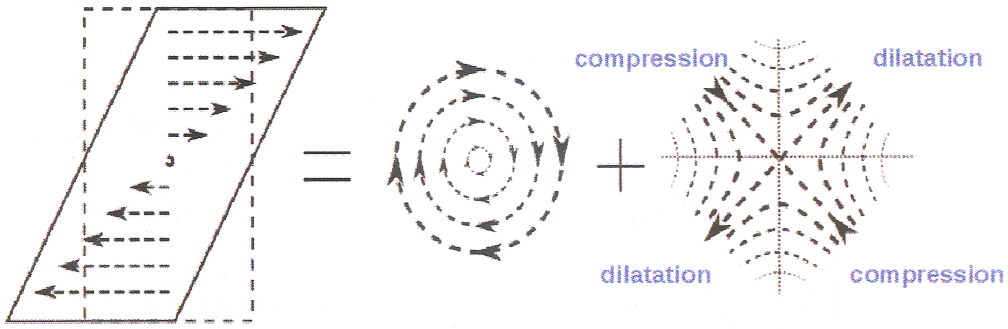


FIGURE 1.2 – Décomposition d'un écoulement de cisaillement simple en une rotation et un écoulement purement élongationnel. Illustration tirée de [56].

virtuelle lorsqu'il s'agit de représenter les efforts exercés par une moitié du matériau sur l'autre moitié. La traction exercée sur une surface ne dépend que de l'orientation de cette surface (2nd postulat de Cauchy). Il suffit alors d'examiner l'équilibre mécanique d'un petit tétraèdre de matière au sein du volume du matériau, dont l'une des faces est orientée selon un $\vec{n}$ quelconque, et les trois autres dans les directions $\vec{u}_x$, $\vec{u}_y$ et $\vec{u}_z$ pour établir que la traction doit être proportionnelle à $\vec{n}$. Cette relation de proportionnalité s'écrit en introduisant neuf coefficients qui sont regroupés en un tenseur $\vec{\vec{\sigma}}$ appelé tenseur des contraintes :

$$\vec{\tau}(\vec{r},\vec{n}) = \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \ , \tag{1.7}$$

de telle sorte que le coefficient $\sigma_{\alpha\beta}$ représente la traction exercée dans la direction α sur une surface unitaire orientée dans la direction β. Enfin, l'examen de l'équilibre des moments exercés sur un petit cube de matière permet d'établir que le tenseur des contraintes doit être symétrique :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\beta\alpha} \ . \tag{1.8}$$

Dès lors, les efforts au sein du matériau sont entièrement décrits par $\vec{f}(\vec{r})$ et $\vec{\vec{\sigma}}(\vec{r})$.

Equations de conservation et loi de comportement.

Un matériau massif est caractérisé comme milieu continu par une densité de masse $\rho(\vec{r})$, soumise à l'équation de conservation :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}\,) = 0 \ . \tag{1.9}$$

Dans le cas d'un matériau homogène et pour un écoulement stationnaire, la densité de masse ne dépend ni de la position, ni du temps, et on retrouve la condition bien connue d'incompressibilité sur le champ de vitesse :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \Leftrightarrow \mathrm{Tr}(\vec{\vec{E}}) = 0 \ . \tag{1.10}$$

La densité associée à la quantité de mouvement dans le matériau est $\rho(\vec{r})\vec{v}(\vec{r})$. Le champ de contrainte interne dans le matériau est la manifestation directe du transport de quantité de mouvement, tandis

que la densité de force en volume générée par l'extérieur agit comme un terme source. L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v} = \vec{\nabla} \cdot \vec{\vec{\sigma}} + \rho \vec{f} \,. \tag{1.11}$$

Les équations de conservation (1.9) et (1.11) sont insuffisantes seules pour déterminer l'évolution au cours du temps de la déformation d'un matériau que l'on charge : il faut une relation supplémentaire qui permet de fermer le système d'équations. Cette relation est qualifiée de loi de comportement du matériau, et contient toute l'information relative à la physique microscopique propre au matériau considéré, et que l'on ne prend pas explicitement en compte dans les équations lorsque l'on se place dans un formalisme de milieu continu.

1.1.2 Fluides Newtoniens.

Pour l'expérience commune, un liquide est un matériau qui ne connaît pas la rupture, et dont les propriétés mécaniques ne sont aucunement altérées par la déformation elle-même. Un liquide ne possède pas de résistance interne à la déformation en tant que telle. En conséquence, le moindre effort extérieur maintenu génère une déformation qui se poursuit indéfiniment dans le temps, c'est à dire un écoulement. Cependant, l'écoulement d'un liquide chargé mécaniquement n'est pas instantané, et dissipe de l'énergie. Cela se traduit par une résistance à l'écoulement, qui provient de cette dissipation d'énergie et est d'autant plus grande que l'écoulement est rapide. Elle est liée à la viscosité du liquide : un liquide très visqueux s'écoule plus lentement pour une sollicitation donnée qu'un autre liquide moins visqueux.

En 1687, Isaac Newton s'intéresse à l'écoulement des liquides ordinaires. Il établit dans les Principia que « la force qui s'exerce entre deux parties d'un liquide en écoulement varie comme la vitesse avec laquelle ces parties se séparent », ce qui se traduit pour un cisaillement simple par la relation de proportionnalité

$$\sigma = \eta_0 \, \dot{\gamma} \,, \tag{1.12}$$

où le coefficient de proportionnalité η_0 est intrinsèque au fluide et est appelé sa viscosité. La structure générale du tenseur des contraintes dans un fluide isotrope et incompressible, dit Newtonien, sera établie au dix-neuvième siècle lors des travaux de Claude-Louis Navier (1822) et George Gabriel Stokes (1845) :

$$\vec{\vec{\sigma}} = -p \, \vec{\vec{\mathrm{Id}}} + 2 \, \eta_0 \, \vec{\vec{E}} \,, \tag{1.13}$$

où $p = p(\vec{r})$ est la pression (thermodynamique) au point $\vec{r}$ dans le fluide. Ainsi, comme $\mathrm{Tr}(\vec{\vec{E}}) = 0$ dans un fluide incompressible, la contrainte normale ne peut y être générée que par la pression hydrostatique, tandis que la contrainte déviatorique $\vec{\vec{\tau}} = \vec{\vec{\sigma}} + p \, \vec{\vec{\mathrm{Id}}}$ est directement proportionnelle au tenseur des taux de déformation. Dans un écoulement de cisaillement simple, un fluide Newtonien ne développe pas d'autre contrainte normale que la seule pression hydrostatique :

$$\vec{\vec{\sigma}} = \begin{bmatrix} -p & \eta_0 \dot{\gamma} & 0 \\ \eta_0 \dot{\gamma} & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{bmatrix} \,. \tag{1.14}$$

Il suffit de remplacer le tenseur des contraintes par son expression pour un fluide Newtonien dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.11), pour obtenir la célèbre équation de Navier-Stokes qui décrit la dynamique d'écoulement d'un fluide simple :

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v} = -\vec{\nabla} p + \eta_0 \, \Delta \vec{v} + \rho \vec{f} \, . \tag{1.15}$$

Physiquement, la viscosité est associée à la diffusion de la quantité de mouvement par « frottement » entre les couches de fluide qui glissent les unes sur les autres pendant l'écoulement. Elle vaut quelques 10^{-5} Pa.s pour l'air, quelque 10^{-3} Pa.s pour l'eau, autour de 10^{-2} Pa.s pour le sang, de $0,1$ à quelques Pa.s pour les huiles, 10 Pa.s pour du miel et jusqu'à 10^8 Pa.s pour un matériau extrêmement visqueux comme le bitume.

Une foule de fluides échappent néanmoins à ces descriptions simples. Avec l'avènement de la physico-chimie moderne, et le développement de procédés industriels toujours plus variés, les mécaniciens ont été amenés à devoir décrire le comportement en déformation de matériaux non triviaux, comme les gels, les pâtes, les fondus de polymères, les émulsions, les dispersions colloïdales, les suspensions, les poudres... De tels matériaux, génériquement appelés fluides complexes, présentent en général une microstructure riche, dont les effets se retrouvent à l'échelle macroscopique dans la complexité du comportement en écoulement. L'étude des lois de comportement de ces matériaux complexes fonde la branche de la physique appelée rhéologie.

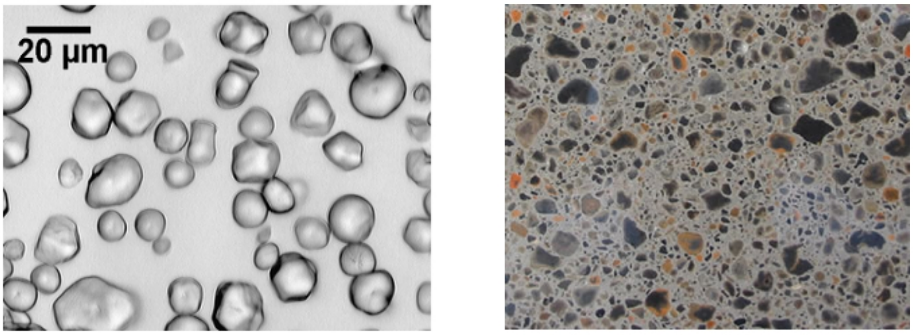
1.2 Des suspensions.

1.2.1 Généralités.

Les suspensions font partie des milieux diphasiques, plus précisément des dispersions, où une phase est contenue sous forme dispersée dans une matrice continue. Les dispersions constituent une classe très riche de matériaux complexes, selon la nature de la phase dispersée et de la phase continue. On distingue ainsi les aérosols et autres fumées (goutelettes ou particules solides dans une matrice gazeuse), les granulaires secs (grains durs dans une atmosphère gazeuse, souvent de l'air), les mousses (bulles de gaz dans une matrice liquide ou solide), les émulsions (goutelettes de liquide dans une matrice liquide non miscible) et donc les suspensions qui sont la dispersion d'une phase solide composée de particules (ou grains) plus ou moins dures dans une matrice liquide. On s'intéresse de plus uniquement aux systèmes pour lesquels le fluide suspendant est Newtonien, de viscosité η_0.

Dans une suspension, les grains peuvent présenter des formes et des tailles extrêmement variées (figure 1.3). Les particules n'ont d'ailleurs aucune raison de faire la même taille au sein d'un même mélange, et la connaissance de toute la distribution granulométrique est nécessaire pour décrire les grains en suspension. Afin d'étudier les mécanismes physiques fondamentaux à l'oeuvre dans les suspensions réelles, sans être gênés par les effets de forme ou de polydispersité des grains difficile à décrire, les systèmes étudiés expérimentalement ou simulés sont souvent des systèmes modèles où les grains sont de forme et de taille contrôlées. Dans la suite de cette section, on discute des propriétés des suspensions modèles, où les grains sont sphériques, de rayon a constant.

Indépendamment de la forme et de la taille des grains, le paramètre permettant de caractériser une suspension est la fraction volumique ϕ qui décrit la proportion du volume de suspension occupé par les particules. Si n représente le nombre moyen de particules par unité de volume, un volume V de



(a) Grains d'amidon dans de la fécule de maïs [50].

(b) Coupe d'un échantillon de béton [114].

FIGURE 1.3 – Les grains en suspension dans de la fécule de maïs (a) ou du béton (b) présentent une grande variété de taille et de forme.

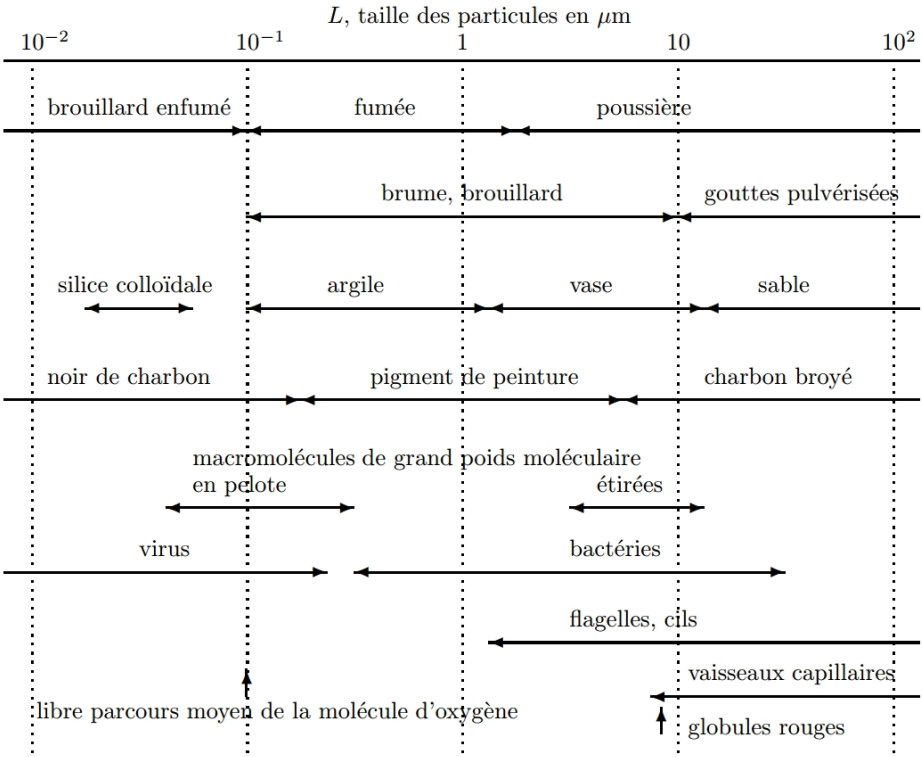


FIGURE 1.4 – Echelles de tailles mises en jeu dans une grande variété de dispersions. D'après [63].

suspension contient $N = nV$ particules, et on a pour des particules sphériques :

$$\phi = \frac{V_{\text{grains}}}{V} = \frac{4}{3}\pi a^3 n \ . \tag{1.16}$$

Bien évidemment, le remplissage progressif de l'espace par les grains qui ne peuvent pas s'interpénétrer s'ils sont assez durs fait qu'il existe une fraction volumique maximale que l'on ne peut dépasser. Cette

valeur $\phi_{\text{hc}} = 0,74$ en 3D est atteinte lorsque les grains sont bien rangés selon un ordre hexagonal compact (c'est la conjecture de Kepler). Les dispersions dont on parle dans ce paragraphe sont des milieux désordonnés, aussi la fraction volumique maximale doit conserver la nature amorphe de la structure. L'empilement le plus compact que l'on puisse générer tout en gardant une structure aléatoire est usuellement qualifié par *random close packing*, dont la fraction volumique est évaluée à $\phi_{\text{rcp}} \approx 0,64$ pour des sphères monodisperses [119]. Cette valeur est néanmoins délicate à définir, et sa mesure tant expérimentale que par simulation semble dépendre du procédé de préparation [127]. Il faut noter que ϕ_{rcp} dépend de la distribution de taille des grains et peut changer considérablement pour un système polydisperse.

Précisons enfin que l'on peut aussi définir une fraction surfacique ϕ pour un système bidimensionnel :

$$\phi^{\text{2D}} = \frac{S_{\text{grains}}}{S} = \pi a^2 n \ , \tag{1.17}$$

pour une suspension monodisperse de disques. Dans ce cas, on peut aussi déterminer la fraction surfacique maximale correspondant à un cristal hexagonal compact $\phi_{\text{hc}}^{\text{2D}} = 0,9$, et au *random close packing* $\phi_{\text{rcp}}^{\text{2D}} \approx 0,84$ [126].
On parlera de suspension diluée pour désigner une suspension où la fraction volumique est de l'ordre de quelques pourcents, et de suspension concentrée quand la fraction volumique dépasse les quelques dizaines de pourcents et s'approche de celle du *random close packing*.

1.2.2 Quelle physique ?

Suivons l'analyse dimensionnelle proposée par Krieger [85, 125]. On note η la viscosité de cisaillement effective de la suspension, dont on peut écrire en général, qu'elle dépend, pour un écoulement stationnaire, des paramètres :

$$\eta = f(a, \rho, n, \eta_0, \rho_0, k_{\text{B}}T, \dot{\gamma}) \ , \tag{1.18}$$

où a est le rayon des particules, ρ leur densité, n leur nombre par unité de volume, η_0 et ρ_0 la viscosité et la densité de la matrice Newtonienne, T la température, de sorte que $k_{\text{B}}T$ soit l'échelle d'énergie thermique et $\dot{\gamma}$ le taux de cisaillement. Ces grandeurs physiques sont donc au nombre de 8, et s'expriment en unités de longueur, de masse et de temps (et en leurs unités composées), de telle sorte qu'il est possible de construire $8 - 3 = 5$ nombres sans dimension suffisant pour décrire le problème. Ces nombres sans dimensions sont la viscosité relative de la suspension $\eta_r = \eta/\eta_0$, la densité relative de la suspension $\rho_r = \rho/\rho_0$, la fraction volumique en particules dans la suspension $\phi = (4\pi/3)a^3 n$, le nombre de Péclet Pe et le nombre de Reynolds particulaire Re_p :

$$\mathrm{Pe} = \frac{6\pi\eta_0 a^3 \dot{\gamma}}{k_{\text{B}}T} \ , \quad \mathrm{Re}_p = \frac{\rho_0 a^2 \dot{\gamma}}{\eta_0} \ . \tag{1.19}$$

Le rapport ρ_r permet d'estimer la poussée d'Archimède exercée sur les particules soumises à la pesanteur. On s'intéresse dans ce travail à des systèmes isodenses ne présentant pas de sédimentation ou d'effets liés à la flottabilité des grains. Dans ce cas, $\rho_r = 1$, et la loi (1.18) s'écrit sous sa forme adimensionnée

$$\eta_r = f(\phi, \mathrm{Pe}, \mathrm{Re}_p) \ . \tag{1.20}$$

Mouvement Brownien.

Le nombre de Péclet s'écrit comme le rapport entre un temps caractéristique t_c de convection de la particule par l'écoulement moyen, soit le temps mis pour parcourir une distance a à la vitesse $a\dot{\gamma}$; et un temps caractéristique de diffusion t_d sous l'effet des fluctuations thermiques des molécules du fluide suspendant, caractérisées par le coefficient de diffusion d'Einstein $D = k_B T/6\pi\eta_0 a$. Ainsi, la limite des petits nombres de Péclet correspond aux suspensions où la dynamique des grains est diffusive, les forces aléatoires Browniennes dominant les forces hydrodynamiques. On parle de suspensions Browniennes. Pour une suspension modèle réelle comme celle utilisée dans [51], $a \approx 40.10^{-6}$ m, $\eta_0 \approx 10^{-3}$ Pa.s, $\dot{\gamma} \approx 1\text{s}^{-1}$ donnent à température ambiante $T \approx 300$ K un nombre de Péclet très grand :

$$\text{Pe} = \frac{6 \times \pi \times 10^{-3} \times (40.10^{-6})^3 \times 1}{1,38.10^{-23} \times 300} \approx 10^6 \ , \tag{1.21}$$

Cette suspension est donc nettement non Brownienne. Dans les mêmes conditions, un nombre de Péclet d'ordre unité correspond à un rayon $a_{\text{brownien}} \approx 10^{-6}$ m. On parlera donc de régime Brownien pour des suspensions de particules submicroniques. Dans ce travail, on s'intéresse à des **suspensions non-Browniennes**.

Inertie.

Le nombre de Reynolds tel qu'il est calculé dans (1.22) estime le rapport des effets inertiels sur les effets visqueux pour le fluide s'écoulant autour d'un grain de la suspension seul. On peut l'évaluer pour la suspension [51], où la densité commune du fluide et des particules est $\rho_0 = 1.5$ g.cm^{-3} :

$$\text{Re}_p = \frac{1.5.10^{-3}.10^6 \times (40.10^{-6})^2 \times 1}{10^{-3}} \approx 10^{-3} \ . \tag{1.22}$$

L'inertie est donc négligeable pour le problème de l'écoulement du fluide autour d'un grain. Il n'est cependant pas évident que cela soit aussi le cas pour l'écoulement dans une suspension entière, surtout si celle-ci est dense. En effet, la taille a des particules n'est alors pas nécessairement la bonne échelle de longueur à utiliser pour calculer le nombre de Reynolds. Nous reportons la discussion de la prise en compte de l'inertie dans le chapitre suivant (section 2.1.2) qui traite plus en détail de la dynamique d'une suspension dense, non Brownienne, **éventuellement inertielle**.

Interactions non hydrodynamiques.

L'analyse précédente ne décrit que la physique des suspensions purement hydrodynamique. Pour tenir compte des forces non hydrodynamiques à l'oeuvre au sein d'une suspension, il faut encore discuter de deux types d'interaction ayant lieu dans les suspensions : les interactions colloïdales à distance, et les forces de contact.

On regroupe sous le terme d'interaction colloïdale toutes les interactions de nature électrostatique (forces de Van der Waals) entre les grains. Ces forces peuvent être attractives ou répulsives et agissent à distance, typiquement de l'ordre de la dizaine de nanomètres. Elles sont usuellement décrites par un potentiel central dans le cadre de la théorie DLVO (Derjaguin, Landau, Verwey, Overbeek). Dans ce travail, nous considérerons uniquement des **suspensions non colloïdales**, pour lesquelles ces effets sont négligeables.

On regroupe enfin sous le terme de forces de contact toutes les forces à très courte distance empêchant l'interpénétration des grains. Les forces de contact regroupent de nombreux effets physiques

(élasticité, plasticité, frottements, collision ...) et semblent nécessaires à la description de la rhéologie des suspensions denses [4, 37, 93]. Nous considérons dans ce travail des **suspensions où les grains peuvent entrer en contact**. Nous discutons plus en détail du rôle et de la modélisation des forces de contact dans une suspension au chapitre suivant (4.3).

1.2.3 Éléments de rhéologie des suspensions.

Les suspensions présentent un comportement rhéologique riche, dont de nombreuses spécificités ne cadrent pas avec un comportement Newtonien simple. L'objectif de ce paragraphe est de récapituler certaines des caractéristiques du comportement non Newtonien des suspensions, tel qu'il est observé par l'expérience et les simulations.

Variation de la viscosité avec le taux de cisaillement.

Lorsqu'elle est cisaillée, une suspension génère une contrainte qui ne varie pas forcément linéairement avec le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$. Empiriquement, une loi de puissance (Ostwald, 1925) est souvent utilisé pour relier contrainte et taux de cisaillement dans les fluides non linéaires :

$$\sigma = k\dot{\gamma}^n \ , \tag{1.23}$$

où le coefficient k et l'exposant n sont à mesurer expérimentalement. La viscosité $\eta = k\dot{\gamma}^{n-1}$ d'un fluide d'Ostwald diminue avec le taux de cisaillement si $n < 1$ et augmente avec lui si $n > 1$. On qualifie de rhéofluidifiant un fluide qui se trouve dans le premier cas : c'est un fluide qui s'écoule d'autant plus facilement qu'il s'écoule vite. De nombreux fluides complexes sont rhéofluidifiant : suspensions diluées, encres, peintures, solutions ou fondus de polymères, cristaux liquides nématiques, etc... Cet effet est souvent lié à l'altération d'une microstructure interne sous écoulement, de manière à rendre celui-ci plus facile (par exemple l'alignement des macromolécules avec l'écoulement dans une solution de polymère ou un cristal liquide.)

À l'inverse un fluide dont la viscosité effective augmente avec le taux de cisaillement est qualifié de rhéoépaississant : plus l'écoulement est rapide, plus il est proportionnellement difficile à initier. Le phénomène est nettement moins courant que la rhéofluidification et concerne essentiellement les suspensions.

Globalement, les suspensions denses sont rhéofluidifiantes à bas taux de cisaillement, et présentent un rhéoépaississement à plus haut taux de cisaillement [11, 29]. La figure (1.5), tirée d'une revue par Stickel et Powell de 2005 récapitule les régimes rhéologiques observés pour les suspensions. L'augmentation de la viscosité avec le taux de cisaillement, est associée à la formation d'amas de particules (*hydroclusters*) [16, 29]. Elle se retrouve dans les simulations de suspensions Browniennes, dans le domaine de nombre de Péclet où l'hydrodynamique domine les forces Browniennes [55, 103]. Ce rhéoépaississement continu est habituellement réversible, et plus aigü aux hautes fractions volumiques. Au voisinage du *random close packing*, un rhéoépaississement discontinu peut être observé, associé à l'aggrégation des hydroclusters en un réseau percolant [17, 28]. Le rôle important joué par les forces de contact dans ce rhéoépaississement, et notamment la friction entre les grains est suggéré par des simulations [68, 98].

Un autre mécanisme de rhéoépaississement est l'apparition d'un régime inertiel quand $\dot{\gamma}$ augmente, et ce d'autant plus vite que la suspension est dense [51]. Ce régime est réminiscent de la loi de Bagnold, bien connue pour les granulaires secs, et déjà observée pour de suspensions de grains millimétriques

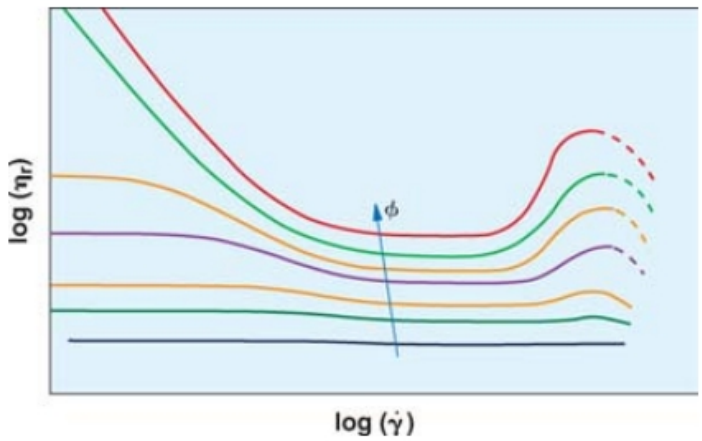


FIGURE 1.5 – Représentation de la viscosité relative d'une suspension en fonction du taux de cisaillement pour différentes fractions volumiques. Á haute fraction volumique, la viscosité diverge pour $\dot{\gamma} \to 0$, ce qui témoigne de l'existence d'un seuil d'écoulement. Á haut $\dot{\gamma}$ les suspensions présentent un régime rhéoépaississant plus ou moins marqué. D'après [125].

par Bagnold en 1954 [7]. Dans ce régime la contrainte varie proportionnellement à $\dot{\gamma}^2$, et donc la viscosité croît linéairement avec le taux de cisaillement. Le taux de cisaillement de transition prévu par le nombre de Reynolds particulaire Re_p ne correspond cependant pas aux observations, suggérant qu'il faille évaluer l'importance relative de l'inertie et de l'hydrodynamique différemment [51, 93].

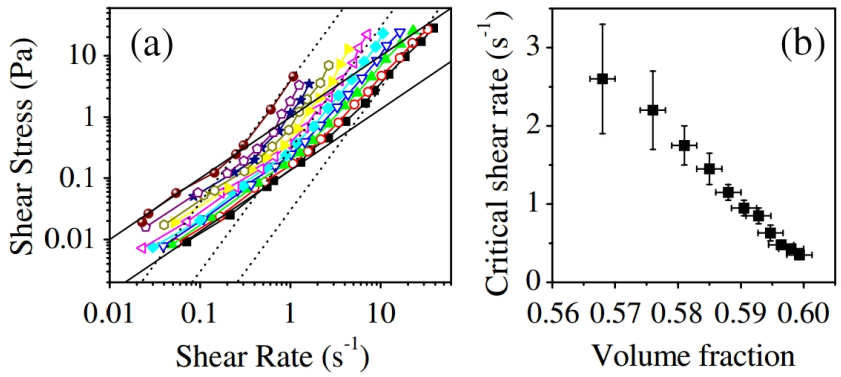


FIGURE 1.6 – Transition entre une loi de comportement visqueux ($\sigma \propto \dot{\gamma}$) et une loi de Bagnold ($\sigma \propto \dot{\gamma}^2$) (a). La transition se fait à un taux de cisaillement critique qui s'effondre quand la fraction volumique de la suspension se rapproche du *random close packing* (b). D'après [51].

Fluide à seuil

La divergence de la viscosité observée pour les suspensions denses quand le taux de cisaillement tombe à zéro est caractéristique de l'existence d'un seuil de contrainte en deça duquel l'écoulement n'est pas possible.

On appelle comportement plastique idéal le comportement d'un matériau qui ne se déforme pas du tout tant que la contrainte est inférieure à un seuil, puis qui s'écoule indéfiniment comme un fluide une fois le seuil dépassé (et c'est alors la vitesse d'écoulement qui génère de la contrainte) :

$$\begin{aligned} \sigma < \sigma_{\text{seuil}} &\Leftrightarrow \text{matériau plastique idéal bloqué,} \\ \sigma = \sigma_{\text{seuil}} &\Leftrightarrow \text{matériau plastique idéal en écoulement.} \end{aligned} \tag{1.24}$$

En réalité, la plupart des matériaux plastiques réels se déforment élastiquement avant que le seuil de

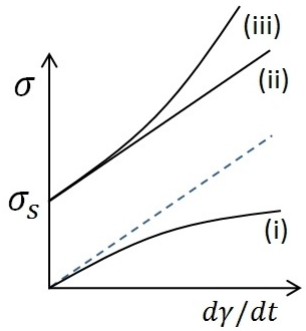


FIGURE 1.7 – Représentation des courbes d'écoulement d'un fluide rhéofluidifiant (i), d'un fluide de Bingham (ii), et d'un fluide de Hershel-Bulkley rhéoépaississant (iii). Le comportement Newtonien est donné pour référence en pointillés bleus.

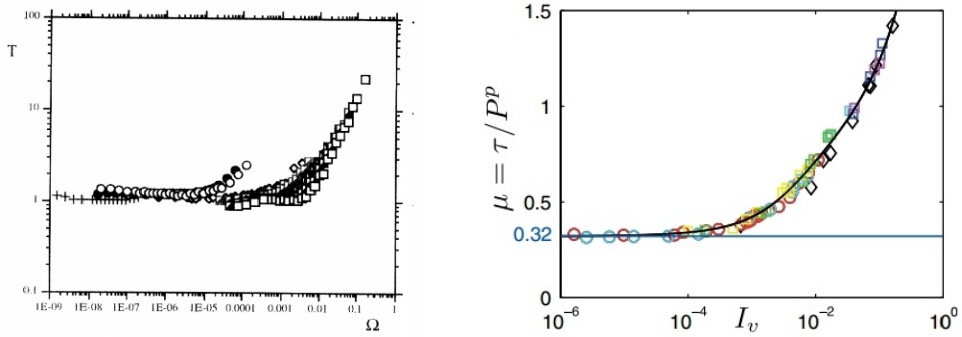
plasticité soit atteint. Passé le seuil d'écoulement, le matériau se comporte comme un fluide qualifié alors de viscoplastique, ou fluide à seuil. Il existe plusieurs modèles décrivant la rhéologie d'un fluide à seuil, le plus simple étant le modèle de Bingham dont le comportement est quasi-Newtonien à hautes contraintes :

$$\sigma = \sigma_{\text{seuil}} + k\dot{\gamma} \ . \tag{1.25}$$

Symboliquement, un fluide de Bingham correspond à l'association en parallèle d'un patin frottant et d'un amortisseur. Les fluides à seuil peuvent exhiber un comportement non linéaire en écoulement, que l'on décrit par un modèle plus général qui intègre une loi de puissance dans la loi de comportement, et qui constitue le modèle de Herschel-Bulkley :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= 0 && \text{pour } \sigma \leqslant \sigma_{\text{seuil}} \ , \\ \sigma &= \sigma_{\text{seuil}} + k\dot{\gamma}^n && \text{pour } \sigma > \sigma_{seuil} \ . \end{aligned} \tag{1.26}$$

De nombreux fluides complexes arborent un seuil d'écoulement : suspensions concentrées de particules, solutions de polymères, gels, mousses, émulsions, ou encore argiles (bentonite ou laponite par exemple). Les exemples pratiques sont légion : dentifrice, mousse à raser, ciment frais, peintures, boues de forage, etc... Les granulaires secs présentent également un caractère de fluide à seuil dans la mesure où l'écoulement n'est possible que si la contrainte dépasse une certaine valeur nécessaire pour vaincre les frottements entre grains. Ce comportement frottant macroscopique se retrouve dans les suspensions denses, cisaillées à pression constante à des vitesses tendant vers zéro [4, 22], voir figure (1.8). Là encore, le comportement de fluide à seuil des suspensions denses, non Browniennes et non colloïdales semble être liée à l'existence de frottements entre les grains dans le mélange.



(a) Couple T mesuré en fonction de la vitesse de rotation Ω, tous deux adimensionnés par la pression, pour différentes suspensions. Tiré de [4].

(b) $\mu = \sigma_{xy}/p$ en fonction de $I_v = \eta_0\dot{\gamma}/p$, pour différentes pressions imposées p. Tiré de [22].

FIGURE 1.8 – Le cisaillement d'une suspension dense à pression constante présente un comportement macroscopique frottant comparable aux granulaires secs, la contrainte tendant vers une valeur finie, proportionnelle à la pression imposé aux $\dot{\gamma}$ nuls.

Divergence de la viscosité avec la concentration.

Á taux de cisaillement fixé, la viscosité relative d'une suspension de particules monodisperses ne dépend que de la fraction volumique ϕ. Expérimentalement, on observe une divergence de la viscosité à une fraction volumique ϕ_c [110, 73]. Il n'y a pas d'expression analytique exacte pour exprimer la loi $\eta_r(\phi)$

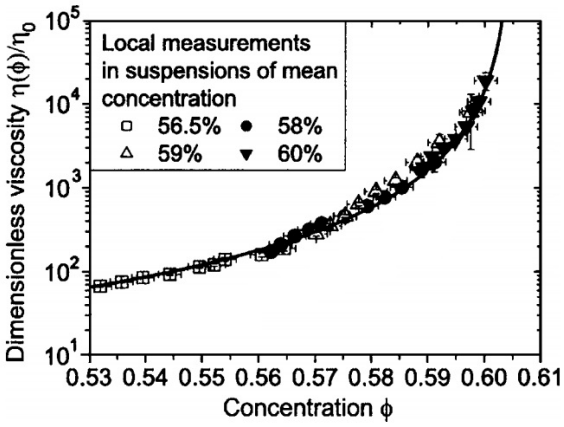


FIGURE 1.9 – Mesure expérimentale de la divergence de la viscosité relative de suspensions à différentes concentrations. Le trait plein correspond à un ajustement par une loi de Krieger-Dougherty. D'après [110].

pour des suspensions concentrées. Les suspensions diluées peuvent être décrites par un développement en puissance de ϕ :

$$\eta_r^{\text{dilué}}(\phi) = 1 + \frac{5}{2}\phi + K\phi^2 \ , \tag{1.27}$$

où le facteur $5/2$ a été calculé par Einstein [47] à partir du problème hydrodynamique à un grain (et permet de décrire des suspensions concentrées à l'ordre du pourcent), et la constante K exprimée par Batchelor et Green [15] sous la forme d'une intégrale à partir du problème hydrodynamique à deux grains (et permet de décrire des suspensions concentrées à l'ordre de la dizaine de pourcent). Cette intégrale ne peut d'ailleurs être calculée que dans le cas d'un écoulement élongationnel pur et est estimée à $K \approx 7,6$.

Dans le cas de suspensions concentrées, de multiples lois empiriques permettent d'ajuster raisonnablement les données expérimentales. Citons la loi de Maron et Pierce [99] :

$$\eta_r(\phi) = \left[1 - \frac{\phi}{\phi_c}\right]^{-2} , \tag{1.28}$$

et la loi de Krieger-Dougherty :

$$\eta_r(\phi) = \left[1 - \frac{\phi}{\phi_c}\right]^{-5\phi_c/2} , \tag{1.29}$$

qui est essentiellement une évolution destinée à récupérer la formule d'Einstein quand $\phi \to 0$ et qui peut se justifier heuristiquement par une approche de milieu effectif [84]. Dans ces lois, le paramètre ϕ_c est en général considéré comme un paramètre ajustable, bien qu'il soit censé représenter une grandeur fondamentale qui est la fraction volumique à laquelle la viscosité de la suspension diverge. La fraction ϕ_c est parfois identifiée avec la fraction de *random close packing*, bien qu'il n'y ait aucun argument théorique qui permette d'identifier les deux paramètres. En réalité, ϕ_c est souvent inférieure à ϕ_{rcp} en raison de l'existence de frottements entre les grains qui modifie la microstructure atteignable par l'écoulement. La valeur $\phi_c \approx 0.6$ estimée par Ovarlez *et al.* [110] par des mesures locales effectuées à l'aide d'un dispositif d'imagerie par raisonance magnétique est une des mesures les plus fiables qui ait été proposée.

Contraintes normales.

Un fluide Newtonien en écoulement de cisaillement simple ne génère pas d'autres contraintes normales que la pression hydrostatique :

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = -p \ . \tag{1.30}$$

En raison de l'absence de microstructure complexe en son sein, le comportement d'un fluide Newtonien est parfaitement isotrope. Dans le cas d'un fluide complexe possédant une microstructure comme une suspension, celle-ci peut se coupler avec l'écoulement, influencer celui-ci, et en retour acquérir une certaine anisotropie, conduisant à l'apparition d'efforts normaux supplémentaires au sein du fluide. En éliminant la pression (qui n'est pas fixée par la rhéologie dans un fluide incompressible), cela se traduit par la non nullité des composantes diagonales du tenseur des contraintes déviatoriques, lesquelles ne sont d'ailleurs pas nécessairement égales entre elles :

$$\tau_{xx} \neq \tau_{yy} \neq \tau_{zz} \neq 0 \ . \tag{1.31}$$

Afin de s'affranchir de la pression, on mesure en général les différences de contrainte normale :

$$\begin{aligned} N_1 &= \tau_{xx} - \tau_{yy} = \sigma_{xx} - \sigma_{yy} \ , \\ N_2 &= \tau_{yy} - \tau_{zz} = \sigma_{yy} - \sigma_{zz} \ . \end{aligned} \tag{1.32}$$

Les contraintes normales existent dans des fluides complexes présentant une microstructure fortement couplée à l'écoulement, en général douée d'une certaine élasticité (les contraintes normales ne contribuent pas à la dissipation dans l'écoulement). Les suspensions concentrées exhibent des contraintes normales, qui ont pu être évaluées expérimentalement, à l'aide d'une pression de grille dans un écoulement de Couette [45, 57], ou dans un écoulement de torsion entre deux disques [44].

Leur anisotropie génère des effets parfois spectaculaires. Dans un écoulement cylindrique autour d'un barreau tournant, la vitesse est essentiellement orthoradiale. Dans ces circonstances, un fluide newtonien ne génère pas de contrainte verticale autre que la pression. Dans une suspension en revanche, une contrainte verticale proportionnelle au taux de cisaillement (et donc variant avec le rayon) se développe, entraînant le plongement de la surface libre de la suspension au voisinage du bareau (effet anti-Weissenberg, voir figure 1.10). Diverses expériences de rhéologie, ainsi que des simulations

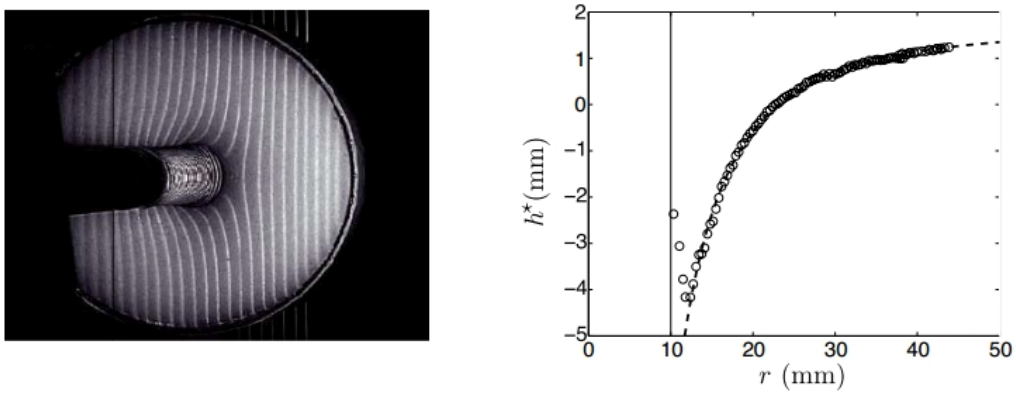


FIGURE 1.10 – Effet anti-Weissenberg dans une suspension concentrée. Gauche : Image du plongement de la surface libre au voisinage d'un barreau tournant. Droite : reconstruction du profil de la surface libre. Tiré de [23].

numériques permettent d'estimer les différences de contraintes normales générées dans une suspension en écoulement. Ces résultats s'accordent sur une seconde différence normale négative $N_2 < 0$, à l'origine de l'effet anti-Weissenberg observé. Le signe et la valeur de N_1 semblent par contre encore controversés : $N_1 \approx N_2 < 0$ ([121, 123, 133]), $N_1 < N_2 < 0$ ([136]), $N_1 \approx 0$ ([39]), voir $N_1 > 0$ ([44]).

Chapitre 2

Éléments de théorie.

Dans ce chapitre sont présentés des éléments du formalisme permettant la description de l'écoulement d'une suspension de particules rigides. L'objectif de ce chapitre est double. Il nous permet en premier lieu d'ancrer le travail que nous présentons dans le contexte théorique de l'hydrodynamique des suspensions et d'introduire des notations et des concepts utilisés par la suite. Ensuite, il permet de comprendre les techniques de simulation de l'état de l'art présentées au chapitre (3), et enfin de justifier les approximations employées dans le code de calcul que nous utilisons et qui sera détaillé dans le chapitre (4).

Dans la première section de ce chapitre, nous formulons le problème général de l'écoulement de cisaillement simple d'une suspension de particules rigides. La section qui suit aborde en quelques mots les problèmes de l'écoulement visqueux autour d'un corps ou deux corps rigide, prémisses du problème de l'écoulement d'une suspension diluée. La troisième section aborde le calcul de la contrainte dans une suspension. Enfin le rôle des contacts entre grains est discuté dans la quatrième section.

Pour l'essentiel, les calculs présentés dans ce chapitre sont tirés des articles de Batchelor [12, 14, 15], et des livres de Kim et Karrila [82] et Guazzelli et Morris [65].

2.1 Formalisation du problème de l'écoulement d'une suspension.

2.1.1 Équations de la dynamique.

Il s'agit de décrire l'écoulement d'une suspension de particules sphériques, indéformables et parfaitement lisses, immergées dans un fluide Newtonien, en écoulement moyen de cisaillement simple au taux de déformation $\dot{\gamma}$. Un tel écoulement peut être imposé en plaçant la suspension entre deux plaques rigides parallèles, séparées d'une distance L et en déplacement longitudinal l'une par rapport à l'autre à une vitesse relative $V = L\dot{\gamma}$. On définit un référentiel galiléen direct $\mathcal{R} = (O, \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$, où O est un point fixe par rapport au laboratoire situé entre les parois, $\vec{e}_x$ est le vecteur unitaire dans la direction de l'écoulement et $\vec{e}_y$ le vecteur unitaire dans la direction transverse. Positions et vitesses des particules sont exprimées dans le référentiel $\mathcal{R}$.

On appelle $\vec{v}^{\infty}(\vec{r})$ le champ de vitesse moyen de cisaillement simple imposé, défini dans tout l'espace entre les parois :

$$\vec{v}^{\infty}(\vec{r}) = \dot{\gamma} y \vec{e}_x \ . \tag{2.1}$$

Ce champ de vitesse est une fonction affine de l'espace, c'est à dire que pour tout points $\vec{r}, \vec{r}'$ on peut écrire :

$$\vec{v}^{\infty}(\vec{r}) = \vec{v}^{\infty}(\vec{r}') + \vec{\omega}^{\infty} \times (\vec{r} - \vec{r}') + \vec{\vec{E}}^{\infty} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \ , \tag{2.2}$$

où l'on définit la vitesse de rotation moyenne $\vec{\omega}^{\infty}$ et le tenseur des taux de déformation moyen $\vec{\vec{E}}^{\infty}$ imposés par le cisaillement simple. Pour que cette relation soit cohérente avec l'expression (2.1) du cisaillement simple, quand on pose $\vec{r}' = \vec{0}$, il faut :

$$\vec{\omega}^{\infty} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\dot{\gamma}/2 \end{bmatrix} \ , \quad \vec{\vec{E}}^{\infty} = \begin{bmatrix} 0 & \dot{\gamma}/2 & 0 \\ \dot{\gamma}/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \ . \tag{2.3}$$

Ce champ de vitesse correspond autant à la vitesse du fluide en l'absence de particules, qu'au champ de vitesse moyen au point $\vec{r}$ n'importe où dans la suspension, quand il y a beaucoup de particules.

On s'intéresse à un domaine $\mathcal{V}$ situé autour de O. On note V son volume, et N le nombre de grains qu'il contient. On suppose que $\mathcal{V}$ est assez loin des parois pour ne pas en ressentir les effets autrement que par le champ de vitesse moyen qui est imposé. Dans $\mathcal{V}$, on note $\mathcal{P}_i$ le domaine occupé par chaque particule i, et $\mathcal{F}$ le domaine restant occupé par le fluide. On note η_0 la viscosité du fluide, ρ la densité commune des particules et du fluide, m_i la masse de la particule i, a_i son rayon, $I_i = 2m_i a_i^2/5$ son moment d'inertie, $\vec{r}_i$ la position dans $\mathcal{R}$ de son centre, $\vec{v}_i$ la vitesse de translation dans $\mathcal{R}$ de son centre, $\vec{\omega}_i$ sa vitesse de rotation, et $\vec{f}_i$ et $\vec{\Gamma}_i$ la force totale et le couple total auxquels elle est soumise [1].
On décrit la suspension dans le domaine $\mathcal{V}$, comme un milieu continu multiphasique, où se développe un champ de contrainte $\vec{\vec{\sigma}}(\vec{r})$, et dont la déformation est décrite par un champ de vitesse $\vec{v}(\vec{r})$. Dans chaque domaine $\mathcal{P}_i$, le champ de vitesse $\vec{v}(r)$ est celui d'un mouvement de corps rigide, correspondant aux vitesses de translation $\vec{v}_i$ et de rotation $\vec{\omega}_i$:

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}_i + \vec{\omega}_i \times (\vec{r} - \vec{r}_i) \ . \tag{2.4}$$

Dans le domaine fluide $\mathcal{F}$, le champ de vitesse est solution des équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Le fluide est supposé incompressible, la conservation de la masse revient alors à annuler la divergence de la vitesse. En toute généralité, la conservation de la quantité de mouvement pour un fluide Newtonien se ramène à l'équation de Navier-Stokes pour la vitesse sur $\mathcal{F}$:

$$\begin{aligned} &\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \ , \\ &\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v} = -\vec{\nabla} p + \eta_0 \ \Delta \vec{v} \ , \end{aligned} \tag{2.5}$$

La pression hydrostatique locale dans le fluide $p = -(1/3)\,\mathrm{Tr}(\vec{\vec{\sigma}})$ n'est autre que le multiplicateur de Lagrange associé à la condition d'incompressibilité. Les particules imposent au champ de vitesse dans le fluide une condition de non-glissement à leur interface avec celui-ci. En tout point $\vec{r} \in \partial\mathcal{P}_i$, on a nécessairement :

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}_i + \vec{\omega}_i \times (\vec{r} - \vec{r}_i) \ . \tag{2.6}$$

1. On emploira le terme générique « efforts » pour désigner indistinctement la force agissant sur une particule et ses moments (couple et moments éventuels d'ordre supérieur).

Il reste à écrire les conditions limites au bord du domaine $\mathcal{V}$. Dans le cas d'un (petit) nombre fini de particules, englobées largement par $\mathcal{V}$ on parlera de conditions limites « à l'infini ». On impose dans ce cas que la vitesse du fluide $\vec{v}(\vec{r})$ tende à l'infini vers le champ de vitesse affine $\vec{v}^{\infty}(\vec{r})$ qui serait celui imposé par les parois en l'absence de particules. La pression à l'infini est alors également imposée à une valeur p^{∞}. On écrit dans ce cas, pour $\|\vec{r}\| \to \infty$:

$$p(\vec{r}) \to p^{\infty} \ , \quad \vec{v}(\vec{r}) \to \vec{v}^{\infty}(\vec{r}) \ . \tag{2.7}$$

Dans une véritable suspension, où les particules en nombre infini sont distribuées sur la totalité du domaine $\mathcal{V}$ et même au delà, les conditions limites que l'on peut imposer à l'infini sont plus subtiles et portent sur une moyenne de la vitesse sur la frontière $\partial\mathcal{V}$ [Durlofsky, Brady, 1989].

La trajectoire des centres des particules est solution des équations de Newton :

$$m_i \frac{\mathrm{d}\vec{v}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{f}_i \ , \quad I_i \frac{\mathrm{d}\vec{\omega}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{\Gamma}_i \ , \tag{2.8}$$

où les efforts $\{\vec{f}_i, \vec{\Gamma}_i\}$ sont la résultante de la contrainte exercée par le fluide sur l'interface fluide/particules, notée $\partial\mathcal{P}_i$. On se place donc dans le cas de figure où il n'y a aucun effort d'origine non hydrodynamique qui s'applique, et on a [2] :

$$\vec{f}_i = \int_{\partial\mathcal{P}_i} \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \ \mathrm{d}^2\vec{r} \ , \tag{2.9}$$

$$\vec{\Gamma}_i = \int_{\partial\mathcal{P}_i} (\vec{r} - \vec{r}_i) \times \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \ \mathrm{d}^2\vec{r} \ , \tag{2.10}$$

La contrainte locale est directement liée au tenseur local des taux de déformation par la loi de comportement Newtonien :

$$\vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) = -p(\vec{r})\,\vec{\vec{\mathrm{Id}}} + 2\,\eta_0\ \vec{\vec{E}}(\vec{r}), \quad \text{où} \quad \vec{\vec{E}}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\left[\vec{\nabla}\vec{v}(\vec{r}) + \vec{\nabla}\vec{v}^{\mathsf{T}}(\vec{r})\right] \ . \tag{2.11}$$

2.1.2 Régime Stokésien et régime inertiel lubrifié.

Approximation de Stokes.
Il est courant de négliger les termes inertiels dans l'équation de Navier-Stokes quand les échelles de vitesse mises en jeu sont suffisamment faibles pour que l'inertie soit instantanément amortie. Le nombre de Reynolds compare l'importance des termes inertiels (stationnaire comme instationnaire) par rapport au terme visqueux dans l'équation de Navier-Stokes. On parle de nombre de Reynolds particulaire Re_{p} quand il est construit comme ici avec la taille caractéristique a des particules :

$$\begin{aligned} \frac{|\rho(\vec{v}\ \vec{\nabla}) \cdot \vec{v}|}{|\eta_0\ \Delta\vec{v}|} &\approx \frac{\rho \times (\dot{\gamma}a) \times (1/a) \times (\dot{\gamma}a)}{\eta_0 \times (1/a^2) \times (\dot{\gamma}a)} = \frac{\rho\dot{\gamma}a^2}{\eta_0} = \mathrm{Re}_{\mathsf{p}} \ , \\ \frac{|\rho\partial\vec{v}/\partial t|}{|\eta_0\ \Delta\vec{v}|} &\approx \frac{\rho \times (\dot{\gamma}a) \times \dot{\gamma}}{\eta_0 \times (1/a^2) \times (\dot{\gamma}a)} = \mathrm{Re}_{\mathsf{p}} \ . \end{aligned} \tag{2.12}$$

2. Le couple calculé ici est le couple $\vec{\Gamma}_{i/G_i}$ par rapport au centre de masse G_i de la particule - qui est aussi son centre géométrique dans le cas d'une sphère homogène.
On peut calculer le couple par rapport à un autre point, par exemple l'origine O du repère : $\vec{\Gamma}_{i/O} = \int_{\partial\mathcal{P}_i} \vec{r} \times \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \ \mathrm{d}^2\vec{r} = \Gamma_{i/C_i} + \vec{r}_i \times \vec{f}_i$. On voit que la valeur du couple ne dépend du point de référence dans le cas de particules libres, pour lesquelles $\vec{f}_i = \vec{0}$.

On peut également construire un nombre de Stokes particulaire, qui compare l'importance relative de l'inertie des particules et des forces auxquelles elles sont soumises dans l'équation de Newton qui détermine leur dynamique.

$$\frac{|m_i \mathrm{d}\vec{v}_i/\mathrm{d}t|}{|\vec{f}_i|} \approx \frac{(\rho a^3) \times (\dot{\gamma} a) \times \dot{\gamma}}{(\eta_0 \dot{\gamma}) \times a^2} = \frac{\rho \dot{\gamma} a^2}{\eta_0} = \mathrm{St}_\mathsf{p} \ , \tag{2.13}$$

où l'ordre de grandeur des forces est estimé à l'aide de l'intégrale (2.9) comme la résultante d'une contrainte visqueuse d'échelle $\eta_0 \dot{\gamma}$ s'appliquant sur une surface d'échelle a^2. Dans le cas d'une suspension isodense diluée ou modérément concentrée, ce nombre se ramène au nombre de Reynolds du fluide :

$$\mathrm{Re}_\mathsf{p} = \mathrm{St}_\mathsf{p} \ . \tag{2.14}$$

Il y a alors un régime caractérisé par un taux de cisaillement moyen suffisamment faible, où l'inertie du fluide et des grains peut être négligée. Il faut pour cela que :

$$\mathrm{Re}_\mathsf{p}, \mathrm{St}_\mathsf{p} \ll 1 \ , \quad \text{c'est à dire :} \quad \dot{\gamma} \ll \frac{\eta_0}{\rho a^2} \ . \tag{2.15}$$

Dans ce régime dit de **suspension Stokésienne**, les grains sont libres et sans inertie, et les efforts totaux exercés sur eux sont nuls :

$$\vec{f}_i = \int_{\partial \mathcal{P}_i} \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \ \mathrm{d}^2\vec{r} = \vec{0} \ , \tag{2.16}$$

$$\vec{\Gamma}_i = \int_{\partial \mathcal{P}_i} (\vec{r} - \vec{r}_i) \times \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \cdot \vec{n} \ \mathrm{d}^2\vec{r} = \vec{0} \ . \tag{2.17}$$

Cela impose autant de conditions sur le champ de vitesses, qui est par ailleurs solution de l'équation de Stokes :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} &= 0 \ , \\ \eta_0 \ \Delta \vec{v} &= \vec{\nabla} p \ . \end{aligned} \tag{2.18}$$

Approximation de lubrification.

Dans une suspension dense où les particules sont très serrées, l'écoulement du fluide est fortement confiné sur une largeur de taille caractéristique e éventuellement très petite devant le rayon moyen a des grains. Plus précisément, on peut montrer [38] une relation de la forme :

$$\frac{e}{a} \propto \left[\frac{\phi}{\phi_c} \right]^{-1/3} - 1 \ , \tag{2.19}$$

où ϕ_c est la fraction volumique maximale atteignable dans la suspension. Ainsi quand ϕ s'approche de son maximum, les constrictions entre grains deviennent en moyenne très petites devant la taille des grains. Il faut alors estimer le nombre de Reynolds différemment.

Considérons l'écoulement axisymétrique du fluide dans le gap entre les parois de deux grains. Si l'échelle de longueur est a dans la direction radiale et $e \ll a$ dans la direction axiale, alors l'échelle de vitesse est $\dot{\gamma} a$ dans la direction radiale et $\dot{\gamma} e$ dans la direction axiale. On peut estimer l'importance relative

des termes inertiels et visqueux dans l'équation de Navier-Stokes, projetée dans les directions radiales et axiales. Dans la direction radiale, l'équation s'écrit les ordres de grandeur sont les suivants :

$$\rho\frac{\partial v_r}{\partial t} + \rho(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})v_r = -\frac{\partial p}{\partial r} + \eta_0(\Delta\vec{v})_r \ , \tag{2.20}$$

où l'on estime les échelles respectives du terme inertiel stationnaire et du terme visqueux en ne gardant que l'échelle dominante dans la somme de termes :

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})v_r &= \rho\left[v_r\frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z\frac{\partial v_r}{\partial z}\right] \\
&\approx \rho(\dot{\gamma}a)\frac{\dot{\gamma}a}{a} + \rho(\dot{\gamma}e)\frac{\dot{\gamma}a}{e} \approx \rho\dot{\gamma}^2 a \ , \quad \text{et :} \\
\eta_0(\Delta\vec{v})_r &= \eta_0\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial v_r}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} - \frac{v_r}{r^2}\right] \\
&\approx \eta_0\frac{1}{a}\frac{1}{a}a\frac{\dot{\gamma}a}{a} + \eta_0\frac{\dot{\gamma}a}{e^2} + \eta_0\frac{\dot{\gamma}a}{a^2} \approx \eta_0\frac{\dot{\gamma}a}{e^2} \ .
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Le nombre de Reynolds radial s'estime finalement :

$$\frac{|\rho(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})v_r|}{|\eta_0(\Delta\vec{v})_r|} \approx \frac{\rho\dot{\gamma}^2 a}{\eta_0(\dot{\gamma}a/e^2)} = \frac{\rho\dot{\gamma}e^2}{\eta_0} = \left(\frac{e}{a}\right)^2 \mathrm{Re}_\mathsf{p} \ . \tag{2.22}$$

De la même façon, écrivons l'équation axiale :

$$\rho\frac{\partial v_z}{\partial t} + \rho(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})v_z = -\frac{\partial p}{\partial z} + \eta_0(\Delta\vec{v})_z \ , \tag{2.23}$$

et estimons l'échelle du terme inertiel et du terme visqueux :

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})v_z &= \rho\left[v_r\frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z\frac{\partial v_z}{\partial z}\right] \\
&\approx \rho(\dot{\gamma}a)\frac{\dot{\gamma}e}{a} + \rho(\dot{\gamma}e)\frac{\dot{\gamma}e}{e} \approx \rho\dot{\gamma}^2 e \ , \quad \text{et :} \\
\eta_0(\Delta\vec{v})_z &= \eta_0\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial v_z}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2}\right] \\
&\approx \eta_0\frac{1}{a}\frac{1}{a}a\frac{\dot{\gamma}e}{a} + \eta_0\frac{\dot{\gamma}e}{e^2} \approx \eta_0\frac{\dot{\gamma}}{e} \ .
\end{aligned} \tag{2.24}$$

On obtient le même rapport d'échelle pour le nombre de Reynolds axial :

$$\frac{|\rho(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})v_z|}{|\eta_0(\Delta\vec{v})_z|} \approx \frac{\rho\dot{\gamma}^2 e}{\eta_0(\dot{\gamma}/e)} = \frac{\rho\dot{\gamma}e^2}{\eta_0} = \left(\frac{e}{a}\right)^2 \mathrm{Re}_\mathsf{p} \ . \tag{2.25}$$

On voit ainsi que l'effet des constrictions est de faire intervenir un facteur $(e/a)^2$ qui peut être très petit devant l'unité dans le nombre de Reynolds local. Dans ce cas, il est légitime de négliger l'inertie du fluide, même si le nombre de Reynolds particulaire n'est pas petit.

Notons que l'on a uniquement estimé l'ordre de grandeur du terme inertiel stationnaire dans l'équation de Navier-Stokes pour calculer un nombre de Reynolds local. On suppose assez naturellement que le terme inertiel instationnaire est du même ordre de grandeur que le terme inertiel stationnaire, mais il

faut en toute rigueur également l'estimer. Si τ_r et τ_z sont des échelles caractéristiques de variation temporelle de l'écoulement dans les direction radiale et axiale,

$$\rho \partial v_r / \partial t \sim \rho \dot{\gamma} a / \tau_r \ , \tag{2.26}$$
$$\rho \partial v_z / \partial t \sim \rho \dot{\gamma} e / \tau_z \ , \tag{2.27}$$

et il faudrait que $\tau_r \sim (a/e\dot{\gamma})$ et $\tau_z \sim (e/a\dot{\gamma})$ pour que l'on retrouve le Reynolds local (2.25). Ces échelles de temps sont a priori liées à la vitesse moyennes des particules dans la suspension, dont on a du mal à donner un ordre de grandeur différent de $1/\dot{\gamma}$. Il faudrait sans doute en toute rigueur conserver ces termes, et écrire une équation de Stokes instationnaire.
Une seconde remarque que l'on peut émettre est que si le nombre de Reynolds local (2.25) est pertinent pour décrire l'écoulement dans une constriction de taille caracteristique e, il est moins évident qu'il le soit également pour résoudre le champ de vitesse du fluide dans les pores intersticiels, de taille caractéristique a dans le cas de particules sphériques. On imagine néanmoins mal l'écoulement développer de la turbulence dans les pores, ni même s'écarter significativement d'un écoulement laminaire, et on conservera donc l'approximation de Stokes dans la totalité du domaine fluide.

À ces objections près, ces arguments nous conduisent à considérer pour une suspension dense, le régime dans lequel on ne néglige pas l'inertie des grains, et pour autant, en raison du confinement de l'écoulement, la dynamique du fluide est régie par l'équation de Stokes. On qualifiera de **suspension inertielle lubrifiée** une suspension qui se trouve dans ce régime.

2.1.3 Résolution formelle du problème de Stokes et résistance hydrodynamique.

Quel que soit le régime (stokesien ou inertiel lubrifié) dans lequel on se place, on utilise donc l'équation de Stokes (2.18) pour décrire l'écoulement du fluide intersticiel. Pour calculer la dynamique des grains, il faut être capable de déterminer la relation entre les efforts hydrodynamiques qui s'appliquent sur eux (forces et moments de ces forces) et leurs grandeurs cinématiques (qui se réduisent à leur vitesse de translation et de rotation, les particules étant considérées comme indéformables).

Problème de Stokes sur la vitesse non affine.

On peut reformuler le problème de Stokes sur $\vec{v}(\vec{r})$ comme un problème de Stokes sur la vitesse non affine $\vec{c}(\vec{r}) = \vec{v}(\vec{r}) - \vec{v}^{\infty}(\vec{r})$ (et sur la perturbation en pression $\tilde{p}(\vec{r}) = p(\vec{r}) - p^{\infty}$). En effet, la divergence et le laplacien de $\vec{v}^{\infty}(\vec{r})$ sont nuls sur tout le domaine $\mathcal{F}$, et donc $\vec{c}(\vec{r})$ est solution du même problème de Stokes que $\vec{v}(\vec{r})$ sur $\mathcal{F}$:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{c} &= 0 \ , \\ -\vec{\nabla}\tilde{p} + \eta_0 \, \Delta \vec{c} &= \vec{0} \ , \end{aligned} \tag{2.28}$$

Les conditions aux limites pour la vitesse non affine se déduisent immédiatement de celles sur la vitesse totale. Pour $\|\vec{r}\| \to \infty$, on a :

$$\vec{c}(\vec{r}) \to \vec{0} \quad , \ \tilde{p}(\vec{r}) \to 0 \ . \tag{2.29}$$

Pour $\vec{r} \in \partial \mathcal{P}_i$, la condition sur (2.6) $\vec{v}(\vec{r})$ combinée à la relation (2.2) impose pour $\vec{r} \in \partial \mathcal{P}_i$:

$$\vec{c}(\vec{r}) = \vec{v}_i - \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_i) + (\vec{\omega}_i - \vec{\omega}^{\infty}) \times (\vec{r} - \vec{r}_i) - \vec{\vec{E}}^{\infty} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_i) \ . \tag{2.30}$$

Formalisme de résistance hydrodynamique.

Compte tenu de la forme additive des conditions (2.30), la linéarité des équations de Stokes permet d'utiliser le principe de superposition pour exprimer la solution totale comme la somme des perturbations générées par chacune des conditions limites partielles suivantes pour chaque particule i :

$$\begin{aligned}
\vec{c}(\vec{r} \in \partial\mathcal{P}_i) &= \vec{v}_i - \vec{v}^\infty(\vec{r}_i) \ , \\
\vec{c}(\vec{r} \in \partial\mathcal{P}_i) &= (\vec{\omega}_i - \vec{\omega}^\infty) \times (\vec{r} - \vec{r}_i) \\
\vec{c}(\vec{r} \in \partial\mathcal{P}_i) &= -\vec{\vec{E}}^\infty \cdot (\vec{r} - \vec{r}_i) \ ,
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Le champ de vitesse varie linéairement avec chacune de ces conditions limites partielles, et il en est de même de son gradient. D'autre part, les efforts (force et couple) exercés sur une particule i sont donnés par l'intégration sur $\partial\mathcal{P}_i$ de la contrainte hydrodynamique elle même ou de son moment, fonctions linéaires du gradient des vitesses. La contrainte sur $\partial\mathcal{P}_i$ varie donc elle-même linéairement avec chacune des conditions limites partielles (2.31), et il en est de même pour la force $\vec{f}_i$ et le couple $\vec{\Gamma}_i$.

Ces dépendances linéaires sont formalisées par le concept de matrices de résistances hydrodynamiques. On écrit sans autre hypothèse [3] :

$$\begin{aligned}
\underline{\vec{f}} &= -\mathbf{R}_{fv} \cdot (\underline{\vec{v}} - \vec{v}^\infty(\underline{\vec{r}})) - \mathbf{R}_{f\omega} \cdot (\underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^\infty) + \mathbf{R}_{fE} \cdot \vec{\vec{E}}^\infty \ , \\
\underline{\vec{\Gamma}} &= -\mathbf{R}_{\Gamma v} \cdot (\underline{\vec{v}} - \vec{v}^\infty(\underline{\vec{r}})) - \mathbf{R}_{\Gamma\omega} \cdot (\underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^\infty) + \mathbf{R}_{\Gamma E} \cdot \vec{\vec{E}}^\infty \ ,
\end{aligned} \tag{2.32}$$

où les tenseurs de rang deux $\mathbf{R}_{fv}$, $\mathbf{R}_{f\omega}$, $\mathbf{R}_{\Gamma v}$ et $\mathbf{R}_{\Gamma\omega}$ couplent respectivement les forces aux vitesses et vitesses angulaires, et les couples aux vitesses et vitesses angulaires ; les tenseurs de rang trois $\mathbf{R}_{fE}$ et $\mathbf{R}_{\Gamma E}$ couplent quant à eux les forces et les couples au champ de déformation moyen. Lorsque l'on s'intéresse à une suspension stokésienne de particules libres et indéformables, les inconnues sont les vitesses et vitesses angulaires des particules, les forces et les couples étant nuls. Les vitesses et vitesses angulaires sont alors solutions d'un problème inverse :

$$\begin{bmatrix} \underline{\vec{v}} \\ \underline{\vec{\omega}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{v}^\infty(\underline{\vec{r}}) \\ \vec{\omega}^\infty \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{fv} & \mathbf{R}_{f\omega} \\ \mathbf{R}_{\Gamma v} & \mathbf{R}_{\Gamma\omega} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{fE} \cdot \vec{\vec{E}}^\infty \\ \mathbf{R}_{\Gamma E} \cdot \vec{\vec{E}}^\infty \end{bmatrix} \ . \tag{2.33}$$

Formellement, le calcul les coefficients des matrices de résistance hydrodynamique $\mathbf{R}_{xx}$ se fait par la résolution du problème de Stokes (2.28), assorti de ses conditions aux limites. Une fois ces coefficients connus, la matrice peut être inversée, de manière à obtenir les vitesses et vitesses angulaires des particules.

Résolution formelle du problème de Stokes.

À chaque instant, la résolution du problème de Stokes prédit une distribution de contrainte exercée par le fluide sur la surface des particules. Il se développe une densité surfacique de forces $\vec{f}(\vec{\xi})$ définie pour $\xi \in \partial\mathcal{P}$:

$$\vec{f}(\vec{\xi}) = \vec{\vec{\sigma}}(\vec{\xi}) \cdot \vec{n}(\vec{\xi}) \ . \tag{2.34}$$

3. On utilise le soulignement pour désigner un champ discret $\underline{X} = \{X_i\}_{i=1..N}$ qui prend ses valeurs sur les particules.

En vertu de la troisième loi de Newton, la distribution de forces surfacique correspond aussi aux forces exercées par les particules sur le fluide. Comme le problème de Stokes est un problème différentiel linéaire, on peut exprimer formellement la vitesse non affine $\vec{c}(\vec{r})$ en tout point de $\mathcal{V}$ [4] sous la forme d'une intégrale, utilisant là encore le principe de superposition :

$$\vec{c}(\vec{r}) = \int_{\vec{\xi}\in\partial\mathcal{P}} \vec{\vec{\mathcal{G}}}(\vec{r}-\vec{\xi}) \cdot [-\vec{f}(\vec{\xi})] \, \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) \ , \tag{2.35}$$

où le tenseur $\vec{\vec{\mathcal{G}}}(\vec{x}-\vec{y})$ est la fonction de Green du problème, c'est à dire la fonction permettant d'exprimer la solution fondamentale qui est la perturbation générée au point $\vec{x}$ par une force ponctuelle d'intensité $\vec{F}$ placée en $\vec{y}$, le tout dans le domaine $\mathcal{V}$ considéré [5]. Ce champ de vitesse particulier est appelé stokeslet [6] est alors donné par la simple contraction

$$\vec{c}(\vec{x}) = \vec{\vec{\mathcal{G}}}(\vec{x}-\vec{y}) \cdot \vec{F} \ . \tag{2.36}$$

Dans le cas d'une force ponctuelle positionnée à l'origine dans un espace infini complètement rempli de fluide, avec des conditions limites à l'infini nulles, la fonction de Green porte le nom de tenseur d'Oseen, noté $\vec{\vec{\mathcal{O}}}$. Le stokeslet correspondant se met sous la forme suivante [82, 65] :

$$\vec{c}(\vec{r}) = \vec{\vec{\mathcal{O}}}(\vec{r}) \cdot \vec{F} \ , \quad \text{où} \quad \vec{\vec{\mathcal{O}}}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi\eta_0}\left[\frac{\vec{\vec{\mathrm{Id}}}}{r} + \frac{\vec{r}\vec{r}}{r^3}\right] \ . \tag{2.37}$$

Dans le cas d'une suspension, la formulation intégrale (2.35) permet de passer d'un problème où l'inconnu est le champ 3D des vitesses $\vec{c}(\vec{r})$ à un problème où l'inconnu est le champ 2D des forces surfaciques $\vec{f}(\vec{\xi})$ qui s'appliquent à l'interface $\partial\mathcal{P}$. De fait, on peut écrire un développement dit multipolaire du champ de vitesse, en développant la fonction de Green. Pour $\vec{\xi} \in \partial P_i$, on écrit le développement de Taylor au voisinage du centre $\vec{r}_i$ de la particule :

$$\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{\xi}) = \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i) + (r_{i,\gamma}-\xi_\gamma)\frac{\partial\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i)}{\partial r_\gamma} + \cdots \tag{2.38}$$

En reportant ce développement dans la formulation intégrale (2.35) du champ de vitesse, on obtient :

$$\begin{aligned} c_\alpha(\vec{r}) &= -\int_{\vec{\xi}\in\partial\mathcal{P}} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{\xi}) f_\beta(\vec{\xi}) \, \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) \\ &= -\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i)\int_{\vec{\xi}\in\partial\mathcal{P}} f_\beta(\vec{\xi}) \, \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) - \frac{\partial\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i)}{\partial r_\gamma}\int_{\vec{\xi}\in\partial\mathcal{P}} (r_{i,\gamma}-\xi_\gamma) f_\beta(\vec{\xi}) \, \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) - \cdots \end{aligned} \tag{2.39}$$

4. En réalité on ne résout pas tout à fait (2.28), qui est défini sur $\mathcal{F}$, mais le même problème dans tout $\mathcal{V}$, avec les mêmes conditions limites à l'infini. On a remplacé les conditions de non pénétration sur $\partial\mathcal{P}$ par l'existence de sources (2.34), dont la valeur - inconnue - est telle que les lignes de courant solutions ne traversent pas $\partial\mathcal{P}$. Ainsi, la restriction de cette solution trouvée sur $\mathcal{V}$ à $\mathcal{F}$ est bien solution de (2.28) avec les bonnes conditions limites sur $\partial\mathcal{P}$.

5. On parle aussi de propagateur, car cette fonction décrit la façon dont les effets d'une force ponctuelle sont propagés entre deux points de $\mathcal{V}$ par l'équation de Stokes.

6. Il faut noter que le stokeslet est défini en toute rigueur pour des conditions aux limites données à l'infini.

On appelle moments d'ordre n de la distribution des force surfaciques $\vec{f}(\vec{\xi})$ les intégrales en préfacteur des dérivées $n-$ièmes de la fonction de Green dans le développement. On appelle aussi monopôle le moment d'ordre 0, dipôle les moments d'ordre 1, puis on parle de quadrupôle, d'octupôle, etc...
Dans le cas d'une inclusion rigide quelconque, l'égalité n'est exacte que si l'on poursuit le développement à l'infini. Dans ce cas, la connaissance de la totalité des moments de la distribution des $\vec{f}(\vec{\xi})$ est formellement équivalente à la connaissance de la distribution elle-même, et on peut reconstruire complètement le champ de vitesse. Dans le cas d'une sphère rigide, les moments au delà de l'octupôle sont nuls pour des raisons géométriques [82].
En général, une formulation approximative du champ de vitesse est retenue en tronquant le développement à un ordre arbitraire rendant les calculs tractables. Une telle troncature revient à regarder chaque particule de loin, c'est à dire à négliger les interactions hydrodynamique de champ proche entre les particules, i.e. les interactions de lubrification. Pour que celles-ci soient inclues, il faut soit conserver la totalité du développement, soit les rajouter à la main dans les expressions.

Bien que cette distribution des tractions soit inconnue, elle est contrainte par par l'intensité fixée des forces et couples exercés sur les particules (ils doivent valoir $\vec{0}$ dans le cas de particules libres, ou bien sont donnés par la conservation de la quantité de mouvement dans le cas de particules inertielles) :

$$\int_{\partial\mathcal{P}_i} \vec{f}(\vec{\xi})\ \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) = \vec{f}_i\ ,$$
$$\int_{\partial\mathcal{P}_i} (\vec{\xi}-\vec{r}_i)\times\vec{f}(\vec{\xi})\ \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) = \vec{\Gamma}_i\ . \tag{2.40}$$

La force totale $\vec{f}_i$ n'est rien d'autre que le monopôle. On note le dipôle (calculé par rapport au centre de la particule i) $\vec{\vec{D}}_{i/\vec{r}_i}$. On introduit sa partie symétrique, notée $\vec{\vec{S}}_i$ et appelée stresslet, et sa partie antisymétrique $\vec{\vec{A}}_i$ qui n'est en fait rien d'autre que le couple total :

$$D_{i,\alpha\beta} = \int_{\vec{\xi}\in\partial\mathcal{P}_i} (r_{i,\beta}-\xi_\beta) f_\alpha(\vec{\xi})\ \mathrm{d}^2S(\vec{\xi})\ , \tag{2.41}$$
$$\begin{aligned} S_{i,\alpha\beta} &= \frac{1}{2}\left(M_{i,\alpha\beta}+M_{i,\beta\alpha}\right) \\ &= \frac{1}{2}\int_{\partial\mathcal{P}_i} [\sigma_{\alpha\gamma}(r_{i,\beta}-\xi_\beta)+\sigma_{\beta\gamma}(r_{i,\alpha}-\xi_\alpha)] n_\gamma(\vec{\xi})\ \mathrm{d}^2S(\vec{\xi})\ , \end{aligned} \tag{2.42}$$
$$\begin{aligned} A_{i,\alpha\beta} &= \frac{1}{2}\left(M_{i,\alpha\beta}-M_{i,\beta\alpha}\right) \\ &= \frac{1}{2}\int_{\partial\mathcal{P}_i} [\sigma_{\alpha\gamma}(r_{i,\beta}-\xi_\beta)-\sigma_{\beta\gamma}(r_{i,\alpha}-\xi_\alpha)] n_\gamma(\vec{\xi})\ \mathrm{d}^2S(\vec{\xi}) = -\frac{1}{2}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\Gamma_{\gamma,i/\vec{r}_i}\ , \end{aligned} \tag{2.43}$$

où $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ est le tenseur complètement antisymétrique de rang 3. Les premiers termes du développement multipolaire du champ de vitesse dans le fluide s'écrivent donc en fonction des forces et des couples des particules :

$$c_\alpha(\vec{r}) = -\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i) f_{i,\beta} - \frac{\partial\mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i)}{\partial r_\gamma}\left[\frac{1}{2}\varepsilon_{\beta\gamma\delta}\Gamma_{i,\delta} - S_{i,\beta\gamma}\right] - \cdots \tag{2.44}$$

Le développement en moments de la distribution des forces surfaciques illustre comment les contraintes que constituent la valeur prescrite des forces et couples particulaires s'insèrent dans le problème. Elles sont compatibles avec l'expression (2.35) car elles ne fixent qu'une partie des moments de la distribution

des tractions, c'est à dire les premiers termes du développement (2.44). La partie symétrique du dipôle, ainsi que tous les multipôles d'ordre supérieur de la distribution des forces surfaciques sont libres et peuvent s'adapter de manière à ce que le champ de vitesse soit bien solution du problème de Stokes.

Le stresslet appliqué aux particules est une grandeur fondamentale en rhéologie des suspensions car elle intervient dans l'expression de la contrainte développée au sein de l'écoulement (voir section 2.3.1). Les arguments de linéarité permettant d'exprimer les forces et couples exercés sur les particules sont également valables pour les stresslets. On a donc en toute généralité une relation matricielle :

$$\underline{\vec{\vec{S}}} = -\mathbf{R}_{Sv} \cdot \left(\underline{\vec{v}} - \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}})\right) - \mathbf{R}_{S\omega} \cdot \left(\underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^{\infty}\right) + \mathbf{R}_{SE} \cdot \vec{\vec{E}}^{\infty} \ , \tag{2.45}$$

où les tenseurs de rang trois $\mathbf{R}_{Sv}$ et $\mathbf{R}_{S\omega}$ couplent respectivement les forces et les couples au champ de déformation, et les stresslets aux vitesses et vitesses angulaires, et le tenseur de rang quatre $\mathbf{R}_{SE}$ couple les stresslet au champ de déformation moyen imposé. Le système linéaire constitué des relations (2.33) et (2.45) peut être noté de façon condensé :

$$\begin{bmatrix} \underline{\vec{f}} \\ \underline{\vec{\vec{\Gamma}}} \\ \underline{\vec{\vec{S}}} \end{bmatrix} = -\mathbf{R} \begin{bmatrix} \underline{\vec{v}} - \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}}) \\ \underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^{\infty} \\ -\vec{\vec{E}}^{\infty} \end{bmatrix} \ , \quad \text{où} \quad \mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{fv} & \mathbf{R}_{f\omega} & \mathbf{R}_{fE} \\ \mathbf{R}_{\Gamma v} & \mathbf{R}_{\Gamma\omega} & \mathbf{R}_{\Gamma E} \\ \mathbf{R}_{Sv} & \mathbf{R}_{S\omega} & \mathbf{R}_{SE} \end{bmatrix} \tag{2.46}$$

est appelée grande matrice de résistance hydrodynamique. Le problème peut aussi s'écrire en terme de mobilité :

$$\begin{bmatrix} \underline{\vec{v}} - \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}}) \\ \underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^{\infty} \\ -\vec{\vec{E}}^{\infty} \end{bmatrix} = -\mathbf{M} \begin{bmatrix} \underline{\vec{f}} \\ \underline{\vec{\vec{\Gamma}}} \\ \underline{\vec{\vec{S}}} \end{bmatrix} \ , \quad \text{où} \quad \mathbf{M} = \mathbf{R}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{vf} & \mathbf{M}_{\omega f} & \mathbf{M}_{Ef} \\ \mathbf{M}_{v\Gamma} & \mathbf{M}_{\omega\Gamma} & \mathbf{M}_{E\Gamma} \\ \mathbf{M}_{vS} & \mathbf{M}_{\omega S} & \mathbf{M}_{ES} \end{bmatrix} \tag{2.47}$$

est la grande matrice de mobilité hydrodynamique.

2.2 Problèmes à un ou deux corps.

On ne peut pas calculer en toute généralité la matrice de résistance associée au problème hydrodynamique complet de l'écoulement d'une suspension comprenant $N \gg 1$ particules. Dans cette section, nous revenons rapidement sur deux cas simples qui sont à l'origine du calcul théorique de la viscosité d'une suspension dilué : le problème à un corps et le problème à deux corps.

2.2.1 Une particule dans un champ de cisaillement simple.

Pour calculer la matrice de résistance hydrodynamique associée à l'écoulement d'un fluide de viscosité η_0 autour d'une particule unique de rayon a, on peut se demander quels sont les efforts qui sont exercés sur elle lorsqu'elle est maintenue immobile en un point $\vec{r}_0$, dans le champ de cisaillement simple défini par l'équation (2.1), assorti d'une pression p^{∞} à l'infini. Au voisinage de la particule, le champ de cisaillement simple imposé s'écrit en vertu de la relation affine (2.2) comme la superposition d'un champ de translation à la vitesse $\vec{v}^{\infty}(\vec{r}_0)$, d'un champ de rotation à la vitesse angulaire $\vec{\omega}^{\infty}$ et d'un champ de déformation décrit par le tenseur $\vec{\vec{E}}^{\infty}$:

$$\vec{v}^{\infty}(\vec{r}) = \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_0) + \vec{\omega}^{\infty} \times (\vec{r} - \vec{r}_0) + \vec{\vec{E}}^{\infty} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0) \tag{2.48}$$

La résolution de ce problème est classique ([13, 65]), on ne rappele que la méthode et le résultat. On commence par résoudre les trois problèmes de Stokes correspondant aux trois écoulements (translation, rotation, déformation) imposés à l'infini, assortis des conditions aux limites sur la vitesse à la surface de la particule. La résolution se fait en décomposant la perturbation en vitesse $\vec{c}(\vec{r}) = \vec{v}(\vec{r}) - \vec{v}^{\infty}(\vec{r})$ et en pression $\tilde{p}(\vec{r}) = p(\vec{r}) - p^{\infty}(\vec{r})$ sur la famille de fonctions tensorielles générée par la fonction $1/r$ et ses gradients, qui permettent de construire des fonctions harmoniques avec les bonnes conditions de décroissance à l'infini . Des considérations de symétrie permettent de sélectionner lesquelles de ces fonctions apparaissent dans la solution finale, qui en raison de la linéarité de l'équation de Stokes s'écrit comme la somme des solutions trouvées pour chacun des écoulements. Il faut ensuite calculer le tenseur local des déformations en prenant les gradients du champ de vitesse, puis calculer la contrainte. La force et le couple auxquels la particule est soumise s'obtiennent à partir de la contrainte locale en calculant les intégrales (2.9) et (2.10), ainsi que le stresslet avec (2.42). On obtient le résultat classique de la traînée de Stokes pour une sphère dans un écoulement affine :

$$\vec{f} = 6\pi\eta_0 a\ \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_0)\ , \tag{2.49}$$

$$\vec{\Gamma} = 8\pi\eta_0 a^3 \vec{\omega}^{\infty}\ , \tag{2.50}$$

$$\vec{\vec{S}} = \frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3 \vec{\vec{E}}^{\infty}\ . \tag{2.51}$$

On en déduit les coefficients de la matrice de résistance hydrodynamique à un corps $\mathbf{R}_{1\mathrm{B}}$ (1B pour *one body*) :

$$\begin{aligned} R^{1\mathrm{B}}_{fv} &= 6\pi\eta_0 a\ , & R^{1\mathrm{B}}_{f\omega} &= R^{1\mathrm{B}}_{\Gamma v} = 0\ , \\ R^{1\mathrm{B}}_{\Gamma\omega} &= 8\pi\eta_0 a^3\ , & R^{1\mathrm{B}}_{fE} &= R^{1\mathrm{B}}_{\Gamma E} = 0\ , \\ R^{1\mathrm{B}}_{SE} &= \frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3\ , & R^{1\mathrm{B}}_{Sv} &= R^{1\mathrm{B}}_{S\omega} = 0\ . \end{aligned} \tag{2.52}$$

La matrice de résistance hydrodynamique à un corps $\mathbf{R}_{1\mathrm{B}}$ s'écrit finalement très simplement :

$$\mathbf{R}_{1\mathrm{B}} = \begin{bmatrix} 6\pi\eta_0 a & 0 & 0 \\ 0 & 8\pi\eta_0 a^3 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3 \end{bmatrix}\ , \tag{2.53}$$

et la matrice de mobilité correspondante $\mathbf{M}_{1\mathrm{B}}$ s'en déduit par inversion.

2.2.2 Deux particules dans un champ de cisaillement simple.

Considérons maintenant deux grains i et j. On note $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ le vecteur position relative de la paire ij ($\vec{r}_{ij}$ est le vecteur qui part du centre de i et qui arrive au centre de j), $r_{ij} = \|\vec{r}_{ij}\|$ la distance centre à centre et $h_{ij} = r_{ij} - a_i - a_j$ le gap surface à surface entre les deux particules. On note encore $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$ la vitesse relative des deux particules ($\vec{v}_{ij}$ est la vitesse de j dans un référentiel centré en permanence sur i) et $\vec{\omega}_{ij} = \vec{\omega}_j - \vec{\omega}_i$ la différence des vitesses de rotation.

Si on se place dans le formalisme général des paragraphes précédents, on comprend que les efforts auxquels sont soumis les deux particules sont la résultante des tractions exercées par le fluide à leur surface, en raison de la perturbation de son champ de vitesse due à la seule présence des deux particules. Dans le problème à deux corps, il est tentant de ne plus penser à la médiation du fluide, et de dire que les efforts sont directement exercés par chaque particule sur l'autre. On écrit alors pour les forces :

$$\vec{f}_i = \vec{f}_{j\to i} = \vec{f}_{ij}\ , \quad \vec{f}_j = \vec{f}_{i\to j} = \vec{f}_{ji}, \tag{2.54}$$

et de même pour les couples :

$$\vec{\Gamma}_i = \vec{\Gamma}_{j\to i} = \vec{\Gamma}_{ij} \ , \quad \vec{\Gamma}_j = \vec{\Gamma}_{i\to j} = \vec{\Gamma}_{ji}, \tag{2.55}$$

où $\vec{f}_{ij}$ dénote donc par convention la force exercée par la particule j sur la particule i par le truchement du fluide, et $\vec{f}_{ji}$ la force opposée, exercée par i sur j.
On peut toujours se placer dans le référentiel $\mathcal{R}'$ centré sur le centre géométrique du segment reliant les centres des deux particules, et se déplaçant à la vitesse $(\vec{v}_i + \vec{v}_j)/2$: on se trouve dans une situation où les vitesses des particules et tout le champ de vitesse dans le fluide présentent une symétrie centrale $\vec{v}_{\mathcal{R}'}(\vec{r}) = -\vec{v}_{\mathcal{R}'}(-\vec{r})$. Cette symétrie se retrouve dans le tenseur des taux de déformation $\vec{\vec{E}}_{\mathcal{R}'}(\vec{r}) = \vec{\vec{E}}_{\mathcal{R}'}(-\vec{r})$, donc dans la partie déviatorique de la contrainte, et finalement dans la distribution des tractions à la surface des grains i et j qui est égale en intensité et opposée en direction, pour deux points diamétralement opposés à la surface de chacun des grains :

$$\vec{f}(\vec{r} \in \mathcal{P}_i) = -\vec{f}(-\vec{r} \in \mathcal{P}_j) \ . \tag{2.56}$$

La conséquence de cela après intégration sur la surface des grains est que les forces exercées sur les particules i et j sont égales en intensité et opposées en direction, tandis que les couples sont égaux en intensité et en direction :

$$\vec{f}_{ij} = -\vec{f}_{ji} \ , \quad \vec{\Gamma}_{ij} = \vec{\Gamma}_{ji} \ . \tag{2.57}$$

On peut ici discuter le concept de forces hydrodynamiques exercée par une particule sur une autre, que ça soit dans le problème à deux corps, ou plus généralement dans une suspension comprenant de nombreuses particules. Une particule seule suivant un mouvement prescrit perturbe un écoulement de cisaillement simple par sa seule présence et indéformabilité, ce qui se traduit par une force qu'elle subit. Cette force n'est pas nulle car elle doit équilibrer l'inertie de la particule, et même si celle-ci est libre et immobile, les moments de la distribution de force à sa surface ne sont pas tous nuls. Une particule seule dans un fluide en écoulement subit des efforts, sans qu'il y ait d'autres particules pour « exercer » ces efforts sur elle !
Dans le problème à deux corps, il doit donc également y avoir une partie des efforts subis par chaque particule qui est générée par sa seule présence dans le fluide. Bien entendu, le problème est compliqué par l'existence d'efforts générés par la présence de sa voisine, qui elle même ressent les efforts exercés par le fluide perturbé par sa propre présence et par la présence de la première particule. On appelle au final forces hydrodynamiques $\vec{f}_{ij}$ et $\vec{f}_{ji}$ la résultante de ces couplages multiples. On ne peut néanmoins pas vraiment considérer ces forces comme rigoureusement « exercées » par chaque particule sur sa voisine, mais bien les voir comme la conséquence de la résolution d'une équation continue sur le champ des vitesses dans la totalité du domaine fluide.

Il n'existe pas de solutions analytique exacte pour calculer la dynamique d'une paire de particules immergées dans un écoulement affine. Des développements asymptotiques sont en revanche possibles, dans les deux cas limites où les particules sont très éloignées l'une de l'autre, ou au contraire très proches. Batchelor et Green montrent que l'on peut écrire la vitesse relative $\vec{v}_{ij}$ des deux particules, ainsi que leur vitesses angulaires respectives $\vec{\omega}_k$, sous la forme suivante [14] :

$$\begin{aligned} v_{ij,\alpha} &= v^\infty_\alpha(\vec{r}_j) - v^\infty_\alpha(\vec{r}_i) - \left[A\frac{r_{ij,\alpha}r_{ij,\beta}}{r_{ij}^2} + B\left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{r_{ij,\alpha}r_{ij,\beta}}{r_{ij}^2}\right)\right] E^\infty_{\beta\gamma} r_{ij,\gamma} \ , \\ \omega_{k,\alpha} &= \omega^\infty_\alpha + C_k \ \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \ E^\infty_{\gamma\delta} \frac{r_{ij,\alpha}r_{ij,\beta}}{r_{ij}^2} \ , \end{aligned} \tag{2.58}$$

où $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ est le tenseur complètement antisymétrique de rang 3, et les fonctions A, B et C_k sont des fonctions de la distance de séparation r_{ij} et des rayons a_i et a_j uniquement, et s'expriment à partir des coefficients de $\mathbf{M}_{2\mathrm{B},ij}$. Connaissant le champ de vitesse, le stresslet exercé sur une particule $k = i$ ou j peut aussi être calculé. Batchelor et Green le mettent sous la forme :

$$\begin{aligned} S_{k,\alpha\beta} = \frac{20}{3}\pi\eta_0 a_k^3 \Bigg[& (1+K_k)E^{\infty}_{\alpha\beta} \\ & + L_k\ E^{\infty}_{\gamma\delta}\left(\frac{r_{ij,\alpha}r_{ij,\gamma}\delta_{\beta\delta} + r_{ij,\beta}r_{ij,\gamma}\delta_{\alpha\delta}}{r_{ij}^2} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta}\frac{r_{ij,\gamma}r_{ij,\delta}}{r_{ij}^2}\right) \\ & + M_k\ E^{\infty}_{\gamma\delta}\left(\frac{r_{ij,\alpha}r_{ij,\beta}}{r_{ij}^2} - \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}\right)\frac{r_{ij,\gamma}r_{ij,\delta}}{r_{ij}^2}\Bigg] , \end{aligned} \tag{2.59}$$

où là encore, les fonctions K_k, L_k et M_k ne dépendent que de la distance de séparation r_{ij} et des rayons a_i et a_j, et s'expriment à partir des coefficients de $\mathbf{M}_{2\mathrm{B},ij}$.

Particules éloignées : Méthode des réflexions

Cette méthode de calcul des coefficients de la matrice de résistance hydrodynamique associée à une paire est basée sur un raisonnement itératif, qui exploite l'idée d'un développement des efforts exercés sur les deux particules en une addition de couplages mutuels. La méthode est basée sur l'idée selon laquelle le champ de vitesse au voisinage d'un grain est donné par la somme du champ de vitesse non perturbé et des perturbations dues à la présence de chaque particule. Le raisonnement est fondamentalement itératif car ces perturbations sont elles-mêmes à l'origne de corrections à apporter à la postition et à la vitesse de toutes les particules, lesquelles entraînent à leur tour une correction d'ordre supérieur aux perturbations initiales du champ de vitesse du fluide. Le raisonnement peut être poussé indéfiniment en considérant une infinité de corrections successives correspondant aux couplages mutuels entre les positions et vitesses des particules, et le champ de vitesse dans le fluide qui les porte ([82, 65]).

La méthode des réflexions s'exprime naturellement selon un formalisme de mobilité. On considère que les particules i et j sont soumises à des forces $(\vec{f}_k, \vec{\Gamma}_k)$, $(k = i$ ou $j)$ et on calcule leur vitesse. La vitesse du fluide est

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}^{\infty}(\vec{r}) + \vec{c}_i(\vec{r}) + \vec{c}_j(\vec{r}) , \tag{2.60}$$

où $\vec{c}_k(\vec{r})$ est la perturbation en vitesse induite par la présence de la particule $k = i$ ou j (c'est à dire le respect des conditions aux limites de non pénétration et non glissement sur $\partial\mathcal{P}_k$). De là, on procède par itérations successives. L'itération zéro consiste à supposer que les particules sont assez éloignées pour être considérées comme seules. La matrice de mobilité du problème à un corps permet de calculer l'approximation zéro $(\vec{v}_k^{(0)}, \vec{\omega}_k^{(0)})$ des vitesses des deux particules :

$$\begin{bmatrix} \vec{v}_k^{(0)} - \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_k) \\ \vec{\omega}_k^{(0)} - \vec{\omega}^{\infty} \\ -\vec{E}^{\infty} \end{bmatrix} = -\mathbf{M}_{1\mathrm{B},k} \begin{bmatrix} \vec{f}_k \\ \vec{\Gamma}_k \\ \vec{\vec{S}}_k \end{bmatrix} , \tag{2.61}$$

où $\mathbf{M}_{1\mathrm{B},k} = \mathbf{R}_{1\mathrm{B},k}^{-1}$ est la matrice de mobilité à un corps construite sur la particule $k = i$ ou j. Connaissant ces vitesses, on peut calculer à l'ordre zéro les perturbations $\vec{c}_k^{(0)}(\vec{r})$ causées par chaque particule dans la vitesse du fluide. On utilise pour cela le champ de vitesse connu du problème à un

corps. Cela conclut le calcul à l'ordre zéro (qui consiste essentiellement à remplacer le problème à deux corps par la somme de deux problèmes à un corps).

La première itération va intégrer le premier ordre de perturbations du champ de vitesse ressenti par chaque particule et généré par sa voisine. Pour tenir compte de cette perturbation, on considère que chaque particule n'est plus immergée dans l'écoulement non perturbé $\vec{v}^{\infty}(\vec{r})$, mais dans l'écoulement perturbé à l'ordre zéro :

$$\vec{v}^{(0)}(\vec{r}) = \vec{v}^{\infty}(\vec{r}) + \vec{c}_i^{(0)}(\vec{r}) + \vec{c}_j^{(0)}(\vec{r}) \ . \tag{2.62}$$

On veut calculer les vitesses des particules immergées dans cet écoulement, vitesses qui constitueront l'approximation d'ordre un de la vraie solution, notées $(\vec{v}_k^{(1)}, \vec{\omega}_k^{(1)})$. Malheureusement, l'écoulement (2.62) n'est pas affine, et il faut utilise la loi de de Faxén [7] :

$$\vec{v}_k^{(1)} = -\frac{\vec{f}_k}{6\pi\eta_0 a_k} + [1 + \frac{a_k^2}{6}\Delta]\vec{v}^{(0)}(\vec{r}_k) \ , \tag{2.63}$$

$$\vec{\omega}_k^{(1)} = -\frac{\vec{\Gamma}_k}{8\pi\eta_0 a_k^3} + \frac{1}{2}\vec{\nabla} \times \vec{v}^{(0)}(\vec{r}_k) \ . \tag{2.64}$$

Connaissant la vitesse des particules à l'ordre 1, on en déduit comme pour l'itération zéro les perturbations $\vec{c}_k^{(1)}(\vec{r})$ causées par chaque particule dans la vitesse du fluide, à l'ordre 1.

Ces itérations successives de l'algorithme de calcul des vitesses des particules sont répétables autant que voulu. Chacune de ces itérations rajoute un ordre de précision aux coefficients obtenus pour la matrice de mobilité. Il s'avère que l'on ne sait pousser le développement à l'infin. Ainsi, la matrice de mobilité obtenue est n'est calculable qu'à un certain ordre de précision en $1/r_{ij}$, et est d'autant plus valable que les particules sont éloignées. On note $\mathbf{M}^{\infty}_{2\mathrm{B},ij}$, la matrice de mobilité obtenue par ce développement, et $\mathbf{R}^{\infty}_{2\mathrm{B},ij}$ la matrice de résistance qui s'en déduit par inversion.
Dans [14] Batchelor et Green estiment, les fonctions A, B et C_k de (2.58) et K_k, L_k et M_k de (2.59) à l'ordre $o(1/r_{ij}^6)$ lorsque les grains sont éloignés. Les coefficients de la matrice de résistance obtenue pour des particules éloignées par des développements de cette nature sont explicités par Jeffrey et Onishi dans [75].

Particules proches : Lubrification

La configuration où deux particules sont très proches est inaccessible en pratique par la méthode des réflexions, car le développement qu'elle fournit converge assez lentement vers la solution totale. Il faut faire appel à la théorie de Reynolds de la lubrification pour estimer la matrice de résistance hydrodynamique dans ce cas. Batchelor et Green calculent les fonctions A, B et C_k, K_k, L_k et M_k dans cette limite, leur permettant d'estimer la trajectoire et le stresslet pour deux particules très proches [14].

Toujours dans la limite des gaps surface-surface fins, Cox montre que pour des particules de forme quelconque mais suffisamment régulières pour ne se toucher qu'en un point à la limite de gap nul avec un rayon de courbure fini, les efforts exercés sont proportionnels à l'ordre $\mathcal{O}(h_{ij})$ aux vitesses

7. La formule de Faxén est une généralisation de la formule de Stokes (2.61) à l'immersion d'une sphère dans un écoulement quelconque.

relatives $\{\vec{v}_{ij}, \vec{\omega}_{ij}\}$ imposées, ce qui introduit une contrainte supplémentaire sur la forme de la matrice de résistance hydrodynamique générale [40] :

$$\begin{bmatrix} \vec{f}_{ij} \\ \vec{\Gamma}_{ij} \end{bmatrix} = -\tilde{\mathbf{R}}^{\mathsf{lub}}_{2\mathsf{B},ij} \begin{bmatrix} \vec{\omega}_{ij} \\ \vec{v}_{ij} \end{bmatrix} + \mathcal{O}(h_{ij}) \ , \tag{2.65}$$

où la tilde indique une formulation en résistance qui s'applique pas aux virtesses absolues, mais aux vitesses relatives (leur différence). On définit une base locale directe $(\vec{n}_{ij}, \vec{t}_{ij}, \vec{t}'_{ij})$ où $\vec{n}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ est le vecteur unitaire normal, orienté du centre de i vers le centre de j.On décompose les vitesses relatives $\{\vec{v}_{ij}, \vec{\omega}_{ij}\}$, ainsi que les efforts exercés $\{\vec{f}_{ij}, \vec{\Gamma}_{ij}\}$ sur l'axe normal et les deux axes tangentiels :

$$\begin{aligned} \vec{v}_{ij} &= v^N_{ij}\ \vec{n}_{ij} + v^T_{ij}\ \vec{t}_{ij} + v^{T'}_{ij}\ \vec{t}'_{ij} \ , \qquad & \vec{\omega}_{ij} &= \omega^N_{ij}\ \vec{n}_{ij} + \omega^T_{ij}\ \vec{t}_{ij} + \omega^{T'}_{ij}\ \vec{t}'_{ij} \ , \\ \vec{f}_{ij} &= f^{\mathsf{N}}_{ij}\ \vec{n}_{ij} + f^{\mathsf{T}}_{ij}\ \vec{t}_{ij} + f^{\mathsf{T'}}_{ij}\ \vec{t}'_{ij} \ , \quad & \vec{\Gamma}_{ij} &= \Gamma^{\mathsf{N}}_{ij}\ \vec{n}_{ij} + \Gamma^{\mathsf{T}}_{ij}\ \vec{t}_{ij} + \Gamma^{\mathsf{T'}}_{ij}\ \vec{t}'_{ij} \ . \end{aligned} \tag{2.66}$$

La matrice de résistance hydrodynamique qui apparaît dans (2.65) est donc a priori une matrice 6×6 qui couple les 6 composantes des efforts aux 6 composantes des vitesses. Dans le cas d'une monocouche de particules (qui est le cas que la simulation $2D$ peut représenter), seules deux composantes de la vitesse et une composante de la vitesse de rotation sont pertinentes, de sorte que l'on ne conserve qu'une sous-matrice 3×3 de la matrice de résistance. On écrit alors :

$$\begin{bmatrix} f^N_{ij} \\ f^T_{ij} \\ \Gamma^{T'}_{ij} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} R^{\mathsf{lub}}_{NN} & R^{\mathsf{lub}}_{NT} & R^{\mathsf{lub}}_{N\omega} \\ R^{\mathsf{lub}}_{NT} & R^{\mathsf{lub}}_{TT} & R^{\mathsf{lub}}_{T\omega} \\ R^{\mathsf{lub}}_{N\omega} & R^{\mathsf{lub}}_{T\omega} & R^{\mathsf{lub}}_{\omega\omega} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v^N_{ij} \\ v^T_{ij} \\ \omega^{T'}_{ij} \end{bmatrix} \ . \tag{2.67}$$

Dans le calcul de Cox, le champ de vitesse dans fluide intersticiel est développé en puissance du gap, et une équation de Reynolds est dérivée puis résolue ordre par ordre pour chacun des déplacements relatifs élémentaires possibles (rapprochement frontal, rapprochement tangentiel, roulement, rotation axiale). Le tenseur des contraintes est calculé jusqu'à un certain ordre en h_{ij}, et les forces et couples exercés sur les parois des particules sont dérivées. Dans cette limite où $h_{ij} \to 0$ (en pratique pour $h_{ij} \ll a_i, a_j$), les seuls coefficients qui divergent sont ceux qui couplent vitesse et force normale, vitesse et force tangentielle, et rotation et force tangentielle. Ils s'écrivent [8] [40] :

$$\begin{aligned} R^{\mathsf{lub}}_{NN} &= -6\pi\eta_0 \frac{a_i^2 a_j^2}{(a_i+a_j)^2} \frac{1}{h_{ij}} + \mathcal{O}(\ln h_{ij}) \ , \\ R^{\mathsf{lub}}_{TT} &= \quad 2\pi\eta_0 \frac{a_i a_j}{a_i+a_j} \left[\frac{3(a_i-a_j)^2}{5(a_i+a_j)^2} + 1 \right] \ln h_{ij} \ , \\ R^{\mathsf{lub}}_{T\omega} &= -\frac{12\pi}{5} \eta_0 \frac{a_i^2 a_j^2}{(a_i+a_j)^2} \frac{a_i - a_j}{a_i + a_j} \ln h_{ij} \ . \end{aligned} \tag{2.68}$$

On notera que les coefficients R^{lub}_{NN} et R^{lub}_{TT} sont invariants par permutation de a_i et a_j, tandis que $R^{\mathsf{lub}}_{T\omega}$ change de signe quand les rayons des particules sont échangés. Cela est une conséquence des relations de symétrie (2.57), où il y a un changement de signe pour les forces mais pas pour les couples. Les autres coefficients ne sont pas singuliers, et sont sous-dominants pour des particules suffisamment rapprochées.

8. Le signe diffère des expressions de [Cox, 1974] car les efforts de lubrification y sont exprimés en fonction de la vitesse de la particule j dans le référentiel de i, à savoir $\vec{v}_{i/j} = \vec{v}_i - \vec{v}_j = -\vec{v}_{ij}$.

La formulation (2.67) exprime la résistance hydrodynamique qui s'applique sur les vitesses relatives des particules, projetées sur les axes de la base locale $(\vec{n}_{ij}, \vec{t}_{ij}, \vec{t}'_{ij})$. Les opérations qui permettent de calculer les vitesses relatives à partir des vitesses absolue des particules sont toutes linéaires (ce sont des différences et des projections), on peut donc exprimer les coefficients de la matrice de résistance hydrodynamique $\mathbf{R}^{\mathsf{lub}}_{2\mathsf{B},ij}$, qui s'applique sur les vitesses absolues des particules. Ces coefficients sont calculés dans [75, 76]. La matrice de mobilité $\mathbf{M}^{\mathsf{lub}}_{2\mathsf{B},ij}$ correspondante est ensuite calculée par inversion.

Interpolation à toutes les distances, trajectoires

Comme il n'y a pas d'expression générale des matrices de résistance/mobilité pour toutes les distances, on procède par interpolation des résultats obtenus dans la limite de particules proches, ou éloignées. Une première interpolation sur toutes les distances a été proposée par Batchelor et Green [14], basée sur les connaissances de l'époque de la trajectoire de deux particules en interaction hydrodynamique. La valeur des coefficients des matrices de résistance/mobilité sur des distances intermédiaires a depuis été raffinée par de nombreux travaux et par l'apport de l'outil informatique permettant résolution numérique complète d'un écoulement de Stokes autour de deux particules [83]. On note $\mathbf{R}_{2\mathsf{B},ij}$ et $\mathbf{M}_{2\mathsf{B},ij}$ ces matrices, dont les coefficients sont valables à toutes les distances de séparation r_{ij}. Leurs expressions complètes modernes sont tabulées dans [82].

La vitesse relative peut ensuite être intégrée numériquement pour calculer les trajectoires suivies par l'une des particules par rapport à l'autre (2.1). Dans le cas d'un cisaillement simple $E^{\infty}_{\gamma\delta}$ est donné par (2.3). Les trajectoires obtenues sont représentées sur la figure (2.1). Comme attendu en conséquence de la réversibilité des équations de Stokes, les trajectoires sont symétriques entre l'amont et l'aval. Ces résultats mettent de plus en évidence l'existence d'une trajectoire limite qui délimite une zone dans laquelle les trajectoires sont fermées. Une paire de particules initialement positionnée dans cette zone ne la quittera jamais sous l'effet d'un seul cisaillement simple, quel que soit la déformation accumulée. Cette trajectoire limite fermée n'existe cependant pas dans le cas d'un écoulement élongationnel.

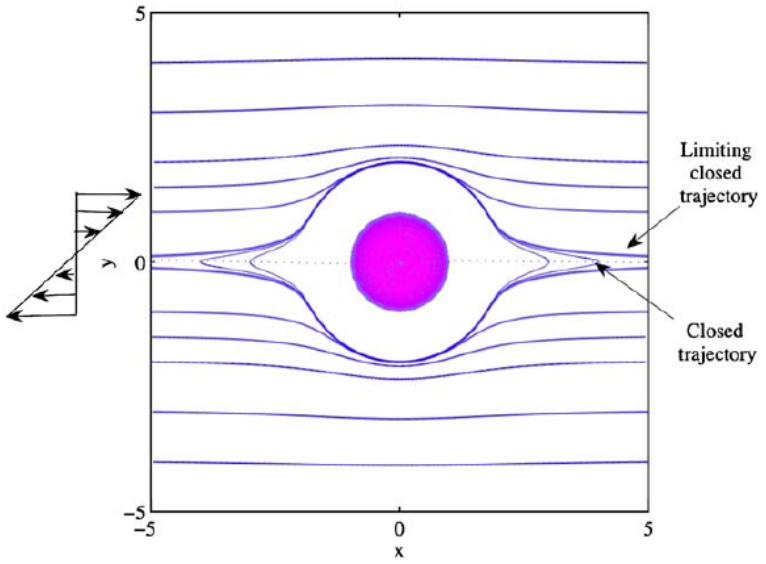


FIGURE 2.1 – Trajectoires dans le plan de cisaillement d'une paire de particules immergées dans un écoulement de cisaillement simple. La seconde particule évolue autour de la première particule, instantanément positionnée à l'origine. Tire de [106]

2.3 Notion de contrainte dans une suspension.

Dans cette section, nous développons le concept de contrainte dans une suspension, et rappelons comment elle s'exprime à partir d'une moyenne d'espace sur le volume de la suspension [12, 65]. Ce calcul met en évidence le rôle fondamental joué par le stresslet exercé sur chaque grain dans le développement d'une contrainte macroscopique.

2.3.1 Contrainte particulaire.

La contrainte macroscopique associée à un volume élémentaire représentatif $\mathcal{V}$ de suspension de volume V et contenant $N \gg 1$ particules rigides se décrit statistiquement comme la moyenne volumique de la contrainte locale sur le domaine $\mathcal{V}$:

$$\langle \vec{\vec{\sigma}} \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} \vec{\vec{\sigma}}(\vec{r}) \, \mathrm{d}^3\vec{r} \, . \tag{2.69}$$

En l'absence d'inertie du fluide, la contrainte en un point $\vec{r}$ situé dans le fluide est donnée par le comportement Newtonien (2.11). La contrainte dans les particules est inconnue, mais on peut tout de même écrire :

$$\langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \left[-p\delta_{\alpha\beta} + \eta_0 \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial r_\alpha} \right] \right] \mathrm{d}^3\vec{r} + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathcal{P}_i} \sigma_{\alpha\beta} \, \mathrm{d}^3\vec{r} \, . \tag{2.70}$$

On peut étendre l'intégrale sur $\mathcal{F}$ à tout le domaine $\mathcal{V}$, de manière à faire apparaitre la moyenne spatiale de la pression et du tenseur des taux de déformation, quitte à retrancher le complément intégré sur les domaines $\mathcal{P}_i$. Comme les grains sont indéformables, le champ de vitesse à l'intérieur des $\mathcal{P}_i$ est donné

par le mouvement de corps rigide (2.4), où il n'y a aucune composante de déformation. Le tenseur des taux de déformation est donc nul dans $\mathcal{P}_i$, de telle sorte que l'on peut écrire :

$$\langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle = \frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} \left[-p\delta_{\alpha\beta} + \eta_0 \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial r_\alpha} \right] \right] \mathrm{d}^3\vec{r} + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathcal{P}_i} \left[\sigma_{\alpha\beta} + p\delta_{\alpha\beta} \right] \mathrm{d}^3\vec{r} \,. \tag{2.71}$$

De ces deux termes, le premier n'est rien d'autre que la contrainte Newtonienne associée à la pression moyenne et au taux de déformation moyen dans $\mathcal{V}$:

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{V}} \left[-p\delta_{\alpha\beta} + \eta_0 \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial r_\alpha} \right] \right] \mathrm{d}^3\vec{r} = -\langle p \rangle \delta_{\alpha\beta} + 2\eta_0 \langle E_{\alpha\beta} \rangle \,. \tag{2.72}$$

Le second terme correspond à une contrainte supplémentaire liée à la présence des particules, et que l'on appelle « contrainte particulaire » [12], notée $\vec{\vec{\Sigma}}^{(p)}$:

$$\Sigma^{(p)}_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} \int_{\mathcal{P}_i} \left[\sigma_{\alpha\beta} + p\delta_{\alpha\beta} \right] \mathrm{d}^3\vec{r} \,. \tag{2.73}$$

Après quelques transformations algébriques, on peut exprimer la contrainte particulaire comme une intégrale surfacique de la traction générée par la contrainte dans le fluide, sur l'interface fluide/particules. Utilisant la convention de sommation des indices répétés, on écrit :

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{P}_i} \left[\sigma_{\alpha\beta} + p\delta_{\alpha\beta} \right] \mathrm{d}^3\vec{r} &= \int_{\mathcal{P}_i} \left[\sigma_{\alpha\beta} - \frac{1}{3}\sigma_{\delta\delta}\delta_{\alpha\beta} \right] \mathrm{d}^3\vec{r} \\
&= \int_{\mathcal{P}_i} \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial r_\beta}{\partial r_\gamma} \, \mathrm{d}^3\vec{r} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \int_{\mathcal{P}_i} \sigma_{\gamma\delta} \frac{\partial r_\delta}{\partial r_\gamma} \, \mathrm{d}^3\vec{r} \\
&= \int_{\mathcal{P}_i} \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \left(\sigma_{\alpha\gamma} r_\beta \right) \, \mathrm{d}^3\vec{r} - \int_{\mathcal{P}_i} r_\beta \frac{\partial \sigma_{\alpha\gamma}}{\partial r_\gamma} \, \mathrm{d}^3\vec{r} \\
&\qquad - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \left[\int_{\mathcal{P}_i} \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \left(\sigma_{\delta\gamma} r_\delta \right) \, \mathrm{d}^3\vec{r} - \int_{\mathcal{P}_i} r_\beta \frac{\partial \sigma_{\delta\gamma}}{\partial r_\gamma} \mathrm{d}^3\vec{r} \right] \,,
\end{aligned} \tag{2.74}$$

où l'on a remplacé la pression par sa définition $p = -1/3 \, \mathrm{Tr}(\vec{\vec{\sigma}})$ dans la première égalité, utilisé le fait que $\partial r_\beta / \partial r_\gamma = \delta_{\beta\gamma}$ et $\partial r_\delta / \partial r_\gamma = \delta_{\delta\gamma}$ dans la seconde, et utilisé le développement de la dérivée des produits $(\sigma_{\alpha\gamma} r_\beta)$ et $(\sigma_{\delta\gamma} r_\delta)$ dans la dernière égalité. En l'absence de forces volumiques extérieures, la divergence du tenseur des contraintes s'annule dans les particules :

$$\frac{\partial \sigma_{\alpha\gamma}}{\partial r_\gamma} = \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{\vec{\sigma}} \right]_\alpha = 0 \,, \qquad \frac{\partial \sigma_{\delta\gamma}}{\partial r_\gamma} = \left[\vec{\nabla} \cdot \vec{\vec{\sigma}} \right]_\delta = 0 \,. \tag{2.75}$$

Ainsi, deux des quatres intégrales au second membre de (2.74) s'annulent, autorisant, à l'aide du théorème de la divergence, à écrire ce qui reste comme une intégrale de surface sur l'interface $\partial\mathcal{P}_i$:

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{P}_i} \left[\sigma_{\alpha\beta} + p\delta_{\alpha\beta} \right] \mathrm{d}^3\vec{r} &= \int_{\mathcal{P}_i} \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \left(\sigma_{\alpha\gamma} r_\beta \right) \, \mathrm{d}^3\vec{r} - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \int_{\mathcal{P}_i} \frac{\partial}{\partial r_\gamma} \left(\sigma_{\delta\gamma} r_\delta \right) \, \mathrm{d}^3\vec{r} \\
&= \int_{\partial\mathcal{P}_i} \left[\sigma_{\alpha\gamma} r_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\sigma_{\delta\gamma} r_\delta \right] n_\gamma \, \mathrm{d}^2\vec{r} \,,
\end{aligned} \tag{2.76}$$

où n_γ est la composante dans la direction γ du vecteur unitaire sortant $\vec{n}(\vec{r})$ au point $r \in \partial\mathcal{P}_i$. La contrainte particulaire s'écrit finalement comme une somme de moments de la traction due à la contrainte dans le fluide sur la surface de toutes les particules :

$$\Sigma^{(p)}_{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{N}\int_{\partial\mathcal{P}_i}\left[\sigma_{\alpha\gamma}r_\beta - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\sigma_{\delta\gamma}r_\delta\right]n_\gamma\,\mathrm{d}^2\vec{r}\ . \tag{2.77}$$

Il apparaît naturellement dans la contrainte particulaire le tenseur $D_{i,\alpha\beta} = \int_{\partial\mathcal{P}_i}\sigma_{\alpha\gamma}r_\beta n_\gamma \mathrm{d}^2\vec{r}$ des moments des tractions exercées par le fluide sur la particule i à leur interface [9] :

$$\Sigma^{(p)}_{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{N}D_{i,\alpha\beta} - \frac{1}{V}\frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{Tr}\,\vec{\vec{D}}_i\ . \tag{2.78}$$

Le dipôle $D_{i,\alpha\beta}$ peut être décomposé en la somme de sa partie symétrique $S_{i,\alpha\beta}$ qui est le stresslet, et sa partie antisymétrique $A_{i,\alpha\beta}$, qui est le couple appliqué à la particule i, calculé par rapport à l'origine O du repère.
Dans le cas de particules libres et sans inertie, le couple $\vec{\Gamma}_i$ est nul, et le tenseur des moments des tractions se résume au stresslet. Physiquement, le stresslet représente les efforts exercés sur la particule parcequ'elle est indéformable et résiste à la composante de déformation locale de l'écoulement (c'est à dire la partie symétrique $E_{\alpha\beta}$ du tenseur des gradients des vitesses $\partial_\alpha v_\beta$). Il n'est donc responsable d'aucune mouvement de la particule à proprement parler, mais se retrouve dans l'expression de la contrainte particulaire $\Sigma^{(p)}_{\alpha\beta}$ dans une suspension de particules libres. On a en effet :

$$\Sigma^{(p)}_{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{N}S_{i,\alpha\beta} - \frac{1}{V}\frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{Tr}\,\vec{\vec{S}}_i = \frac{N}{V}\langle\underline{S}_{\alpha\beta}\rangle - \delta_{\alpha\beta}\frac{N}{V}\langle\frac{1}{3}\,\mathrm{Tr}\,\underline{\vec{\vec{S}}}\rangle\ . \tag{2.79}$$

La contrainte totale dans une suspension de particules libres, moyennée spatialement sur un domaine de volume V, contenant N particules peut finalement s'écrire en fonction des moyennes spatiales de la pression hydrostatique et du tenseur des taux de déformation dans le domaine, ainsi que du stresslet moyenné sur les particules [10] :

$$\langle\sigma_{\alpha\beta}\rangle = -\langle p\rangle\delta_{\alpha\beta} + 2\eta_0\langle E_{\alpha\beta}\rangle + \frac{N}{V}\langle\underline{S}'_{\alpha\beta}\rangle\ , \tag{2.80}$$

où $\underline{S}'_{\alpha\beta} = \underline{S}_{\alpha\beta} - (\delta_{\alpha\beta}/3)\,\mathrm{Tr}\,\underline{\vec{\vec{S}}}$ est le stresslet privé de sa trace. Comme le stresslet exercé sur chaque particule dépend de la position de toutes les particules, une façon de calculer sa moyenne est d'effectuer une moyenne d'ensemble sur le stresslet $S'_{\alpha\beta}(\underline{\vec{r}})$ exercé sur une particule test, positionnée à l'origine O dans une suspension qui s'étend dans tout l'espace [11]. Les différentes réalisations de cette moyenne d'ensemble correspondent à différents positionnements $\underline{\vec{r}} = \{\vec{r}_1, ...\vec{r}_N\}$ des N autres particules autour de la particule test. On voit immédiatement ici l'impact de la microstructure de la suspension sur

9. Plus précisément, il s'agit du tenseur $\vec{\vec{D}}_{i/O}$, des moments par rapport à l'origine O des tractions exercées sur la particule i. Dans le cas de particules libres et sans inertie, les moments ne dépendent pas du point par rapport auquel on les calcule, ce qui permet d'économiser cette précision.

10. Dans cette équation, les chevrons $\langle . \rangle$ désignent deux types différents de moyenne, l'une sur l'espace pour des champs continus, l'autre sur les particules pour un champ discret.

11. La limite $\mathcal{V} = \mathbb{R}^3$ doit être définie car dans la limite thermodynamique, la contrainte ne doit pas dépendre du volume de la suspension

la contrainte, étant donné que la valeur du stresslet moyen dépend directement de la distribution moyenne des positions des autres particules de la suspension autour d'une particule test. On note $p_{N|1}(\underline{\vec{r}}|\vec{0})$ la densité de probabilité associée à la présence des N particules de la suspension dans la configuration $\underline{\vec{r}}$, sachant que la particule test est en $\vec{0}$, et on a :

$$\langle \underline{S}'_{\alpha\beta} \rangle = \frac{\int_{\mathbb{R}^{3N}} S'_{\alpha\beta}(\underline{\vec{r}})\ p_{N|1}(\underline{\vec{r}}|\vec{0})\ \mathrm{d}^{3N}\underline{\vec{r}}}{\int_{\mathbb{R}^{3N}} p_{N|1}(\underline{\vec{r}}|\vec{0})\ \mathrm{d}^{3N}\underline{\vec{r}}} = \frac{1}{N!}\int_{\mathbb{R}^{3N}} S'_{\alpha\beta}(\underline{\vec{r}})\ p_{N|1}(\underline{\vec{r}}|\vec{0})\ \mathrm{d}^{3N}\underline{\vec{r}}\ , \tag{2.81}$$

les N particules de la suspension sur la position desquelles on effectue la moyenne étant indiscernables, la densité de probabilité $p_{N|1}(\underline{\vec{r}}|\vec{0})$ se normalise au nombre de permutations possibles sur N particules.

Calculs de la contrainte particulaire dans la limite diluée.

Formule d'Einstein.
Dans une limite très diluée, on peut supposer qu'aucune particule n'est présente dans un voisinage raisonnable de la particule test, de telle sorte que le stresslet qu'elle exerce peut être est donné par les résultats du problème à un corps (2.51) :

$$\vec{\vec{S}} = \frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3 \vec{\vec{E}}^{\infty}\ . \tag{2.82}$$

Comme ce stresslet est de trace nulle, et ne dépend plus des positions $\underline{\vec{r}}$ des autres particules, la moyenne se simplifie immédiatement et on obtient la contrainte particulaire générée par le problème à un corps en identifiant le champ de déformation à l'infini du problème à un corps avec le champ de déformation moyen dans la suspension :

$$\Sigma^{(p)}_{1\mathrm{B},\alpha\beta} = \frac{N}{V}\frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3 E^{\infty}_{\alpha\beta}\ . \tag{2.83}$$

On retrouve alors la formule d'Einstein qui donne la contrainte dans une suspension diluée :

$$\langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle = -\langle p \rangle \delta_{\alpha\beta} + 2\eta_0 \left[1 + \frac{5}{2}\phi\right] \langle E_{\alpha\beta} \rangle\ , \tag{2.84}$$

où $\phi = 4\pi a^3 N/3V$ est la densité volumique des particules dans la suspension.

Formule de Batchelor.
Dans une limite un peu moins diluée, on peut supposer qu'il ne peut y avoir qu'une particule à la fois à une position $\vec{r}_1$ dans un voisinage raisonnable de la particule test. On cherche alors la partie de la contrainte particulaire générée par les interactions à deux corps, que l'on obtient en soustrayant celle trouvée pour les interactions à un corps de la contrainte particulaire totale :

$$\Sigma^{(p)}_{2\mathrm{B},\alpha\beta} = \Sigma^{(p)}_{\alpha\beta} - \Sigma^{(p)}_{1\mathrm{B},\alpha\beta} = \frac{N}{V}\left[\langle \underline{S}'_{\alpha\beta} \rangle - \frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3 E^{\infty}_{\alpha\beta}\right] = 5\phi\eta_0 \left[\frac{\langle \underline{S}'_{\alpha\beta} \rangle}{\frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3} - E^{\infty}_{\alpha\beta}\right]\ . \tag{2.85}$$

La moyenne du stresslet est calculée en utilisant la formule (2.81) où $N = 1$. L'intégrale est donc prise sur la densité de probabilité conditionnelle à 2 corps $p_{1|1}(\vec{r}_1|\vec{0})$:

$$\Sigma^{(p)}_{2\mathrm{B},\alpha\beta} = 5\eta_0\phi \int_{\mathbb{R}^3} \left[\frac{S'_{\alpha\beta}(\vec{r}_1)}{\frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3} - E^{\infty}_{\alpha\beta}\right] p_{1|1}(\vec{r}_1|\vec{0}) \mathrm{d}^3\vec{r}_1\ . \tag{2.86}$$

Malheureusement, il s'avère que cette intégrale diverge, car l'intégrande ne décroit pas assez vite à l'infini quand le stresslet y est remplacé par son expression obtenue dans le problème à deux corps. La solution utilisée par Batchelor et Green [15], est d'intégrer non pas cette quantité, mais son écart à une quantité $Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_1)$ dont la moyenne est connue, et qui décroit à l'infini comme l'intégrande de (2.86). La quantité choisie est l'écart entre le taux de déformation local du problème à deux corps et le taux de déformation moyen imposé :

$$Q_{\alpha\beta}(\vec{r}_1) = E_{\alpha\beta}(\vec{r}_1) - E^{\infty}_{\alpha\beta} \ . \tag{2.87}$$

La moyenne de cette grandeur est nulle, et on peut donc écrire :

$$\Sigma^{(p)}_{2\mathrm{B},\alpha\beta} = \frac{15}{4\pi a^3}\eta_0\phi^2 \int_{\mathbb{R}^3} \left[\left[\frac{S'_{\alpha\beta}(\vec{r}_1)}{\frac{20}{3}\pi\eta_0 a^3} - E^{\infty}_{\alpha\beta} \right] - \left[E_{\alpha\beta}(\vec{r}_1) - E^{\infty}_{\alpha\beta} \right] \right] g(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r} \ , \tag{2.88}$$

où où a exprimé la densité de probabilité à deux corps en fonction de la fonction de corrélation de paire $p_{1|1}(\vec{r}_1|\vec{0}) = ng(\vec{r}_1) = 3\phi g(\vec{r}_1)/4\pi a^3$.
Il reste à calculer la fonction de corrélation de paire. Elle est solution de l'équation de conservation :

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [g\vec{v}(\vec{r})] = 0 \ , \tag{2.89}$$

où le champ de vitesse $\vec{v}(\vec{r})$ est donné par l'expression (2.58) de la vitesse relative $\vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij})$ de deux particules en interaction hydrodynamique, connu de la résolution du problème à deux corps. Malheureusement, l'existence de trajectoires fermées dans le cas d'un cisaillement simple empêche la résolution de cette équation en régime stationnaire dans tout l'espace. En effet, la quantité de particules au contact, dans la région entourée par la trajectoire fermée limite dépend de l'histoire de la suspension, et en particulier du nombre de particules piégée dans cette zone dès le départ. Il se trouve de plus que cette zone est de volume infini, ce qui empêche de négliger sans précaution la partie correspondante de l'intégrale (2.88).
La fonction de corrélation de paire peut en revanche être exprimée dans la région de l'espace au delà de la trajectoire fermée limite, c'est à dire la région remplie par les trajectoires qui viennent de l'infini et vont à l'infini. Dans cette région, la fonction de corrélation de paire est mise sous la forme [15] :

$$g(\vec{r}) = \frac{1}{1 - A(r)} \exp\left[\int_r^{\infty} \frac{3(B(r) - A(r)}{r(1 - A(r))} \mathrm{d}r \right] \ , \tag{2.90}$$

où les fonctions $A(r)$ et $B(r)$ sont celles qui interviennent dans l'expression (2.58) donnée par Green et Batchelor pour la vitesse relative de deux grains en interaction hydrodynamique. Ainsi, dans la région accessible par les grains arrivant de l'infini, la fonction de corrélation de paire présente une symétrie radiale.

Dans le cas d'un écoulement élongationnel où il n'y a pas de trajectoires limites et de paires piégées, on peut estimer numériquement $g(\vec{r})$ puis l'intégrale (2.88) (dont tous les termes sont tous proportionnels au taux de déformation moyen imposé $E^{\infty}_{\alpha\beta} = \langle E_{\alpha\beta} \rangle$) donnant une forme Newtonienne à la contrainte :

$$\langle \sigma_{\alpha\beta} \rangle = -\langle p \rangle \delta_{\alpha\beta} + 2\eta_0 \left[1 + \frac{5}{2}\phi + K\phi^2 \right] \langle E_{\alpha\beta} \rangle \ , \tag{2.91}$$

où le coefficient K est évalué à 7.6 par Batchelor et Green.

2.3.2 Contrainte dans une suspension inertielle.

Dans une suspension en écoulement purement Stokésien, ni les particules, ni le fluide n'ont d'inertie et la seule contrainte (en l'absence de contacts) générée dans la suspension est la contrainte particulaire, d'origine hydrodynamique.
Dans le cas où l'on ne néglige pas l'inertie, il faut tenir compte des fluctuations de vitesse capable de transporter de la quantité de mouvement et donc de générer de la contrainte. Ces fluctuations de vitesse concernent tant le fluide que les particules.

Concernant le fluide, Reynolds [115] propose d'isoler les fluctuations de vitesse $\vec{v}\,'(\vec{r})$ dans l'équation de Navier-Stokes en soustrayant sa moyenne du champ de vitesse

$$\vec{v}\,'(\vec{r}) = \vec{v}(\vec{r}) - < \vec{v}(\vec{r}) > \tag{2.92}$$

Cela conduit à l'écriture d'un tenseur de contrainte local dit tenseur des contraintes de Reynolds :

$$\sigma^{\mathsf{Re}}_{\alpha\beta}(\vec{r},t) = -\rho v\,'_{\alpha}(\vec{r},t) v\,'_{\beta}(\vec{r},t) \ , \tag{2.93}$$

dont on peut faire la moyenne sur $\mathcal{F}$ [12] :

$$\left\langle \sigma^{\mathsf{Re}}_{\alpha\beta} \right\rangle = -\frac{1}{V} \int_{\mathcal{F}} \rho v\,'_{\alpha}(\vec{r}) v\,'_{\beta}(\vec{r}) \mathrm{d}^3\vec{r} \ . \tag{2.94}$$

Concernant les grains, la contrainte portée par les fluctuations de leur vitesse correspond à la contribution dite cinétique dans la formule de Irving-Kirkwood [74] :

$$\left\langle \sigma^{\mathsf{K}}_{\alpha\beta} \right\rangle = -\frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} m_i c_{i,\alpha} c_{i,\beta} \ , \tag{2.95}$$

où $\vec{c}_i = \vec{v}_i - \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_i)$ est l'écart de la vitesse de la particule i par rapport au champ de vitesse affine moyen imposé. Cette formule s'obtient en suivant une procédure de moyennage des équations (inertielles) du mouvement des particules sur le domaine $\mathcal{V}$. Différents procédés sont possibles, ils sont équivalents et permettent de démontrer la contribution de l'inertie dans la formule d'Irving-Kirkwood pour le stress générée dans une assemblée discrète de particules. Une démonstration de cette formule suivant la procédure de Goldhirsch [66] est donnée en annexe (A).

Dans la section (2.1.2), on considère deux régime d'écoulement pour une suspension. Si celle-ci est diluée ou modérément dense, elle est dite purement Stokésienne et on ne tient aucunement compte de l'inertie. Dans ce cas, ni la contrainte de Reynolds, ni la contrainte cinétique due aux grains n'entre en compte dans le calcul de la contrainte dans la suspension.
En revanche, pour des suspensions très denses, nous avons vu que l'on pouvait s'intéresser à un régime d'écoulement inertiel lubrifié, où l'inertie des grains ne doit pas être négligée. Dans ce cas, on ajoutera la contrainte cinétique (2.95) à la contrainte totale qui se développe dans la suspension.

2.4 Contacts entre grains : Rôle et description.

L'analyse du seul problème du cisaillement de deux particules immergées met en évidence l'existence de trajectoires capables de générer des distances très petites entre grains. Quand deux grains sphériques entrent en interaction dans un champ de cisaillement simple, une distance minimale de séparation

aussi petite qu'un dix-millième de leur rayon peut être générée [42]. De plus l'existence de trajectoires fermées au voisinage du contact dans le problème purement hydrodynamique d'une suspension diluée, et leur conséquence en terme de rhéologie justifie l'importance qu'il y a à tenir compte des contacts directs entre les grains. Ceux-ci sont en effet susceptibles de perturber les trajectoires purement hydrodynamiques quand une distance d'approche très faible de l'ordre de taille des rugosités naturelles à la surface des particules est générée. Expérimentalement enfin, il a été mis en évidence l'existence de déviations par rapport aux trajectoires attendues dans un cadre purement hydrodynamique lorsque deux sphères rigides se rapprochent suffisamment [49, 43].

On ne peut donc pas se limiter au problème théorique abstrait des interactions entre particules infiniment lisses : la théorie hydrodynamique est incapable seule de modéliser correctement les interactions inter particulaires au sein d'une suspension concentrée. On discute dans cette partie des interactions directes entre grains qui se produisent donc nécessairement dans ces systèmes : quels sont les éléments physiques pertinents à leur description, et comment leur existence influence-elle la contrainte générée dans la suspension.

2.4.1 Éléments de physique des contacts.

La formalisation mathématique des interactions de contact entre particules rigides a été développée historiquement dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des milieux granulaires secs. Dans ces systèmes, il n'y a pas de fluide intersticiel, et le comportement macroscopique est la conséquence des seuls contacts directs entre grains solides, qui y déterminent le transport de la quantité de mouvement et la dissipation de l'énergie.
De nombreux ingrédients physiques sont à l'oeuvre dans la zone dite de contact, c'est à dire la petite région où les deux particules interagissent à très courte distance : élasticité, plasticité, frottements, rugosité, vieillissement, cohésion, interactions électrostatiques. Les détails microscopiques de la physique à l'oeuvre dans la zone de contact sont en réalité très riches et ne sont d'ailleurs pas encore bien compris. Il n'existe pas à notre connaissance de théorie générale capable de condenser tous ces effets dans une formalisation mathématique globale.

Une première modélisation (déjà simplificatrice) est de postuler l'existence d'une « force de contact » $\vec{f}^{\,c}$ qui s'applique en un « point de contact » entre les deux particules. On suppose alors que les interactions, dans toute leur complexité, sont limitées à une région de contact de très petite taille devant la taille des grains. On cherche alors à exprimer la relation entre l'intensité de cette force, et toute variable éventuellement nécessaire à la description de l'état interne du contact. Cette relation est appelée loi de contact, et est nécessairement le fruit d'un compromis entre réalisme physique et praticabilité de la loi, d'autant plus que l'on souhaite utiliser la loi de contact dans le cadre d'une simulation numérique qui impose ces propres contraintes.

On peut formaliser le fait que deux particules i et j soient en contact en prenant comme condition de contact le fait que $r_{ij} \leqslant a_i + a_j$, c'est à dire si le recouvrement δ_{ij} est positif ou nul :

$$\delta_{ij} = a_i + a_j - r_{ij} \geqslant 0 \Leftrightarrow i \text{ et } j \text{ sont en contact.} \tag{2.96}$$

Dans le cas de particules infiniment rigides et complètement indéformables (comme cela a été supposé lors du traitement hydrodynamique de l'écoulement entre les grains), le recouvrement ne peut être que nul et le point de contact C entre les particules est défini sans ambiguïté. Si on autorise les particules à se déformer un petit peu sous l'effet des forces de contact exercées, on autorise un recouvrement fini. Le point de contact C peut alors être positionné au centre géométrique de cette zone.

On définit la vitesse relative au contact comme la vitesse relative du point C vu comme un point de la particule i par rapport au point C vu comme un point de la particule j :

$$\begin{aligned}\vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}} &= \vec{v}_j + (a_j - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{\omega}_j \times \vec{n}_{ij} - (\vec{v}_i - (a_i - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{\omega}_i \times \vec{n}_{ij}) \\ &= \vec{v}_{ij} + [(a_j - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{\omega}_j + (a_i - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{\omega}_i] \times \vec{n}_{ij} \ . \end{aligned} \tag{2.97}$$

Suivant les mêmes conventions que pour les forces hydrodynamiques, on note $\vec{f}_{ij}$ la force exercée au contact par la particule j sur la particule i et $\vec{f}_{ji}$ la force opposée, exercée par i sur j :

$$\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c}} = \vec{f}_{j\to i,\ \mathsf{contact}} = -\vec{f}_{ji}^{\,\mathsf{c}} \ . \tag{2.98}$$

On construit une base locale directe $(\vec{n}_{ij}, \vec{t}_{ij}, \vec{t}'_{ij})$, en prenant $\vec{n}_{ij} = \vec{r}_{ij}/\|\vec{r}_{ij}\|$ et $\vec{t}_{ij} = \vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}}/\|\vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}}\|$, ce qui permet de décomposer la vitesse de contact en une composante normale et une composante tangentielle :

$$\begin{aligned} \vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}} &= v_{ij}^{\mathsf{c,N}}\ \vec{n}_{ij} + v_{ij}^{\mathsf{c,T}}\ \vec{t}_{ij} \ , \\ v_{ij}^{\mathsf{c,N}} &= \vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}} \cdot \vec{n}_{ij} = \dot{r}_{ij} \ , \\ v_{ij}^{\mathsf{c,T}} &= \vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}} \cdot \vec{t}_{ij} \ . \end{aligned} \tag{2.99}$$

On décompose également la force de contact en une force normale et une force tangentielle :

$$\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c}} = f_{ij}^{\mathsf{c,N}}\ \vec{n}_{ij} + f_{ij}^{\mathsf{c,T}}\ \vec{t}_{ij} \ . \tag{2.100}$$

La force tangentielle ne se développe que dans la direction $\vec{t}_{ij}$ car elle est générée en opposition à la vitesse de contact tangentielle, et est colinéaire à celle-ci.

Déformations élastiques au contact.

Les forces de contact qui s'exercent entre deux grains rigides sont essentiellement d'origine élastique. Bien que l'élasticité soit une théorie linéaire, les forces générées par la déformation de deux grains sphériques ne varient pas linéairement avec l'écrasement généré, pour des raisons géométriques. En effet, quand les deux grains de rayon de taille caractéristique $\sim a$ sont suffisamment comprimés pour les déformer, la surface de contact augmente avec la force appliquée. Si on note l l'ordre de grandeur du rayon de la zone de contact et δ l'ordre de grandeur de la déformation, on a géométriquement que

$$a^2 = \left(a - \frac{\delta}{2}\right)^2 + \left(\frac{l}{2}\right)^2 \ . \tag{2.101}$$

On peut développer cette relation géométrique en utilisant la séparation d'échelle entre la taille des grains, le rayon de la zone déformée et la taille de la déformation $\delta \ll l \ll a$. L'ordre le plus élevé donne

$$l^2 = 2\delta a \ . \tag{2.102}$$

On utilise alors la dépendance linéaire entre la contrainte dans le contact et la déformation relative générée (une description scalaire de l'élasticité est suffisante pour capturer la loi de variation). Si E est le module d'élasticité de la particule, et σ une échelle de contrainte dans le contact, on a

$$\sigma \sim E\epsilon \ , \tag{2.103}$$

où ϵ est la déformation relative, à savoir la taille de la déformation ramenée à la taille de la zone déformée : $\epsilon \sim \delta/l$. L'échelle de contrainte étant donnée par le rapport de la force sur la surface sur laquelle elle s'applique, on a :

$$\frac{F}{l^2} \sim E\frac{\delta}{l} \quad \text{soit :} \tag{2.104}$$

$$F \sim E\ \delta\ l\ \sim E\ \delta\ (\delta a)^{1/2}\ \sim E\ a^2\ \left(\frac{\delta}{a}\right)^{3/2}\ . \tag{2.105}$$

La formule exacte, obtenue par Heinrich Hertz dans le cadre d'un calcul complet d'élasticité linéaire [69] fait intervenir en plus un préfacteur géométrique pour des sphères, ainsi que le module de Poisson ν du matériau :

$$f_{ij}^{\mathsf{c,N}} = -\frac{4}{3}\frac{E}{1-\nu^2}a^2\ \left(\frac{\delta_{ij}}{a}\right)^{3/2}\ . \tag{2.106}$$

Frottements.
Lorsque les particules i et j entrent en contact avec une vitesse de contact tangentielle finie, une force tangentielle de frottement peut également être générée. Le détail des mécanismes microscopiques générant cette force ne sont pas nécessairement faciles à décrire, et on peut applique usuellement la loi de Coulomb qui contraint l'intensité de la force tangentielle développée en fonction de la charge normale dans le contact.
Le glissement des surfaces des deux grains l'une par rapport à l'autre au point de contact n'est possible que si le rapport entre force tangentielle et force normale atteint un certain coefficient μ :

$$f_{ij}^{\mathsf{c,T}} = \mu f_{ij}^{\mathsf{c,\ N}}\ . \tag{2.107}$$

Le coefficient μ est appelé coefficient de friction (statique) du matériau et représente la résistance à vaincre pour générer un glissement malgré les frottements dans le contact. [12] La vitesse tangentielle de contact $\vec{v}_{ij}^{\mathsf{c,T}}$ est alors non nulle et le contact est alors appelé contact glissant.

La relation de proportionnalité (2.107) peut s'expliquer si on tient compte de l'étendue apparente S_a de la zone de contact, et de l'existence d'aspérité [21]. Ainsi, lorsque deux solides sont placés l'un contre l'autre, le contact effectif a lieu uniquement au niveau des aspérités les plus saillantes. La surface de contact réelle S_r est en fait beaucoup plus limitée que la surface apparente. La contrainte normale générée par la force normale, d'intensité F_N s'écrit alors en ordre de grandeur :

$$\sigma_N \sim \frac{F_N}{S_r}\ . \tag{2.108}$$

Bowden et Tabor font alors l'hypothèse que cette contrainte normale est assez grande pour plastifier localement les aspérités concernées. Le matériau fluant localement, la contrainte normale est alors à peu près constante quelle que soit la charge normale appliquée, et s'établit à la limite de plasticité H en compression du matériau. C'est la surface réelle de contact qui est modifiée quand la charge normale augmente, selon

$$S_r \sim \frac{F_N}{H}\ . \tag{2.109}$$

12. Une fois en mouvement, le rapport entre la force normale et la force tangentielle saute vers une autre valeur μ_d, appelé coefficient de friction dynamique, qui représente la force à appliquer pour maintenir un glissement déjà initié.

Pour estimer la force tangentielle générée dans le contact entre deux aspérités, Bowden et Tabor supposent que les deux solides sont soudés localement, et que le déplacement tangentiel n'est possible que si la contrainte tangentielle générée atteint la limite de plasticité en cisaillement τ du matériau. Un ordre de grandeur de la contrainte tangentielle développée est

$$\sigma_T \sim \frac{F_T}{S_r} \sim \tau \ . \tag{2.110}$$

En combinant les expressions (2.109) et (2.110), on obtient une relation de proportionnalité entre les forces normales et tangentielles :

$$F_T \sim \frac{\tau}{H} F_N \ . \tag{2.111}$$

Si la force générée n'est pas suffisante pour vaincre les frottements au contact, la vitesse tangentielle de contact est nulle et le contact est qualifié de contact roulant. La force générée applique un couple qui conduit à mettre les grains en rotation de façon à ce que le point de contact pour chaque grain reste en permanence en face de son vis à vis de l'autre grain, l'impulsion restante étant stockée élastiquement dans le contact, ou bien dissipée. Dans ce cas, l'intensité de la force tangentielle n'est en fait pas fixée a priori par la loi de Coulomb tant qu'elle est inférieure à $\mu f_{ij}^{\mathsf{c,\,N}}$.
Il n'existe pas de modèle clair permettant d'évaluer la force tangentielle élastique dans ces circonstances, aussi l'usage est d'utiliser un modèle de ressort-amortisseur qui semble capturer la nature élastique de la force générée dans un contact roulant ainsi que l'existence de mécanismes de dissipation (voir méthodes de DEM au chapitre (3), section 3.3.3).

2.4.2 Contacts et rhéologie.

Contrainte de contacts.

L'existence de contacts directs dans une suspension de particules a des implications importante pour la rhéologie. Le premier effet évident est une contribution directe à la contrainte, due au transport de quantité de mouvement à travers les forces non hydrodynamique qui s'exercent dans les contacts qui se forment et disparaissent au fur et à mesure du cisaillement.

Le calcul de la contrainte de contact nécessite de veut passer d'une distribution discrète de forces $\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c}}$ associées aux paires de particules en contact dans le volume élémentaire représentatif $\mathcal{V}$ à un tenseur de contraintes $\langle \sigma_{\alpha\beta}^{\mathsf{c}} \rangle$. Pour ce faire, il faut encore une fois effectuer un processus de moyennage sur $\mathcal{V}$. Ce calcul permet de démontrer la contribution des forces dans la formule d'Irving-Kirkwood pour le stress générée par une assemblée de particules dans un volume [74]. Une démonstration de cette formule est donnée en annexe (A). La contrainte de contact s'écrit

$$\langle \sigma_{\alpha\beta}^{\mathsf{c}} \rangle = -\frac{1}{2V} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{N} f_{ij,\alpha}^{\mathsf{c}} r_{ij,\beta} \ . \tag{2.112}$$

Contrairement à la contrainte particulaire hydrodynamique qui est sans trace, ce tenseur possède une trace et peut être à l'origine du développement d'une pression particulaire non nulle au sein d'une suspension en cisaillement.

Impact sur la microstructure.

En plus de la contrainte de contact additionnelle, l'existence de contacts due à la rugosité des particules à un second effet indirect sur la contrainte particulaire. Comme le fluide est susceptible de s'écouler entre les aspérités à la surface d'une particule, les trajectoires de celles-ci ne sont plus uniquement déterminées par le problème hydrodynamique, en conséquence de quoi la microstructure de toute la suspension est modifiée. La composante hydrodynamique de la contrainte particulaire est donc affectée indirectement par l'existence de contacts.

Da Cunha et Hinch [42], puis Zarraga et Leighton [137] ont proposé de tenir compte de l'existence de contacts dans le problème à deux corps en postulant l'existance d'une approche minimale ε entre les deux particules correspondant à la taille typique des aspérités. Lorsque la séparation entre les surfaces est égale à ε, une force répulsive normale est générée de manière à empêcher un rapprochement plus avant des grains. En résolvant le problème à deux corps dans ces conditions, ces auteurs ont montré une dissymétrisation des trajectoires par rapport au problème lisse (2.2).

Cette brisure de la symétrie des trajectoires a deux conséquence microstructurelles. Premièrement, les

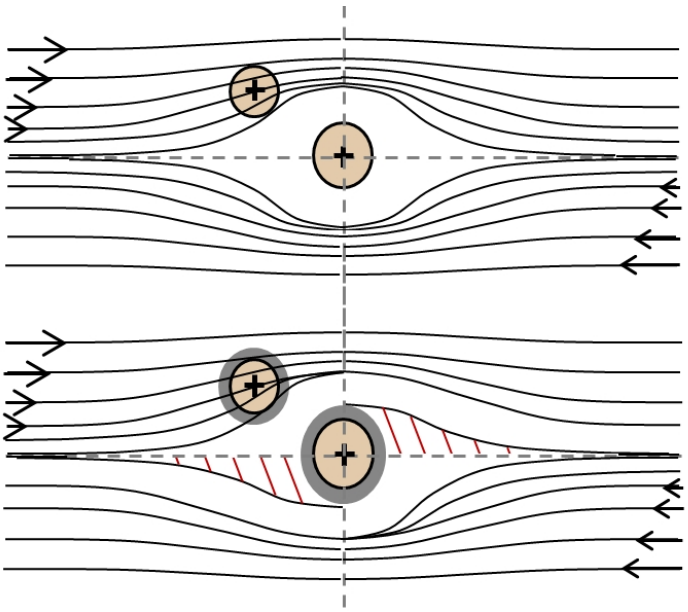


FIGURE 2.2 – L'existence d'une échelle de rugosité génère de l'anisotropie dans le problème à deux corps. La symétrie amon-aval du problème à deux corps lisses (haut) est à l'origine d'une fonction de corrélation de paire à symétrie radiale. L'existence de rugosité génère des contacts dans le quadrant de compression, et un sillage de dépletion dans le quadrant de dilatation (bas).

interactions de contact, uniquement répulsives, n'ont lieu que dans le quadrant de compression. Dans le quadrant de dilatation, l'écoulement éloigne les particules l'une de l'autre et il ne peut donc pas y avoir de contact. Deuxièmement, l'existence des contacts projette les particules qui s'approchent un peu trop sur une trajectoire limite correspond à la trajectoire dont la plus grande approche est exactement ε. Il en résulte un sillage de déplétion en aval : toute la zone occupée dans le problème lisse par des particules s'étant plus approchées que ε est maintenant vide, les particules en ayant été chassées par le contact. Il en résulte une assymétrie de la fonction de corrélation de paire $g(r)$, directement

à l'origine de l'assymétrie des contraintes normales. En effet, l'équilibre des forces hydrodynamique entre le quadrant de compression (où les particules se rapprochent) et le quadrant de dilatation (où elles s'éloignent) est brisé.

Cette assymétrisation de la microstructure est bien décrite théoriquement dans le domaine dilué, pour lequel il « suffit » de résoudre le problème à deux corps [26, 132]. Dans les suspensions plus concentrées, il n'y a pas à notre connaissance de description théorique permettant d'estimer la distribution des paires. Néanmoins, l'assymétrie de la microstructure persiste, et est mesurée expérimentalement dans des suspensions réelles [18, 19], ou en simulation [121, 107].

Chapitre 3

Un état de l'art des approches numériques.

La complexité analytique des problèmes qui se posent en physique des suspensions, couplée à l'apparition de l'informatique et d'ordinateurs de plus en plus puissants a naturellement poussé au développement d'approches numériques pour explorer le comportement de ces systèmes.

Ce chapitre est consacré à un rapide tour d'horizon des méthodes numériques employées pour simuler la dynamique d'une suspension de particules. Cette étude bibliographique n'a bien entendu pas vocation à l'exhaustivité, tant la diversité des méthodes existantes est grande et les variantes nombreuses. Différentes familles de méthodes sont évoquées, selon un classement approximatif qui permet de se faire une idée approches existantes. Une telle classification est toujours hasardeuse, étant donné que de nombreux travaux sont basés sur des méthodes hybrides qui combinent plusieurs de ces idées. Grossièrement, nous ferons les distinctions suivantes :

- Une première catégorie comprend les méthodes, regroupées sous la dénomination de méthodes de simulation directes ou explicites, qui cherchent à résoudre entièrement la dynamique du fluide intersticiel. On classera avec les méthodes directes les méthodes de type Boltzmann sur réseau, où le fluide est également représenté explicitement dans la simulation.
- On rassemble dans une seconde catégorie les méthodes qui utilisent les propriétés mathématiques de l'équation de Stokes (essentiellement la linéarité) pour estimer les efforts générés, nécessaires au calcul de la dynamique de la suspension. La méthode de dynamique Stokésienne [24, 25] utilise un formalisme de résistance hydrodynamique, tandis que les méthodes de couplage de force [134] utilisent le développement multipolaire à partir du propagateur de Stokes, des efforts générés à l'interface avec une particule. Par construction, ces méthodes ne sont appliquables qu'au régime purement Stokésien de la dynamique [1].
- Enfin on regroupera dans une troisième catégories les méthodes discrètes de type dynamique moléculaire, où seules les particules sont suivies de manière Lagrangienne, les efforts auxquels elles sont soumises étant calculés à l'aide d'une loi d'interaction de paire.

3.1 Représentation explicite du fluide intersticiel.

Les méthodes de simulation directes résolvent explicitement les équations aux dérivées partielles décrivant la dynamique du fluide intersticiel sur une discrétisation de l'espace entre les particules appelée

1. Bien que des aménagements permettant de s'aventurer vers les régimes inertiels existent.

maillage. On peut séparer ces méthodes en deux sous-familles, selon que le maillage soit fixe (on parle de maillage structuré, ou non conforme) et discrétise la totalité du domaine $\mathcal{V}$ occupé par la suspension, ou qu'il soit mobile avec les particules (maillage conforme, non structuré) et ne discrétise que l'espace intersticiel $\mathcal{F}$ (voir figure (3.1)).

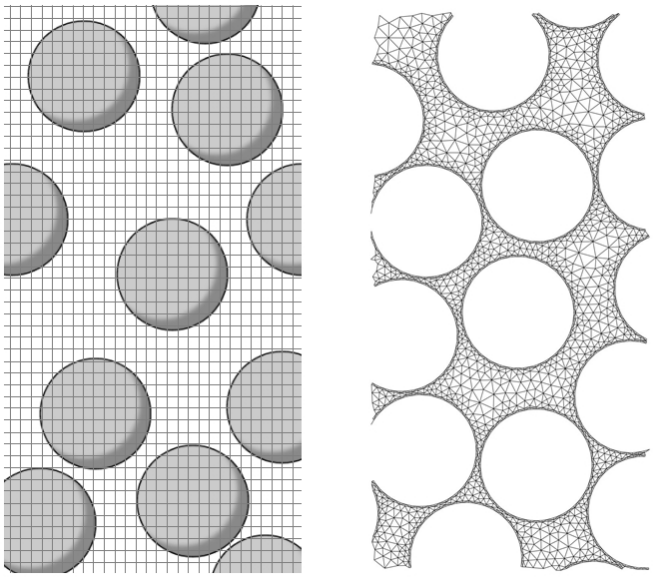


FIGURE 3.1 – Exemples de maillages utilisés dans des méthodes directes. À gauche un maillage structuré cartésien, utilisé dans des méthodes de type domaines fictifs ; à droite, un maillage non structuré utilisé par une méthode *Arbitrary Euler-Lagrange*. Tiré de [92].

Dans tous les cas, l'équation de conservation de la quantité de mouvement (souvent l'équation de Navier-Stokes) est écrite soit sous sa forme forte (2.5), soit dans une formulation variationnelle, pour être ensuite résolue par des techniques classiques, de type éléments finis ou volumes finis.

3.1.1 Méthodes à maillage non structurés (*Arbitrary Euler-Lagrange*).

Les méthodes de type Euler-Lagrange Arbitraire résolvent numériquement une formulation variationnelle de Navier-Stokes pour les variables $\vec{v}(\vec{r})$ et $p(\vec{r})$ sur un maillage du domaine $\mathcal{F}$ qui épouse la forme des particules (voir figure (3.1), à droite).
Une difficulté se pose immédiatement dans ce type de méthodes : comme les particules sont mobiles, il faut gérer le déplacement du domaine $\mathcal{F}$, qui bouge avec elles. On peut par exemple remailler le domaine $\mathcal{F}$ à chaque nouveau pas de temps, puis projeter la solution du pas de temps précédent sur le nouveau maillage [72]. Malheureusement, cette étape de projection introduit des erreurs numériques que l'on souhaite éviter. Une autre possibilité est de convecter les points de l'ancien maillage avec les particules pour en obtenir un nouveau, en choisissant une bonne dynamique qui répond au déplacement des particules. Ce déplacement Lagrangien du maillage est un choix arbitraire qui dépend de l'algorithme, d'où le nom de la méthode (dans [77], les points du maillage se déplacent en suivant la dynamique de l'élasticité linéaire). La vitesse de déplacement des points du maillage peut aussi être insérée directement dans la formulation variationnelle du problème, et calculée à chaque instant de

manière à conserver une bonne répartition des points du maillage ([71, 100]). Il faut tout de même noter que ces techniques de convection du maillage avec les particules nécessitent tout de même un remaillage suivi d'une projection de temps à autre, car les cellules du maillage finissent par être trop déformées.
Une autre difficulté se trouve dans la façon d'imposer les bonnes conditions aux bords pour obtenir le couplage entre les domaines fluide et solide. À chaque pas de temps, les conditions aux bord sont imposées à partir des vitesses des particules calculées au pas de temps précédent. On calcule alors $\vec{v}(\vec{r})$ et $p(\vec{r})$ dans $\mathcal{F}$, puis on déduit de ces champs les forces s'exerçant sur les particules. Les équations de Newton sont intégrées sur le pas de temps avec ces forces, ce qui permet de calculer la vitesse des particules à la fin du pas. Ce type de couplage est utilisé directement dans [77] et avec une itération répétée à chaque pas de temps jusqu'à convergence vers la solution du problème dans [72]. Il est également possible d'obtenir le couplage en insérant aussi les variables particulaires $\underline{\vec{v}}$ et $\underline{\vec{\omega}}$ dans la formulation variationelle du problème [71, 100].

3.1.2 Méthodes à maillage structuré : Domaines fictifs et frontières immergées.

Dans ces méthodes, le problème continu est posé fictivement sur la totalité du domaine $\mathcal{V}$ de la suspension, dont un maillage fixe est généré, ce qui permet d'éviter complètement les problèmes de remaillage et de projection. Le principe général est de résoudre les équations de Navier-Stokes partout dans $\mathcal{V}$, en y rajoutant une densité volumique de force $\vec{f}(\vec{r},t)$ pour représenter les particules.

Dans les méthodes des frontières immergées [112], la densité de force est appliquée aux frontières des inclusions rigides, sur des noeuds supplémentaires mobiles rajoutés au maillage fixe.
Les méthodes de domaines fictifs étendent fictivement le fluide à l'interieur des inclusions, et le contraignent à s'y déplacer selon un mouvement de corps rigide cohérent avec les vitesses $(\underline{\vec{v}}, \underline{\vec{\omega}})$ des particules. Cette contrainte est imposée via la densité de force volumique $\vec{f}(\vec{r},t)$ qui est alors le champ multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de mouvement de corps rigide dans les inclusions, et qui joue le rôle d'une pression fictive.

On peut distinguer deux classes de méthodes de domaines fictifs. La première utilise des maillages mobiles locaux sur les particules pour y imposer un mouvement de corps rigide par le moyen d'un champ multiplicateur de Lagrange qui y est défini [59, 60, 61] pour des écoulements autours de particules se déplaçant à vitesse imposée, [62, 111] pour des particules libres). Le champ multiplicateur de Lagrange correspond à un champ de pression fictif associé à la contrainte cinématique de non déformabilité dans les particules, par exemple $\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}_i + \vec{\omega}_i \times (\vec{r} - \vec{r}_i)$ ou bien $\vec{\vec{E}}(\vec{r}) = \vec{\vec{0}}$. Le multiplicateur de Lagrange n'est pas réutilisé d'un pas de temps au suivant, il n'y a donc pas besoin d'effectuer de projections lorsque ces maillages mobiles sont actualisés.
D'autres méthodes de domaines fictifs n'utilise qu'un maillage fixe global de $\mathcal{V}$, c'est par exemple le cas des méthodes dites de pénalisation [6, 80].

3.1.3 Méthodes Boltzmann sur réseau.

Les approches de type Boltzmann sur réseau (LBM pour *Lattice Boltzmann Method*) proposent d'utiliser l'équation de Boltzmann au lieu de l'équation de Navier-Stokes pour décrire la dynamique du fluide intersticiel. Cette équation, introduite par Ludwig Boltzmann en 1872 pour décrire l'évolution statistique d'un gaz peu dense, porte sur la distribution de probabilité $f(\vec{r},\vec{p},t)$ des positions et des impulsions dans le gaz (plus précisément $f(\vec{r},\vec{p},t)\mathrm{d}^3\vec{r}\mathrm{d}^3\vec{p}$ représente la probabilité qu'une particule du gaz présente l'impulsion $\vec{p}$ à $\mathrm{d}^3\vec{p}$ près à la position $\vec{r}$ à $\mathrm{d}^3\vec{r}$ près au temps t).

L'équation de Boltzmann s'écrit en égalant les effets sur la distribution f de l'opérateur de Liouville $\mathcal{L}$ à ceux d'un opérateur de collision $\mathcal{C}$:

$$\mathcal{L}(f) = \mathcal{C}(f) \ . \tag{3.1}$$

L'opérateur de Liouville décrit l'évolution « libre » de la distribution statistique des positions et des impulsions des particules (de masse m) dans un éventuel champ de force extérieur $\vec{f_e}(\vec{r}, t)$, c'est à dire lorsque celles-ci sont considérées comme évoluant chacune seule. Ainsi, la limite infiniment diluée de l'équation de Boltzmann s'écrit simplement $\mathcal{L}(f) = 0$. L'opérateur de Liouville s'écrit :

$$\mathcal{L}(f) = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \vec{f_e} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{v}} f \ . \tag{3.2}$$

L'opérateur de collision $\mathcal{C}$ décrit l'influence sur la densité f des interactions entre particules. Il est absolument nécessaire de l'inclure dans l'équation pour pouvoir décrire des fluides un peu denses. L'écriture de cet opérateur de collision est un problème ouvert de théorie cinétique des gaz. Une approximation fréquemment utilisée est l'approximation dite du temps de relaxation, où l'on considère que :

$$\mathcal{C}(f) = -\frac{f - f_0}{\tau} \ , \tag{3.3}$$

où f_0 est une distribution d'équilibre vers laquelle on veut que la distribution relaxe, en un temps typique τ. Sous cette hypothèse, on peut montrer que la discrétisation de l'équation de Boltzmann sur un réseau pavant le domaine spatial occupé par le fluide est équivalent à une discrétisation de l'équation de Navier-Stokes pour un fluide compressible [34].

Les méthodes LB représentent donc le fluide porteur par une assemblée de nombreuses petites particules fictive se déplaçant suivant un opérateur de Liouville discret entre les noeuds d'un réseau occupant le domaine fluide, et subissant des collisions sur ces noeuds suivant des règles bien précises. Les positions et vitesses des particules sont discrètes. Le nombre de ces particules à chaque noeud et leur vitesse permet de calculer la densité et la vitesse locale du fluide. Des règles de rebond aux parois permettent d'imposer l'équivalent des conditions de non-glissement des équations de la mécanique des fluides, et de calculer le transfert de quantité de mouvement aux particules afin d'en déduire les efforts auxquels celles-ci sont exposées.

Cette méthode est très intéressante pour modéliser les écoulements dans des géométries complexes, comme c'est le cas pour des suspensions denses [86, 87, 88]. La méthode présente également l'avantage de ne nécessiter l'inversion d'aucune matrice, ce qui représente un gain de temps appréciable par rapport à d'autres approches. Le problème ainsi posé est par nature aisé à diviser en sous-problèmes, le rendant facile à paralléliser.

3.1.4 Lubrification et contacts dans les méthodes directes.

Nous avons vu que la dynamique d'une suspension dense nécessite la résolution correcte de l'écoulement du fluide intersticiel dans des constrictions entre particules d'autant plus fines que la suspension est dense. Des contacts directs, entre les grains sont également à envisager, dans la mesure où ceux-ci ont une certaine rugosité. Dans ce cas, les forces de lubrification ne sont pas nécessairement suffisamment fortes pour empêcher les contacts. Il faut donc prévoir un système de gestion des collisions.

Les forces entre grains très proches, qu'elle soient d'origine hydrodynamique comme la lubrification,

ou non hydrodynamique comme les forces de contact ont un effet très important sur la dynamique globale du système. Un inconvénient majeur des techniques de simulation directes, qui reposent sur une discrétisation de l'espace (que ça soit sur un maillage ou un réseau pour les méthodes LB) est alors l'existence d'une borne inférieure de résolution spatiale qui correspond à une taille de maille fixée par l'algorithme. On comprend alors bien que ces techniques sont par essence incapable de résoudre une dynamique sur une échelle inférieure à cette résolution, et donc ne tiennent que partiellement compte de la lubrification. L'approche la plus répandue consiste alors à ajouter directement dans l'équation du mouvement des particules une force de lubrification de paire $\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{lub}}$ donnée par le calcul théorique de l'interaction entre deux particules seules (voir paragraphe 2.2.2). Ce type de correction pour la lubrification peut s'appliquer à toutes les méthodes explicites, par exemple en domaines fictifs [135] ou en Boltzmann sur réseau [108]. Dans [56] les matrices de résistance théoriques modélisant la lubrification entre deux particules sont tabulées à toutes les distances, et utilisées pour corriger le champ de vitesse obtenu dans une méthode de domaine fictifs. Seule la partie non-résolue de la lubrification est ajoutée dans les équations du mouvement sur les particules.

Une autre approche est de coupler l'algorithme de résolution des équations de continues avec un algorithme de projection des vitesses sur un espace de vitesses admissibles ([90, 52, 129]), de telle façon que toute paire de particules qui doit se recouvrir si on suit le solveur, conserve en fait une distance surface à surface qui est positive ou nulle. Les particules sont alors considérées en contact lubrifié, et sont maintenues à distance ≈ 0 tant que la dynamique ne les sépare pas. Une variable interne (correspondant d'une certaine manière au logarithme de la distance réelle, très faible, qui les sépare) est introduite (modèle des *gluey particles* de Maury et Lefebvre [101, 91]). La dynamique de cette variable est intégrée tant que les particules restent collées, ce qui permet d'estimer avec précision l'intensité des efforts exercées entre elles par la lubrification, et de savoir quand le contact lubrifié disparaît.

En ce qui concerne les forces de contact, des modèles de forces répulsives simples sont en général implémentés dans les techniques de simulation directe. Classiquement, une force répulsive ad hoc entre deux particules i et j est rajoutée directement dans l'équation du mouvement des particules, si celles-ci sont trop proches, typiquement si $r_{ij} < a_i + a_j + \rho$, où ρ est un paramètre qui fixe la portée de la force répulsive de contact. Cette force est en général de la forme

$$\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c}} = -k(a_i + a_j + \rho - r_{ij})\vec{r}_{ij} \ , \tag{3.4}$$

où k joue le rôle d'une raideur, et est ajusté pour qu'il n'y ait pas de recouvrement numérique des inclusions rigides [62, 135]. Il est également possible d'autoriser les particules à se recouvrir légèrement, auquel cas, une stratégie doit être choisie pour que les mouvements de corps rigides imposés par chaque particule dans la région de recouvrement ne surcontraignent la dynamique [124, 131]. La force de contact peut être également être calculée de façon incrémentale par couplage avec un solveur DEM (*Discrete Element Method* voir paragraphe 3.3.3), ce qui permet un calcul des forces de contact entre particules polygonales [131] et permet d'étudier les effets des frottements entre particules [56].

3.2 Exploitation du caractère linéaire des équations de Stokes.

Dans un écoulement de Stokes, les efforts hydrodynamiques sont déterminés sans ambiguité par la configuration microscopique instantanée des particules. Plusieurs méthodes ont été développées pour utiliser ces propriétés particulières afin de calculer directement les interactions hydrodynamique entre les particules, plutôt que de se concentrer sur l'écoulement dans son ensemble.

3.2.1 Dynamique Stokesienne.

La méthode de dynamique Stokesienne [20, 24, 25, 46] propose de partir de la formulation en terme de matrice de résistance hydrodynamique pour résoudre la dynamique des particules dans une suspension. Le fluide porteur n'est pas résolu à proprement parler, et toute son influence sur les particules apparaît dans l'expression des matrices de résistance/mobilité. On cherche à exprimer les coefficients de la grande matrice de mobilité **M** qui donne les vitesses en fonction des efforts subis. Elle est définie par (2.47) :

$$\begin{bmatrix} \underline{\vec{v}} \\ \underline{\vec{\omega}} \\ \underline{\vec{\vec{0}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}}) \\ \vec{\omega}^{\infty} \\ \vec{\vec{E}}^{\infty} \end{bmatrix} + \mathbf{M} \begin{bmatrix} \underline{\vec{f}} \\ \underline{\vec{\vec{\Gamma}}} \\ \underline{\vec{\vec{S}}} \end{bmatrix} . \tag{3.5}$$

La formulation est jusque là exacte, et ne fait qu'exprimer le caractère linéaire de l'équation de Stokes. Toute la difficulté est dans le calcul des coefficients de la matrice de mobilité.

Pour deux particules sphériques, les grandes matrices de résistance et de mobilité sont connues exactement, à toutes les distances. Pour N particules il faut en revanche faires des approximations si l'on veut éviter de complètement résoudre la dynamique du fluide. La matrice de mobilité hydrodynamique correspondant au champ lointain est formée en calculant la vitesse et la vitesses angulaire de chaque particule à l'aide des formules de Faxén [14], qui expriment la vitesse d'une particule, lorsqu'elle est immergée dans le champ de vitesse générée par toutes les autres :

$$\vec{v}_i - \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_i) = -\frac{\vec{f}_i}{6\pi\eta_0 a_i} + [1 + \frac{a_i^2}{6}\Delta]\vec{c}'(\vec{r}_i) \ , \tag{3.6}$$

$$\vec{\omega}_i - \vec{\omega}^{\infty} = -\frac{\vec{\Gamma}_i}{8\pi\eta_0 a_i^3} + \frac{1}{2}\vec{\nabla} \times \vec{c}'(\vec{r}_i) \ . \tag{3.7}$$

où $\vec{c}'(\vec{r}_i)$ est la perturbation en vitesse causée en $\vec{r}_i$ par toutes les autres particules, et qui s'écrit selon le développement multipolaire (2.44), tronqué après le dipôle :

$$c'_{\alpha}(\vec{r}) = -\sum_{j\neq i} \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}_j) f_{j,\beta} - \frac{\partial \mathcal{G}_{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}_j)}{\partial r_{\gamma}} \Big[\frac{1}{2}\varepsilon_{\beta\gamma\delta}\Gamma_{j,\delta} + S_{j,\beta\gamma}\Big] \ . \tag{3.8}$$

La combinaison des lois de Faxén (3.6) et (3.7) et du développement multipolaire de la vitesse dans le fluide permet d'écrire une relation linéaire entre les vitesses des particules et les forces, couples, et stresslets. Les coefficients qui interviennent dans cette relation linéaire sont les coefficients de la matrice de mobilité, que l'on note ici $\mathbf{M}^{\infty}$ car elle est correspond à un développement qui est d'autant plus valable que les particules sont éloignées les unes des autres. La matrice de mobilité est ensuite inversée pour obtenir une approximation en champ lointain de la matrice de résistance :

$$\mathbf{R}^{\infty} = [\mathbf{M}^{\infty}]^{-1} \ . \tag{3.9}$$

La grande matrice de mobilité ayant été construite additivement à partir des mobilités décrivant les perturbations de vitesse générées par les particules de chaque paires, l'inverser résout le problème à N corps au niveau des efforts appliqués à chaque particules [46]. Pour faire un parallèle avec la méthode des réflexions utilisée pour deux particules, cela revient ici à sommer tous les couplages possibles sur toutes les autres particules (voir paragraphe 2.2.2). En particulier, il semble que cette inversion permette de récupérer la propriété d'écrantage des interactions hydrodynamiques entre particules

éloignées dans une suspension dense [25]. En revanche, il manque à cette grande matrice de résistance la composante de champ proche des efforts, à savoir les forces de lubrification.

Les forces de lubrification sont introduites dans la matrice de résistance car ce sont des forces de paire, qui se somment directement au niveau des efforts appliqués. Là encore, les matrices de résistance à deux corps $\mathbf{R}_{2\mathrm{B},ij}$ (exactement connues) entre deux particules i et j sont utilisées. Comme la lubrification n'est présente dans la matrice $\mathbf{R}^{\infty}$ que de manière très inexacte, il est tentant de simplement y ajouter $\mathbf{R}_{2\mathrm{B},ij}$ pour toutes les paires. Une partie de ces efforts a été néanmoins déjà comptée dans $\mathbf{R}^{\infty}$, il faut donc retrancher la partie champ lointain de $\mathbf{R}_{2\mathrm{B},ij}$, calculée au même ordre d'approximation que l'avait été la matrice de mobilité $\mathbf{M}^{\infty}$. Si on note $\mathbf{R}^{\infty}_{2\mathrm{B},ij}$ cette composante de champ lointain de la résistance de paire, on écrit au final :

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}^{\infty} + \sum_{ij} [\mathbf{R}_{2\mathrm{B},ij} - \mathbf{R}^{\infty}_{2\mathrm{B},ij}] \ . \tag{3.10}$$

La connaissance de la grande matrice de résistance hydrodynamique permet deux choses. Premièrement, il est possible de calculer les efforts hydrodynamiques subis par les particules à partir des seules vitesses de celles-ci. On a en effet :

$$\underline{\vec{f}} = -\mathbf{R}_{fv} \cdot \left(\underline{\vec{v}} - \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}})\right) - \mathbf{R}_{f\omega} \cdot \left(\underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^{\infty}\right) + \mathbf{R}_{fE} \cdot \underline{\vec{\vec{E}}}^{\infty} \ , \tag{3.11}$$

$$\underline{\vec{\Gamma}} = -\mathbf{R}_{\Gamma v} \cdot \left(\underline{\vec{v}} - \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}})\right) - \mathbf{R}_{\Gamma\omega} \cdot \left(\underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^{\infty}\right) + \mathbf{R}_{\Gamma E} \cdot \underline{\vec{\vec{E}}}^{\infty} \ . \tag{3.12}$$

Il est alors possible d'intégrer numériquement les équations du mouvement,

$$\vec{0} = \vec{f}_i + \vec{f}_i^{B} + \vec{f}_i^{NH} \ , \quad \vec{0} = \vec{\Gamma}_i + \vec{\Gamma}_i^{B} + \vec{\Gamma}_i^{NH} \ , \tag{3.13}$$

où on rajoute éventuellement des efforts stochastiques $(\vec{f}_i^{B}, \vec{\Gamma}_i^{B})$ représentant du mouvement Brownien, ou encore des efforts d'origine non hydrodynamiques $(\vec{f}_i^{NH}, \vec{\Gamma}_i^{NH})$ liés par exemple à des forces de contact ou des forces colloïdales. Les nouvelles vitesses des particules sont calculées au pas de temps suivant en inversant la grande matrice de résistance hydrodynamique.
Il est difficile en pratique, d'empêcher les recouvrements numériques entre les grains. Cela n'est de toute façon pas nécessairement souhaitable étant donné qu'il a été établi que des contacts se forment entre grains d'une suspension cisaillée, notamment à cause de l'état de rugosité de ceux-ci. En dynamique Stokesienne, cette répulsion au contact est modélisée par une force interparticulaire dont l'expression est [25] :

$$\vec{f}_{ij}^{NH} = F_0 \frac{\tau e^{-\tau r_{ij}}}{1 - e^{-\tau r_{ij}}} \vec{n}_{ij} \ . \tag{3.14}$$

Une telle expression rappelle les forces colloïdales s'exerçant entre particules chargées. Ces forces sont ici caractérisées par une échelle d'intensité F_0, et une portée τ. Ce potentiel de répulsion semble plus être motivé par des raisons pratiques que physiques, étant donné en particulier que les valeurs prises pour ces paramètres sont ajustées de façon ad-hoc, jusqu'à ce que la simulation fonctionne. Une force de nature électrostatique n'a de plus pas de sens physique clair dans le contexte des suspensions non Browniennes.

La connaissance de la grande matrice de résistance permet également de calculer les stresslets s'exerçant sur toutes les particules. On a en effet :

$$\underline{\vec{\vec{S}}} = -\mathbf{R}_{Sv} \cdot \left(\underline{\vec{v}} - \vec{v}^{\infty}(\underline{\vec{r}})\right) - \mathbf{R}_{S\omega} \cdot \left(\underline{\vec{\omega}} - \vec{\omega}^{\infty}\right) + \mathbf{R}_{SE} \cdot \underline{\vec{\vec{E}}}^{\infty} \ . \tag{3.15}$$

De là, il est possible de mesurer le stresslet moyen, et donc la contrainte moyenne dans le volume de suspension simulé, en vertu de la relation (2.80).

En raison d'un coût en temps de calcul important du à l'inversion de la matrice de mobilité $\mathbf{M}^{\infty}$, les simulations de dynamique Stokésienne ont longtemps été limitées au problème 2D d'une monocouche d'un nombre modéré de particules. Une version plus récente de l'algorithme (*Accelerated Stokesian Dynamics* [120, 121]) a néanmoins permis la simulation 3D de la dynamique de suspensions comptant jusqu'à 2000 particules.

3.2.2 Méthode de couplage de force.

L'idée d'origine de la méthode de couplage de force (FCM pour *Force Coupling Method*) réside dans l'exploitation du développement multipolaire (2.39) de la vitesse non affine dans le fluide. Ce développement exprime le fait que « vu de loin » une particule immergée dans le fluide perturbe celui-ci comme si elle se réduisait à une force ponctuelle appliquée en son centre, complétée d'un dipôle ponctuel, d'un quadrupôle ponctuel, etc... Plus le développement est tronqué tôt, plus l'approximation n'est valable qu'à des distances importantes.
Exploitant cette idée, chacune des particules i est représentée en FCM, par un petit volume de fluide de largeur à ajuster, sur lequel est distribué un terme de forcage de forme multipolaire $\vec{f_i}(\vec{r},t)$. Ce forcage est placé comme terme source, dans les équations de Stokes décrivant la dynamique du fluide [134], qui sont donc étendues à la totalité du domaine $\mathcal{V}$ de la suspension :

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}\cdot\vec{v} &= 0 \ , \\ -\vec{\nabla}p + \eta_0\ \Delta\vec{v} &= \sum_{i=1}^{N} \vec{f_i}(\vec{r},t) \ . \end{aligned} \tag{3.16}$$

Le développement multipolaire est généralement tronqué à l'ordre dipôlaire :

$$f_{i,\alpha}(\vec{r},t) = M_{i,\alpha}\Delta_M(\vec{r}-\vec{r_i}) + D_{i,\alpha\beta}\frac{\partial}{\partial r_\beta}\Delta_D(\vec{r}-\vec{r_i}) \ , \tag{3.17}$$

où $\vec{M_i}$ et $\vec{\vec{D}}_i$ sont le monopôle et le dipôle qu'exerce la particule i sur le fluide. Au lieu d'être appliqués ponctuellement à la position du centre de la particule - ce qui est difficile à faire numériquement, la FCM distribue les différents multipôles sur des enveloppes sphériques gaussiennes $\Delta_M(\vec{r}-\vec{r_i})$ et $\Delta_M(\vec{r}-\vec{r_i})$ centrées sur la position des particules. Ces enveloppes sont de largeur respective σ_M et σ_D reflétant la taille finie des particules, et sont ajustées de manière à reproduire le problème à une particule quand celle-ci est seule [102]. L'étendue spatiale des particules n'est pas pris en compte autrement dans la méthode que par ces enveloppes, elles sont donc par ailleurs considérées comme ponctuelles.

L'équation (3.16) est résolue à l'aide d'un solveur choisi arbitrairement qui discrétise l'équation de Stokes sur un maillage de $\mathcal{V}$. La résolution nécessite de connaître la valeur des multipôles représentant les particules. Le monopôle et la partie antisymétrique du dipôle sont donnés par la résultante des forces et des couples non hydrodynamiques s'appliquant à chaque particule. La partie symétrique du dipôle, c'est à dire le stresslet, n'est pas connue à prori. Elle est déterminée afin de satisfaire la contrainte de non déformabilité dans l'enveloppe sphérique représentant chaque particule :

$$\int_{\mathcal{V}} E_{\alpha\beta}(\vec{r})\Delta_D(\vec{r}-\vec{r_i})\mathrm{d}^3V(\vec{r}) = 0. \tag{3.18}$$

Comme cette contrainte dépend du champ de vitesse, lui même solution de l'équation de Stokes, une méthode itérative est nécessaire pour ce calcul.

Enfin, les vitesses de translation et de rotation des particules sont calculées en effectuant une moyenne spatiale du champ de vitesse, pondérée par l'enveloppe gaussienne centrée sur les particules :

$$\vec{v}_i = \int_{\mathcal{V}} \vec{v}(\vec{r})\Delta_M(\vec{r}-\vec{r}_i)\mathrm{d}^3V(\vec{r}) \ , \tag{3.19}$$

$$\omega_{i,\alpha} = \int_{\mathcal{V}} \epsilon_{\alpha\beta\gamma}\frac{\partial v_\gamma}{\partial r_\beta}(\vec{r})\Delta_D(\vec{r}-\vec{r}_i)\mathrm{d}^3V(\vec{r}) \ . \tag{3.20}$$

Il est ainsi possible de construire un suivi Lagrangien des particules à partir de la perturbation de vitesse induite dans le fluide porteur par leur propre mouvement.

Cette méthode a également été appliquée à des calculs de dynamique des suspensions [36, 1, 2, 133].

3.3 Méthodes discrètes.

3.3.1 Méthodes de dynamique moléculaire

Depuis les années 1970, des méthodes discrètes ont vu le jour, permettant la simulation numérique de la dynamique d'assemblées d'un nombre de plus en grand de particules en interactions dans le vide [3]. Ces méthodes de calcul, regroupées sous le nom de méthodes de dynamique moléculaire, reposent essentiellement sur l'intégration des équations de Newton pour des particules ponctuelles, représentant des atomes ou des molécules,

$$\frac{\mathrm{d}\vec{r}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{v}_i \ , \quad m_i\frac{\mathrm{d}\vec{v}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{f}_i \ . \tag{3.21}$$

En dynamique moléculaire, les particules sont en interactions dans un paysage énergétique modélisé par un potentiel $V(\underline{\vec{r}})$ dépendant a priori des positions $\underline{\vec{r}}$ de toutes les particules. Le calcul des forces $\underline{\vec{f}}$ se fait alors simplement en prenant le gradient du potentiel pour chaque particule, ce qui permet de calculer l'évolution des vitesses $\underline{\vec{v}}$ à partir des seules positions. Le potentiel est généralement construit comme une somme $\sum_j V(r_{ij})$ sur toutes les paires de particules en interaction dans le système (souvent les seules voisines si le potentiel de paire décroit suffisamment à l'infini) :

$$\vec{f}_i = -\sum_{j \text{ v.}i} \frac{\mathrm{d}V(r_{ij})}{\mathrm{d}r}\vec{n}_{ij} \ . \tag{3.22}$$

L'idée de pouvoir simuler la dynamique d'une assemblée de particules, dont les interactions - de paire - sont décrites par une loi de force simple semble s'appliquer naturellement aux matériaux granulaires, dans la mesure où des modèles de loi de contact reproduisant plus ou moins simplement, et avec plus ou moins de compromis avec la physique réelle très complexe des contacts entre grains solides, peuvent remplacer l'emploi d'un potentiel $V(\underline{\vec{r}})$ dans les équations du mouvement.
Historiquement, des modèles numériques de contact inspirés des idées de la dynamique moléculaire ont été développés dans le cadre des méthodes par éléments distincts, (DEM pour *Discrete Element Method*), qui sont une famille de méthodes développées depuis les années 1970 [41]. Cundall et Strack

ont pu reproduire la dynamique sous sollicitation extérieure d'une assemblée de quelques centaines de disques macroscopiques secs, donnant naissance aux méthodes de DEM en milieux granulaires.

Un certain nombre d'auteurs se sont intéressés aux suspensions en examinant les effets de l'ajout d'une force dissipative dans un système « moléculaire » de particules plus ou moins molles, sans chercher à modéliser les détails de l'écoulement d'un quelconque fluide intersticiel. Dans ces simulations, l'hydrodynamique est simplifiée à l'extrême : seule une traînée de type Stokes est ajoutée sur la vitesse des particules [5, 68, 138, 79]. La force exercée sur les particules s'écrit alors sous la forme de la somme d'une force $\underline{\vec{f}}^{\mathbf{c}}$ due aux interactions de contact entre voisins et d'une force visqueuse $\underline{\vec{f}}^{\mathbf{v}}$. La force de contact peut être calculée à partir d'un potentiel de paire comme dans (3.22), où bien par couplage avec un algorithme de DEM. La force visqueuse est souvent exprimée comme une force de traînée de viscosité équivalente ξ, appliquée à la vitesse de chaque particule, ou la vitesse relative de chaque paire :

$$\vec{f}_i^{\mathbf{v}} = -\xi m \vec{c}_i \qquad [5, 68, 79] \tag{3.23}$$

$$\vec{f}_i^{\mathbf{v}} = -\sum_{j \text{ v.} i} \xi m \vec{c}_{ij} \quad [138] \ . \tag{3.24}$$

3.3.2 Suspensions lubrifiées

L'idée de ne considérer que des interactions de paire entre particules proches au niveau des efforts hydrodynamiques générés dans le fluide intersticiel est délicate en raison de la longue portée des interactions hydrodynamiques. La perturbation en vitesse générée par une force ponctuelle est donnée par la résolution des équations de Stokes et décroit en $1/r$ (voir le tenseur d'Oseen (2.37)), ce qui nécessite a priori la prise en compte des termes de champ lointain correspondant à la matrice de mobilité $\mathbf{M}^{\infty}$ de la dynamique Stokésienne.

Dans le cas de suspensions denses, Ball et Melrose ont proposé de ne cependant conserver que la composante de lubrification des matrices de résistance hydrodynamique permettant l'estimation des efforts de paires dans une suspension. Ces efforts de lubrification peuvent être calculés paire par paire dans la suspension, puis sommés pour chaque particule, ce qui permet une formulation simple des équations du mouvement [8, 9]. La matrice de résistance hydrodynamique est alors limitée à la somme sur toutes les paires de la seule résistance due à la lubrification dans la paire, exprimée pa la matrice $\mathbf{R}^{\text{lub}}_{2\text{B},ij}$ définie au paragraphe (2.2.2).

Le but de ces méthodes est d'éviter l'inversion d'une matrice trop grande et trop dense, (que ça soit à cause de la résolution d'un système généré par la discrétisation spatiale des équations continues de la mécanique des fluides, ou à cause de l'inversion de la grande matrice de mobilité comme en dynamique stokésienne) : même si l'on se retrouve à devoir inverser une matrice de résistance, cette matrice est en fait relativement creuse, car elle ne couple que des particules voisines.

Ball et Melrose choisissent de ne tenir compte d'aucun autre effort hydrodynamique que la lubrification. Ils invoquent un argument d'invariance galiléenne pour ne conserver que des efforts proportionnels aux vitesses relatives des particules, de manière à ce que ceux-ci ne dépendant pas de la vitesse de l'observateur. Dans ce cadre, seules les conditions aux limites permettent d'assurer le mouvement en imposant le gradient de la vitesse moyenne d'écoulement des grains de la suspension. Ce choix est également suivi par d'autres auteurs [114, 81].
Il est également envisageable d'ajouter une force et un couple de trainée hydrodynamique à chaque particule, par rapport à un fluide ambiant qui se déplace à la vitesse moyenne imposée [104, 98], ou

bien qui suit une dynamique propre [128] Cette traînée est en général estimée à l'aide de la formule de Stokes (2.49), bien que celle-ci ne soit théoriquement valable que pour une particule seule immergée dans un espace infini de fluide.

Les vitesses obtenues sont ensuite intégrées numériquement de manière à ne pas générer de recouvrement dans les trajectoires des particules. Le problème alors rencontré dans le cas de particules n'intéragissant que par la lubrification est la difficulté qu'il y a à atteindre un état stationnaire. En effet, des séparations extrêmement petites de l'ordre de 10^{-10} fois le rayon des particules sont générées au bout de quelques unités de cisaillement , et ce sans même se rapprocher particulièrement de la fraction volumique de blocage. Cette constatation n'est pas une surprise si l'on connaît la solution complète du problème à deux corps, où déjà de nombreuses trajectoires passent très près du contact (voir section 2.2.2). L'apparition de ces gaps fins pose problème à différents niveaux. Physiquement d'abord, leur signification pose question car il n'y a pas vraiment de sens à considérer un écoulement visqueux dans une constriction de quelques diamètres atomiques de large. Un modèle numérique de contact doit donc nécessairement prendre le relais aux très courtes distances. Numériquement ensuite, des séparations si petites deviennent extrêmement sensibles à l'erreur numérique inévitablement présente dans toute simulation.

3.3.3 Régularisation de la lubrification par les contacts.

Les forces de contact sont généralement calculées à l'aide d'une formulation de type DEM, où les particules interagissent uniquement deux à deux par des modèles de contact de type ressort-amortisseur (voir paragraphe (2.4.1) [41, 95, 96]). Ces forces peuvent n'inclure qu'une composante normale élastique [8, 104], ou bien ajouter en plus des forces tangentielles, ainsi que du frottement [114, 81, 128, 98].

Dans une simulation de DEM, on considère que les forces de contact sont essentiellement d'origine élastique. Leur intensité dans chaque contact entre deux particules i et j est estimée à partir de l'état de déformation élastique dans le contact, modélisé par deux variables locales δ_{ij} et $\vec{\xi}_{ij}$ qui correspondent aux déformations élastiques normale et tangentielle. L'écrasement normal δ_{ij} est souvent directement pris égal au recouvrement numérique entre les grains à chaque pas de temps, quand celui-ci est positif :

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= a_i + a_j - \|\vec{r}_{ij}\| \quad \text{si } \|\vec{r}_{ij}\| \leqslant a_i + a_j \ , \\ &= 0 \qquad\qquad\qquad\quad \text{sinon.} \end{aligned} \tag{3.25}$$

La force normale est répulsive, et est directement proportionnelle à une puissance du recouvrement δ_{ij}. Il est possible de prendre en compte de façon ad-hoc [2] la dissipation d'énergie générée dans le contact par la composante normale du déplacement relatif des deux particules en ajoutant à la force normale un terme répulsif visqueux, proportionnel à la vitesse de rapprochement au contact. Les modèles de ce type sont regroupés sous l'appellation de modèles ressort-amortisseur (*spring-dashpot models*), dont la loi de contact pour la force normale est de la forme :

$$f_{ij}^{\mathsf{c,N}} = K_{ij}^N \delta_{ij}^{\alpha} + \nu_N v_{ij}^{\mathsf{c,N}} \ . \tag{3.26}$$

2. On ne discute pas ici de l'origine de cette dissipation d'énergie, le modèle étant relativement ad-hoc de ce point de vue là. Cette formulation de la dissipation est néanmoins cohérente avec l'existence mesurée d'un coefficient de restitution $e = |\dot{r}_{ij}^{\text{avant}}/\dot{r}_{ij}^{\text{après}}| < 1$ lors d'un choc entre deux de ces particules élastiques, à condition de prendre $\nu_N = -2\ln e[m_{ij}K_{ij}^N/(\pi^2 + \ln^2 e)]^{-1/2}$, où $m_{ij} = m_i m_j/(m_i + m_j)$ est une masse réduite associée à la paire [35].

où K_{ij}^N est un coefficient de raideur associée à la paire ij, et ν_N un coefficient de dissipation visqueuse. Souvent, l'exposant α est pris égal à 1 (ce qui correspond en fait au scaling de Hertz en deux dimensions, car alors $\sigma \sim F/a$ dans (2.104)), et dans ce cas la raideur K_{ij}^N correspond au module d'Young du matériau constituant les grains. Pour retrouver la loi de Hertz 3D, il faut prendre

$$\alpha = 3/2 \ , \tag{3.27}$$

$$K_{ij}^N = \frac{4}{3}\frac{E}{1-\nu^2}a_{ij}^{1/2} \ , \tag{3.28}$$

où $a_{ij} = a_i a_j/(a_i + a_j)$ est un rayon réduit associé à la paire. Cette définition de la force élastique normale générée par le contact pose un problème lorsqu'elle est couplée additivement avec les forces normales de lubrification qui apparaissent dans l'équation (4.10). En effet, la force de contact est non nulle si $\|\vec{r}_{ij}\| \leqslant a_i + a_j$ mais dans ce cas, le gap qui intervient dans la force de lubrification est négatif, ce qui génère des problèmes numériques importants. Il faut alors par exemple utiliser des rayons différents dans la loi de contact, en posant :

$$a_i' = a_i + \varepsilon \ , \tag{3.29}$$

$$\delta_{ij} = a_i' + a_j' - \vec{r}_{ij} \ , \tag{3.30}$$

où ε est une taille typique d'aspérité à la surface des particules. Il s'avère que pour des valeurs assez grande de ε, la force normale élastique suffit à maintenir les particules à des séparations positives les unes des autres [8, 104]. En revanche, pour des aspérités trop petites, ou une raideur trop faible conjuguée à une densité en particules trop importante, la répulsion élastique peut se révéler impuissante à empêcher la formation de gaps extrêmement fins, voir négatifs, tout comme dans le cas où il n'y a pas de forces de contact.

Une autre possibilité est de régulariser la loi de lubrification en la rendant compatible avec les petits recouvrements numériques nécessaires à la loi de contact de la DEM. Les coefficients de la matrice de résistance hydrodynamique de lubrification sont alors modifiés :

$$\tilde{R}_{NN}^{\text{lub}} = -6\pi\eta_0 \frac{a_i^2 a_j^2}{(a_i+a_j)^2}\frac{1}{f(h_{ij})} \ , \tag{3.31}$$

$$\tilde{R}_{TT}^{\text{lub}} = \quad 2\pi\eta_0 \frac{a_i a_j}{a_i + a_j}\left[\frac{3(a_i-a_j)^2}{5(a_i+a_j)^2} + 1\right]\ln f(h_{ij}) \ , \tag{3.32}$$

$$\tilde{R}_{T\omega}^{\text{lub}} = -\frac{12\pi}{5}\eta_0 \frac{a_i^2 a_j^2}{(a_i+a_j)^2}\frac{a_i - a_j}{a_i + a_j}\ln f(h_{ij}) \ , \tag{3.33}$$

où $f(h_{ij})$ est une fonction de régularisation qui ne s'annule pas quand le gap est nul. Des exemples d'une telle régularisation pour une taille d'aspérité ε sont

$$f(h_{ij}) = h_{ij} + \varepsilon \qquad \text{[128, 98]}, \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned} f(h_{ij}) &= h_{ij} && \text{si } h_{ij} > \varepsilon, \\ &= a h_{ij} + b && \text{sinon,} \\ & && \text{[114, 81].} \end{aligned} \tag{3.35}$$

où a et b sont des constantes choisies de manière à assurer la continuité de f et de sa dérivée en $h_{ij} = \varepsilon$.

La déformation tangentielle $\vec{\xi}_{ij}$ est une variable interne au contact, initialisée quand celui-ci se forme,

et dont la dynamique est suivie pendant toute la durée de vie du contact. Il n'existe pas de modèle clair permettant d'évaluer la force tangentielle dans un contact. La seule loi physique à respecter est le critère de Coulomb qui donne une borne supérieure à l'intensité de la force. L'usage est d'utiliser aussi un modèle de ressort-amortisseur qui semble capturer la nature élastique de la force générée, ainsi que l'existence de mécanismes de dissipation. La variable $\vec{\xi}_{ij}$ est alors une mesure de la déformation tangentielle locale[3] . Lorsque le contact se forme, la déformation tangentielle est initialisée à zéro $\vec{\xi}_{ij} = 0$. La dynamique de $\vec{\xi}_{ij}(t)$ est a priori fixée par la vitesse tangentielle au contact :

$$\dot{\vec{\xi}}_{ij} = \vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c,T}} \ . \tag{3.36}$$

Cette relation permet de calculer $\vec{\xi}_{ij}(t)$ de façon incrémentale entre chaque pas de temps. La force tangentielle se déduit alors a priori par la loi ressort-amortisseur :

$$\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,T}} = K_{ij}^{T}\vec{\xi}_{ij} + \nu_T v_{ij}^{\mathsf{c,T}}\ \vec{t}_{ij} \ , \tag{3.37}$$

où K_{ij}^{T} est une raideur tangentielle et ν_T un coefficient de dissipation tangentiel. Il faut en réalité s'assurer que le critère de Coulomb est respecté. On veut donc imposer

$$\|\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}\| \leqslant \mu\|\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,N}}\| \ , \tag{3.38}$$

où μ est le coefficient de friction sur lui-même du matériau composant les grains. Dans le cas d'un contact roulant, l'inégalité est stricte. L'égalité est atteinte quand le contact bascule dans le régime glissant. Connaissant l'intensité de la force normale, on vérifie à chaque pas de temps si l'expression (3.37) vérifie le critère (3.38). Si c'est le cas, les valeurs calculées pour $\dot{\vec{\xi}}_{ij}$, $\vec{\xi}_{ij}$, et $\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}$ sont retenues, et la dynamique suit son cours. Si ce n'est pas le cas, on considère que le contact est entré en régime glissant. La force tangentielle est fixée pour ce pas de temps à la valeur limité donnée par le critère de Coulomb :

$$\|\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}\| = \mu\|\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,N}}\| \ . \tag{3.39}$$

On considère que le glissement au niveau du contact n'ajoute pas de déformation tangentielle supplémentaire. Ainsi, le taux de variation de $\vec{\xi}_{ij}$ est fixé pour ce pas de temps à zéro :

$$\dot{\vec{\xi}}_{ij} = \vec{0} \ . \tag{3.40}$$

La valeur de $\vec{\xi}_{ij}$ est alors donnée par la valeur de la force tangentielle, de telle façon que la formule (3.37) soit compatible avec (3.39) :

$$\vec{\xi}_{ij} = \frac{\mu\|\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,N}}\|}{K_{ij}^{T}} \ . \tag{3.41}$$

Enfin, notons que la force tangentielle dans le contact génère un couple qui tend à mettre en rotation les deux particules impliquées. Ce couple se calcule en estimant simplement le moment de $\vec{f}_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}$ par rapport au centre de chacune des particules :

$$\vec{\Gamma}_i^{\,\mathsf{c}} = a_i'\vec{n}_{ij} \times f_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}\vec{t}_{ij} = a_i' f_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}\ \vec{t}_{ij} \ , \quad \vec{\Gamma}_j^{\,\mathsf{c}} = a_j'\vec{n}_{ji} \times f_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}\vec{t}_{ji} = a_j' f_{ij}^{\,\mathsf{c,T}}\ \vec{t}_{ij} \ . \tag{3.42}$$

3. En plus de son amplitude, le vecteur $\vec{\xi}_{ij}$ mesure également la direction de la déformation tangentielle. Normalement, la direction de la force tangentielle de rappel est exactement l'opposée de celle de la vitesse tangentielle au contact.

3.3.4 Couplage entre forces de contact et forces de lubrification.

Les ingrédients des simulations discrètes de suspensions de particules denses sont essentiellement les mêmes à quelques variante de régularisation près : l'utilisation des formules de lubrification pour l'interaction hydrodynamique entre particules proches, ainsi que des modèle de type ressort-amortisseur (éventuellement non linéaires pour retrouver la loi de Hertz) pour l'estimation des forces de contact entre particules qui se touchent. Beaucoup de travaux couplent ces efforts de manière additive, ce qui correspond à une association en parallèle d'un élément (essentiellement) élastique représentant l'aspérité et d'un élément visqueux représentant le fluide pompé dans la constriction entre les particules (voir figure 3.2). Lorsque le contact survient, l'aspérité se déforme élastiquement, ce qui empêche le contact de se fermer complètement si la rigidité est assez importante.

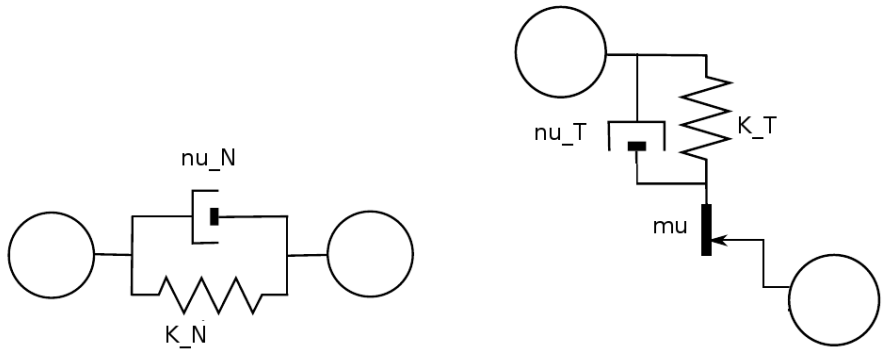


FIGURE 3.2 – Représentation symbolique d'une loi de contact visco-élastique sur la normale (gauche) et visco-élasto-plastique sur le plan tangentiel (droite). Ces lois classiquement utilisées en DEM associent ressorts et amortisseurs en parallèle, correspondant à une addition des forces visqueuse et élastique.

Dans le but de simuler l'écoulement de suspensions d'objets mous, l'algorithme Soft Dynamics proposé par Rognon et Gay établit le couplage des forces élastiques et visqueuses en associant ces éléments en série et lorsque le contact a lieu, et non en parallèle [116, 117, 118]. Un modèle $1D$ du couplage entre élasticité et viscosité dans la dynamique d'une paire de particules en *Soft Dynamics* est représenté par la mise en série d'un ressort représentant la déflection élastique δ_i de la première particule, d'un amortisseur représentant la dissipation dans le fluide intersticiel, puis d'un second ressort représentant la déflection δ_j de la seconde particule (voir figure 3.3). Dans ces simulations, la déformation élastique normale $\delta_{ij} = \delta_i + \delta_j$ suit sa dynamique propre, déterminée par l'équilibre instantané du positionnement des surfaces des grains. Illustrons le modèle par l'exemple d'une collision frontale entre deux particules identiques de rayon a, initié par l'application d'une force extérieure F^{ext} sur les centres des particules. La surface de chaque particule est déformée de $\delta_{ij}/2$, de telle sorte que

$$r_{ij} = 2a + h_{ij} - \delta_{ij} \ . \tag{3.43}$$

Le fluide entre les particules génère des efforts hydrodynamiques visqueux F^{vis} sur leur surface. La surface des particules se déforme sous l'effet de cette force, ce qui génère en retour une force de rappel élastique F^{ela}. On peut alors écrire l'équilibre de l'interface particule/fluide :

$$F^{\text{ela}} = F^{\text{vis}} \ ; \tag{3.44}$$

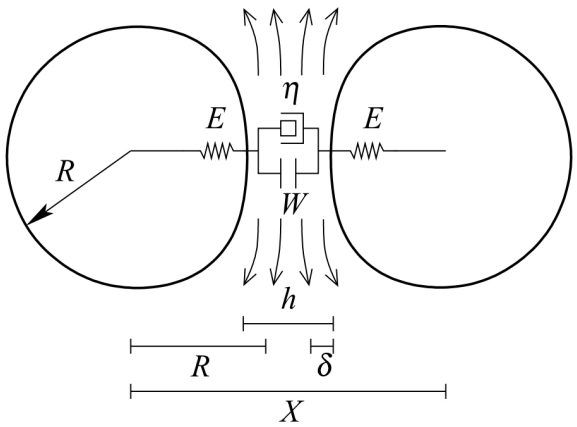


FIGURE 3.3 – Couplage en série utilisé en *Soft Dynamics* entre déformation élastique de deux particules (de raideur E) et écoulement visqueux dans le fluide intersitiel (de viscosité η). une interaction à distance est éventuelle prise en compte (potentiel W). Tiré de [116].

ainsi que l'équilibre des centres des grains :

$$F^{\mathsf{ext}} = F^{\mathsf{ela}} \ . \tag{3.45}$$

La force générée lors de la déformation élastique d'une particule sphérique est reliée à l'amplitude δ de la déformation et à la taille A de la zone déformée par la loi de Hertz :

$$F^{\mathsf{ela}} = \frac{4}{3}\frac{E}{1-\nu^2}A\delta \ . \tag{3.46}$$

Rognon et Gay considèrent trois limites. Dans un cas très dilué, les particules sont très éloignées et $h_{ij} \gg a \gg \delta_{ij}$. Dans ce cas, la force hydrodynamique est la force de trainée de Stokes due à la vitesse de déplacement $\dot{h}_{ij}/2$ des particules. La déformation des particules est négligeable et s'applique sur l'ensemble de chaque particule, tel que $A = a$.
Dans un cas dense, le contact est lubrifié. Les particules sont proches, et la force hydrodynamique est donnée par la théorie de la lubrification. On peut considérer que zone déformée élastiquement, de taille A, est à peu près celle qui participe à la lubrification. Comme le modèle est destiné à la simulation d'objets très mous, potentiellement très déformés, le modèle considère en toute généralité que la force s'exerce entre deux disques parallèles de rayon A et de vitesse relative $\dot{h}_{ij}$:

$$F^{\mathsf{vis}} = \frac{3\pi}{2}\eta_0 A^4 \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}^3} \ . \tag{3.47}$$

Deux sous cas sont alors distingués. Lorsque les forces sont modérées, les particules sont en fait peu déformées, et $a \gg h_{ij} \gg \delta_{ij}$. Dans ce cas, la force de lubrification est en fait celle qui s'exerce entre deux sphères de rayon a ce qui impose $A = \sqrt{2ah_{ij}}$ pour que l'équation (3.47) corresponde à la force de lubrification entre deux sphères.
En revanche, lorsque les forces et la déformation sont importantes et/ou le gap est très fin, $a \gg \delta_{ij} \gg h_{ij}$. Ce cas n'intervient que dans la dynamique d'une suspension dense d'objets très mous. La force élastique est alors fixée par le scaling de Hertz et la force de lubrification conserve son expression

(3.47).

Gay et Rognon proposent d'utiliser une forme fonctionnelle qui interpole dans tous les régimes les expressions de la taille de la région sollicitée, et de la force hydrodynamique :

$$A(h,\delta) = \sqrt{2a\left(\frac{ah}{a+h}+\delta\right)}\ , \tag{3.48}$$

$$F^{\mathsf{ela}}(A,\delta) = \frac{4}{3}\frac{E}{1-\nu^2}\ A\ \delta\ , \tag{3.49}$$

$$F^{\mathsf{vis}}(h,\dot{h},A) = \frac{3\pi}{2}\eta_0\ A^4\ \left(\frac{a+h}{ah}\right)^3\ \dot{h}\ . \tag{3.50}$$

Ces expressions sont ad-hoc mais reproduisent correctement la physique voulue dans les limites considérées. Elles permettent un passage continu d'un domaine à l'autre pendant la simulation. Dans la généralisation tridimensionnelle de ce modèle la déformation est vectorielle, et les couplages représentés par des tenseurs. Les idées sont néanmoins les mêmes [117, 118].

Il s'avère que dans le cas d'une suspension dense, le modèle *Soft dynamics* semble ne pas suffire pour empêcher des recouvrements entre particules. Une force de répulsion additionnelle est alors ajoutée en parallèle à la lubrification afin de garantir que la distance de séparation entre deux particules soit de l'ordre d'une séparation d'équilibre h_0. L'intensité de cette force de répulsion additionnelle est fixée par

$$f_{ij}^{\mathsf{rep}} = \sigma d^2 \left(\frac{h_{ij}}{h_0}\right)^{-8}\ , \tag{3.51}$$

où d est la taille des grains, et σ une échelle de la pression imposée dans la simulation. Cette expression ne semble pas avoir de signification physique et présente un intérêt essentiellement numérique.

Chapitre 4

Choix d'un modèle et implémentation numérique.

L'outil numérique constitue un outil formidable lorsque l'on s'intéresse à un problème aussi complexe que peut l'être l'écoulement d'une suspension de particules. Afin de l'exploiter, un travail de traduction de la physique vers le numérique est nécessaire. Il faut décider d'un niveau de réalisme dans la représentation, choisir un modèle des phénomènes physiques dont on souhaite tenir compte, et en déduire des équations fermées qui sont celles que l'on va entrer dans la machine. Ce travail est la seconde étape : les équations doivent être « numérisées », c'est à dire converties en algorithmes discrets exécutables par un programme informatique constituant le code de simulation proprement dit.
Ce chapitre est consacré à la description précise du modèle retenu ainsi que des méthodes numériques utilisées pour effectuer des simulations.

Dans la continuité des travaux de simulations discrètes de suspensions, nous ne résolvons pas la dynamique du fluide porteur. Sa présence est prise en compte implicitement à travers les efforts auxquels sont soumis les grains. Dans une première partie (section 4.1), nous définissons le système d'équations que nous utilisons pour décrire la dynamique d'un tel système. Nous commençns par revenir sur les choix qui nous avons fait pour prendre en compte le fluide intersticiel et modéliser les efforts hydrodynamiques qui s'exercent sur les particules. Dans la suite, nous décrivons comment on implémenter la dynamique d'écoulement d'une assemblée de grains de façon à imposer un déplacement moyen dans la cellule de simulation correspondant à un cisaillement simple à un taux $\dot{\gamma}$, à volume constant. Des conditions limites périodiques sont établies, et les équations du mouvement sont posées. Enfin, une implémentation du cisaillement simple à pression constante, permettant d'accéder à des suspensions de haute densité, est proposée.

Peu satisfait des modèles de contact existant dans la littérature, notre choix initial a été de voir jusqu'où il était possible de pousser la simulation du cisaillement d'une suspension de grains lisses, dans laquelle les particules n'interagissent que par l'hydrodynamique. Ce projet a débouché sur l'implémentation d'un premier algorithme, où nous proposons l'intégration d'une dynamique spécifique pour les gaps, afin d'éviter les problèmes de gaps fins rapportés par Ball et Melrose [8]. Cet algorithme est présenté dans une seconde partie (section 4.2). Ces simulations fonctionnent dans un régime modéré de densité et de taux de cisaillement, mais il s'est avéré que des problèmes de cohérence numérique du schéma empêchent d'atteindre le régime des suspensions très denses, ainsi que d'exercer un cisaillement plus rapide, nécessaire à l'observation d'une éventuelle transition inertielle.

Suite à ces limites qui mettent en évidence l'importance physique des contacts directs dans la dy-

namique d'écoulement, nous avons décidé d'intégrer les efforts de contact dans la simulation. Dans une troisième partie (4.3), nous présentons un second algorithme de simulation, de type DEM, dans lequel des forces de contact sont mises en jeu. Ce modèle de contact est inspiré des travaux de Gay et Rognon [116, 117] sur les algorithmes de *Soft Dynamics*. Cet algorithme est utilisé dans les simulations de cisaillement à pression constante, et permet de se rapprocher notablement de la densité de blocage dans la suspension.

4.1 Dynamique d'écoulement d'une assemblée de particules.

On simule la dynamique d'écoulement d'une suspension de N particules $i = 1..N$. La suspension est bidisperse, et comprend moitié de grosses particules et moitié de petites particules, avec un rapport de taille $a_{\text{big}} = 0.5 = 1,4\, a_{\text{small}}$. Bien que les particules soient considérées comme tridimensionnelles dans les équations, les simulations effectuées sont en deux dimension. Elles représentent ainsi le cisaillement d'une monocouche de particules. On se place dans une cellule de simulation rectangulaire, de dimensions L_x, L_y. On note $\mathcal{R} = (O, \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ le référentiel de la simulation, O désignant le coin inférieur droit de la cellule, et $\vec{e}_z$ le vecteur unitaire perpendiculaire au plan de la simulation.
On reprend les notations du paragraphe (2.1.1) : η_0 est la viscosité du fluide, ρ la densité commune des particules et du fluide, m_i la masse de la particule i, a_i son rayon, $I_i = 2m_i a_i^2/5$ son moment d'inertie, $\vec{r}_i$ la position dans $\mathcal{R}$ de son centre, $\vec{v}_i$ la vitesse de translation dans $\mathcal{R}$ de son centre, $\vec{\omega}_i$ sa vitesse de rotation, et $\vec{f}_i$ et $\vec{\Gamma}_i$ la force totale et le couple total auxquels elle est soumise. L'écoulement moyen imposé est un écoulement de cisaillement simple :

$$\vec{v}^{\infty}(\vec{r}) = \dot{\gamma} y \vec{e}_x \ , \tag{4.1}$$

que l'on peut toujours écrire sous une forme affine pour tout autre point $\vec{r}'$ de la cellule de simulation :

$$\vec{v}^{\infty}(\vec{r}) = \vec{v}^{\infty}(\vec{r}') + \vec{\omega}^{\infty} \times (\vec{r} - \vec{r}') + \vec{\vec{E}}^{\infty} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \ , \tag{4.2}$$

où $\vec{\omega}^{\infty} = -\frac{1}{2}\dot{\gamma}\vec{e}_z$ est la vitesse de rotation moyenne imposée, et $\vec{\vec{E}}^{\infty} = \frac{1}{2}\dot{\gamma}(\vec{e}_x\vec{e}_y + \vec{e}_y\vec{e}_x)$ le tenseur des taux de déformation moyen imposé. Les équations du mouvement des particules sont les équations de Newton :

$$m_i \frac{\mathrm{d}\vec{v}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{f}_i \ , \quad I_i \frac{\mathrm{d}\vec{\omega}_i}{\mathrm{d}t} = \vec{\Gamma}_i \ . \tag{4.3}$$

Explicitons d'abord les expressions utilisées pour les forces et couples dans l'implémentation numérique des équations (4.3), avant de voir comment celles-ci s'écrivent en pratique dans le code de calcul.

4.1.1 Choix d'un modèle de forces hydrodynamiques.

Dans ce paragraphe, on néglige tout effort extérieur, de telle sorte que les efforts totaux $(\vec{f}_i, \vec{\Gamma}_i)$ auxquels est soumise la particule i sont de nature hydrodynamique uniquement. Par la suite on ajoutera des efforts de contact, qui seront activés si la particule i en vient à « toucher » directement une autre particule, en un sens que l'on précisera.

Efforts de lubrification.

Suivant Ball et Melrose, nous nous plaçons dans un modèle où seules sont conservées les interactions de lubrification entre les particules les plus proches. Les efforts subis par chaque particule i s'écrivent alors comme une somme d'efforts de paire exercées par toutes ses voisines j. Pour chaque paire de grains ij, on reprend les notations du paragraphe (2.2.2). On note $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ le vecteur position relative de la paire, r_{ij} la distance centre à centre et h_{ij} le gap surface à surface entre les deux particules. On note encore $\vec{v}_{ij} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$ la vitesse relative des deux particules et $\vec{\omega}_{ij} = \vec{\omega}_j - \vec{\omega}_i$ la différence de leurs vitesses de rotation. Enfin, on note $\vec{f}_{ij}$ et $\vec{\Gamma}_{ij}$ la force et le couple « exercés » par la particule j sur la particule i. On écrit :

$$\vec{f}_i = \sum_{j \text{ v.} i} \vec{f}_{ij} \ , \quad \vec{\Gamma}_i = \sum_{j \text{ v.} i} \vec{\Gamma}_{ij} \ , \tag{4.4}$$

où les efforts de paire $\vec{f}_{ij}$ et $\vec{\Gamma}_{ij}$ sont donnés dans la limite de particules très resserrées par la seule somme des contributions des trois modes singuliers de la lubrification (déplacements relatifs frontal et tangentiel, et rotation), obtenus selon (2.67), en multipliant chaque composante de la vitesse relative avec le bon coefficient de (**??**). Les efforts exercés sur i s'écrivent alors en fonction des vitesses relatives $\vec{v}_{ij}$ et $\vec{\omega}_{ij}$:

$$\vec{f}_i = -\sum_{j \text{ v.} i} \left[R^{\text{lub}}_{NN} (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}) \vec{n}_{ij} + R^{\text{lub}}_{TT} (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{t}_{ij}) \vec{t}_{ij} \right] \ , \tag{4.5}$$

$$\vec{\Gamma}_i = -\sum_{j \text{ v.} i} R^{\text{lub}}_{T\omega} (\vec{\omega}_{ij} \cdot \vec{e}_z) \vec{e}_z \ , \tag{4.6}$$

où l'on se place dans la base locale $(\vec{n}_{ij}, \vec{t}_{ij}, \vec{t}'_{ij})$ définie au paragraphe (2.2.2), avec nécessairement $\vec{t}'_{ij} = \vec{e}_z$ en deux dimensions. On utilise les expressions de Cox pour les coefficients de résistance hydrodynamique :

$$R^{\text{lub}}_{NN} = -6\pi\eta_0 \frac{a_i^2 a_j^2}{(a_i + a_j)^2} \frac{1}{h_{ij}} \ , \tag{4.7}$$

$$R^{\text{lub}}_{TT} = \quad 2\pi\eta_0 \frac{a_i a_j}{a_i + a_j} \left[\frac{3(a_i - a_j)^2}{5(a_i + a_j)^2} + 1 \right] \ln h_{ij} \ , \tag{4.8}$$

$$R^{\text{lub}}_{T\omega} = -\frac{12\pi}{5} \eta_0 \frac{a_i^2 a_j^2}{(a_i + a_j)^2} \frac{a_i - a_j}{a_i + a_j} \ln h_{ij} \ . \tag{4.9}$$

Une simplification raisonnable est de ne conserver que la divergence la plus sévère en $1/h_{ij}$ du couplage vitesse normale - force normale, dans l'expression des forces (4.5) et de négliger les divergences en $\ln h_{ij}$ du couplage orthoradial. Cet ordre d'approximation revient à également oublier la dynamique en rotation des particules (le couple de lubrification étant également en $\ln h_{ij}$). La seule force restante est donc une force colinéaire à l'axe des centres s'exerce sur les particules, force qui est donc proportionnelle à la viscosité du fluide intersticiel, inversement proportionnelle au gap entre les particules, et opposée à la vitesse normale $\vec{v}^N_{ij}$ de la particule i dans le référentiel de la particule j :

$$\vec{f}_i = \sum_{j \text{ v.} i} \vec{f}_{ij} \ , \qquad \text{avec} \qquad \vec{f}_{ij} = 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \frac{\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}}{h_{ij}} \vec{n}_{ij} \ , \tag{4.10}$$

où $a_{ij} = a_i a_j/(a_i + a_j)$ est le rayon réduit associé à la paire. De manière intuitive, la projection de la vitesse relative entre les deux particules sur la normale n'est autre que le taux de variation du gap. En effet :

$$\vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} = \frac{\dot{\vec{r}}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}}{r_{ij}} = \frac{1}{r_{ij}} \frac{1}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\vec{r}_{ij}^{\,2}) = \frac{1}{2r_{ij}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r_{ij}^2) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(r_{ij}) = \dot{h}_{ij} \ . \tag{4.11}$$

Finalement, la force de lubrification exercée par la particule j sur la particule i s'exprime en fonction du gap et de son taux de variation :

$$\vec{f}_{ij} = 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}} \ \vec{n}_{ij} \ . \tag{4.12}$$

Cette force s'oppose au mouvement relatif des deux particules. Lorsque j se rapproche de i, $\dot{h}_{ij} < 0$ et $\vec{f}_{ij}$ est opposée à $\vec{n}_{ij}$, c'est à dire orientée du centre de j vers le centre de i. La particule i est bien repoussée par la particule j. À l'inverse, quand j s'éloigne de i, $\dot{h}_{ij} > 0$ et $\vec{f}_{ij}$ est orientée du centre de i vers le centre de j. La particule i est aspirée vers la particule j.

Nous nous contenterons des forces de lubrification normales dans toutes les simulations où on ne résout pas la dynamique de rotation des grains. Cette dynamique ne sera résolue que dans les simulations où les forces de frottement sont prises en compte.

Traînée résiduelle : pros and cons.

L'argument principal avancé pour justifier que l'on néglige complètement les interactions à longue portée est un argument d'écrantage. Néanmoins, de nombreux auteurs ajoutent aux efforts de lubrification un terme de traînée de Stokes agissant directement sur les particules. Ces efforts sont donnés par la solution du problème à un corps :

$$\vec{f}_i^{\,\mathsf{Stokes}} = -6\pi a_i[\vec{v}_i - \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_i)] \ , \tag{4.13}$$

$$\vec{\Gamma}_i^{\,\mathsf{Stokes}} = -8\pi a_i^3[\vec{\omega}_i - \vec{\omega}^{\infty}] \ . \tag{4.14}$$

Cette force est évidemment incorrecte telle quelle : l'écoulement du fluide est fortement perturbé par toutes les particules de la suspension, et le calcul de Stokes n'est pas valable. L'ajout de cette force a néanmoins un mérite : il permet une modélisation directe du moteur du mouvement des particules.

On veut discuter de l'erreur que l'on commet en négligeant complètement les interactions de champ lointain. On peut écrire le champ de vitesse en $\vec{r}$ dans le fluide sous sa forme intégrale (2.35), où l'on sépare la contribution de la distribution de traction sur les portions de surface de i et j qui se font face deux à deux (notées $\partial\mathcal{P}_{ij}$), et la contribution de traction sur tout ce qui reste des surface des grains, plus éloignés dans la suspension, et que l'on note collectivement $\mathcal{P}^{\infty}$. On a :

$$\begin{aligned}\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}^{\infty}(\vec{r}) &+ \sum_{j \text{ v.} i} \int_{\vec{\xi} \in \partial\mathcal{P}_{ij}} \vec{\vec{\mathcal{G}}}(\vec{r} - \vec{\xi}) \cdot [-\vec{f}(\vec{\xi})] \ \mathrm{d}^2 S(\vec{\xi}) \\ &+ \int_{\vec{\xi} \in \partial\mathcal{P}^{\infty}} \vec{\vec{\mathcal{G}}}(\vec{r} - \vec{\xi}) \cdot [-\vec{f}(\vec{\xi})] \ \mathrm{d}^2 S(\vec{\xi}) \ .\end{aligned} \tag{4.15}$$

Les efforts exercés sur i sont donnés par l'intégrale de la traction à sa surface, générés par le gradient de ce champ de vitesse. On peut donc séparer disons la force exercée sur i en une contribution due

à la perturbation en champ de vitesse générée par la distribution de traction sur chaque constriction $\partial\mathcal{P}_{ij}$ et une contribution due à la distribution de traction sur toutes les interfaces éloignées $\mathcal{P}^{\infty}$.

La somme dans l'équation (4.15) correspond aux forces de lubrification. L'intégrale restante donne une estimation des efforts de champ lointain que l'on néglige si l'on ne tient compte que de la lubrification. Une façon de les quantifier est de considérer que, « vu de loin », l'écoulement du fluide entre les grains est comparable à l'écoulement dans un matériau poreux. L'écoulement Stokésien dans un poreux dont on a moyenné la microstructure sur différentes réalisations peut se modéliser par l'équation de Brinkman [27, 97] :

$$\eta_0\ \Delta\vec{v} - \frac{\eta_0}{K}\vec{v} = \vec{\nabla}p\ , \tag{4.16}$$

où $K(\phi)$ est la porosité du matériau, qui varie ici avec la densité ϕ de la suspension. Cette équation corrige l'équation de Darcy habituellement utilisée pour caractériser le transport dans un matériau poreux, afin de pouvoir prendre en compte des conditions limites de non-glissement aux parois. L'équation de Brinkman interpole l'équation de Darcy sur les grandes longueurs (où la vitesse est grande devant son laplacien) et l'équation de Stokes sur les petites longueurs (ou c'est le laplacien qui domine). La longueur typique l^* de transition se calcule par un argument d'échelle :

$$\frac{|\eta_0\ \Delta\vec{v}|}{|\frac{\eta_0}{K}\vec{v}|} = \frac{K}{l^{*\,2}} \sim 1\ , \quad \text{soit} \quad l^* \sim \sqrt{K}\ . \tag{4.17}$$

On peut voir la longueur l^* représente la longueur d'écrantage du flot de Stokes due à la nature poreuse du domaine d'écoulement [46]. Le point intéressant est que l'équation de Brinkman étant également linéaire, elle admet aussi un propagateur qui dans $\mathbb{R}^3$ s'écrit [70] :

$$\vec{\vec{\mathcal{B}}}(\vec{r}) = \frac{2l^{*\,2}}{r^3}\left[(1+\frac{r}{l^*}+\frac{r^2}{l^{*\,2}})e^{-\frac{r}{l^*}}-1\right]\vec{\vec{\mathrm{Id}}} + \frac{6l^{*\,2}}{r^5}\left[1-(1+\frac{r}{l^*}+\frac{r^2}{3l^{*\,2}})e^{-\frac{r}{l^*}}\right]\vec{r}\vec{r}\ . \tag{4.18}$$

La décroissance de cette fonction de $\vec{r}$ est en $1/r^3$, beaucoup plus rapide grâce à l'écrantage que celle du tenseur d'Oseen pour l'équation de Stokes. Dès lors il est tentant d'estimer la seconde intégrale de l'équation (4.15) non plus comme la somme d'une distribution surfacique de forces s'appliquant sur la surface des particules éloignées, mais comme la somme d'une distribution de forces volumique, répartie dans tout le volume occupé par ces particules éloignées, avec une densité fonction de la densité en particules dans cette région. Le propagateur est utilisé est alors celui de Brinkman, dont la décroissance en $1/r^3$ permet la convergence de l'intégrale. Après calcul de la contrainte additionnelle associée à cette perturbation en vitesse, et somme de cette contrainte additionnelle à la surface de la particule i, on doit obtenir une force « de traînée » équivalente qui s'applique sur i, et qui correspond donc à la traînée ressentie par une particule immergée dans un matériau poreux. Cette traînée doit nécessairement être inférieure à la traînée de Stokes à cause de l'écrantage, et dépend de la densité en particules de la suspension.

Etant incapable de mener ces calculs, nous nous laissons le choix dans notre simulation d'ajouter ou non une force de traînée que l'on prendra égale à la traînée de Stokes (4.14). Dans la plupart des simulations que nous effectuons (toutes les simulations effectuées avec des particules rugueuses), nous ajoutons cette force.

Identification des paires et réseau.

En raison de l'écrantage des interactions hydrodynamiques, chaque particule n'interagit qu'avec ses voisines. Deux particules i et j ne sont considérées comme voisines dans notre algorithme que si

leur distance de séparation est inférieure à un certain gap de cutoff h^*. Dans ce cas, les forces de lubrification sont multipliées par une fonction de cutoff ϕ_{ij} qui assure la continuité à zéro lorsque les particules s'éloignent au cours de la dynamique

$$\phi_{ij} = \phi(h_{ij}) = 0 \quad \text{si } h_{ij} > h^* \ . \tag{4.19}$$

La fonction de cutoff doit bien évidemment tendre vers un quand le gap tend vers zéro, de manière à ne pas altérer la singularité de lubrification aux gaps fins. Plusieurs possibilités sont envisageables, on utilisera soit un simple cut-off binaire, discontinu en h^* :

$$\begin{aligned} \phi(h_{ij}) &= 1 \quad \text{si } h_{ij} < h^*, \\ &= 0 \quad \text{sinon ;} \end{aligned} \tag{4.20}$$

soit un cut-off continu :

$$\begin{aligned} \phi(h_{ij}) &= \left(1 - \frac{h_{ij}}{h^*}\right)^3 \quad \text{si } h_{ij} < h^*, \\ &= 0 \qquad\qquad\qquad \text{sinon.} \end{aligned} \tag{4.21}$$

Ainsi, l'expression utilisée dans la simulation pour les efforts hydrodynamiques appliquées aux particules est (si l'on tient compte de la traînée) :

$$\vec{f_i} = -\sum_{j\neq i}\left[R^{\text{lub}}_{NN}\phi_{ij}(\vec{v}_{ij}\cdot\vec{n}_{ij})\vec{n}_{ij} + R^{\text{lub}}_{TT}\phi_{ij}(\vec{v}_{ij}\cdot\vec{t}_{ij})\vec{t}_{ij}\right] - 6\pi a_i[\vec{v}_i - \vec{v}^{\infty}(\vec{r}_i)] \ , \tag{4.22}$$

$$\vec{\Gamma}_i = -\sum_{j\neq i} R^{\text{lub}}_{T\omega}\phi_{ij}(\vec{\omega}_{ij}\cdot\vec{e}_z)\vec{e}_z - 8\pi a_i^3[\vec{\omega}_i - \vec{\omega}^{\infty}] \ , \tag{4.23}$$

où les coefficients de résistance hydrodynamique sont ceux de (4.9).

La condition (4.19) est testée sur chaque paire de particule potentielle ij pour voir si il faut tenir compte d'une force $\vec{f}_{ij}$ dans la dynamique des particules à chaque fois que c'est nécessaire au cours de la simulation. L'ensemble des paires de particules identifiées comme « en interaction » est regroupé dans une structure appelée réseau des paires. Le réseau contient donc une information de nature topologique, sur la connectivité des interactions dans la suspension. (i.e. « qui interagit avec qui ? ») À chaque fois qu'il faut estimer les efforts agissant sur une particule, le réseau des paires est parcouru, et toutes les contributions pour tous les voisins sont sommées.

Il peut être couteux en temps de calcul de construire un réseau de paires. En effet, il y a potentiellement $N(N-1)/2$ couples de particules dans le système, dont la majorité ne constituent pas de paire en interaction car constitués de grains trop éloignés. Une optimisation classique utilisée en dynamique moléculaire pour construire un réseau de paire est l'utilisation de listes de Verlet [130, 3]. L'idée est de ne tester la condition (4.19) que dans une liste de voisins potentiels pour chaque grain. Cette liste est construite en divisant la cellule de simulation en cases, dont la taille est une majoration $r^* = \max_{i,j}[h_* + a_i + a_j]$ de la distance à laquelle une paire ij peut exister. Il suffit dès lors de savoir dans quelle case se trouve chaque particule pour ne chercher à construire des paires qu'avec les particules qui se trouvent dans la même case, ou dans les huit cases immédiatement voisines.
Il faut théoriquement actualiser le réseau à chaque pas de temps de la simulation. Dans une dynamique très amortie, comme peut l'être la dynamique visqueuse d'une suspension, il est raisonnable de penser que le réseau ne change pas très souvent et qu'il est dommage de chercher à l'actualiser trop

fréquemment. Une seconde optimisation peut être mise en place pour exploiter ce fait. L'idée est de se donner une marge m supplémentaire dans la distance à laquelle on considère que deux particules sont en interactions. La condition à tester est alors

$$h_{ij} \leqslant h^* + m \ . \tag{4.24}$$

Faisant cela, on compte un peu trop de paires. Il y a donc des paires faussement en interaction dans le réseau, pour lesquelles $\phi_{ij} = 0$. En contrepartie, on peut alors montrer [33] que si le réseau des paires est correct à un temps t, il est encore correct à un temps $t' > t$ si :

$$2 \max_i [\|\delta\vec{r}_i(t,t')\|] + \dot{\gamma}(t'-t)r^* < m \ , \tag{4.25}$$

où $\delta\vec{r}_i(t,t')$ est le « déplacement non-affine à rebours » de la particule i, défini par :

$$\delta\vec{r}_i(t,t') = \vec{r}_i(t') - \vec{r}_i(t) - \dot{\gamma}(t'-t)y_i(t')\vec{e}_x \ . \tag{4.26}$$

4.1.2 Conditions limites de Lees-Edwards et équations SLLOD.

Le cisaillement simple à un taux $\dot{\gamma}$ est implémenté dans la simulation en utilisant les conditions limites dites de Lees-Edwards ([Lees, Edwards, 1972]) (figure 4.1). Le but de ces conditions limites est de simuler le cisaillement d'un milieu infini obtenu en répliquant le domaine $[0, L_x[\times[0, L_y[$ (appelé cellule de référence) indéfiniment dans les deux directions de l'espace, tout en introduisant un décalage horizontal D croissant entre les cellules de deux rangées adjacentes. Les paramètres géométriques L_x, L_y et D caractérisent la géométrie de la cellule de Lees-Edwards, et doivent être considérés comme des variables du problème, dépendant (éventuellement) du temps.

La périodicité de ce pavage revient à construire un réseau de cellules de Bravais, dont la cellule primitive est l'ensemble de tous les points $s\vec{a} + s'\vec{b}$ pour $s, s' \in [0, 1[$, où $\vec{a}$ et $\vec{b}$ sont les vecteurs de Bravais définis par :

$$\vec{a} = \begin{bmatrix} L_x \\ 0 \end{bmatrix} \ , \quad \vec{b} = \begin{bmatrix} D \\ L_y \end{bmatrix} \ . \tag{4.27}$$

À l'instant initial, le décalage est nul, et la cellule primitive coincide avec la cellule de référence. Chaque grain i est représenté par une famille infinie de grains, un dans chaque cellule du réseau de Bravais, qui sont tous image les uns des autres. On appelle grain primitif le grain qui se trouve à chaque instant dans la cellule primitive, et on note $\vec{r}_i^0$ ses coordonnées. Chaque image du grain primitif est caractérisée par un couple d'entiers relatifs (n, m), et a pour position :

$$\vec{r}_i^{(n,m)} = \vec{r}_i^0 + n\vec{a} + m\vec{b} \ . \tag{4.28}$$

On appelle grain de référence le seul grain parmi le grain primitif et toutes ses images qui se trouve dans la cellule de référence. La position $\vec{r}_i(t)$ de la particule i s'identifie aux coordonnées du grain de référence. Au cours de la simulation, il arrive que le grain de référence courant sorte par un des bords de la cellule. Le rôle de grain de référence est alors pris par l'image qui vient par périodicité de rentrer dans la cellule au niveau du bord opposé. La fonction $\vec{r}_i(t)$ est donc discontinue en temps.

Les conditions aux limites périodiques de Lees-Edwards permettent de simuler la déformation du système selon un champ de vitesse affine moyen. Cette déformation peut être imposée en moyenne en prescrivant que toutes les images d'un grain i ont la même vitesse non affine, qui sert alors de variable

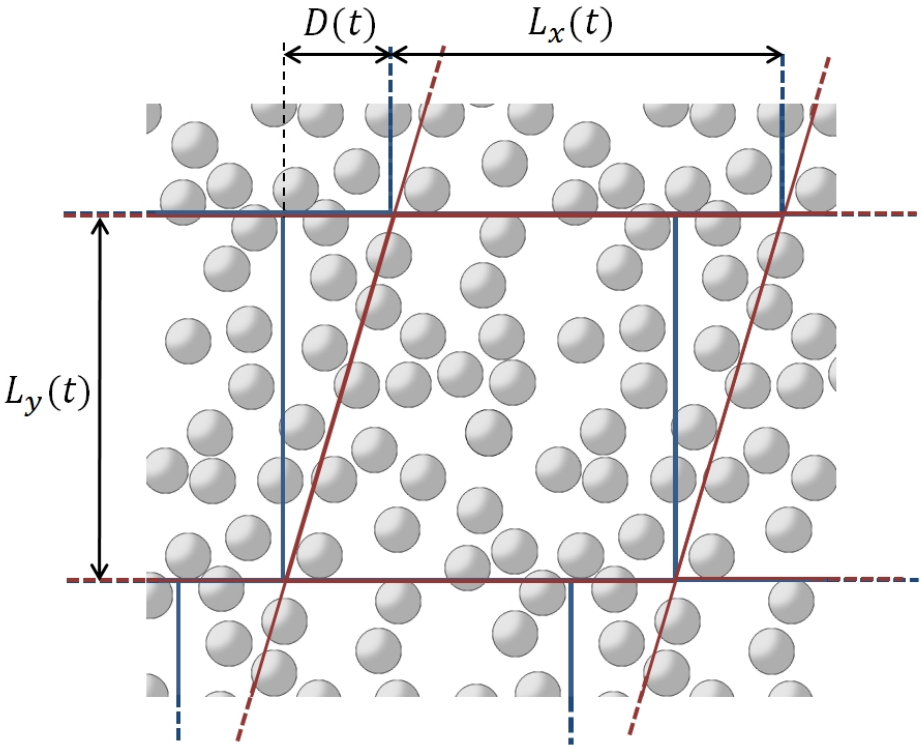


FIGURE 4.1 – Cellule de Lees-Edwards utilisée pour simuler le cisaillement simple d'une assemblée de grains. La cellule de référence est dessinée en bleu, le pavage de Bravais correspond à sa périodisation en rouge. La géométrie de la cellule de Lees-Edwards est caractérisée par les paramètres L_x, L_y et D.

cinétique dans la simulation. C'est cette condition de périodicité des vitesses non affines qui permet de trouver l'équation dynamique des variables géométriques L_x, L_y et D de la cellule. Ecrivons l'égalité de la vitesse non affine $\vec{c}_i^{(n,m)}$ d'une image (n,m) et $\vec{c}_i^0$ du grain primitif :

$$\begin{aligned}\vec{c}_i^{(n,m)} &= \dot{\vec{r}}_i^{(n,m)} - [\vec{\nabla}\vec{v}^\infty]\cdot\vec{r}_i^{(n,m)} \\ &= \dot{\vec{r}}_i^0 + n\dot{\vec{a}} + m\dot{\vec{b}} - [\vec{\nabla}\vec{v}^\infty]\cdot(\vec{r}_i^0 + n\vec{a} + m\vec{b}) \\ &= \vec{c}_i^0 + n(\dot{\vec{a}} - [\vec{\nabla}\vec{v}^\infty]\cdot\vec{a}) + m(\dot{\vec{b}} - [\vec{\nabla}\vec{v}^\infty]\cdot\vec{b}) \ . \end{aligned} \tag{4.29}$$

La condition d'égalité des vitesses non affines de toutes les images d'un même grain, s'écrit donc $\forall n, m \in \mathbb{Z}$:

$$n(\dot{\vec{a}} - [\vec{\nabla}\vec{v}^\infty]\cdot\vec{a}) + m(\dot{\vec{b}} - [\vec{\nabla}\vec{v}^\infty]\cdot\vec{b}) = \vec{0} \ . \tag{4.30}$$

Dans le cas d'un cisaillement simple, le gradient de vitesse moyen est :

$$\vec{\nabla}\vec{v}^\infty = \begin{bmatrix} 0 & \dot{\gamma} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \ . \tag{4.31}$$

Compte tenu de l'expression des vecteurs de Bravais (4.27), cette condition prescrit la dynamique des paramètres géométriques de la cellule de Lees-Edwards $L_x(t)$, $L_y(t)$ et $D(t)$. On a en effet :

$$n\dot{L}_x + m(\dot{D} - \dot{\gamma}L_y) = 0 \ , \tag{4.32}$$

$$m\dot{L}_y = 0 \ . \tag{4.33}$$

Pour que ces égalités soient valables quels que soient n et m, il faut imposer :

$$\dot{L}_x = 0 \ , \tag{4.34}$$

$$\dot{L}_y = 0 \ , \tag{4.35}$$

$$\dot{D} = \dot{\epsilon}D + \dot{\gamma}L_y \ . \tag{4.36}$$

La dimension de la boîte sont constantes, ce qui est compatible avec un volume $V = L_x L_y$ constant. Seul le décalage $D(t) = \dot{\gamma}t$ avec les cellules d'au dessus ou d'en dessous augmente avec le temps, ce qui impose en pratique le cisaillement de la suspension. Cette dynamique assure la périodicité d'image en image : les seules variables à calculer au cours de la simulation sont alors celles des particules de référence. Positions $\underline{\vec{r}}$ et vitesses non affines $\underline{\vec{c}}$ sont intégrées numériquement à partir des équations dites SLLOD [3, 48], qui s'écrivent :

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{c}_i + [\vec{\nabla}\vec{v}^{\infty}] \cdot \vec{r}_i \ , \tag{4.37}$$

$$\dot{\vec{c}}_i = \frac{\vec{f}_i}{m_i} - [\vec{\nabla}\vec{v}^{\infty}] \cdot \vec{c}_i \ , \tag{4.38}$$

où les efforts sont calculés à partir des positions et des vitesses non affines avec les formules (4.23). Ces équations sont classiquement utilisées en dynamique moléculaire. Elles sont rigoureusement équivalentes aux équations de Newton si $\dot{\gamma}$ ne dépend pas du temps.

4.1.3 Asservissement en pression.

Lorsque l'on effectue un cisaillement à volume constant d'une suspension modérément dense, on observe que de temps à autre, les particules s'arqueboutent en travers de la cellule de cisaillement et forment des arches rendant la dynamique localement très raide, et difficile à résoudre numériquement. Ces structures se forment aléatoirement, et il semblent qu'elles soient d'autant plus probables que la suspension est dense.

Une façon d'outrepasser ce phénomène et d'accéder à des densités plus élevées est d'autoriser la cellule à temporairement gonfler légèrement pour aider le système à passer un cap difficile. Cela revient à considérer que la variable de contrôle n'est plus la densité (ou le volume), mais la pression exercée dans la cellule. Dans une simulation, on connaît à chaque instant la totalité des informations microscopiques dans toute la cellule, ce qui nous permet entre autre de mesurer la pression (voir paragraphe (**??**)).
Le volume n'étant plus constant, il faut pouvoir dilater ou contracter la cellule pour maintenir une pression donnée. Cela se fait en ajoutant une composante de dilatation isotrope de vitesse (variable) $\dot{\epsilon}(t)$ au champ de vitesse affine moyen imposé à la suspension :

$$\vec{v}^{\infty}(\vec{r}) = \dot{\gamma}y\vec{e}_x + \dot{\epsilon}(t)\vec{r} \ , \tag{4.39}$$

correspondant à un tenseur des gradients de vitesse :

$$\vec{\nabla}\vec{v}^{\infty} = \begin{bmatrix} \dot{\epsilon} & \dot{\gamma} \\ 0 & \dot{\epsilon} \end{bmatrix} \ . \tag{4.40}$$

Les équations régissant la dynamique de la géométrie de la boîte sont alors modifiées et s'écrivent à partir de la condition (4.30) qui impose $\forall n, m$:

$$n(\dot{L}_x - \dot{\epsilon} L_x) + m(\dot{D} - \dot{\epsilon} D - \dot{\gamma} L_y) = 0 \ , \tag{4.41}$$

$$m(\dot{L}_y - \dot{\epsilon} L_y) = 0 \ . \tag{4.42}$$

On obtient finalement les équations pour la géométrie de la boîte :

$$\dot{L}_x = \dot{\epsilon} L_x \ , \tag{4.43}$$

$$\dot{L}_y = \dot{\epsilon} L_y \ , \tag{4.44}$$

$$\dot{D} = \dot{\epsilon} D + \dot{\gamma} L_y \ . \tag{4.45}$$

Les positions et vitesses non affines des particules sont toujours solutions des équations sllod (4.38), comme dans le cas où $\dot{\epsilon} = 0$. Ces équations ne sont plus formellement équivalentes aux équations de Newton (la dynamique de Newton n'est en fait pas compatible avec les conditions aux limites périodiques de Lees-Edwards), mais génère des propriétés statistiques identiques pour le sytème simulé [48].

Reste à se donner un moyen de calculer $\dot{\epsilon}(t)$ pour assurer que la pression converge vers une valeur de consigne fixée P^*, et y reste. Une façon simple d'assurer cette trajectoire de la pression vers la consigne est d'écrire une relaxation sur un temps τ :

$$\dot{\epsilon}(t) = \frac{1}{\tau} \frac{P(t) - P^*}{P^*} \ , \tag{4.46}$$

tel que si la pression est trop importante, $P(t) - P^*$ et donc $\dot{\epsilon}(t)$ sont positifs, provoquant la dilatation de la boîte ce qui laisse de l'espace aux particules, et diminue la pression. À l'inverse, si la pression est trop basse, $\dot{\epsilon}(t)$ est négatif, entraîné une contraction de la boîte et une augmentation de la pression jusqu'à la consigne. Le paramètre τ fixe l'échelle de temps de cette dynamique. Il s'avère que sa valeur n'influe pas trop sur la stabilité des algorithmes. Nous l'avons pris d'ordre $\gamma_0/\dot{\gamma}$ pour donner assez de temps au système pour s'adapter à la pression imposée, en générant un transitoire sur un cisaillement γ_0 raisonnable (d'ordre unité).

4.1.4 Préparation des systèmes.

Dans ce paragraphe, on décrit rapidement la procédure de préparation des systèmes. Comme on souhaite étudier les propriétés stationnaires des suspensions, l'état initial n'a que peu d'importance puisque l'on précisaille suffisamment le système jusqu'à « l'oublier » complètement. Afin de précisailler le système, il faut tout de même être capable de faire avancer la dynamique, ce qui suppose de travailler sur une configuration réaliste acceptable par les algorithmes, c'est à dire sans recouvrement.

En pratique, les configurations sont générées de la façon suivante. Premièrement, les N particules sont positionnées dans la cellule, avec des coordonnées déterminées au hasard dans le rectangle $[0, L_x[\times[0, L_y[$, selon une distribution équiprobable. Bien entendu de gros recouvrements sont générés. Dans une seconde phase, une dynamique est intégrée dans le temps, jusqu'à minimiser une énergie potentielle $e = \sum_j V(r_{ij})$. L'expression du potentiel répulsif utilisé pour cette phase n'a pas d'importance tant qu'il défavorise fortement les recouvrements [1]. Cette dynamique ne permet de générer des systèmes acceptables qu'à des densités surfaciques allant jusqu'à 70%. Au delà, une seconde

1. Nous utilisons un potentiel de Lennard-Jones tiré d'une bibliothèque utilisée dans un autre projet.

phase de compression isotrope ($\dot{\gamma} = 0$, $\dot{\epsilon} < 0$) avec un des algorithmes développés est effectuée jusqu'à obtenir la densité voulue. Enfin, le système est précisaillé de 500% de façon à effacer toute influence de la configuration de départ. Ce précisaillement a été déterminé de façon empirique, en observant simplement la durée du transitoire généralement constaté lors des simulations.

4.2 Un premier algorithme : Dynamique des gaps.

Dans cette première approche, on ne s'intéresse qu'au cisaillement simple à volume constant, à la vitesse $\dot{\gamma}$. On ne tient compte que des efforts hydrodynamiques de lubrification (pas de traînée), et pour simplifier encore le problème on ne conserve que la divergence la plus sévère dans les interactions, celle en $1/h$ des forces normales. Dans ce cas, on oublie la dynamique de rotation des particules, et les équations du mouvement sont :

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{c}_i + \dot{\gamma} y_i \vec{e}_x, \tag{4.47}$$

$$\dot{\vec{c}}_i = \frac{1}{m_i} \sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}} \phi_{ij} \ \vec{n}_{ij} - \dot{\gamma}(\vec{c}_i \cdot \vec{e}_y)\vec{e}_x \ . \tag{4.48}$$

Comme le cisaillement se fait à volume constant, la dynamiquer de la boîte est triviale. Les dimensions L_x et L_y ne changent pas, et le décalage vaut directement $D(t) = \dot{\gamma}\, t$.

Dans les équations du mouvement, on peut a priori calculer directement le gap et son taux de variation à partir des variables positions et vitesses des particules :

$$h_{ij} = \|\vec{r}_j - \vec{r}_i\| - (a_i + a_j) \ , \tag{4.49}$$

$$\dot{h}_{ij} = (\vec{c}_j - \vec{c}_i + \dot{\gamma}(y_j - y_i)\vec{e}_x) \cdot \vec{n}_{ij} \ , \tag{4.50}$$

ce qui permet de fermer les équations du mouvement (4.48).

Il existe inévitablement une certaine erreur incompressible lorsque l'on traite numériquement une équation, due à la nature discrète de la représentation informatique des grandeurs physiques. Notons e_A l'erreur près à laquelle une grandeur A est connue. L'existence de cette erreur est acceptable tant que $e_A \ll A$ pour toutes les grandeurs manipulées dans le calcul.

Si $\vec{r}_j$ et $\vec{r}_i$ sont connus avec une erreur $\vec{e}_r$ telle que $e_r \ll r_i, r_j$, alors la relation 4.49 nous permet de connaître le gap h_{ij} avec une erreur $e_h \sim e_r$. La difficulté de cette dynamique particulière est qu'elle génère par nature des gaps arbitrairement fins. Quelle que soit la précision à laquelle on s'astreint, et l'erreur sur les positions que l'on s'autorise, il arrive donc inéluctablement un moment dans la simulation où l'erreur sur le gap est du même ordre que le gap, voir plus grand que lui : $e_h \sim h$. Les forces étant inversement proportionnelles aux gaps, l'erreur propagée sur les forces est alors également relativement grande. L'erreur se propage ensuite aux vitesses, puis aux positions, provoquant l'arrêt de l'algorithme [8].

La solution que nous proposons à ce problème est ne n'estimer les gaps à partir des positions des particules que lorsque les paires se forment, et que les particules sont assez éloignées pour que l'erreur relative générée soit faible. Par la suite, lors de l'évolution de chaque paire après sa formation, le gap suit sa propre dynamique, indépendamment des centres des particules. Cette formulation permet de connaître les $\{h_{ij}\}$ et $\{\dot{h}_{ij}\}$ avec une erreur faible en toute circonstance. Les forces hydrodynamiques sont ainsi toujours correctement évaluées. La dynamique sur les centres des particules est toujours

intégrée, en utilisant pour les forces les valeurs des $\{h_{ij}\}$ et $\{\dot{h}_{ij}\}$ fournie par la dynamique des gaps. Les deux dynamiques sont menées en parallèle. Elles sont analytiquement compatibles, car issues des mêmes équations. Numériquement, la compatibilité ne peut cependant être assurée que jusqu'à un certain ordre.

Dans un premier paragraphe, l'équation utilisée pour la dynamique des gaps est dérivée. Cette équation sera intégrée en parallèle aux équations (4.48) dans cet algorithme. Dans un second paragraphe, nous détaillons comment ces équations sont discrétisées.

4.2.1 Opérateur de rigidité et dynamique des gaps.

On veut calculer indépendamment la dynamique des gaps et celle des positions des centres des grains. La première étant issue d'une projection de la seconde, elle est analytiquement redondante. Le travail direct sur les gaps permet cependant une plus grande précision numérique sur le calcul des forces de lubrification. Bien que les deux dynamiques sont analytiquement compatibles, l'équivalence numérique après discrétisation n'est pas garantie a priori.

Pour décrire l'évolution des gaps en introduisant le moins d'erreur numérique possible, il est important d'estimer correctement les forces de lubrification exercées sur les particules. Comme celles-ci sont proportionnelles au cutoff près à $\dot{h}_{ij}/h_{ij} = \mathrm{d}\ln h_{ij}/\mathrm{d}t$, on travaillera directement sur la variable $s_{ij} = \ln h_{ij}$. On a :

$$\dot{s}_{ij} = \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}} \ , \tag{4.51}$$

où $\dot{h}_{ij} = \vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij}$. Dérivons une seconde fois cette expression :

$$\ddot{s}_{ij} = \frac{\ddot{h}_{ij}}{h_{ij}} - \dot{s}_{ij}^2 \ . \tag{4.52}$$

Lorsque l'on calcule la dérivée seconde du gap, il apparaît la dérivée du vecteur directeur $\vec{n}_{ij}$:

$$\ddot{h}_{ij} = \dot{\vec{v}}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} + \vec{v}_{ij} \cdot \dot{\vec{n}}_{ij} \quad . \tag{4.53}$$

Le premier terme de cette somme fait intervenir les accélérations des particules, c'est à dire les forces auxquelles elles sont soumises, divisées par leur masse : $\dot{\vec{v}}_{ij} = \vec{f}_j/m_j - \vec{f}_i/m_i$. Chaque force s'exprime ensuite comme une somme sur les forces de lubrification exercées par les voisines :

$$\dot{\vec{v}}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} = \left[\frac{1}{m_j}\vec{f}_j - \frac{1}{m_i}\vec{f}_i\right] \cdot \vec{n}_{ij} \tag{4.54}$$

$$= \left[\frac{1}{m_j}\sum_{k\neq j}\vec{f}_{jk} - \frac{1}{m_i}\sum_{k\neq i}\vec{f}_{ik}\right] \cdot \vec{n}_{ij} \quad . \tag{4.55}$$

Pour calculer le second terme, il faut connaître $\dot{\vec{n}}_{ij}$:

$$\dot{\vec{n}}_{ij} = \mathrm{d}_t(\vec{r}_{ij}/r_{ij}) = \frac{\dot{\vec{r}}_{ij}}{r_{ij}} - \frac{\dot{r}_{ij}}{r_{ij}^2}\vec{r}_{ij} = \frac{\vec{v}_{ij} - \dot{r}_{ij}\,\vec{n}_{ij}}{r_{ij}} = \frac{\vec{v}_{ij}^{\,T}}{r_{ij}} \quad , \tag{4.56}$$

où $\vec{v}_{ij}^{\,T}$ est la partie orthoradiale de la vitesse relative de la paire ij. Comme $\dot{\vec{n}}_{ij}$ est perpendiculaire à $\vec{n}_{ij}$, il ne reste dans le second terme de (4.53) que le carré de la vitesse orthordiale divisée par la distance centre à centre :

$$\vec{v}_{ij} \cdot \dot{\vec{n}}_{ij} \;=\; (\vec{v}_{ij}^{\,N} + \vec{v}_{ij}^{\,T}) \cdot \frac{\vec{v}_{ij}^{\,T}}{r_{ij}} \;=\; \frac{(\vec{v}_{ij}^{\,T})^2}{r_{ij}} \quad . \tag{4.57}$$

Ce terme peut s'interpréter comme une force d'inertie due à la rotation locale de la paire ij à une vitesse angulaire O_{ij} :

$$O_{ij} = \frac{\|\vec{v}_{ij}^{\,T}\|}{r_{ij}} \quad . \tag{4.58}$$

La dynamique du gap suit finalement l'équation

$$\ddot{s}_{ij} \;=\; \frac{1}{h_{ij}}\left[\left[\frac{1}{m_j}\sum_{k\neq j}\vec{f}_{jk} - \frac{1}{m_i}\sum_{k\neq i}\vec{f}_{ik}\right]\cdot\vec{n}_{ij} + r_{ij}\,O_{ij}^2\right] - \dot{s}_{ij}^2 \tag{4.59}$$

$$\;=\; \frac{1}{h_{ij}}\left[\sum_k\left[\frac{1}{m_j}f_{jk}\vec{n}_{jk} - \frac{1}{m_i}f_{ik}\vec{n}_{ik}\right]\cdot\vec{n}_{ij} + r_{ij}\,O_{ij}^2\right] - \dot{s}_{ij}^2 \quad , \tag{4.60}$$

où on note $f_{ij} = \vec{f}_{ij}\cdot\vec{n}_{ij} = 6\pi\eta_0\phi_{ij}\dot{s}_{ij} = \pm\|\vec{f}_{ij}\|$ si $i \neq j$ et $f_{ii} = f_{jj} = 0$. On peut voir l'équation (4.60) comme la composante ij d'une relation entre des champs scalaires définis sur les paires. La somme $\sum_k[\frac{1}{m_j}f_{jk}\vec{n}_{jk} - \frac{1}{m_i}f_{ik}\vec{n}_{ik}]\cdot\vec{n}_{ij}$ correspond à un opérateur linéaire appliqué au champ $\{f_{kl}\}$. On note cet opérateur $\underline{\underline{\mathfrak{M}}}$ (dimension inverse d'une masse) :

$$\ddot{s}_{ij} \;=\; \frac{1}{h_{ij}}\left[(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\{f_{kl}\})_{ij} + r_{ij}\,O_{ij}^2\right] - \dot{s}_{ij}^2 \quad . \tag{4.61}$$

Comme les particules sont en nombre fini dans la simulation, l'opérateur $\underline{\underline{\mathfrak{M}}}$ est une matrice carrée, dont la taille à un pas de temps donné dépend du nombre de paires de particules dans le réseau. On peut calculer une expression pour le coefficient $\mathfrak{M}_{[ij][kl]}$ de cette matrice, qui couple la paire $[ij]$ et la paire $[kl]$ en développant la somme qui apparaît dans (4.60) :

$$\begin{aligned}(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\{f_{kl}\})_{ij} \;&=\; \sum_k\left[\frac{1}{m_j}f_{jk}\vec{n}_{jk} - \frac{1}{m_i}f_{ik}\vec{n}_{ik}\right]\cdot\vec{n}_{ij}\\ &=\; \sum_k\left[\sum_l\frac{\delta_{jl}}{m_l}f_{lk}\vec{n}_{lk} - \sum_l\frac{\delta_{il}}{m_l}f_{lk}\vec{n}_{lk}\right]\cdot\vec{n}_{ij}\\ &=\; \sum_k\;\sum_l\frac{1}{m_l}f_{lk}\,\vec{n}_{lk}\cdot\vec{n}_{ij}\;(\delta_{jl}-\delta_{il}) \quad .\end{aligned} \tag{4.62}$$

Cette somme porte sur tous les couples non ordonnés (k,l) possibles, et compte donc les termes correspondant à une paire kl deux fois via les couples (k,l) et (l,k) (les termes (k,k) sont aussi comptés mais sont nuls). Elle peut être séparée en deux sommes, une pour les couples $k<l$, l'autre regroupant les couples $l<k$:

$$(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\{f_{kl}\})_{ij} \;=\; \sum_k\;\sum_{l<k}\frac{1}{m_l}f_{lk}\,\vec{n}_{lk}\cdot\vec{n}_{ij}\;(\delta_{jl}-\delta_{il}) + \sum_k\;\sum_{l>k}\frac{1}{m_l}f_{lk}\,\vec{n}_{lk}\cdot\vec{n}_{ij}\;(\delta_{jl}-\delta_{il}) \quad . \tag{4.63}$$

Les indices de ces sommes étant muets, on choisit de renommer l en k et k en l dans la seconde somme :

$$\begin{aligned}(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\{f_{kl}\})_{ij} &= \sum_k \sum_{l<k} \frac{1}{m_l} f_{lk}\,\vec{n}_{lk}\cdot\vec{n}_{ij}\ (\delta_{jl}-\delta_{il}) + \sum_l \sum_{k>l} \frac{1}{m_k} f_{kl}\,\vec{n}_{kl}\cdot\vec{n}_{ij}\ (\delta_{jk}-\delta_{ik}) \\ &= \sum_k \sum_{l<k} \left[\frac{1}{m_l} f_{lk}\,\vec{n}_{lk}\cdot\vec{n}_{ij}\ (\delta_{jl}-\delta_{il}) + \frac{1}{m_k} f_{kl}\,\vec{n}_{kl}\cdot\vec{n}_{ij}\ (\delta_{jk}-\delta_{ik})\right] \quad . \end{aligned} \tag{4.64}$$

Comme $\vec{n}_{lk} = -\vec{n}_{kl}$ et $f_{lk} = \vec{f}_{kl}\cdot\vec{n}_{kl} = (-\vec{f}_{kl})\cdot(-\vec{n}_{kl}) = f_{kl}$, on peut factoriser $f_{kl}\,\vec{n}_{kl}$ dans la somme :

$$(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\{f_{kl}\})_{ij} = \sum_k \sum_{l<k} f_{kl}\,\vec{n}_{kl}\cdot\vec{n}_{ij}\left[\frac{\delta_{jk}-\delta_{ik}}{m_k} - \frac{\delta_{jl}-\delta_{il}}{m_l}\right] \quad . \tag{4.65}$$

L'ensemble des indices (k,l) tels que $k<l$ sur lesquels porte cette somme compte chaque paire de deux particules voisines une et une fois. Cette somme est donc bien écrite pour représenter un produit matrice-vecteur dans l'espace des paires :

$$(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\{f_{kl}\})_{ij} = \sum_{kl} \mathfrak{M}_{ij,kl}\, f_{kl} \quad , \tag{4.66}$$

où le coefficient $\mathfrak{M}_{ij,kl}$ de couplage entre une paire ij et une paire kl a pour expression :

$$\mathfrak{M}_{ij,kl} = \vec{n}_{kl}\cdot\vec{n}_{ij}\left[\frac{\delta_{jk}-\delta_{ik}}{m_k} - \frac{\delta_{jl}-\delta_{il}}{m_l}\right] \quad . \tag{4.67}$$

Comme $f_{kl} = 6\pi\eta_0 a_{kl}^2 \phi_{kl}\dot{s}_{kl}$ pour toute paire $_{kl}$, l'équation (4.61), s'écrit sous la forme d'une équation différentielle sur le champ $\{\dot{s}_{kl}\}$:

$$\ddot{s}_{ij} = \frac{1}{h_{ij}}\left[(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\,\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R\{\dot{s}_{kl}\})_{ij} + r_{ij}\,O_{ij}^2\right] - \dot{s}_{ij}^2 \quad , \tag{4.68}$$

où $\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R$ est l'opérateur diagonal regroupant les préfacteurs des forces :

$$\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R = \mathrm{Diag}_{[kl]}(\{6\pi\eta_0 a_{kl}^2\phi_{kl}\}) \ . \tag{4.69}$$

4.2.2 Discrétisation en temps.

On travaille dans les variables $\{\vec{r}_i(t), \vec{c}_i(t)\}$ pour les centres, et $\{h_{ij}(t), \dot{s}_{ij}(t)\}$ pour les gaps. On rappelle les équations du mouvement de ces deux dynamiques :

$$\dot{\vec{r}}_i = \vec{c}_i + \dot{\gamma} y_i \vec{e}_x, \tag{4.70}$$

$$\dot{\vec{c}}_i = \frac{1}{m_i}\sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \dot{s}_{ij}\phi_{ij}\ \vec{n}_{ij} - \dot{\gamma}(\vec{c}_i\cdot\vec{e}_y)\vec{e}_x \ , \tag{4.71}$$

$$\dot{h}_{ij} = h_{ij}\ \dot{s}_{ij} \ , \tag{4.72}$$

$$\ddot{s}_{ij} = \frac{1}{h_{ij}}\left[(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}\,\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R\{\dot{s}_{kl}\})_{ij} + r_{ij}\,O_{ij}^2\right] - \dot{s}_{ij}^2 \ . \tag{4.73}$$

Ces deux dynamiques sont intégrées numériquement en parallèle, la dynamique des centres se nourrissant de l'expression des forces calculée par la dynamique des gaps, et la dynamique des gaps se nourrissant de celle des centres pour calculer les termes non critiques (le cutoff $\phi_{ij} = \phi(r_{ij})$ nécessaire au calcul de l'opérateur $\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R$, les vecteurs normaux $\vec{n}_{ij} = \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ nécessaires au calcul de la rigidité $\underline{\underline{\mathfrak{M}}}$ et le terme d'inertie de rotation $r_{ij}O_{ij}^2 = (\|\vec{v}_{ij}^{\,T})^2\|/r_{ij}$).

Un schéma semi-implicite.

Le temps est discrétisé en posant $t_n = n\Delta t$, où $\Delta t = 10^{-3}$ est le pas de temps. Pour n'importe quelle fonction du temps $f(t)$, on note $f(n)$ son estimation numérique au temps t_n. L'évolution des variables dynamiques se fait en deux étapes : une étape d'accélération où la vitesse des particules est modifiée, suivie d'une étape de convection où les particules sont déplacées.

Pendant l'étape d'accélération, on veut calculer les incréments :

$$\vec{c}_i(n+1) = \vec{c}_i(n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \dot{\vec{c}}_i(t)\mathrm{d}t \ , \tag{4.74}$$

$$\dot{s}_{ij}(n+1) = \dot{s}_{ij}(n) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \ddot{s}_{ij}(t)\mathrm{d}t \ . \tag{4.75}$$

Pour calculer ces intégrales, on suppose que toutes les variables évoluent assez lentement pour être approximées par leur valeur en t_n, à l'exception de la variable $\dot{s}(t)$ qui intervient dans l'expressions des forces, et que l'on approxime par une moyenne $(\dot{s}(t_n) + \dot{s}(t_{n+1}))/2$. Cette approximation constitue une discrétisation semi-implicite des forces. Elle revient à considérer que les particules sont soumises pendant $\Delta t/2$ à des forces calculées à partir de leur position au début du pas de temps, puis pendant $\Delta t/2$ à des forces calculées à partir de leur position à la fin du pas de temps. On écrit ainsi $\forall t \in [t_n, t_{n+1}[$:

$$\ddot{s}_{ij}(t) = \frac{1}{h_{ij}(t)}\left[(\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(t)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(t)\{\dot{s}_{kl}(t)\})_{ij} + r_{ij}(t)\, O_{ij}(t)^2\right] - \dot{s}_{ij}(t)^2 \tag{4.76}$$

$$\approx \frac{1}{h_{ij}(n)}\left[(\frac{1}{2}\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(n)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(n)\{\dot{s}_{kl}(n) + \dot{s}_{kl}(n+1)\})_{ij} + r_{ij}(n)\, O_{ij}(n)^2\right] - \dot{s}_{ij}(n)^2 \ . \tag{4.77}$$

En remplaçant $\ddot{s}_{ij}(t)$ par cette estimation dans l'intégrale de la relation (4.75) on obtient une relation implicite sur le champ des $\{\dot{s}_{ij}(n+1)\}$, que l'on peut alors calculer en résolvant un problème inverse :

$$\begin{aligned}&([\underline{\underline{\mathrm{Id}}} - \frac{\Delta t}{2}\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n)\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(n)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(n)]\{\dot{s}_{kl}(n+1)\})_{ij} \\ &\quad = ([\underline{\underline{\mathrm{Id}}} + \frac{\Delta t}{2}\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n)\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(n)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(n)]\{\dot{s}_{kl}(n)\})_{ij} + \Delta t\left[\frac{r_{ij}(n)\, O_{ij}(n)^2}{h_{ij}(n)} - \dot{s}_{ij}(n)^2\right] \ ,\end{aligned} \tag{4.78}$$

où $\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n)$ est l'opérateur diagonal constité des inverses des gaps :

$$\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n) = \mathrm{Diag}_{[kl]}(\{1/h_{kl}(n)\}) \ . \tag{4.79}$$

On incrémente de même les vitesses non affines $\{\vec{c}_i\}$ en exprimant la force $\vec{f}_i(t)$ en fonction des $\{\dot{s}_{ij}(t)\}$. La discrétisation s'écrit de façon cohérente, $\forall t \in [t_n, t_{n+1}[$:

$$\dot{\vec{c}}_i(t) = \frac{1}{m_i}\sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}(t)\dot{s}_{ij}(t)\vec{n}_{ij}(t) - \dot{\gamma}(\vec{c}_i(t)\cdot\vec{e}_y)\vec{e}_x \tag{4.80}$$

$$\approx \frac{1}{m_i}\sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}(n)\frac{1}{2}(\dot{s}_{ij}(n) + \dot{s}_{ij}(n+1))\vec{n}_{ij}(n) - \dot{\gamma}(\vec{c}_i(n)\cdot\vec{e}_y)\vec{e}_x \ . \tag{4.81}$$

Connaissant $\dot{s}_{ij}(n+1)$, on peut calculer :

$$\vec{c}_i(n+1) = \vec{c}_i(n) + \frac{\Delta t}{m_i}\sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}(n)\frac{1}{2}(\dot{s}_{ij}(n) + \dot{s}_{ij}(n+1))\vec{n}_{ij}(n) \tag{4.82}$$

$$- \dot{\gamma}\Delta t(\vec{c}_i(n)\cdot\vec{e}_y)\vec{e}_x \ . \tag{4.83}$$

Pendant l'étape de convection, les positions et les gaps sont incrémentés à l'aide d'un pas d'Euler explicite d'ordre un, où leur dérivée est calculée à partir des variables au début du pas de temps :

$$\vec{r}_i(n+1) = \vec{r}_i(n) + \Delta t[\vec{c}_i(n) + \dot{\gamma} y_i(n)] \ , \tag{4.84}$$

$$h_{ij}(n+1) = h_{ij}(n) + \Delta t \ h_{ij}(n) \ \dot{s}_{ij}(n) \ . \tag{4.85}$$

Inversion de la matrice dynamique.

Pour résoudre l'équation (4.78) et calculer les $\{\dot{s}_{ij}(n+1)\}$ il est nécessaire d'inverser l'opérateur dynamique $\underline{\underline{\mathrm{Id}}} - \frac{\Delta t}{2}\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n)\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(n)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(n)$, qui se trouve être une matrice étant donné que l'on manipule un nombre fini du paire. On peut montrer que la matrice de rigidité $\underline{\underline{\mathfrak{M}}}$ est une matrice symétrique, mais cette propriété de symétrie est potentiellement perdue à la multiplication avec une matrice diagonale. En conséquence, nous utilisons un algorithme de gradient biconjugué stabilisé pour estimer l'inverse de cette matrice.

Cet algorithme permet de résoudre un système linéaire $\underline{\underline{A}}\,\underline{x} = \underline{b}$ de façon itérative à partir d'une estimation initiale $\underline{x}_0$ de la solution. Il ne requiert pas la symétrie de la matrice $\underline{\underline{A}}$, et fonctionne bien si celle-ci est creuse. Il est donc bien adapté au problème que l'on souhaite résoudre. Nous ne revenons pas ici sur l'implémentation exacte de cet algorithme, les détails des itérations pouvant facilement se trouver dans la littérature.

Récapitulatif de l'algorithme.

Connaissant $\{\vec{r}_i(n), \vec{c}_i(n)\}$ et $\{h_{ij}(n), \dot{s}_{ij}(n)\}$, les calculs effectués à chaque pas de temps pour calculer une estimation de ces variables au temps $n+1$ sont dans l'ordre :

- Calcul des forces auxquelles sont soumises les particules au début du pas de temps, i.e. en fonction des variables au temps n (actuellement en mémoire) :

$$\vec{f}_i(n) = \sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}(n)\dot{s}_{ij}(n)\vec{n}_{ij}(n) \ . \tag{4.86}$$

- Calcul de la dérivée des $\{\vec{r}_i\}$:

$$\dot{\vec{r}}_i(n) = \vec{c}_i(n) + \dot{\gamma} y_i(n) \ . \tag{4.87}$$

- Calcul de la dérivée des $\{h_{ij}\}$:

$$\dot{h}_{ij}(n) = h_{ij}(n) \ \dot{s}_{ij}(n) \ . \tag{4.88}$$

- Calcul du membre de droite de l'équation (4.78) :

$$\mathrm{rhs}_{ij} = ([\underline{\underline{\mathrm{Id}}} + \frac{\Delta t}{2}\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n)\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(n)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(n)]\{\dot{s}_{kl}(n)\})_{ij} + \Delta t\left[\frac{r_{ij}(n)\,O_{ij}(n)^2}{h_{ij}(n)} - \dot{s}_{ij}(n)^2\right] \ . \tag{4.89}$$

- Construction de la matrice dynamique à inverser :

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{\mathrm{Id}}} - \frac{\Delta t}{2}\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_L(n)\underline{\underline{\mathfrak{M}}}(n)\underline{\underline{\mathfrak{D}}}_R(n) \ . \tag{4.90}$$

- Calcul des $\{\dot{s}_{ij}(n+1)\}$ en résolvant le problème linéaire à l'aide d'une routine de gradient biconjugué stabilisée :

$$\dot{s}_{ij}(n+1) = (\underline{\underline{A}}^{-1}\{\mathsf{rhs}_{kl}\})_{ij} \ . \tag{4.91}$$

- Calcul des $\{h_{ij}(n+1)\}$ à l'aide d'un pas d'Euler d'ordre un :

$$h_{ij}(n+1) = h_{ij}(n) + \Delta\ t h_{ij}(n)\ \dot{s}_{ij}(n) \ . \tag{4.92}$$

- Actualisation des $\{h_{ij}\}$ et des $\{\dot{s}_{ij}\}$ pour toutes les paires. Les anciennes valeurs sont perdues.
- Accélération des particules sur un demi pas de temps avec les valeurs gardées en mémoire pour les forces :

$$\vec{c}_i(n+\frac{1}{2}) = \vec{c}_i(n) + \frac{\Delta t}{2m_i}\vec{f}_i(n) - \dot{\gamma}\frac{\Delta t}{2}(\vec{c}_i(n)\cdot\vec{e}_y)\vec{e}_x \ . \tag{4.93}$$

- Calcul des forces auxquelles sont soumises les particules à la fin du pas de temps, i.e. en fonction des variables au temps $n+1$ (maintenant en mémoire). Les facteurs dépendant des positions et vitesses des centres sont toujours évalués à partir de leur valeur au temps n, qui n'a pas été modifiée depuis le début du pas de temps. On calcule :

$$\vec{f}_i(n+1) = \sum_j 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}(n)\dot{s}_{ij}(n+1)\vec{n}_{ij}(n) \ . \tag{4.94}$$

- Accélération des particules sur un demi pas de temps avec les nouvelles valeurs des forces :

$$\vec{c}_i(n+1) = \vec{c}_i(n+\frac{1}{2}) + \frac{\Delta t}{2m_i}\vec{f}_i(n+1) - \dot{\gamma}\frac{\Delta t}{2}(\vec{c}_i(n)\cdot\vec{e}_y)\vec{e}_x \ . \tag{4.95}$$

- Convection des grains :

$$\vec{r}_i(n+1) = \vec{r}_i(n) + \Delta t\dot{\vec{r}}_i(n) \ . \tag{4.96}$$

- Actualisation du temps et du décalage de la cellule de Lees-Edwards :

$$t(n+1) = (n+1)\Delta t \ , \quad D(n+1) = \dot{\gamma}\, t(n+1) \ . \tag{4.97}$$

- Comme les grains ont bougé, il faut vérifier si le réseau doit être recalculé selon que la condition (4.25) sur le déplacement qui vient d'être effectué est vérifiée ou non.

4.3 Un second algorithme : Prise en compte des contacts.

Ce premier algorithme que nous avons développé souffre de deux limites. Premièrement, des difficultés numériques dues à la formation de gaps très fins nous empêchent de simuler des suspensions très denses, ce qui est pourtant nécessaire à une caractérisation propre de la divergence de la viscosité à la densité de blocage, ainsi que d'atteindre des cisaillements plus rapides nécessaires à l'observation d'une transition vers un régime inertiel.
Deuxièmement, et comme nous l'avons développé dans la partie consacrée à l'état de l'art des connaissances sur la rhéologie des suspensions, il est connu que des contacts directs entre grains doivent subvenir, et jouent un rôle important dans la dynamique d'écoulement. Il est dès lors important de pouvoir tenir compte de ces effets.

Devant ces constatations, il a été décidé de développer un algorithme prenant en compte la formation de contacts. Dans cet algorithme, nous résolvons également la dynamique en rotation des particules. Comme nous souhaitons explorer le comportement de suspensions aussi denses que possibles qui sont difficiles à cisailler à volume constant, des simulations à pression constante seront aussi menées. Cela nécessite d'introduire un taux de compression $\dot{\epsilon}(t)$ dans le champ de vitesse affine imposé en moyenne et dans la dynamique de la cellule de Lees-Edwards. Enfin, une traîné de Stokes est également (éventuellement) prise en compte. Les équations du mouvement s'écrivent alors :

$$\begin{aligned}
\dot{\vec{r}}_i &= \vec{c}_i + [\vec{\nabla}\vec{v}^{\infty}] \cdot \vec{r}_i \\
\dot{\vec{c}}_i &= \frac{1}{m_i}\Big[-6\pi\eta_0\vec{c}_i + \sum_j [f_{ij}^{\mathsf{N}}\vec{n}_{ij} + f_{ij}^{\mathsf{lub,T}}\vec{t}_{ij} + f_{ij}^{\mathsf{c,T}}\vec{t}_{ij}]\Big] - [\vec{\nabla}\vec{v}^{\infty}] \cdot \vec{c}_i \\
\dot{\vec{\omega}}_i &= \frac{1}{I_i}\Big[-8\pi a_i^3(\vec{\omega}_i + \frac{1}{2}\dot{\gamma}\vec{e}_z) + \sum_j [\vec{\Gamma}_{ij}^{\mathsf{lub}} + \vec{\Gamma}_{ij}^{\mathsf{c}}]\Big] \\
\dot{L}_x &= \dot{\epsilon} L_x \\
\dot{L}_y &= \dot{\epsilon} L_y \\
\dot{D} &= \dot{\epsilon} D + \dot{\gamma} L_y \ ,
\end{aligned} \tag{4.98}$$

où $\dot{\epsilon}$ est calculé instantanément à partir de la pression dans le système. Cet ensemble d'équation décrit la dynamique générale du système. Nous pouvons donc simuler aussi bien un cisaillement à volume constant ou à pression constante.

Un premier paragraphe est dédié à la description du modèle que nous utilisons pour décrire les forces de contacts entre grains très proches. Ces forces ont une composante normale, ainsi qu'une partie tangentielle dues aux frottement que nous prenons en compte. Dans un second paragraphe, nous décrivons la discrétisation des équations du mouvement qui a été implémentée pour ce second algorithme.

4.3.1 Modèle de contact.

S'inspirant de l'algorithme *Soft Dynamics* de Rognon et Gay [116], nous modélisons les forces normales générées dans les paires de grains par la mise en série d'éléments élastiques et visqueux, dans laquelle nous faisons disparaître l'élément visqueux quand le contact proprement dit est généré (figure 4.2).
En ce qui concerne les forces tangentielles et les couples, nous les séparons en une composante de lubrification calculée à partir des coefficients de la matrice de résistance de Cox (4.9), et une composante de contact qui survient quand le contact se forme. Ces deux contributions sont simplement ajoutées l'une à l'autre dans les équations du mouvement.

Force normale.

La question qui se pose est la suivante : comment passer dynamiquement d'une force d'interaction visqueuse due à la lubrification, à une force de contact élastique, due aux contacts entre aspérités ?
Dans le modèle que nous utilisons, le contact ou quasi contact entre deux particules est modélisé comme la mise en série d'un élément visqueux correspondant au fluide intersticiel entre deux éléments élastiques correspondant aux particules, capables de se déformer. Le gap est alors une variable interne de la paire, dont la dynamique est découplée de la dynamique des centres à cause d'une petite déflection δ_{ij}. Géométriquement, on a la relation :

$$r_{ij} = a_i + a_j + h_{ij} - \delta_{ij} \ . \tag{4.99}$$

On considère deux régimes d'interaction, selon que les particules sont en contact ou non. Lorsque le gap est supérieur à la taille typique ϵ des aspérités, la paire est en régime lubrifié, et l'interaction est purement hydrodynamique. Dans ce régime, les particules sont proches et considérées comme sphériques, c'est donc la formule de lubrification qui s'applique. On représente alors la paire de particules comme une série ressort-amortisseur-ressort, ce qui permet d'exprimer l'amplitude de la déflexion δ_{ij} en fonction de la largeur du gap, en écrivant l'équilibre de la surface d'une particule :

$$f_{ij}^{\mathsf{ela}} = f_{ij}^{\mathsf{lub}} \ (= f_{ij}^{\mathsf{N}}) \ , \tag{4.100}$$

où la force élastique est calculée à l'aide des expressions de Hertz (2.102) et (2.106). On obtient :

$$-K_{ij}\delta_{ij}^{3/2} = 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij} \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}} \ , \tag{4.101}$$

où $K_{ij} = 4E\sqrt{2d_{ij}} \ / \ 3(1-\nu^2)$ est une raideur équivalente pour la paire.

De manière à garantir la positivité du gap au travers des erreurs numériques, on choisit comme variable interne à la paire le logarithme du gap :

$$s_{ij} = \ln(r_{ij} - a_i - a_j) \ . \tag{4.102}$$

De cette façon, le gap est calculé comme une exponentielle et est toujours positif. Lorsque les particules entrent en interaction, la variable interne s_{ij} est initialisée au logarithme du gap $r_{ij} - a_i - a_j$. Pendant toute l'interaction, elle suit sa propre dynamique, que l'on calcule en estimant sa dérivée $\dot{s}_{ij}$. En parallèle, la déflection élastique est calculée à partir de s_{ij} en utilisant la relation géométrique (4.99) :

$$\delta_{ij} = a_i + a_j + \exp[s_{ij}] - r_{ij} \tag{4.103}$$

On exprime alors $\dot{s}_{ij}$ à partir de δ_{ij}, puis de s_{ij} :

$$\dot{s}_{ij} = \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}} = -\frac{K_{ij}\delta_{ij}^{3/2}}{6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}} = -\frac{K_{ij}}{6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \phi_{ij}} \left[a_i + a_j + \exp(s_{ij}) - r_{ij}\right]^{3/2} \ . \tag{4.104}$$

On considère que le contact se forme lorsque les particules se rapprochent à une distance inférieure ou égale à la taille caractéristique ϵ des aspérités. La paire entre alors dans un régime purement Hertzien. Tant que la paire est en compression ($f_{ij} < 0$) la dynamique de la variable interne s_{ij} est bloquée, car nous faisons l'hypothèse que les aspérités indéformables s'arqueboutent en travers du gap pour et empêchent sa fermeture. On impose alors une dynamique constante pour le gap :

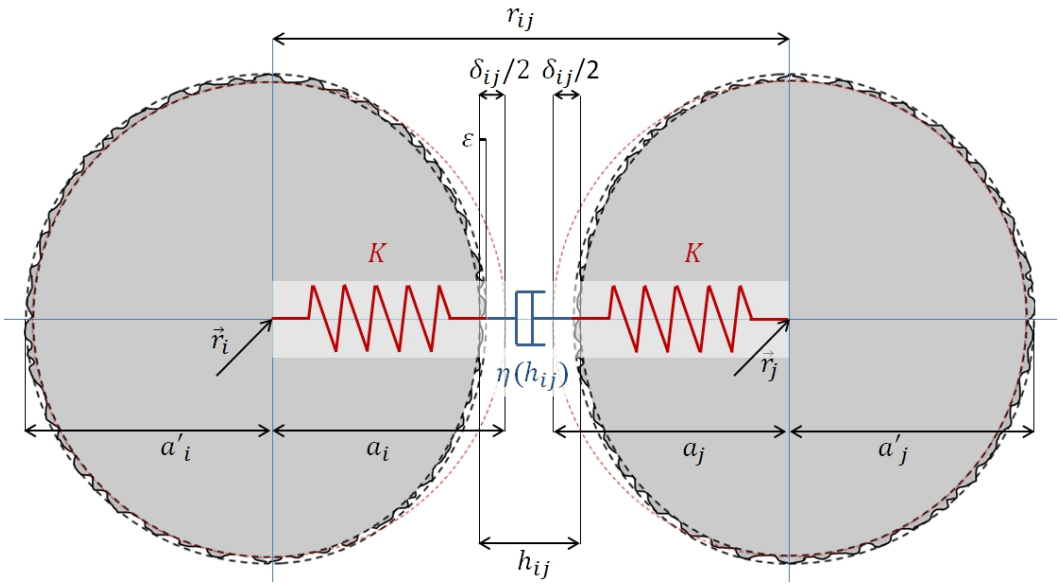
$$\dot{s}_{ij} = 0 \ , \tag{4.105}$$

$$h_{ij} = \epsilon \ . \tag{4.106}$$

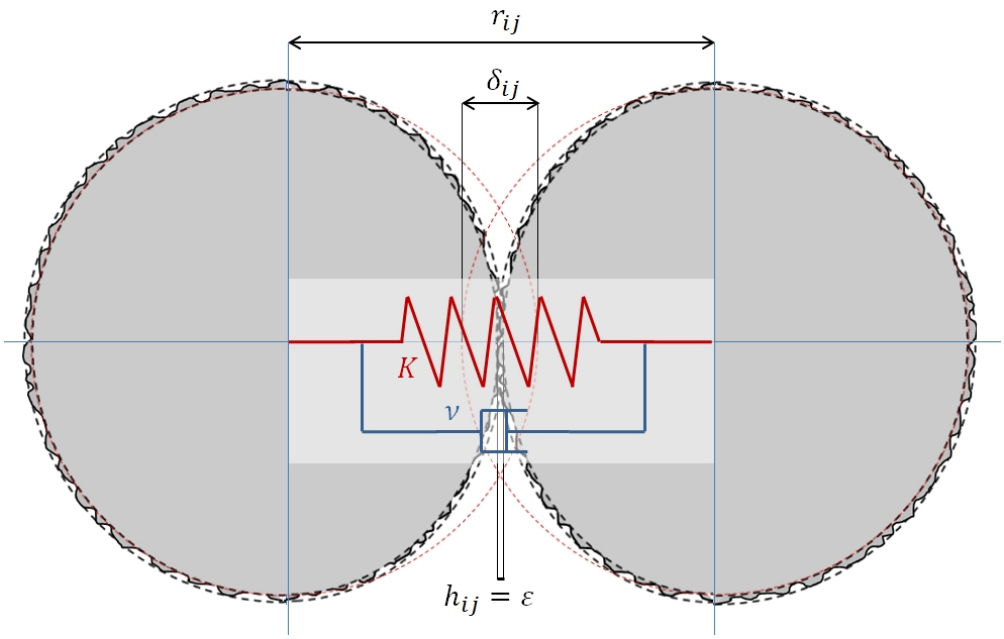
Le contact est alors modélisé par le couplage en parallèle d'un ressort unique de rigidité K_{ij} et d'un amortisseur de coefficient de dissipation ν. La force qui est générée est donnée par

$$f_{ij}^{\mathsf{N}} = -K_{ij}\delta_{ij}^{3/2} - \nu\dot{\delta}_{ij} = -K_{ij}\left(a_i + a_j + \epsilon - r_{ij}\right)^{3/2} + \nu\dot{r}_{ij} \ . \tag{4.107}$$

La seule raison qui permette à la force élastique développée dans le contact de varier dans le temps est donc que la distance r_{ij} entre les centres varie à cause de la dynamique globale de l'assemblée des



(a) Modèle de lubrification.



(b) Modèle de contact.

FIGURE 4.2 – Schéma récapitulatif du modèle de contact lubrifié utilisé pour la force normale. En haut, on représente l'interaction entre deux grains qui ne se touchent pas comme une série ressort-amortisseur-ressort, où la valeur de la force est fixée par la lubrification intersticielle. Quand le contact se ferme, le modèle bascule dans le régime représenté en bas, où la force est modélisée par un ressort mis en série avec un amortisseur.

particules. La déformation élastique est encaissée par la totalité de l'espace occupé par les particules, contrairement aux modèles additifs qui correspondent plutôt à une vision où ce sont les aspérités qui se déforment. Le coefficient de dissipation ν représente tout mécanisme de dissipation envisageable dans un contact élastique fermé immergé dans un fluide Newtonien. Il n'a pas de signification physique claire, même si son origine est ici probablement hydrodynamique, contrairement à ce qui se passe dans la collision entre deux grains secs.

Forces tangentielles et frottements.

La force tangentielle générée dans les contacts est prise comme la somme d'une force tangentielle de lubrification et d'une force tangentielle de contact. La force tangentielle de lubrification est calculée à partir des expressions de la matrice de résistance hydrodynamique (4.9).
Les forces tangentielles de contact sont calculées de manière itérative à partir d'un modèle classique de DEM. Lorsque le contact se forme, une variable interne $\vec{\xi}_{ij} = \xi_{ij}\vec{t}_{ij}$ est générée (elle est initialisée à zéro) et suit ensuite sa dynamique propre tant que le contact existe. À chaque instant, la force de contact tangentielle est calculée comme une force de rappel sur ξ_{ij}, tout en respectant le critère de Coulomb :

$$\begin{aligned} f_{ij}^{\mathsf{c,T}} &= K_{ij}\xi_{ij} \quad \text{si } |K_{ij}\xi_{ij}| \leqslant \mu|f_{ij}^N| \\ &= \mu|f_{ij}^N| \quad \text{sinon.} \end{aligned} \tag{4.108}$$

La dynamique de ξ_{ij} évolue par ailleurs en suivant :

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_{ij} &= \vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}} \cdot \vec{t}_{ij} \quad \text{si } K_{ij}|\xi_{ij}| \leqslant \mu|f_{ij}^N| \\ &= 0 \qquad\qquad \text{sinon,} \end{aligned} \tag{4.109}$$

où $\vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}}$ est la vitesse au contact (2.97), calculée à partir des vitesses de translation et de rotation des particules, les rayons des particules étant corrigés par la déflection au contact et la taille des aspérités :

$$\vec{v}_{ij}^{\,\mathsf{c}} = \vec{v}_{ij} + [(a_j + \epsilon - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{\omega}_j + (a_i + \epsilon - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{\omega}_i] \times \vec{n}_{ij} \ . \tag{4.110}$$

Couples.

Les couples générés dans les paires sont pris comme la somme d'un couple de lubrification et du couple généré par les forces de contact, quand le contact est réalisé. Les couples de lubrification sont calculés à partir des expressions de la matrice de résistance hydrodynamique (4.9). Le couple des forces de contact s'écrit simplement :

$$\vec{\Gamma}_{ij}^{\,\mathsf{c}} = (a_i + \epsilon - \frac{\delta_{ij}}{2})\vec{n}_{ij} \times f_{ij}^{\mathsf{c,T}}\vec{t}_{ij} \ . \tag{4.111}$$

4.3.2 Discrétisation en temps.

L'avantage numérique d'un modèle où les particules peuvent se déformer est que la difficulté à maintenir la stabilité de la dynamique est moins aigüe. Il s'avère qu'il y a moins de problèmes de stabilité que dans le cas de particules rigoureusement indéformables, ce qui permet l'utilisation d'un schéma de discrétisation explicite. Afin de garantir un niveau de précision constant au cours de la dynamique,

nous optons pour schéma de type Runge-Kutta 4,5 à pas de temps adaptatif. Le principe de fonctionnement des méthodes de type Runge-Kutta est détaillé dans l'annexe B.

Dans le problème qui nous occupe, nous travaillons sur les variables $\{\vec{r}_i(t), \vec{c}_i(t)\}$ pour les centres, $\{s_{ij}(t), \xi_{ij}(t)\}$ pour les paires, $L_x(t)$, $L_y(t)$ et $D(t)$ pour la cellule. On regroupe ces variables dans un vecteur $\mathbf{y}(t)$. Les équations sllod ainsi que le modèle de contact choisi permettent d'écrire toutes les dérivées (équations(4.98) pour les variables des particules et de la cellule, équations (4.104) ou (4.105) pour les $\{s_{ij}(t)\}$ selon que les paires sont ou non au contact et équation (4.109) pour les $\{\xi_{ij}(t)\}$ des paires au contact).
On peut écrire l'ensemble de ces relations sous la forme $\dot{\mathbf{y}}(t) = f(\mathbf{y}(t))$, adaptée à l'implémentation d'un schéma de type Runge-Kutta (aucune des dérivées ne dépent explicitement du temps). Nous choisissons d'implémenter le schéma Runge-Kutta adaptatif d'ordre $4,5$ proposé par Cash et Karp [30] (le schéma est d'ordre 4, l'ordre 5 sert à estimer l'erreur commise). Ce schéma est explicite et s'implémente de la façon suivante :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{y}_1 &= \mathbf{y}(n) \\
\mathbf{y}_2 &= \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \left[\frac{1}{5} f(\mathbf{y}_1) \right] \\
\mathbf{y}_3 &= \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \left[\frac{3}{40} f(\mathbf{y}_1) + \frac{9}{40} f(\mathbf{y}_2) \right] \\
\mathbf{y}_4 &= \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \left[\frac{3}{10} f(\mathbf{y}_1) - \frac{9}{10} f(\mathbf{y}_2) + \frac{6}{5} f(\mathbf{y}_3) \right] \\
\mathbf{y}_5 &= \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \left[-\frac{11}{54} f(\mathbf{y}_1) + \frac{5}{2} f(\mathbf{y}_2) - \frac{70}{27} f(\mathbf{y}_3) + \frac{35}{27} f(\mathbf{y}_4) \right] \\
\mathbf{y}_6 &= \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \left[\frac{1631}{55296} f(\mathbf{y}_1) + \frac{175}{512} f(\mathbf{y}_2) + \frac{575}{13824} f(\mathbf{y}_3) + \frac{44275}{110592} f(\mathbf{y}_4) + \frac{253}{4096} f(\mathbf{y}_5) \right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{y}(n+1) = \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \Bigg[& \frac{37}{378} f(\mathbf{y}_1) + 0 \times f(\mathbf{y}_2) + \frac{250}{621} f(\mathbf{y}_3) + \frac{125}{594} f(\mathbf{y}_4) \\
& + 0 \times f(\mathbf{y}_5) + \frac{512}{1771} f(\mathbf{y}_6) \Bigg] \qquad (4.112) \\
\mathbf{y}^*(n+1) = \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \Bigg[& \frac{2825}{27648} f(\mathbf{y}_1) + 0 \times f(\mathbf{y}_2) + \frac{18575}{48384} f(\mathbf{y}_3) + \frac{13525}{55296} f(\mathbf{y}_4) \\
& + \frac{277}{14336} \times f(\mathbf{y}_5) + \frac{1}{4} f(\mathbf{y}_6) \Bigg] , \qquad (4.113)
\end{aligned}
$$

où $\mathbf{y}(n+1)$ et $\mathbf{y}^*(n+1)$ sont des estimations respectivement à l'ordre 4 et 5 en Δt_n de la valeur des variables au temps t_{n+1}. L'erreur réalisée est estimée par la différence

$$\mathbf{e}(n) = \mathbf{y}(n+1) - \mathbf{y}^*(n+1) \ . \qquad (4.114)$$

L'erreur cible est fixée en pratique en se donnant une échelle d'erreur relative **sc** pour chaque variable (essentiellement fixée à 1), ainsi qu'un paramètre global $\varepsilon_{\mathsf{CK}} = 10^{-5}$ tel que :

$$\mathbf{e}^* = \varepsilon_{\mathsf{CK}} \ \mathbf{sc} \ . \qquad (4.115)$$

Il faut noter que pendant l'exécution proprement dite du schéma de Cash-Karp, les grains sont déplacés au gré des pas d'Euler partiels exécutés. Cela peut générer des modifications du réseau, ayant pour

conséquence un changement du nombre de paires, et donc de dimensionnalité du problème. Afin d'éviter ces complications, une routine de « gel » du réseau est activée pendant la résolution du schéma, empêchant temporairement des paires de disparaître ou d'être créées, quand bien même elles le devraient. Le gel est relaché une fois les calculs effectués, et le réseau est recalculé à la fin du pas de temps.

Chapitre 5

Interlude : Le cisaillement d'une paire de particules.

Avant d'aborder les résultats de rhéologie macroscopique obtenus, nous présentons dans ce court chapitre, une résolution analytique de la limite diluée du modèle que nous utilisons en simulation. Dans ce modèle, l'hydrodynamique se résume aux interactions de lubrification entre grains, et à une traînée de Stokes par rapport à l'écoulement moyen de cisaillement simple.
Le but de ce calcul est d'illustrer la dynamique d'une paire dans ce modèle. Il nous permet de plus de mettre en évidence la nécessaire formation de contacts, et de calculer la distribution des contacts générés.
Il faut néanmoins garder à l'esprit que ce calcul n'a pas un sens physique clair, étant donné qu'il traite la limite diluée d'un modèle physiquement pertinent dans la limite dense.

5.1 Une solution analytique pour des particules lisses.

On veut calculer les trajectoires dans le problème à deux corps correspondant à la limite visqueuse du modèle choisi dans notre simulation. Dans ce modèle, les particules sont soumises à la force de lubrification (dont on ne considère que la composante normale) et à la force de traînée de Stokes.

5.1.1 Trajectoires.

On note a_1 et a_2 les rayons des deux particules, $a = a_1 a_2/(a_1 + a_2)$ le rayon réduit, $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ leur position, $\vec{v}_1$ et $\vec{v}_2$ leur vitesse totale, $\vec{c}_1$ et $\vec{c}_2$ leur vitesse non affine, r la distance centre à centre, h le gap entre les surfaces des deux particules, et $\vec{n}_{12} = \vec{r}_{12}/r = (\cos\theta_{12}, \sin\theta_{12})$, le vecteur unitaire pointant de la particule 1 vers la particule 2, θ_{12} étant l'angle orienté que fait $\vec{n}_{12}$ avec $\vec{e}_x$ et qui paramétrise l'inclinaison de la paire[1]. On appelle b le paramètre d'impact de la collision. Dans la limite visqueuse, la masse des particules est nulle, et les équations du mouvement s'écrivent :

$$\vec{0} = -6\pi\eta_0 a_1 \vec{c}_1 + 6\pi\eta_0 a^2 \phi(h) \frac{\dot{h}}{h} \vec{n}_{12} \ , \tag{5.1}$$

$$\vec{0} = -6\pi\eta_0 a_2 \vec{c}_2 - 6\pi\eta_0 a^2 \phi(h) \frac{\dot{h}}{h} \vec{n}_{12} \ . \tag{5.2}$$

1. On conserve les indices 12 ou 21 pour toutes les grandeurs orientées, comme $\vec{c}_{12}$, $\vec{n}_{12}$ ou θ_{12}. On note sans indice les grandeurs non orientées comme h ou $r = \|\vec{r}_{12}\|$.

On se donne la possibilité de prendre en compte le cutoff $\phi(h)$ imposé dans notre simulation. On examinera trois possibilités tout au long du calcul :

$$\begin{aligned}
\phi(h) &= 1 && && \text{(pas de cutoff.)} \\
\phi(h) &= 1 && \text{si } h < h^*,\ 0 \text{ sinon.} && \text{(cutoff discontinu.)} \\
\phi(h) &= \left(1 - \frac{h}{h^*}\right)^3 && \text{si } h < h^*,\ 0 \text{ sinon.} && \text{(cutoff continu.)}
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Nous illustrerons ainsi les effets de l'existence d'un cutoff et de sa forme sur la dynamique d'une collision hydrodynamique dans ce modèle. Le détail des calculs dans le cas du cutoff continu sont donnés en annexe.

Calcul des vitesses.

Le calcul exact des vitesses non affines $\vec{c}_1$ et $\vec{c}_2$ en fonction des positions est ici possible. Les équations (5.1) et (5.2) nous apprennent immédiatement qu'elles sont radiales. On peut donc les écrire sous la forme :

$$\vec{c}_1 = \vec{c}_1 \cdot \vec{n}_{12}\ \vec{n}_{12}\ , \quad \vec{c}_2 = \vec{c}_2 \cdot \vec{n}_{12}\ \vec{n}_{12}\ . \tag{5.4}$$

D'autre part, en écrivant la somme (5.1)+(5.2), on obtient que $a_1\vec{c}_1 + a_2\vec{c}_2 = \vec{0}$. Ainsi, on peut exprimer la vitesse relative non affine en fonction de la vitesse non affine de l'une ou de l'autre particule :

$$\vec{c}_{12} = \vec{c}_2 - \vec{c}_1 = -\left(\frac{a_1}{a_2} + 1\right)\vec{c}_1 = -\frac{a_1}{a}\vec{c}_1 = \left(1 + \frac{a_2}{a_1}\right)\vec{c}_2 = \frac{a_2}{a}\vec{c}_2\ , \tag{5.5}$$

ou directement les vitesses $\vec{c}_1$ et $\vec{c}_2$ en fonction du seul nombre $\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12}$:

$$\vec{c}_1 = -\frac{a}{a_1}\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12}\ \vec{n}_{12}\ , \quad \vec{c}_2 = \frac{a}{a_2}\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12}\ \vec{n}_{12}\ . \tag{5.6}$$

Il reste à calculer ce nombre $\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12}$. Pour cela, on projette la différence (5.1)−(5.2) sur la radiale $\vec{n}_{12}$, ce qui nous donne :

$$0 = (a_2\vec{c}_2 - a_1\vec{c}_1) \cdot \vec{n}_{12} + 2a^2\phi(h)\frac{\dot{h}}{h} = 2a\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12} + 2a^2\phi(h)\frac{\dot{h}}{h}\ . \tag{5.7}$$

Or $\dot{h} = \vec{v}_{12} \cdot \vec{n}_{12} = \vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12} + \dot{\gamma} y_{12} \cos\theta_{12}$, où $y_{12} = y_2 - y_1$. On obtient :

$$\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12} = -a\frac{\phi(h)}{h}\left(\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12} + \dot{\gamma} y_{12} \cos\theta_{12}\right)\ , \tag{5.8}$$

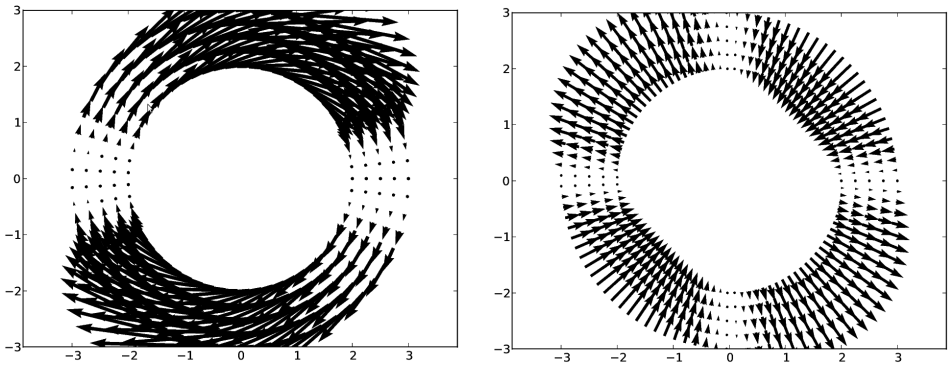
soit en notant que $y_{12} = r\sin\theta_{12}$:

$$\vec{c}_{12} \cdot \vec{n}_{12} = -\dot{\gamma} r \sin\theta_{12} \cos\theta_{12} \frac{a\phi(h)}{h + a\phi(h)}\ . \tag{5.9}$$

Exprimons enfin la vitesse relative des deux particules $\vec{v}_{12} = \vec{c}_{12} + \dot{\gamma} y_{12}\vec{e}_x$:

$$\vec{v}_{12} = -\dot{\gamma} r \sin\theta_{12} \cos\theta_{12} \frac{a\phi(h)}{h + a\phi(h)}\vec{n}_{12} + \dot{\gamma} r \sin\theta_{12}\vec{e}_x\ . \tag{5.10}$$

Les vitesses sont bien entendue proportionnelles à $\dot{\gamma}$. On les représente sur les diagrammes de la figure 5.1. La vitesse relative non affine s'annule si la paire est exactement horizontale (dans ce cas $y_{12} = 0$, les particules ont exactement la même vitesse et ne se perturbent pas l'une l'autre car $\dot{h}$ est nul) ou exactement verticale (et alors $\cos\theta_{12} = 0$). Le maximum de perturbation par rapport au champ affine se trouve à $45°$, sur les axes de compression et de dilatation, la lubrification étant répulsive en compression et attractive en dilatation.



(a) Totale. (b) Non affine.

FIGURE 5.1 – Vitesse relative de deux particules en cisaillement simple.

Calcul des trajectoires.

On peut poursuivre le calcul et intégrer la vitesse pour calculer la trajectoire $\{h(t), \theta_{12}(t)\}$. Pour cela, projettons la vitesse relative des deux particules sur la direction normale $\vec{n}_{12} = \cos\theta_{12}\vec{e}_x + \sin\theta_{12}\vec{e}_y$ de la paire et sur sa direction tangentielle $\vec{t}_{12} = -\sin\theta_{12}\vec{e}_x + \cos\theta_{12}\vec{e}_y$. On écrit $\vec{v}_{12} = v_{12,r}\vec{n}_{12} + v_{12,\theta}\vec{t}_{12}$, où, compte tenu de (5.10), on a les vitesses radiale et angulaire :

$$\begin{aligned} v_{12,r} &= -\dot{\gamma} r \sin\theta_{12}\cos\theta_{12}\frac{a\phi(h)}{h + a\phi(h)} + \dot{\gamma} r \cos\theta_{12}\sin\theta_{12} = \dot{\gamma} r \sin\theta_{12}\cos\theta_{12}\frac{h}{h + a\phi(h)} \\ v_{12,\theta} &= -\dot{\gamma} r \sin^2\theta_{12} \end{aligned} \tag{5.11}$$

D'autre part, par définition,

$$\vec{v}_{12} = \dot{\vec{r}}_{12} = \dot{r}\vec{n}_{12} + r\dot{\vec{n}}_{12} = \dot{h}\vec{n}_{12} + r\dot{\theta}_{12}\vec{t}_{12} \ . \tag{5.12}$$

Comparant les relations (5.11) et (5.12), on obtient deux équations sur le gap et l'angle :

$$\dot{h} = \quad \dot{\gamma} r \sin\theta_{12}\cos\theta_{12}\frac{h}{h + a\phi(h)} \ , \tag{5.13}$$

$$\dot{\theta}_{12} = -\dot{\gamma}\sin^2\theta_{12} \ . \tag{5.14}$$

Après séparation des variables, on peut intégrer directement l'équation sur l'angle :

$$\int_{\theta_{12}(0)}^{\theta_{12}(t)} \frac{\mathrm{d}\tilde{\theta}_{12}}{\sin^2\tilde{\theta}_{12}} = -\dot{\gamma} t \ . \tag{5.15}$$

L'intégrale se calcule en faisant le changement de variable $X = \tan\tilde{\theta}_{12}$, $\mathrm{d}X = \mathrm{d}\tilde{\theta}_{12}/\cos^2\tilde{\theta}_{12}$:

$$\int_{\theta_{12}(0)}^{\theta_{12}(t)} \frac{\mathrm{d}\tilde{\theta}_{12}}{\sin^2\tilde{\theta}_{12}} = \int_{\tan\theta_{12}(0)}^{\tan\theta_{12}(t)} \frac{\mathrm{d}X}{X^2} = \left[-\frac{1}{X}\right]_{\tan\theta_{12}(0)}^{\tan\theta_{12}(t)} = \frac{1}{\tan\theta_{12}(0)} - \frac{1}{\tan\theta_{12}(t)} \ . \tag{5.16}$$

On obtient finalement la tangente de l'angle θ_{12} en fonction du temps :

$$\tan\theta_{12}(t) = \frac{\tan\theta_{12}(0)}{1+\dot{\gamma}t\tan\theta_{12}(0)} \ . \tag{5.17}$$

Revenons maintenant à la relation différentielle (5.13) sur le gap, où l'on sépare les termes dépendant de h de ce qui dépendent de θ_{12} :

$$\frac{\dot{h}\left(h + a_u pphi(h)\right)}{rh} = \dot{\gamma}\sin\theta_{12}\cos\theta_{12} \ . \tag{5.18}$$

On veut intégrer les deux membres de cette équation. Au membre de droite, on veut faire apparaître $\dot{\theta}_{12}$ pour pouvoir intégrer en angle. On utilise la relation (5.14) pour écrire :

$$\begin{aligned}\int_0^t \dot{\gamma}\sin\theta_{12}\cos\theta_{12}\mathrm{d}t &= \int_0^t \frac{\dot{\gamma}\sin^2\theta_{12}}{\tan\theta_{12}}\mathrm{d}t = -\int_0^t \frac{\dot{\theta}_{12}\mathrm{d}t}{\tan\theta_{12}} = -\int_{\theta_{12}(0)}^{\theta_{12}(t)} \frac{\mathrm{d}\tilde{\theta}_{12}}{\tan\tilde{\theta}_{12}} \\ &= -\left[\ln|\sin\tilde{\theta}_{12}|\right]_{\theta_{12}(0)}^{\theta_{12}(t)} \\ &= \ln\left[\frac{\sin\theta_{12}(0)}{\sin\theta_{12}}\right] \ ,\end{aligned} \tag{5.19}$$

$\sin\theta_{12}$ restant positif tout au long de la trajectoire telles que sont numérotées les particules.

Pour le membre de gauche, il faut se donner le cutoff $\phi(h)$ puis effectuer quelques manipulations pour intégrer la fonction de h que l'on obtient.

Absence de cut-off : S'il n'y a pas de cut-off, $\phi(h) = 1$ pour tout h et on a :

$$\frac{\dot{h}\left(h + a\phi(h)\right)}{rh} = \frac{\dot{h}\left(h+a\right)}{rh} = \dot{h}\frac{\alpha}{h} + \dot{h}\frac{1-\alpha}{h+a_1+a_2} \qquad \text{avec } \alpha = a/\left(a_1+a_2\right) \ , \tag{5.20}$$

où l'on a utilisé que $r = h + a_1 + a_2$ et décomposé la fraction rationnelle en h en éléments simples. On intègre cette expression :

$$\int_0^t \frac{\dot{h}\left(h+a\right)}{rh}\mathrm{d}t = \alpha\int_{h(0)}^{h(t)} \frac{\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{h}} + \left(1-\alpha\right)\int_{h(0)}^{h(t)} \frac{\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{h}+a_1+a_2} = \ln\left[\frac{h^\alpha\ r^{1-\alpha}}{h(0)^\alpha\ r(0)^{1-\alpha}}\right] \ . \tag{5.21}$$

L'égalité des expressions (5.21) et (5.19) donne une relation entre le gap et l'angle :

$$\left(\frac{h}{r}\right)^\alpha r\sin\theta_{12} = \left(\frac{h(0)}{r(0)}\right)^\alpha r(0)\sin\theta_{12}(0) \ . \tag{5.22}$$

On peut faire tendre l'instant initial $t = 0$ vers $-\infty$ dans cette relation. Alors $h(0)/r(0)$ tend vers 1 et $r(0)\sin\theta_{12}(0) = y_{12}(0)$ tend vers le paramètre d'impact b. La relation angle-gap se réécrit alors :

$$\left(\frac{h}{r}\right)^\alpha r\sin\theta_{12} = b \ . \tag{5.23}$$

Regardons maintenant ce qui se passe si on introduit un cut-off dans l'interaction.

Cut-off discontinu : Dans ce cas, on peut effectuer séparément l'intégration des trajectoires en dehors du cercle de rayon r^* (où les particules n'intéragissent pas et où $\phi(h) = 0$) et dans le cercle de rayon r^*. Plaçons nous tout d'abord avant l'interaction. On choisit pour $t = 0$ un instant très antérieur à l'interaction, et t un instant postérieur à $t = 0$ mais toujours avant l'interaction. Entre 0 et t, on a toujours $\phi(h) = 0$:

$$\int_0^t \frac{\dot{h}\left(h + a\phi(h)\right)}{rh}\mathrm{d}t = \int_0^t \frac{\dot{h}}{r}\mathrm{d}t = \int_{h(0)}^{h} \frac{\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{h} + a_1 + a_2} = \ln\left[\frac{h + a_1 + a_2}{h(0) + a_1 + a_2}\right] . \tag{5.24}$$

La dynamique angulaire n'est pas modifiée par la présence ou l'absence du cutoff. L'égalité de cette expression avec (5.19) redonne l'équation d'une trajectoire rectiligne horizontale :

$$\frac{\sin\theta_{12}(0)}{\sin\theta_{12}} = \frac{h + a_1 + a_2}{h(0) + a_1 + a_2} , \tag{5.25}$$

soit :

$$r\sin\theta_{12} = r(0)\sin\theta_{12}(0) = b. \tag{5.26}$$

Plaçons nous maintenant dans le cercle de rayon r^*, soit pendant l'interaction à proprement parler. On choisit désormais comme instant initial $t = 0$ l'instant où les particules entrent en interaction, (i.e. $h(0) = h^*$). On a désormais $\phi(h) = 1$, et on retrouve à l'intérieur du cercle d'interaction les mêmes intégrales et trajectoires qu'en l'absence de cut-off

$$\left(\frac{h}{r}\right)^{\alpha} r\sin\theta_{12} = \left(\frac{h^*}{r^*}\right)^{\alpha} r^*\sin\theta_{12}(0) , \tag{5.27}$$

avec $\sin\theta_{12}(0) = b/r^*$. Ainsi, les trajectoires s'écrivent dans le cercle de rayon r^* :

$$\left(\frac{h}{r}\right)^{\alpha} r\sin\theta_{12} = \left(\frac{h^*}{r^*}\right)^{\alpha} b . \tag{5.28}$$

Cut-off continu : Dans nos simulations, nous choisissons d'assurer la continuité des interactions quand deux particules se rapprochent en choisissant un cut-off continu $\phi(h) = \left(1 - h/h^*\right)^3$. Le calcul analytique des trajectoires dans le cercle de rayon r^* est plus fastidieux à mener, aussi nous ne donnons que le résultat ici et détaillons les calculs dans l'annexe C. En prenant comme instant initial $t = 0$ l'instant où les particules entrent en interaction, on obtient :

$$\int_0^t \frac{\dot{h}\left(h + a\phi(h)\right)}{rh}\mathrm{d}t = \ln\left[\frac{h^{\alpha}r^{1-\alpha}}{h^{*\alpha}r^{*1-\alpha}}\right] - A\ln\left[\frac{r}{r^*}\right] + B\left(r - r^*\right) - C\left(r^2 - r^{*2}\right) , \tag{5.29}$$

où A, B et C sont des constantes positives dépendant de a_1, a_2, et h^*. Dans le cas où les particules sont de taille identique et si l'on considère que la portée des interactions de lubrification est d'un rayon de particules, $a_1 = a_2 = h^* = 2a$, alors :

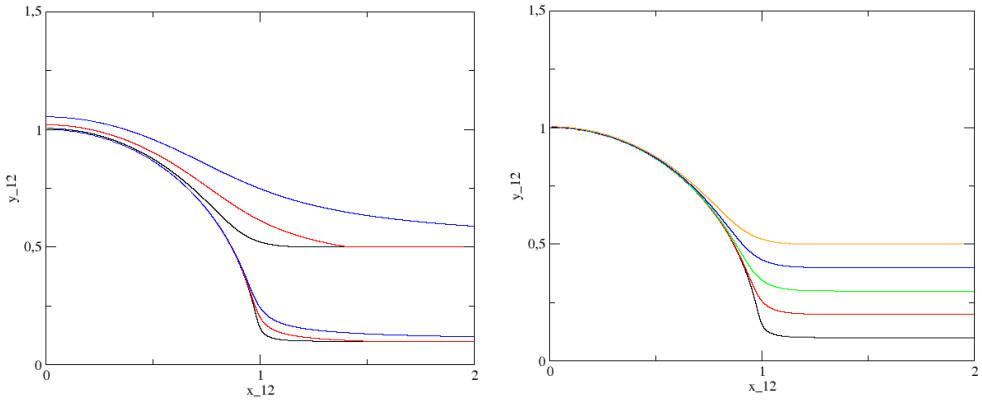
$$A = \frac{13}{2},\ B = \frac{7}{4a},\quad C = \frac{1}{16a^2} . \tag{5.30}$$

On obtient finalement une équation pour la trajectoire en égalisant cette expression avec (5.19), où $\sin\theta_{12}(0)$ est pris égal à b/r^*, puis en prenant l'exponentielle :

$$\frac{b}{r^*\sin\theta_{12}} = \frac{h^{\alpha}\ r^{1-\alpha-A}}{h^{*\alpha}\ r^{*1-\alpha-A}}\exp\left[B\left(r - r^*\right) - C\left(r^2 - r^{*2}\right)\right] , \tag{5.31}$$

soit :

$$\left(\frac{h^*}{r^*}\right)^{\alpha} r^{*-A}\frac{b}{r} = \left(\frac{h}{r}\right)^{\alpha} r^{-A}\sin\theta_{12}\exp\left[B\left(r-r^*\right)-C\left(r^2-r^{*2}\right)\right] \ . \tag{5.32}$$



(a) Effet de la présence et de la nature du cutoff sur les trajectoires.

(b) Trajectoires pour différents paramètres d'impact b.

FIGURE 5.2 – Trajectoires de collision purement lubrifiée. À gauche, on représente les trajectoires obtenues pour $b = 0.1$ et $b = 0.5$ en absence de cutoff (5.23) en bleu, en présence d'un cutoff discontinu (5.28) en rouge, et en présence d'un cutoff continu (5.32) en noir. À droite, on représente plusieurs trajectoires (cutoff continu) pour des paramètres d'impacts différents : $b = 0.1$ (noir), $b = 0.2$ (rouge), $b = 0.3$ (vert), $b = 0.4$ (bleu) et $b = 0.5$ (orange).

5.1.2 Fonction de distribution des paires.

On cherche maintenant la densité de probabilité de trouver une particule en $\vec{r}$ sachant qu'il y a une particule à l'origine. La conservation de la densité de probabilité $\rho(\vec{r})$ se traduit par l'équation de Liouville stationnaire :

$$\vec{\nabla}\cdot\left[\rho(\vec{r})\vec{v}(\vec{r})\right] = 0 \ . \tag{5.33}$$

On se place en coordonnées polaires $\rho(\vec{r}) = \rho(r,\theta)$, et on exprime la divergence :

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[r\rho v_r\right] + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left[\rho v_\theta\right] = 0 \ . \tag{5.34}$$

Le champ de vitesse est connu par ses composantes radiales et angulaires (**??**) :

$$\frac{\partial}{\partial r}\left[\rho r^2\sin\theta\cos\theta\frac{h}{h+a\phi(h)}\right] = \frac{\partial}{\partial\theta}\left[\rho r\sin^2\theta\right] \ . \tag{5.35}$$

Si on cherche une densité moyenne de particules isotrope, $\rho(\vec{r}) = \rho(r)$, le calcul se poursuit :

$$\sin\theta\cos\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[\rho r^2\frac{h}{h+a\phi(h)}\right] = \rho r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[\sin^2\theta\right] = 2\sin\theta\cos\theta\rho r \ , \tag{5.36}$$

soit, en posant $\xi = \rho r^2 h/\left(h + a\phi(h)\right)$,

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r} = 2\rho r = 2\frac{h + a\phi(h)}{rh}\,\xi\ . \tag{5.37}$$

Pour intégrer cette équation et calculer $\rho(r)$, il faut maintenant se donner un $\phi(h)$.

Absence de cut-off : Dans le cas le plus simple où il n' y a pas de cut-off, $\phi(h) = 1$ pour tout r, et on a :

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r} = 2\frac{h + a}{rh}\,\xi\ . = 2\left[\frac{\alpha}{h} + \frac{1-\alpha}{r}\right]\xi \tag{5.38}$$

où la fraction rationnelle en h est décomposée en éléments simples tout comme dans (5.20), avec toujours $\alpha = a/\left(a_1 + a_2\right)$. On intègre cette expression sur les rayons entre r et $r_\infty \to \infty$:

$$\int_r^{r_\infty} \frac{1}{\xi}\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}\tilde{r}}\mathrm{d}\tilde{r} = \int_\xi^{\xi(r_\infty)} \frac{\mathrm{d}\tilde{\xi}}{\tilde{\xi}} = 2\int_r^{r_\infty}\left[\frac{\alpha}{\tilde{r} - a_1 - a_2} + \frac{1-\alpha}{\tilde{r}}\right]\mathrm{d}\tilde{r}$$

$$\ln\frac{\xi(r_\infty)}{\xi} = 2\alpha\ln\frac{h_\infty}{h} + 2\left(1-\alpha\right)\ln\frac{r_\infty}{r} \quad (\text{où } h_\infty = r_\infty - a_1 - a_2), \tag{5.39}$$

soit :

$$\xi = \xi(r_\infty)\left(\frac{h}{h_\infty}\right)^{2\alpha}\left(\frac{r}{r_\infty}\right)^{2(1-\alpha)} = \xi(r_\infty)\left(\frac{r_\infty}{h_\infty}\,\frac{h}{r}\right)^{2\alpha}\left(\frac{r}{r_\infty}\right)^{2}\ . \tag{5.40}$$

Connaissant ξ, on repasse à ρ :

$$\rho r^2\frac{h}{h+a} = \rho(r_\infty)r_\infty^2\frac{h_\infty}{h_\infty + a}\left(\frac{r_\infty}{h_\infty}\,\frac{h}{r}\right)^{2\alpha}\left(\frac{r}{r_\infty}\right)^{2}\ , \tag{5.41}$$

soit après simplification des r^2 et r_∞^2 surnuméraires :

$$\rho = \rho(r_\infty)\frac{h_\infty}{h_\infty + a}\frac{h+a}{h}\left(\frac{r_\infty}{h_\infty}\,\frac{h}{r}\right)^{2\alpha}\ . \tag{5.42}$$

Il reste à faire tendre r_∞ vers l'infini : $\rho(r_\infty)$ tend vers la densité à l'infini n, et les fractions rationnelles en r_∞ tendent vers 1. On trouve :

$$\rho(r) = n\frac{h+a}{h}\left(\frac{h}{r}\right)^{2\alpha}\ . \tag{5.43}$$

On a bien $\rho(r) \to n$ à l'infini. D'autre part, quand le gap h tend vers 0, la densité moyenne de particule diverge comme $h^{2\alpha-1}$, c'est à dire comme $1/\sqrt{h}$ pour des particules de même taille ($\alpha = 1/4$).

Cut-off discontinu : Reprenons maintenant ce calcul avec un cut-off discontinu en h^*, $\phi(h) = 1/h$ pour $h < h^*$, $\phi(h) = 0$ sinon. Hors du cercle de rayon r^*, il n'y a pas d'interaction et le champ de vitesse est le champ de cisaillement simple $\vec{v} = \dot{\gamma}y\vec{e}_x$. Ce champ de vitesse est à divergence nulle, la densité moyenne de particules est donc constante et vaut la densité à l'infini :

$$\rho(r) = n \quad , \text{pour } r > r^*. \tag{5.44}$$

Dans le cercle de rayon r^*, le calcul se mène exactement de la même façon que s'il n'y avait pas de cut-off, excepté que l'intégration (5.39) s'effectue entre r et r^*. On obtient alors, avec $\rho(r^*) = n$:

$$\rho(r) = n\frac{h^*}{h^* + a}\frac{h+a}{h}\left(\frac{r^*}{h^*}\,\frac{h}{r}\right)^{2\alpha} \quad , \text{pour } r < r^*. \tag{5.45}$$

Cut-off continu : Plaçons-nous maintenant dans le cas du cut-off continu en h^*, $\phi(h) = (1 - h/h*)^3$ pour $h < h^*$. Hors du cercle de rayon r^*, il n'y a pas toujours pas d'interaction et la densité moyenne de particules est la densité à l'infini :

$$\rho(r) = n \quad , \text{ pour } r > r^*. \tag{5.46}$$

Dans la sphère de rayon r^*, la résolution de l'équation de conservation s'effectue comme en l'absence de cut-off jusqu'à (5.37) où l'on remplace $\eta(h)$ par son expression :

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r} = 2\frac{h + a\ (1 - h/h*)^3}{hr}\,\xi\ . \tag{5.47}$$

On intègre cette expression sur les rayons entre r et r^* :

$$\int_{\xi}^{\xi(r^*)} \frac{\mathrm{d}\tilde{\xi}}{\tilde{\xi}} = 2\int_{r}^{r^*} \frac{\tilde{h} + a\ \left(1 - \tilde{h}/h*\right)^3}{\tilde{h}\tilde{r}}\mathrm{d}\tilde{r} \tag{5.48}$$

Cette intégrale est la même qu'en (C.1) et on trouve le même résultat qu'en (5.29) :

$$\ln\frac{\xi}{\xi(r^*)} = 2\ln\left[\frac{h^{\alpha}r^{1-\alpha}}{h^{*\alpha}r^{*1-\alpha}}\right] - 2A\ln\left[\frac{r}{r^*}\right] + 2B\left(r - r^*\right) - 2C\left(r^2 - r^{*2}\right)\ . \tag{5.49}$$

Prenons l'exponentielle, puis remplaçons ξ par son expression en fonction de ρ. Comme $\xi(r^*) = nr^{*2}$, on obtient après réarrangement des termes que pour $r < r^*$,

$$\rho = n\left[1 + \frac{a}{h}\left(1 - \frac{h}{h^*}\right)^3\right]\left(\frac{r^*}{h^*}\,\frac{h}{r}\right)^{2\alpha}\left(\frac{r}{r^*}\right)^{-2A}\exp\left[2B\left(r - r^*\right) - 2C\left(r^2 - r^{*2}\right)\right]\ . \tag{5.50}$$

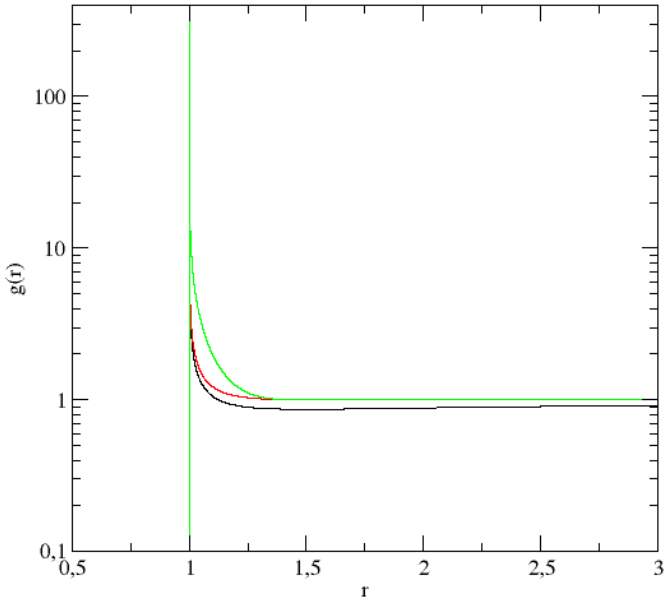


FIGURE 5.3 – Fonction de corrélation de paire théorique dans le régime dilué : sans cutoff en noir (5.43), avec cutoff discontinu en rouge(5.45), avec cutoff continu en vert (5.50).

On représente pour chacun de ces cas la fonction de corrélation de paire $g(r) = \rho(r)/n$ sur la figure 8.11. La divergence au contact est à chaque fois en $h^{2\alpha-1}$ soit en $1/\sqrt{h}$ pour des particules de même taille. La nature du cutoff est néanmoins capable de changer du simple au double le nombre de particules situées à des distances modérées ($h \sim 0.1$).

5.2 Le cas de particules rugueuses.

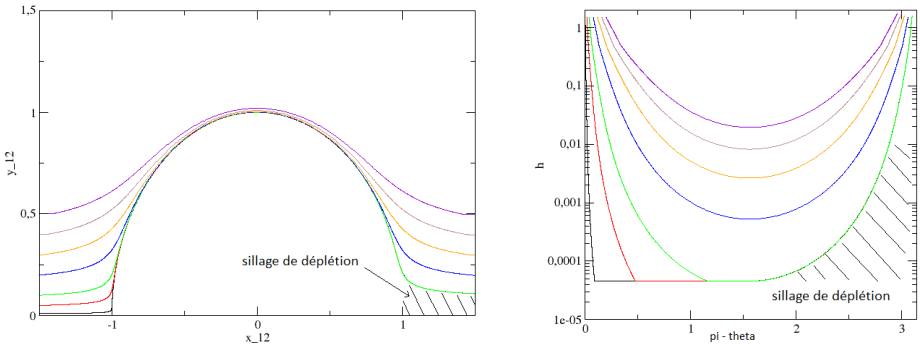
5.2.1 Trajectoires.

Dans un modèle de particules rugueuses, on peut considérer que les particules sont « en contact » dès que le gap qui les sépare est égal à une taille d'aspérité ε. Les forces de contact affectent donc toutes les particules incidentes qui se rapprochent à une distance inférieure ou égale à ε de la particule test. La distance d'approche minimale est atteinte pour $\theta_{12} = \pi/2$. Elle correspond à un paramètre d'impact maximal b_c au dessus duquel les particules incidentes ne génèrent pas de contact. Dans ce cas, les particules suivent les lignes de courant du problème lisse.

Les particules qui arrivent de l'infini avec un paramètre d'impact inférieur à b_c se rapprochent suffisamment pour ressentir un contact avec les aspérités sur une section de leur trajectoire. Les particules en contact subissent une force de contact répulsive qui annule exactement la composante radiale des forces hydrodynamiques, et maintient leur vitesse radiale constante et égale à 0. Leur vitesse angulaire n'est en revanche pas affectée, et est toujours donnée par (5.14) :

$$\dot{\theta} = -\dot{\gamma}\sin^2\theta \ . \tag{5.51}$$

Ces particules restent en contact tant que la composante radial des forces hydrodynamiques est attractive, c'est à dire dans le quadrant de compression $\theta \in [\pi/2, \pi]$. La présence de ces forces de



(a) Trajectoires en présence de rugosités. (b) $h(\theta)$ en présence de rugosités.

FIGURE 5.4 – Effet des rugosités sur les trajectoires du problème à deux corps. On représente les trajectoires correspondant à différents paramètres d'impact : $b = 0.01$ (noir), $b = 0.05$ (rouge), $b = 0.1$ (vert), $b = 0.2$ (bleu), $b = 0.3$ (orange), $b = 0.4$ (marron) et $b = 0.5$ (violet). Les trajectoires noires, rouges et vertes sont projetées sur la même ligne de courant en sortie de collision à cause des rugosités. Les hachures représentent le sillage de déplétion, espace qu'aucune particule ne peut atteindre en régime dilué.

contact, non proportionnelles aux vitesses, casse la réversibilité des trajectoires. De fait, toutes les

particules arrivant avec des paramètres d'impact $b < b_c$ se retrouvent projetées en sortie sur la même ligne de courant, correspondant au paramètre d'impact b_c. Cela génère le sillage de dépletion bien décrit du régime dilué des suspensions.

5.2.2 Distribution des contacts.

On cherche à calculer la densité de particules au contact sur le quadrant de compression. On peut écrire une équation locale de conservation sur le nombre $\mathrm{d}n_c(\theta) = \rho_c(\theta)\mathrm{d}\theta$ de contacts dans un intervalle $[\theta, \theta + \mathrm{d}\theta]$ du quadrant de compression, $\rho_c(\theta)$ étant la densité angulaire de contacts en θ. Compte tenu du signe de $\dot{\theta}$, des contacts sont gagnés avec les particules qui arrivent en $\theta + \mathrm{d}\theta$, et d'autres sont perdus avec les particules qui s'échappent en θ. Il faut également tenir compte du flux incident de particules qui arrivent au contact, et qu'on calcule en multipliant la vitesse nomale du problème sans rugosité (5.11) par la surface exposée, et par la densité $\rho(r_c)$ de particules incidentes (5.43) au niveau des aspérités, à $r_c = \varepsilon + a_1 + a_2$:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}n_c(\theta)}{\mathrm{d}t} &= |\dot{\theta}(\theta + \mathrm{d}\theta)|\,\rho_c(\theta + \mathrm{d}\theta) - |\dot{\theta}(\theta)|\,\rho_c(\theta) + v_r(r_c, \theta)\,\rho(r_c)\,r_c\mathrm{d}\theta \\ &= -\dot{\theta}(\theta + \mathrm{d}\theta)\,\rho_c(\theta + \mathrm{d}\theta) + \dot{\theta}(\theta)\,\rho_c(\theta) + v_r(r_c, \theta)\,\rho(r_c)\,r_c\mathrm{d}\theta\end{aligned}$$

En régime stationnaire, $\rho_c(\theta)$ est indépendant du temps, et $\mathrm{d}n_c(\theta)/\mathrm{d}t = 0$. Après division par $\mathrm{d}\theta$, on obtient une équation locale de conservation :

$$0 = -\frac{\dot{\theta}(\theta + \mathrm{d}\theta)\,\rho_c(\theta + \mathrm{d}\theta) - \dot{\theta}(\theta)\,\rho_c(\theta)}{\mathrm{d}\theta} + r_c v_r(r_c, \theta)\,\rho(r_c) \quad , \tag{5.52}$$

soit :

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[\dot{\theta}\rho_c\right] &= r_c\rho(r_c)\,v_r(r_c, \theta) \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left[\sin^2\theta\rho_c\right] &= -r_c^2\rho(r_c)\sin\theta\cos\theta\frac{\varepsilon}{\varepsilon + a\phi(\varepsilon)} \quad .\end{aligned} \tag{5.53}$$

Posant $\lambda(\theta) = \sin^2\theta\rho_c(\theta)$, on intègre cette équation :

$$\int_{\lambda(\theta)}^{\lambda(\pi)} \mathrm{d}\tilde{\lambda} = -r_c^2\rho(r_c)\frac{\varepsilon}{\varepsilon + a\phi(\varepsilon)}\int_\theta^\pi \sin\tilde{\theta}\cos\tilde{\theta}\mathrm{d}\tilde{\theta} \ . \tag{5.54}$$

À moins d'une divergence importante de $\rho_c(\theta)$ en π, $\lambda(\pi) = 0$, et on exprime la densité angulaire de contacts en fonction d'une intégrale :

$$\rho_c(\theta) = -r_c^2\rho(r_c)\frac{1}{1 + a\eta(h_{\mathsf{rug}})}\frac{1}{\sin^2\theta}\int_\theta^\pi \sin\tilde{\theta}\cos\tilde{\theta}\mathrm{d}\tilde{\theta} \ . \tag{5.55}$$

On calcule :

$$\int_\theta^\pi \sin\tilde{\theta}\cos\tilde{\theta}\mathrm{d}\tilde{\theta} = \frac{1}{2}\int_\theta^\pi \sin 2\tilde{\theta}\mathrm{d}\tilde{\theta} = \frac{1}{2}\left[-\frac{\cos 2\tilde{\theta}}{2}\right]_\theta^\pi = -\frac{1}{4}\left(1 - \cos 2\theta\right) \quad , \tag{5.56}$$

soit,

$$\begin{aligned}\rho_c(\theta) &= -\frac{1}{4}r_c^2\rho(r_c)\frac{1}{1 + a\eta(h_{\mathsf{rug}})}\frac{\cos 2\theta - 1}{\sin^2\theta} \\ &= -\frac{1}{4}r_c^2\rho(r_c)\frac{1}{1 + a\eta(h_{\mathsf{rug}})}\frac{1 - 2\sin^2\theta - 1}{\sin^2\theta} \quad ,\end{aligned} \tag{5.57}$$

ce qui donne une densité angulaire de contacts uniforme :

$$\rho_c(\theta) = \frac{1}{2} r_c^2 \frac{\rho(r_c)\varepsilon}{\varepsilon + a\eta(\varepsilon)} \ . \tag{5.58}$$

La valeur exacte de la densité de contacts dans le quadrant de compression dépend ensuite de la forme de la fonction $\rho(r_c)$, qui dépend elle-même de la fonction de cutoff utilisée dans le modèle. Quoi qu'il en soit, ce calcul démontre l'existence d'une densité de contact uniforme sur le quadrant de compression, dans le régime dilué de ce modèle de particule en interactions lubrifiée.

Chapitre 6

Rhéologie des suspensions denses à volume constant

Dans ce chapitre, nous présentons des données sur la rhéologie en cisaillement des suspensions non Browniennes bidimensionnelles, obtenues après simulation de la dynamique de tels systèmes à l'aide des algorithmes décrits dans le chapitre (4).
Dans une section préliminaire, nous détaillons comment nous calculons la contrainte en pratique à partir des résultats générés par les simulations. Dans une seconde section, nous présentons quelques simulations effectuées en dynamique des gaps de l'écoulement à volume constant de suspensions de particules absolument lisses et n'interagissant que par lubrification. Ces résultats mettent en évidence le besoin de tenir compte du rôle des contacts entre grains. Dans une troisième section, nous présentons des courbes d'écoulement obtenues en simulant l'écoulement à volume constant de suspensions de particules rugueuses, capables de former des contacts élastiques.

6.1 Calcul pratique du tenseur des contraintes.

Commençons par détailler les modalités du calcul de la contrainte en pratique. La théorie hydrodynamique des suspensions. En théorie, la contrainte hydrodynamique générée dans une suspension s'obtient en mesurant le stresslet moyen exercé sur les particules. Il faut ensuite lui rajouter la contrainte de contact si les particules sont autorisées à se toucher, et la contrainte de Reynolds si l'inertie est importante (voir section 2.3).
La donnée du stresslet est accessible dans une simulation explicite, où la distribution de contrainte à la surface de la particule peut être connue, ou bien dans une simulation de dynamique Stokésienne, où la relation de proportionnalité entre stresslets et vitesses des particules est exploitée.

Dans le cas d'une simulation discrète comme la notre, ces données ne sont pas accessibles. En revanche, on dispose avec la formule de Irving-Kirkwood, d'un outil adapté au calcul de la contrainte générée dans une assemblée de particules ponctuelles en interaction de paire. En plus d'utiliser cette formule pour calculer la contrainte de contacts, nous l'utilisons aussi afin d'estimer la contrainte hydrodynamique, due aux seules forces de lubrification. On écrit donc :

$$\vec{\vec{\sigma}} = \vec{\vec{\sigma}}_{\text{lub}} + \vec{\vec{\sigma}}_{\text{c}} + \vec{\vec{\sigma}}_{\text{Re}} \ , \tag{6.1}$$

où l'on utilise la formule (2.112) pour calculer la contrainte due aux interactions :

$$\vec{\vec{\sigma}}_{\text{lub}} = \frac{1}{L^2} \sum_{[ij]\neq \text{c.}} \vec{f}_{ij}\vec{r}_{ij} \ , \tag{6.2}$$

$$\vec{\vec{\sigma}}_{\text{c}} = \frac{1}{L^2} \sum_{[ij]\ \text{c.}} \vec{f}_{ij}\vec{r}_{ij} \ , \tag{6.3}$$

où les indices ($[ij] \neq$ c.) indiquent une somme menée exclusivement sur les paires qui ne sont pas en contact, et ($[ij]$ c.) une somme sur les seules paires au contact. Compte-tenu du modèle de contact lubrifié que nous avons adopté, une paire est au contact ou ne l'est pas : aucune force d'origine hydrodynamique est associée aux paires en contact. La séparation de la contrainte en une contribution hydrodynamique et une contribution de contact est donc immédiate au niveau du code de calcul.
Nous utilisons enfin la formule (2.95) pour la contrainte de Reynolds :

$$\vec{\vec{\sigma}}_{\text{Re}} = -\frac{1}{L^2} \sum_i m_i \vec{c}_i \vec{c}_i \ . \tag{6.4}$$

La contribution $\vec{\vec{\sigma}}_{\text{lub}}$ de la lubrification est à rapprocher de la contrainte hydrodynamique particulaire (2.79) dont on aurait retiré la contribution d'Einstein (en effet, nos simulations ne peuvent pas capturer la contribution à une particule de la contrainte car l'écoulement du fluide n'est pas résolu explicitement). L'utilisation de l'expression (6.2) pour estimer la contrainte dans la suspension revient à approximer le stresslet exercé sur une particule par la somme des moments des forces de lubrification qui lui sont appliquées ponctuellement par ses voisines :

$$\vec{\vec{S}}_i \approx \sum_{j\text{v. } i} \vec{f}_{ij}^{\text{lub}} \vec{r}_{ij} \ . \tag{6.5}$$

Pour obtenir la contrainte réelle équivalente, il faut théoriquement rajouter la contrainte d'Einstein $[1 + (5/2)\phi]\eta_0\dot{\gamma}$. Cette correction n'est cependant pas extrêmement pertinente pour nos calculs étant donné que l'on s'interesse à la limite des suspensions concentrées, proches du blocage, limite dans laquelle le terme d'Eistein est dominé par la divergence de la viscosité. Pour ce qui est de la limite diluée, notre algorithme est de toute façon peu pertinent, ne prenant en compte que les forces hydrodynamiques de champ proche.

Concrètement, l'intensité des composantes respectives des forces apparaissant dans les produits tensoriels de ces expressions sont calculées à chaque pas de temps pour toutes les paires du réseau. Le tenseur des contraintes se mesure donc simplement en parcourant le réseau et en récupérant puis sommant les données pertinentes de chaque paire (ou chaque grain pour la contrainte de Reynolds).
La pression particulaire $p = -(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$, la contrainte de cisaillement σ_{xy} et la différence des contraintes normales $N = (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/2$ sont ensuite extraites du tenseur des contraintes, ce qui permet d'isoler la contribution respective de l'hydrodynamique et des contacts dans chacune de ces grandeurs rhéologique, et de la suivre au cours du cisaillement.
En pratique, nous simulons le cisaillement d'un nombre N_s (compris entre 1 et 10) de systèmes générés aléatoirement, et comprenant chacun $2N$ particules (bidisperses). La valeur des grandeurs pertinentes est sauvegardée tous les $\delta\gamma = 0,001$. Nous effectuons de plus une sauvegarde séparée de la configuration complète du système tous les $\delta\gamma = 0,01$ (i.e. une déformation de 1%).
Les grandeurs macroscopiques sont calculées en effectuant la moyenne temporelle des données sauvegardées. Cette moyenne est identifiée à une moyenne d'ensemble (le système étant supposé ergodique).

En toute rigueur, il faudrait se limiter à des configurations séparées d'un $\Delta\gamma$ assez grand pour être statistiquement décorrélées. En pratique, les moyennes sont calculées sur toutes les configurations sauvegardées, ce qui est redondant d'un point de vue statistique mais simplifie l'écriture des scripts de traitement de données. Les configurations correspondant aux 500% de cisaillement sont ignorées afin de ne conserver que les propriétés rhéologiques stationnaires des systèmes cisaillés.

6.2 Suspensions de particules lisses.

Dans cette section, sont présentés des résultats obtenus après simulation du cisaillement à volume constant d'une suspension de particules lisses et rigides. Un tel problème est purement hydrodynamique, et son intégration numérique a été réalisée en utilisant l'algorithme de dynamique des gaps décrit en détail à la section (4.2), chapitre (4).

Il s'avère que cet algorithme de calcul est incapable d'atteindre des densités importantes et/ou des cisaillements rapides à volume constant. Nous pouvons tout de même examiner les réalisations effectuées pour en tirer quelques éléments de réflexion. Le système cisaillé est un système de référence de 2×100 particules bidisperses. Les simulations réalisées sont récapitulées dans le tableau (6.1).

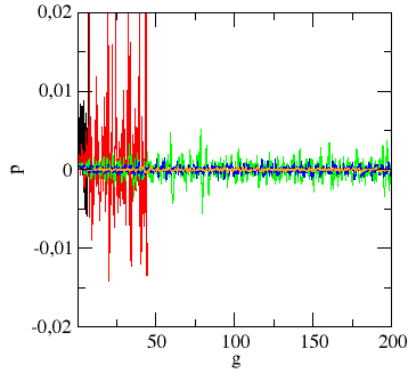
	$\phi = 0.34$	$\phi = 0.44$	$\phi = 0.56$	$\phi = 0.62$	$\phi = 0.69$
$\dot\gamma = 0.1$	200	200	200	45	8
$\dot\gamma = 0.4$	200				
$\dot\gamma = 1$	78				
$\dot\gamma = 4$	14				

TABLE 6.1 – Récapitulatif de la déformation accumulée pour différents couples $(\phi, \dot\gamma)$ lors du cisaillement à volume constant d'une suspension de particules lisses.

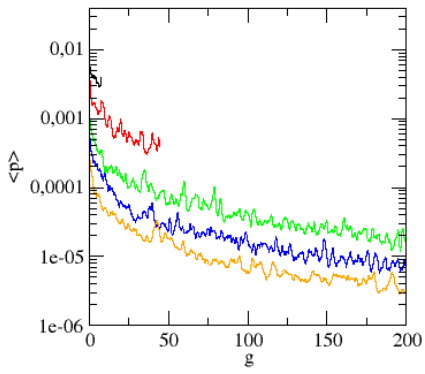
On représente la dépendance de la contrainte avec le taux de cisaillement $\dot\gamma$ ou la densité ϕ pour ce système. La figure 6.2 présente l'évolution de la contrainte avec le cisaillement pour des réalisations à différentes vitesses pour une densité constante, la figure 6.1 pour différentes densité à vitesse constante. Les diagrammes de la colonne de gauche de la figure présentent la valeur instantanée des composantes de la contrainte. Compte-tenu des fluctuations très importantes qui se développent quand la densité augmente, on représente sur la colonne gauche la contrainte moyenne correspondante, intégrée sur la déformation accumulée :

$$< \vec{\vec{\sigma}} > (\gamma) = \frac{1}{\gamma} \int_0^\gamma \vec{\vec{\sigma}}(\tilde\gamma) \mathrm{d}\tilde\gamma \ . \tag{6.6}$$

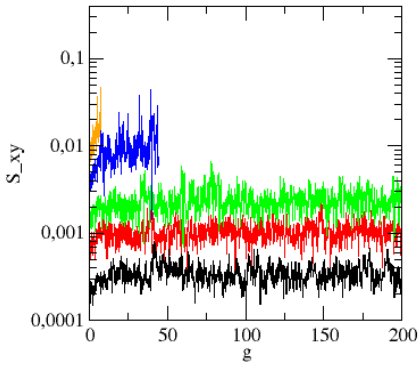
On observe que la pression moyenne décroit invariablement vers zéro, pour toutes les vitesses et densités testées. De fait, il apparaît que ces suspensions sont incapables de supporter une pression non nulle dans leur configuration stationnaire. On peut écrire la pression de lubrification comme une somme $p \propto \sum_{[ij]} \frac{\dot h_{ij}}{h_{ij}} r_{ij}$. Dans un état stationnaire, comme il y a nécessairement autant de paires qui s'ouvrent $(\dot h > 0)$ que de paires qui se ferment $(\dot h < 0)$ dans le sous-ensemble des paires situées à une séparation h donnée, cette somme tend vers zéro.
La contrainte de cisaillement et la différence des contraintes normales semblent en revanche tendre



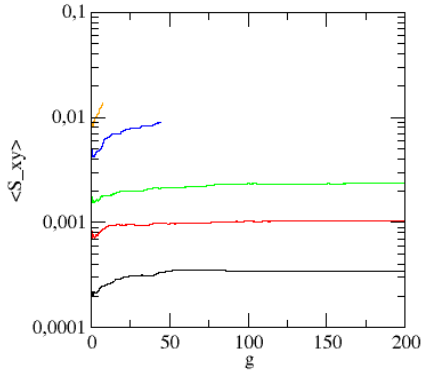
(a) $p(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.



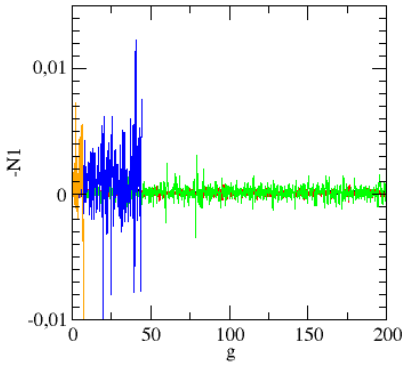
(b) $< p > (\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.



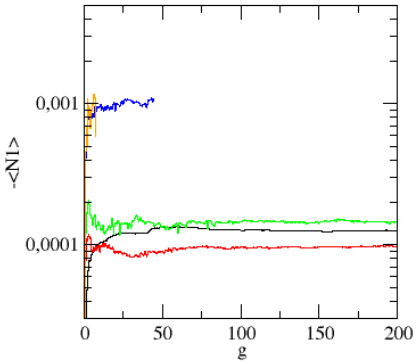
(c) $\sigma_{xy}(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.



(d) $< \sigma_{xy} > (\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.



(e) $N_1(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

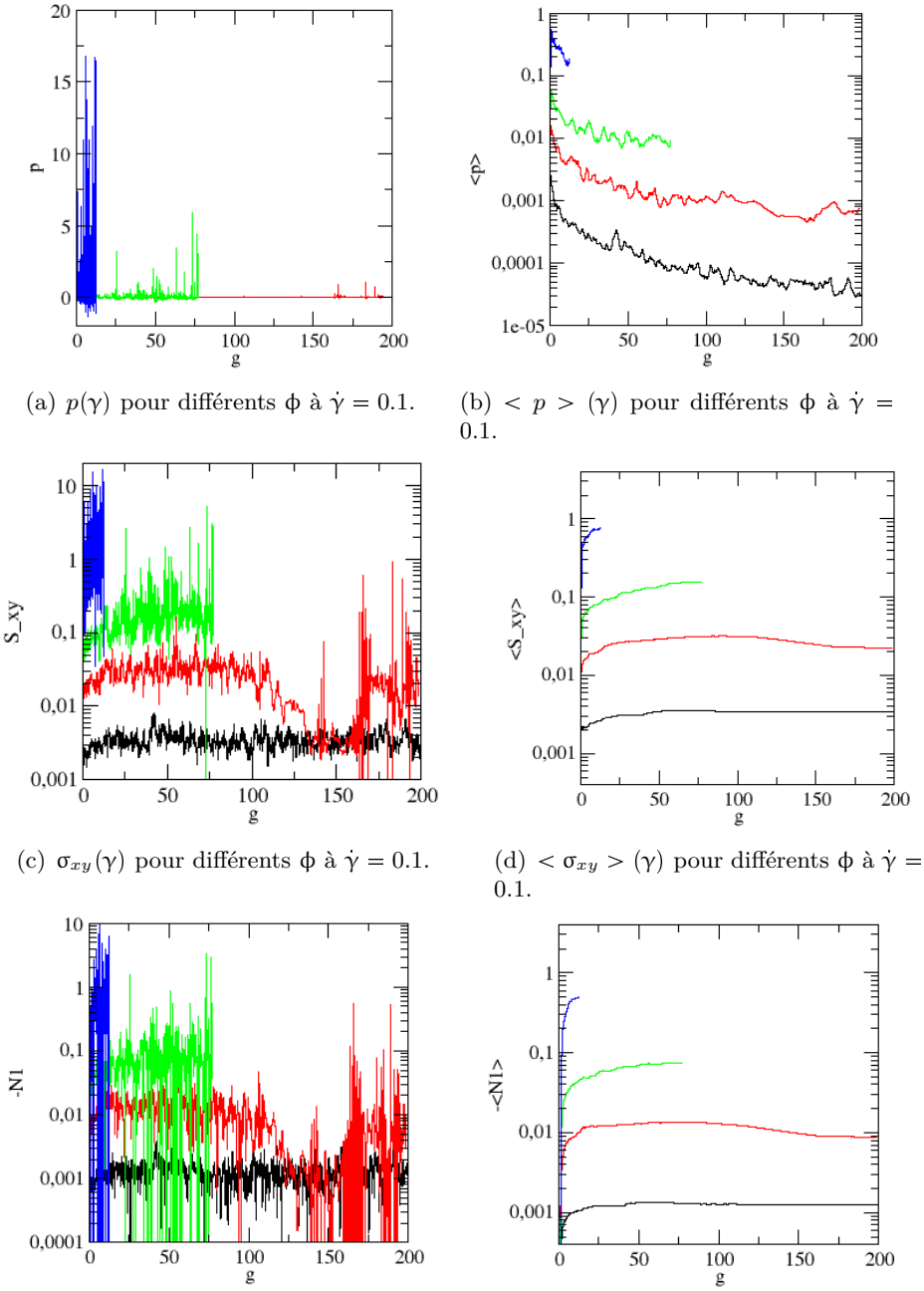


(f) $< N_1 > (\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

FIGURE 6.1 – Composantes du tenseur des contraintes au cours du cisaillement d'une suspension de particules rigides parfaitement lisses de densité $\phi = 0.34$ (noir), 0.44 (rouge), 0.56 (vert), 0.62 (bleu), 0.69 (orange), à une vitesse $\dot{\gamma} = 0.1$. La colonne de gauche représente la réalisation instantanée de la contrainte au cours du cisaillement, la colonne de droite représente la moyenne (6.6) associée.

vers une valeur stationnaire.

On oberve sans surprise que la contrainte de cisaillement augmente avec le taux de cisaillement et



(a) $p(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

(b) $< p > (\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

(c) $\sigma_{xy}(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

(d) $< \sigma_{xy} > (\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

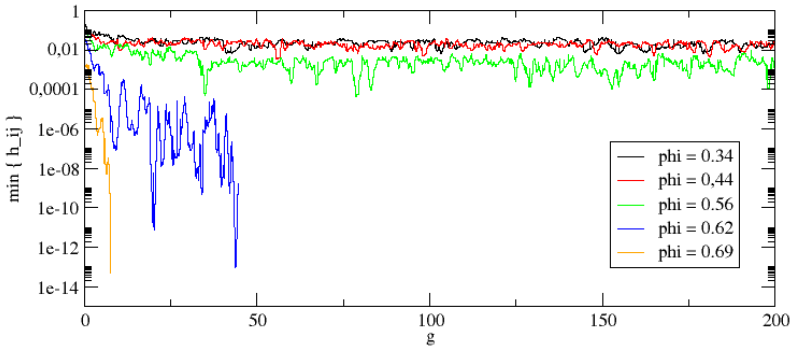
(e) $N_1(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

(f) $< N_1 > (\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.

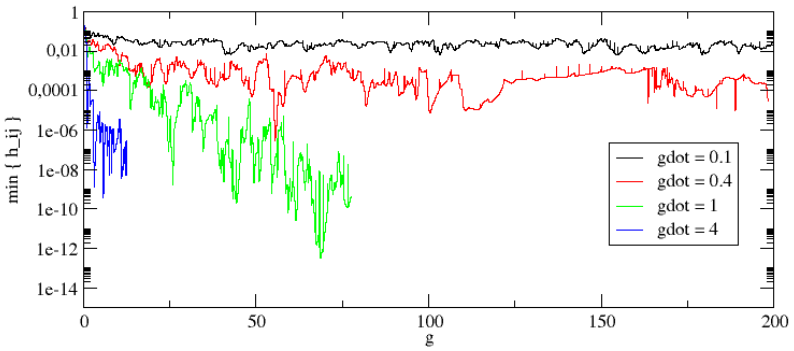
FIGURE 6.2 – Composantes du tenseur des contraintes au cours du cisaillement d'une suspension de particules rigides parfaitement lisses de densité $\phi = 0.34$, à des taux de cisaillement de $\dot{\gamma} = 0.1$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.4$ (rouge), $\dot{\gamma} = 1$ (vert), $\dot{\gamma} = 4$ (bleu). La colonne de gauche représente la réalisation instantanée de la contrainte au cours du cisaillement, la colonne de droite représente la moyenne (6.6) associée.

avec la densité. En raison du petit nombre de points, il est délicat de discuter des lois $\sigma_{xy}(\dot{\gamma})$ et $\sigma_{xy}(\phi)$. Il apparaît néanmoins que $\sigma_{xy}(\dot{\gamma})$ varie plus vite que linéairement dans le régime de $\dot{\gamma}$ sondé. La différence de contraintes normales semble négative, même en l'absence de contacts. Néanmoins, si elle parait augmenter avec la densité et le taux de cisaillement, il est difficile de tirer une tendance claire de ces résultats très partiels et pour lesquels un état stationnaire n'est pas toujours atteint.

Il se pose donc la question des conditions dans lesquelles une suspension uniquement lubrifiée est capable d'atteindre un état stationnaire. On peut examiner l'évolution au cours du temps du minimum de séparation $h_{\text{min}} = \min_{ij}\{h_{ij}\}$ généré dans la suspension au cours de son cisaillement (figure 6.3).



(a) h_{min} vs γ pour différentes densités ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.



(b) h_{min} vs γ pour différents taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ à $\phi = 0.34$.

FIGURE 6.3 – Séparation minimale instantanée h_{min} au cours du temps pour diverses réalisations du cisaillement d'une suspension de particules rigides parfaitement lisses.

On observe que pour des densités ou des vitesses de cisaillement trop importantes ($\phi > 0.6$, $\dot{\gamma} \leqslant 1$), la suspension génère naturellement des gaps nuls, l'empêchant de se stabiliser. Ces diagrammes rappellent les observations de *lubrication breakdown* de Ball et Melrose [8] sur l'apparition d'amas de grains séparés par des gaps de largeur rapidement non physique ($h < 10^{-6}a <$ taille d'une molécule d'eau). Il est donc crucial de tenir compte des contacts dans la simulation du cisaillement de ces systèmes.

6.3 Suspensions de particules rugueuses non frottantes.

Dans cette section sont présentés des résultats concernant la rhéologie des suspensions de particules rugueuses, pour lesquelles on autorise les contacts élastiques directs entre grains. L'algorithme utilisé est le second algorithme présenté dans le chapitre (4), à la section (4.3). Les grains sont néanmoins considérés comme non frottant, les contacts non dissipatifs, et les forces non hydrodynamiques sont purement normales.

Dans ces simulations, on teste la rhéologie à volume constant de ces mélanges. L'influence de paramètres internes à la simulation (nombre de particules, taille des rugosités, rigidité des particules) est testée pour un écoulement identique (même densité, même taux de cisaillement). Des courbes d'écoulement à différentes densités sont ensuites mesurées et commentées dans une seconde partie.

6.3.1 Étude paramétrique préliminaire.

Dans cette section on examine succintement l'effet sur la contrainte développée dans l'écoulement de paramètres de la simulation ou du modèle dont on souhaite a priori éviter les effets.

Nombre de grains.

On cherche à reproduire la rhéologie en volume d'une suspension comportant un nombre arbitrairement grand de grains via la simulation dans une cellule périodique de volume fini de l'interaction sous écoulement d'un nombre $2 \times N$ de grains grand mais manipulable. En toute rigueur, le comportement recherché se définit comme le comportement dans la limite thermodynamique $N \to \infty$ (à densité, ou a pressions constante) des systèmes de volume et de nombre de particules infinis.

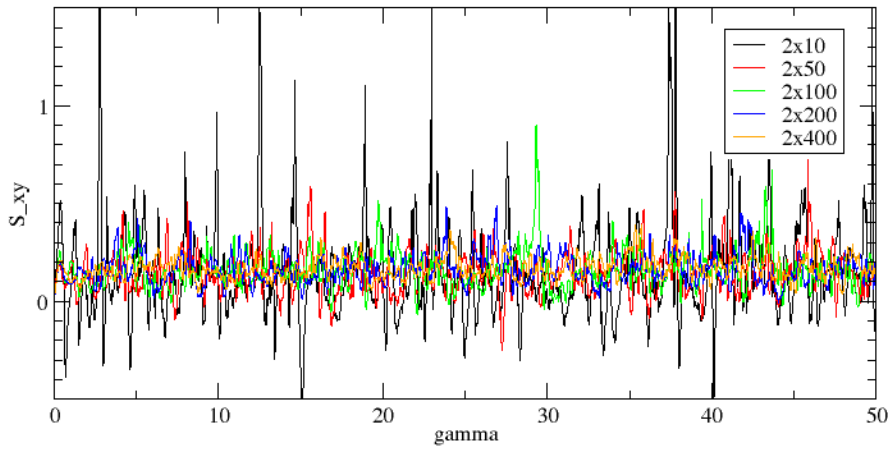


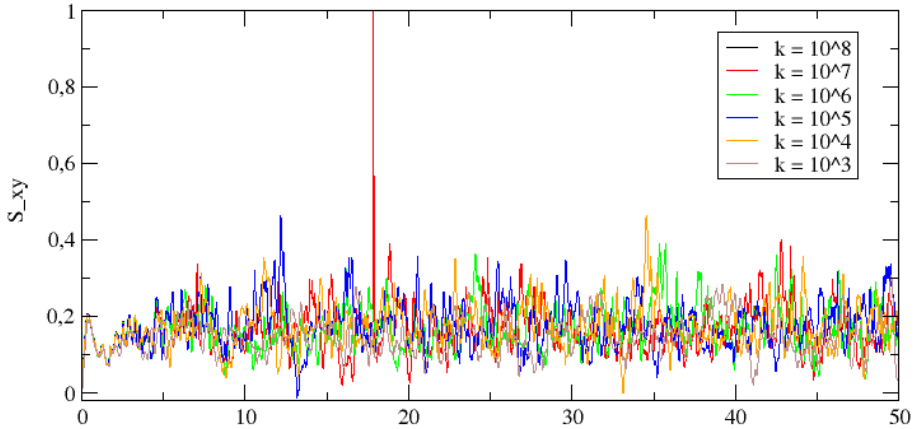
FIGURE 6.4 – Réalisations pour la contrainte de cisaillement dans des systèmes de particules bidisperses en nombre variable.

La figure (6.4) présente des réalisations de la contrainte de cisaillement totale générée au cours de l'écoulement de 5000% de systèmes de différente taille : $N = 10$ (noir), $N = 50$ (rouge), $N = 100$ (vert), $N = 200$ (bleu) et $N = 400$ (orange). Toutes ces réalisations sont par ailleurs obtenues pour des systèmes de même densité $\phi = 0.5$, cisaillés à la même vitesse $\dot{\gamma} = 0.1$. On observe que les trajectoires sont d'autant plus fluctuantes que le nombre de particules est petit. La trajectoire noire

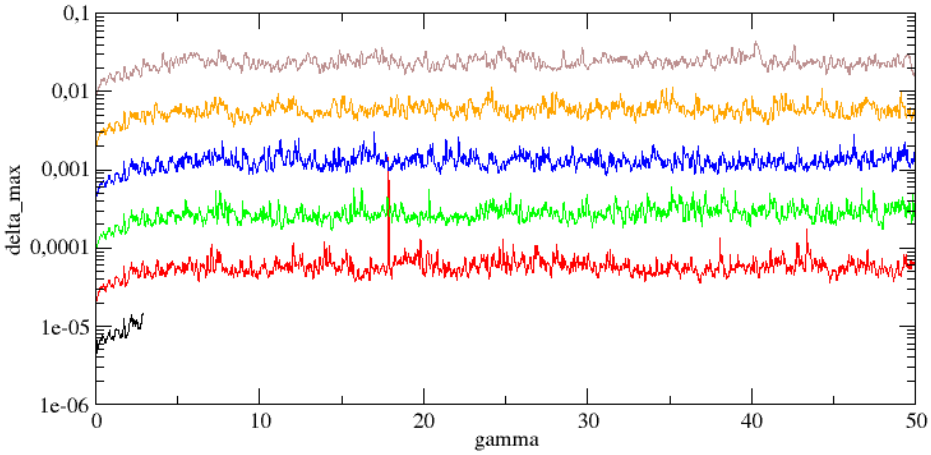
génère de larges pics de contrainte tandis que la trajectoire orange fluctue assez peu (relativement à la noire). Les valeurs moyennes sont relativement indépendantes du nombre de particules. Pour l'essentiel des simulations effectuées dans ce travail, nous avons choisi un système de 2×400 particules qui offre un bon compromis entre temps de calcul et convergence vers le comportement moyen sans trop de fluctuations.

Rigidité des grains.

On s'attache dans ce travail à l'étude de la rhéologie de suspensions de grains rigides. Dans une méthode de type DEM comme notre algorithme, la limite d'infinie rigidité ne peut être qu'approchée numériquement. Les forces de contact entre grains sont évaluées sur la base de l'existence d'une déformation élastique finie δ pour les grains en contact. Comme la rigidité K des grains est nécessairement finie, le recouvrement δ est nécessairement non nul. La limite rigide correspond alors à la limite $K \to \infty$, où de manière équivalente, $\delta \to 0$ à efforts constants.



(a) $\sigma_{xy}(\gamma)$ pour différentes rigidités de grains.



(b) Écrasement maximal $\delta_{\max}$ observé pour différentes rigidités de grain.

FIGURE 6.5 – Réalisations pour la contrainte de cisaillement (a) dans des systèmes de particules bidisperses de rigidité variable. La figure (b) représente l'écrasement élastique maximal observé parmi les particules.

On peut néanmoins considérer que l'on s'approche raisonnablement de cette limite tant que la déformation enregistrée demeure très petite devant la taille des grains, et tant que la contrainte macroscopique développée est insensible à cette échelle de déformation.
La figure (6.5(a)) présente des réalisations de la contrainte de cisaillement générée au cours de l'écoulement de 5000% de systèmes de particules plus ou moins rigides : $K = 10^8$ (noir), $K = 10^7$ (rouge), $K = 10^6$ (vert), $K = 10^5$ (bleu), $K = 10^4$ (orange) et $K = 10^3$ (brun). Là encore, la densité du système et la vitesse du cisaillement sont maintenus constants à $\phi = 0.5$ et $\dot{\gamma} = 0.1$ [1]. Il n'apparait pas de différences flagrantes dans la contrainte générée, que ça soit au niveau de sa valeur moyenne, ou de ses fluctuations. La figure (6.5(b)) montre quant à elle l'évolution de la déformation élastique la plus large générée parmi tous les paires de particules en interaction formées dans la suspension. Sans surprise, on observe que plus les grains sont rigides, plus les déformations sont faibles, jusqu'à poser des problèmes numériques pour des rigidités trop importantes. Pour des particules très molles ($K = 1000$ ou $10\,000$), les déformations générées sont relativement importantes (de l'ordre du pourcent du rayon des particules). Pour des rigidités plus importantes, la déformation maximale enregistrée s'effondre, ce qui est tout à fait satisfaisant (gardant à l'esprit que les conditions choisies ici sont relativement clémentes en terme de forces générées dans le système).

Pour les simulations effectuées à volume constant, et dont les résultats sont présentés par la suite, une rigidité de $K = 10^6$ est choisie, afin de limiter la déformation des particules tout en permettant une bonne intégration numérique des trajectoires des particules.

Échelle de taille de rugosité de la surface des grains.

Dernier paramètre interne au modèle dont nous contrôlons l'effet sur la rhéologie macroscopique, l'échelle ε de la taille des rugosités contrôle à quelle distance l'interaction entre deux grains voisins bascule de la lubrification vers le contact de Hertz.

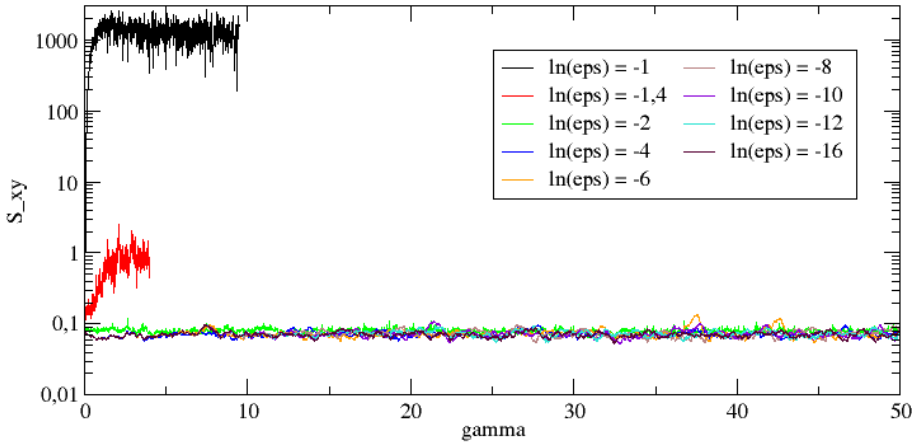


FIGURE 6.6 – Réalisations pour la contrainte de cisaillement dans des systèmes de particules bidisperses rugueuses, d'échelle de rugosité ε variable.

La figure (6.6) présente des réalisations de la contrainte de cisaillement générée au cours de l'écoulement de 5000% de systèmes de particules plus ou moins rugueuses : $\varepsilon \approx 0.37$ (noir), $\varepsilon \approx 0.25$ (rouge), $\varepsilon \approx 0.13$ (vert), $\varepsilon \approx 0.02$ (bleu), $\varepsilon \approx 0.0025$ (orange), jusqu'à $\varepsilon = e^{-16} \approx 10^{-7}$ (mauve). On observe

1. On pourra vérifier plus loin que les contacts sont sollicités dans ces conditions.

que dès que les rugosités font environ un dixième de la taille des grains (et c'est encore beaucoup !) ou moins, la contrainte générée devient indépendante de leur taille. La contrainte devient est en revanche gigantesque dès que la taille des rugosités est comparable à celle des particules. Dans ce cas, c'est tout simplement que l'on modifie la densité effective de la suspension et que l'on s'approche d'un système bloqué de grains en interaction purement élastique. Bien entendu, les tailles de rugosité où cela se produit sont bien trop importantes pour être réalistes. Dans la suite une taille de rugosité de $\varepsilon = e^{-8} \approx 3 \times 10^{-4}$ est retenue.

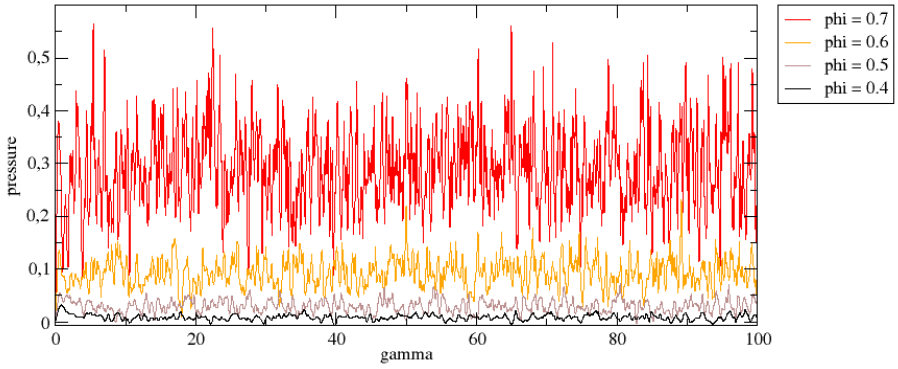
6.3.2 Courbes d'écoulement à volume constant.

La dépendance de la contrainte développée lors d'un écoulement à volume constant avec le taux de cisaillement d'une part, et la densité de la suspension d'autre part, est évaluée lors d'une série de simulations dont les paramètres sont récapitulés dans le table (6.2). Pour chaque couple $(\dot{\gamma}, \phi)$ étudié, 10 systèmes différents de 2×400 particules bidisperses (diamètres 1 et $1/1.4 \approx 0.71$) ont été cisaillés de 10 000%. La rugosité des particules est fixée à $\varepsilon = 3 \times 10^{-4}$. Le coefficient de dissipation dans les contacts est pris nul dans ces simulations ($\nu = 0$ dans l'équation 4.107).

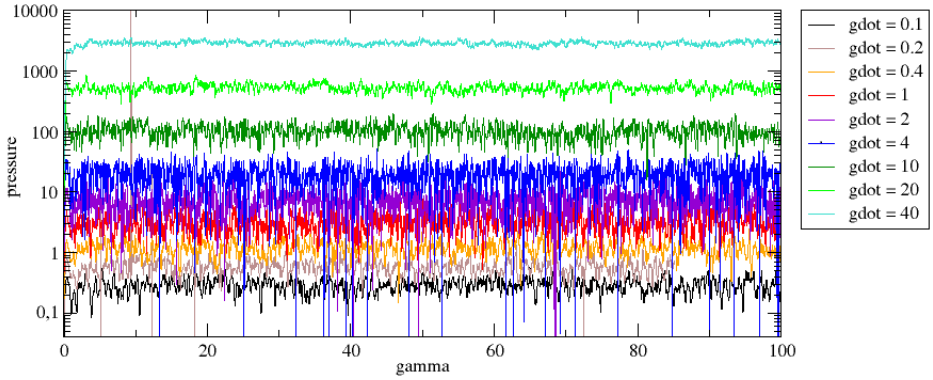
paramètre varié	valeurs testées
$\dot{\gamma}$	0.1, 0.2, 0.4, 1, 2, 4, 10, 20, 40
ϕ	0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5, 0.55, 0.6, 0.65, 0.7

TABLE 6.2 – Récapitulatif des couples $(\dot{\gamma}, \phi)$ étudiés pour le cisaillement à volume constant d'une suspension de particules rugueuses non frottantes.

Globalement, la contrainte développée augmente avec le taux de cisaillement et la densité de la suspension. La figure (6.7) présente des réalisations de la pression lorsque la densité varie à $\dot{\gamma} = 0.1$ constant (haut) ou lorsque le taux de cisaillement varie à densité $\phi = 0.7$ constante (bas).



(a) $p(\gamma)$ pour différents ϕ à $\dot{\gamma} = 0.1$.



(b) $p(\gamma)$ pour différents $\dot{\gamma}$ à $\phi = 0.7$.

FIGURE 6.7 – Réalisations de la pression développée dans une suspension bidisperse de particules rugueuses non frottantes, cisaillé de 10 000 %.

On mesure la contrainte moyennée sur toute la déformation (hors transitoire) et toutes les réalisations simulées, et on porte les résultats sur les diagrammes représentés sur les figures (6.7) pour l'évolution avec le taux de cisaillement et (6.9) pour l'évolution avec la densité.

Les diagrammes de la colonne de gauche sur la figure (6.7) présentent les variations avec $\dot{\gamma}$ de la pression $p = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$, de la contrainte de cisaillement σ_{xy} et de (l'opposé de) la différence des contraintes normales $-N_1 = -(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/2$. Les cercles représentent la contribution des forces de paire à la contrainte (contrainte d'Irving-Kirkwood), tandis que les triangles représentent la partie de la contrainte associée au transport de quantité de mouvement par les fluctuations de vitesse des particules (contrainte de Reynolds), la somme constituant la contrainte totale dans la suspension.

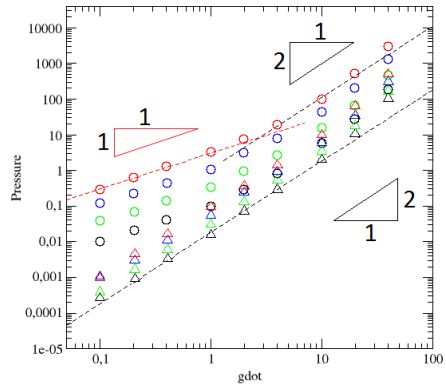
On effectue les observations suivantes. Premièrement, la contrainte totale est presque entièrement générée par la contribution due aux interactions entre grains. Les coefficients du tenseur de contrainte Reynolds sont négligeables devant ceux du tenseur d'Irving-Kirkwood, et ce d'autant plus que le taux de cisaillement est petit (Ils en constituent de quelques centièmes pour $\dot{\gamma} = 100$ à quelques millièmes pour $\dot{\gamma} = 0.1$). La contrainte totale est essentiellement donnée par le tenseur d'Irving-Kirkwood.

Deuxièmement, la contrainte de Reynolds varie essentiellement en loi de puissance avec le taux de cisaillement. Compte tenu de l'expression du tenseur de Reynolds, proportionnel au carré des fluctuations des vitesses des grains, on s'attend à une variation en $\dot{\gamma}^2$ de cette contribution à la contrainte. C'est le cas pour la pression et la contrainte de cisaillement jusqu'à $\dot{\gamma} \lesssim 10$ (droites noires de pente 2 sur les diagrammes 6.8(a) et 6.8(c)). Au delà, il semble que l'on surévalue un peu la contrainte de Reynolds dans ces simulations. Un exposant supérieur à 2 peut être obtenu pour la pression de Reynolds (droite violette sur la figure 6.8(a), de pente 2.3). La différence de contrainte normale due à la contribution de Reynolds n'est pas mesurable pour les petits taux de cisaillement. À haut $\dot{\gamma}$, il semble qu'elle varie proportionnellement à $\dot{\gamma}^3$ (droite noire sur le diagramme 6.8(e)).

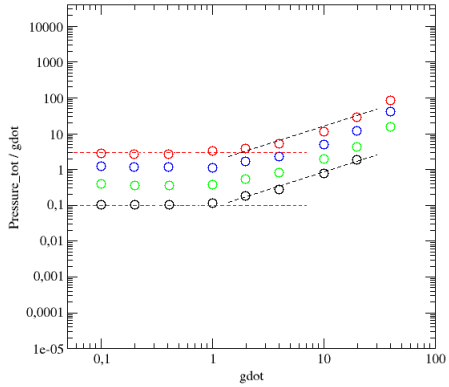
Troisièmement, la suspension exhibe un comportement visqueux dans un domaine de vitesses d'écoulement pas trop élevées. Pour $\dot{\gamma} \lesssim 1$, toutes les composantes de la contrainte d'Irving-Kirkwood (et donc essentiellement de la contrainte totale) varient proportionnellement avec $\dot{\gamma}$ (droites rouges de pente 1 sur les diagrammes 6.8(a), 6.8(c) et 6.8(e)).

Enfin, pour $\dot{\gamma} \gtrsim 1$, la suspension entre dans un autre régime. La pression et la contrainte de cisaillement développées deviennent proportionnelles au carré $\dot{\gamma}^2$ du taux de cisaillement (droites noires de pente 2 sur les diagrammes 6.8(a) et 6.8(c)). La différence des contraintes normales semble également entrer dans un régime un peu plus que linéaire, mais l'exposant mesuré semble à peine plus grand que 1 (droite bleue de pente 1.3 sur le diagramme 6.8(e)).

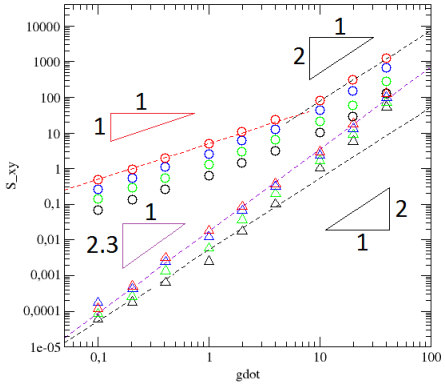
Les diagrammes de la colonne de droite de la figure (6.8) présentent la viscosité effective (normale, en cisaillement, et différence des viscosités normales) obtenue en normalisant la contrainte représentée sur la colonne de gauce par $\dot{\gamma}$. Il s'agit donc essentiellement des mêmes données, avec une pente diminuée d'une unité pour toutes les lois de puissance. On observe un plateau visqueux de la viscosité normale et de cisaillement jusqu'à un taux de cisaillement de quelques unités, suivi d'un régime rhéoépaississant où la viscosité croît comme $\dot{\gamma}$.



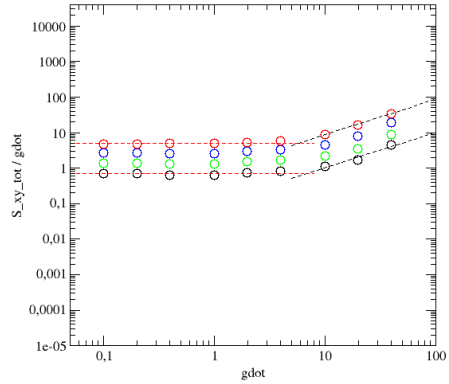
(a) Pression $p = \frac{1}{2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$.



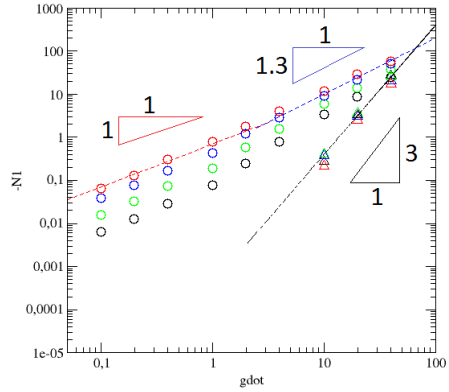
(b) Viscosité normale $\eta_p = p/\dot{\gamma}$.



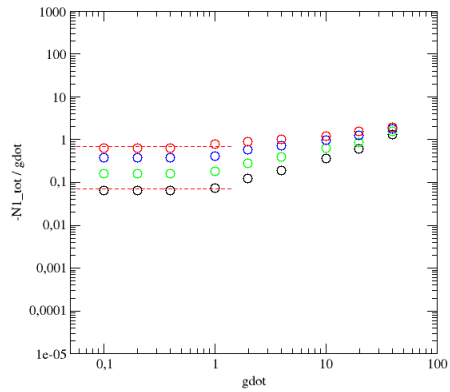
(c) Contrainte de cisaillement σ_{xy}.



(d) Viscosité en cisaillement $\eta_{xy} = \sigma_{xy}/\dot{\gamma}$.



(e) Différence des contraintes normales $-N_1 = \frac{1}{2}(\sigma_{yy} - \sigma_{xx})$.



(f) Différence de viscosité normale $-\eta_{N1} = -N_1/\dot{\gamma}$.

FIGURE 6.8 – Courbes d'écoulement associées au cisaillement à volume constant d'une suspension bidisperse de particules rugueuses non frottantes. La colonne de gauche représente la contrainte développée en fonction de $\dot{\gamma}$: composante d'Irving-Kirkwood (ronds) et de Reynolds (triangles). La colonne de droite représente la viscosité effective (totale) associée à chacune des composantes de la contrainte. La couleur des symboles code la densité : $\phi = 0.7$ (rouge), $\phi = 0.6$ (bleu), $\phi = 0.5$ (vert), et $\phi = 0.4$ (noir).

La transition de la contrainte d'Irving-Kirkwood peut se comprendre comme la transition entre un régime visqueux où les efforts entre grains sont contrôlés par la lubrification et un régime inertiel où les interactions entre grains sont contrôlées par les collisions élastiques entre grains en contact direct.

La dynamique des grains est contrôlée par l'équilibre entre trois « moteurs » du mouvement : les forces hydrodynamiques résultant de l'entraînement des grains par le fluide porteur et de leurs interactions de lubrification, les forces de contact élastiques, et l'inertie des grains. En terme d'échelle, les forces hydrodynamiques sont proportionnelles aux vitesses des grains, et varient comme $\dot{\gamma}$. L'inertie des grains est proportionnelle à leur accélération, et varie comme $\dot{\gamma}^2$. Les forces élastiques de contact par contre, ne présentent pas d'échelle propre. Elles se développent afin d'équilibrer les autres efforts.

Le taux de cisaillement de transition peut être évalué par un argument d'échelle. Au niveau microscopique, on peut partir de l'équation du mouvement d'une particule i, qui s'écrit

$$m_i \frac{\mathrm{d}^2 \vec{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = \sum_j \vec{f}_{ij}^{\mathsf{lub}} + \sum_j \vec{f}_{ij}^{\mathsf{c}} \ , \tag{6.7}$$

où la première somme porte sur les grains voisins suffisamment proches pour être en interaction hydrodynamique mais qui ne sont pas en contact direct, et la seconde somme porte sur les voisins en contact direct. Mis à part les forces de contact, qui ne présentent pas d'échelle propre, les paramètres physiques du problème ($m =< m_i >$, $a =< a_i >$, ε, $\dot{\gamma}$ et η_0) permettent d'adimensionner chaque terme de cette équation par son échelle de variation typique :

$$m_i \frac{\mathrm{d}^2 \vec{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = ma\dot{\gamma}^2 M_i \frac{\mathrm{d}^2 \vec{R}_i}{\mathrm{d}\gamma^2} \ , \tag{6.8}$$

$$\vec{f}_{ij}^{\mathsf{lub}} = 6\pi\eta_0 a_{ij}^2 \frac{\dot{h}_{ij}}{h_{ij}} \vec{n}_{ij} = 6\pi\eta_0 a^2 \dot{\gamma} \vec{F}_{ij}^{\mathsf{lub}} \ , \quad \text{où} \quad \vec{F}_{ij}^{\mathsf{lub}} = A_{ij}^2 \frac{\mathrm{d}H_{ij}/\mathrm{d}\gamma}{H_{ij}} \ , \tag{6.9}$$

où $M_i = m_i/m$ et $\vec{R}_i = \vec{r}_i/a$ sont la masse et la position adimensionnées de la particule i, $\gamma = \dot{\gamma}t$ est la déformation, c'est à dire le temps adimensionné, $A_{ij} = a_{ij}/a$ et $H_{ij} = h_{ij}/\varepsilon$ sont le rayon réduit adimensionné et le gap adimensionné de la paire ij. On peut alors réécrire l'équation du mouvement :

$$ma\dot{\gamma}^2 M_i \frac{\mathrm{d}^2 \vec{R}_i}{\mathrm{d}\gamma^2} = 6\pi\eta_0 a^2 \dot{\gamma} \sum_j \vec{F}_{ij}^{\mathsf{lub}} + \sum_j \vec{f}_{ij}^{\mathsf{c}} \ . \tag{6.10}$$

Comme l'échelle typique de l'inertie d'une particule est proportionnelle à $\dot{\gamma}^2$, alors que l'échelle typique des forces de lubrification auxquelles elle est soumise est proportionnelle à $\dot{\gamma}$, leur rapport permet de définir un taux de cisaillement de transition $\dot{\gamma}^*$ tel que $(ma\dot{\gamma}^2)/(6\pi\eta_0 a^2\dot{\gamma}) = \dot{\gamma}/\dot{\gamma}^*$, i.e. :

$$\dot{\gamma}^* = \frac{6\pi\eta_0 a}{m} \ . \tag{6.11}$$

Si la vitesse d'écoulement est faible devant $\dot{\gamma}^*$, les efforts hydrodynamiques qui agissent sur les grains sont grands devant leur inertie. L'équation du mouvement des grains s'écrit alors :

$$\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}^*} M_i \frac{\mathrm{d}^2 \vec{R}_i}{\mathrm{d}\gamma^2} \approx \vec{0} = \sum_j \vec{F}_{ij}^{\mathsf{lub}} + \sum_j \vec{F}_{ij}^{\mathsf{c}} \ , \tag{6.12}$$

où l'on a adimensionné les forces de contact par l'échelle de force hydrodynamique en posant $\vec{F}^{\mathsf{c}}_{ij} = \vec{f}^{\mathsf{c}}_{ij}/(6\pi\eta_0 a^2\dot{\gamma})$. C'est la limite Stokésienne bien connue pour les suspensions. Les forces de contact équilibrent les seules forces hydrodynamiques, de telle sorte que tous les efforts entre grains varient comme $\dot{\gamma}$, et la contrainte d'Irving-Kirkwood qui se développe est proportionnelle à $\dot{\gamma}$.
Si la vitesse d'écoulement est plus grande, et devient comparable à $\dot{\gamma}^*$, voir grande devant lui, on peut entrer dans un régime où l'inertie des grains dépasse en ordre de grandeur l'échelle des forces hydrodynamiques, surtout si la suspension est dense et la taille typique de l'écoulement entre les grains est petite. L'équation du mouvement s'écrit alors :

$$M_i \frac{\mathrm{d}^2\vec{R}_i}{\mathrm{d}\gamma^2} = \frac{\dot{\gamma}^*}{\dot{\gamma}} \sum_j \vec{F}^{\mathsf{lub}}_{ij} + \sum_j \vec{F}^{\mathsf{c}}_{ij} \approx \sum_j \vec{F}^{\mathsf{c}}_{ij} \ , \tag{6.13}$$

où l'on a cette fois adimensionné les forces de contact par l'échelle d'inertie $\vec{F}^{\mathsf{c}}_{ij} = \vec{f}^{\mathsf{c}}_{ij}/(ma\dot{\gamma}^2)$. Dans ce cas, les forces de contact générées lors des collisions équilibrent essentiellement l'inertie des grains, correspondant à un régime inertiel habituellement rencontré dans les granulaires secs (régime de Bagnold).

Dans notre système, on évalue le taux de cisaillement de transition :

$$\dot{\gamma}^* = \frac{6 \times 3,14 \times 1 \times 0,43}{0,36} \approx 22 \ , \tag{6.14}$$

Ce raisonnement simple surévalue d'un facteur dix le taux de cisaillement de transition par rapport à celui qui est observé sur les courbes d'écoulement de la figure (6.8), et qui est plus proche de l'unité.

Les arguments d'échelle portant sur l'équation du mouvement des particules ne sont par définition valables qu'au niveau microscopique. Pour les transposer au niveau de la rhéologie macroscopique de la suspension, il faudrait pouvoir tenir compte de la microstructure de la suspension qui traduit l'influence de la densité ϕ. Plus précisément, comme les forces auxquelles sont soumis les grains (lubrification et contacts) s'expriment sous la forme de sommes vectorielles, la distribution des voisins, doit intervenir d'une façon où d'une autre si l'on veut estimer au mieux les ordres de grandeurs mis en jeu pour les différents termes. De fait, si l'équation (6.9) donne une échelle d'intensité typique de la force de lubrification de paire $\vec{f}^{\mathsf{lub}}_{ij}$, il n'est pas évident d'en déduire l'échelle d'intensité de la somme vectorielle $\sum_j \vec{f}^{\mathsf{lub}}_{ij}$, qui peut être bien plus petite que chacune de ses composantes, décalant d'autant le taux de cisaillement de transition vers les petites vitesses.

Une façon de tenir compte de la microstructure est de raisonner directement au niveau macroscopique en terme de contrainte [93], c'est à dire en moyennant l'intensité des forces entre grains sur la distribution des voisins (angle et distance).
Dans le régime visqueux correspondant à l'équation microscopique (6.12), une échelle typique σ_{V} de la contrainte peut se calculer en considérant l'ordre de grandeur des forces de lubrification $6\pi\eta_0 a^2\dot{\gamma}$, rapporté à une surface d'ordre a^2. On sait de plus que la contrainte diverge quand $\phi \to \phi_c$, il faut donc multiplier encore par une fonction $S_{\mathsf{V}}(\phi)$ de la densité qui récupère cette divergence :

$$\sigma_{\mathsf{V}} = 6\pi\eta_0\dot{\gamma} S_{\mathsf{V}}(\phi) \ , \tag{6.15}$$

De la même façon, dans le régime inertiel correspondant à l'équation microscopique (6.13), l'échelle σ_{I} de contrainte se construit en rapportant les efforts d'inertie d'ordre de grandeur $ma\dot{\gamma}^2$ à une surface

a^2 et en multipliant le résultat par une fonction $S_{\mathsf{I}}(\phi)$ qui diverge au blocage :

$$\sigma_{\mathsf{I}} = \frac{m}{a}\dot{\gamma}^2 S_{\mathsf{I}}(\phi) \ . \tag{6.16}$$

On peut dès lors construire un taux de cisaillement de transition entre les deux régimes qui dépend a priori de la densité de la suspension en égalant l'ordre de grandeur typique des contraintes visqueuse et inertielle. On écrit $\sigma_{\mathsf{V}} \approx \sigma_{\mathsf{V}}$, ce qui donne :

$$\dot{\gamma}^*(\phi) = \frac{6\pi\eta_0 a}{m}\frac{S_{\mathsf{V}}(\phi)}{S_{\mathsf{I}}(\phi)} \ . \tag{6.17}$$

Il faut donc être capable d'estimer les fonctions $S_{\mathsf{V}}(\phi)$ et $S_{\mathsf{I}}(\phi)$ qui décrivent comment divergent la contrainte respectivement dans un régime purement visqueux et dans un régime purement inertiel, pour connaître le taux de cisaillement de transition entre les deux régimes.

Les diagrammes de la figure (6.9) représentent les variations de la viscosité en pression, en cisaillement et de la différence des viscosités normales avec la fraction volumique de la suspension. Dans ces diagrammes nous nous sommes limité au régime visqueux de la suspension ($\dot{\gamma} = 0.1$ en noir, $\dot{\gamma} = 1$ en rouge).

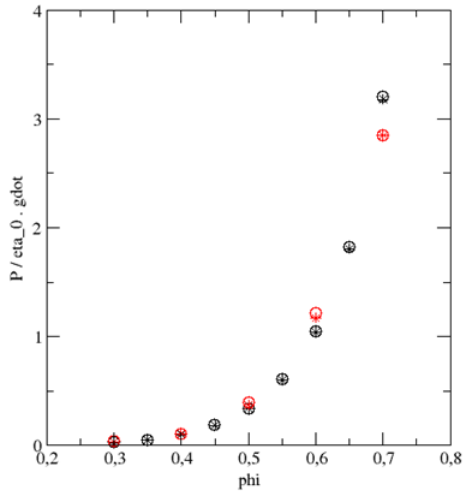
Étant donné que ces simulations ont été réalisées à volume constant, les fortes fluctuations de contraintes observées lorsque l'on densifie le système nous ont empêchés de nous aventurer au-delà d'une densité $\phi = 0.7$. Cette densité est suffisamment importante pour qualifier la suspension de dense, au sens où chaque grain est continuellement en interaction avec plusieurs voisins. Elle est néanmoins encore éloigné de la densité de blocage théorique de ce mélange $\phi^* = 0.84$ [109], et ne permettent pas de capturer l'exposant de divergence de la contrainte. De fait, on voit clairement sur la figure 6.9(c) que l'on atteint pas un régime de divergence en loi de puissance, les points de la courbe $\eta_{xy}(\phi_c - \phi)$ ne s'alignant pas sur une droite en échelle logarithmique. On peut néanmoins estimer la fonction $S_{\mathsf{V}}(\phi)$ de l'équation 6.17 à l'aide de la relation (6.15) :

$$S_{\mathsf{V}}(\phi) \approx \frac{\sigma_{xy}(\phi, \dot{\gamma} = 0.1)}{6\pi\eta_0\dot{\gamma}} \ . \tag{6.18}$$

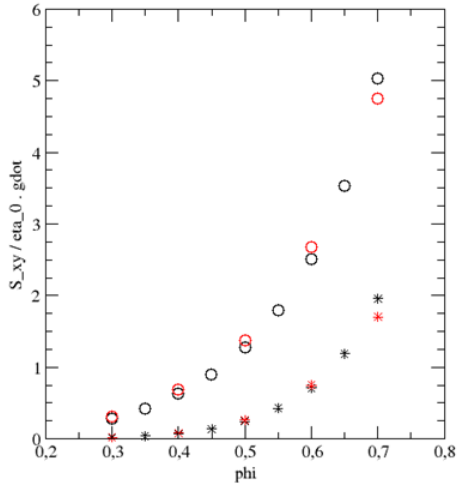
De la même façon, on évalue la divergence de la contrainte dans le régime inertiel. On représente sur la figure 6.10(a) la contrainte de cisaillement divisée par le carré du taux de cisaillement, en fonction de la densité, pour $\dot{\gamma} = 20$ en noir et $\dot{\gamma} = 40$ en rouge. Dans le régime inertiel, les points se regroupent sur une courbe, ce qui nous permet d'estimer la fonction $S_{\mathsf{I}}(\phi)$. De fait, on calcule à l'aide de la relation (6.16) :

$$S_{\mathsf{I}}(\phi) \approx \frac{a\sigma_{xy}(\phi, \dot{\gamma} = 40)}{m\dot{\gamma}^2} \ . \tag{6.19}$$

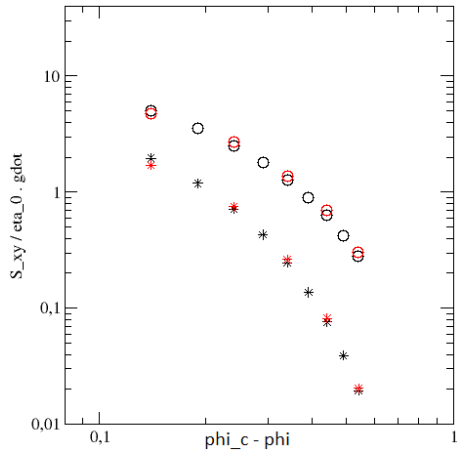
Ayant ainsi estimé $S_{\mathsf{V}}(\phi)$ et $S_{\mathsf{I}}(\phi)$ à partir de la divergence (limitée dans cette gamme de fraction volumique) de la contrainte de cisaillement dans les régimes visqueux et inertiel, nous pouvons estimer à l'aide de la relation (6.17) la variation de taux de cisaillement de transition dans le domaine de densité auquel nous avons accès. Le résultat est présenté sur la figure 6.10(b). Nous obtenons un taux de cisaillement de transition de l'ordre de 2, quasiment constant voir très légèrement décroissant avec la fraction volumique. Ce résultat est cohérent avec ce que l'on observe sur les courbes d'écoulement, à savoir une transiton à un taux de cisaillement d'ordre unité, et indépendant de la densité de la suspension.



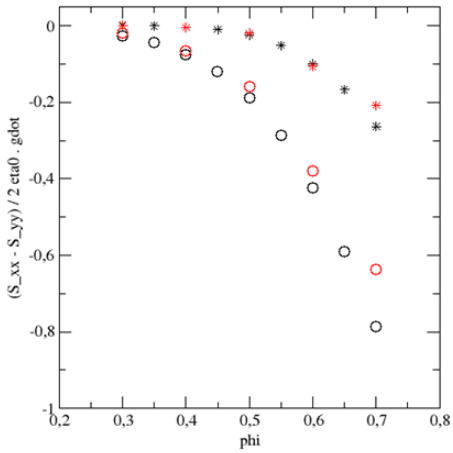
(a) Viscosité normale $\eta_p(\phi)$.



(b) Viscosité de cisaillement $\eta_{xy}(\phi)$.

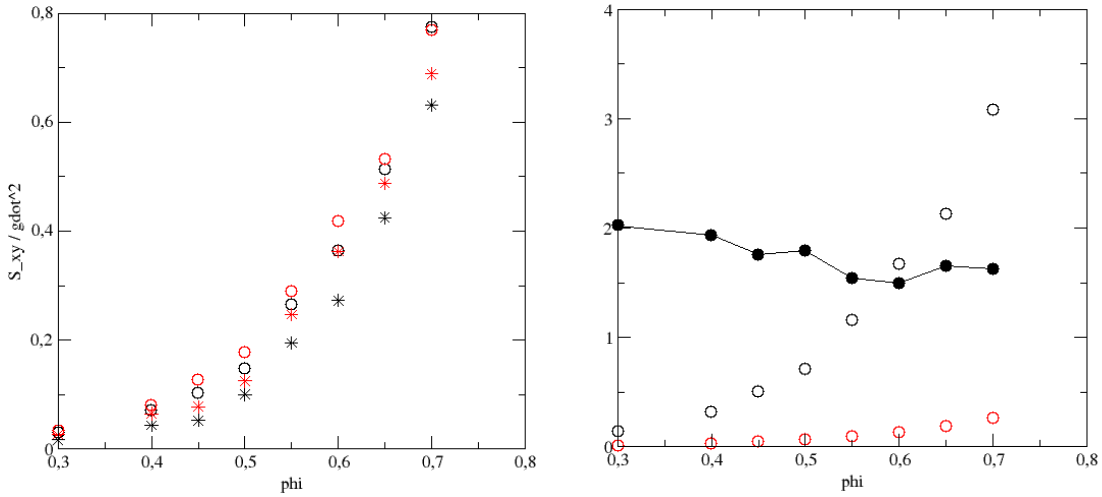


(c) Viscosité de cisaillement $\eta_{xy}(\phi_c - \phi)$ en échelle log-log.



(d) Différence de viscosité normale $\eta_{N1}(\phi)$.

FIGURE 6.9 – Évolution de la viscosité en fonction de la densité pour le cisaillement simple à volume constant d'une suspension bidisperses de particules rugueuses non frottantes.



(a) Contrainte de cisaillement dans le régime inertiel divisée par $\dot{\gamma}^2$ pour $\dot{\gamma} = 20$ (noir) et $\dot{\gamma} = 40$ (rouge).

(b) Fonctions $S_{\mathrm{V}}(\phi)$ (cercles rouges), $S_{\mathrm{I}}(\phi)$ (cercles noirs) et $\dot{\gamma}^*(\phi)$ (gros points noirs).

FIGURE 6.10 – Estimation du taux de cisaillement de transition $\dot{\gamma}_c(\phi)$ à partir de la divergence de la contrainte en régime inertiel (à gauche) et en régime visqueux (figure 6.9(b)).

Chapitre 7

Rhéologie des suspensions denses à pression constante

Une seconde série de simulations a été ensuite effectuée à pression constante. Le but de ces mesures est de s'approcher autant que possible du blocage en étudiant des suspensions aussi denses que possibles. Une loi d'écoulement à pression constante au voisinage du blocage est établie et la divergence de la contrainte est examinée.

7.1 Suspensions de particules rugueuses non frottantes.

7.1.1 Loi d'écoulement à pression constante.

Dans cette section sont présentés des résultats obtenus lors de la simulation du cisaillement d'une suspension de particules rugueuses non frottantes exposés à une pression constante.

Pour chaque couple $(\dot{\gamma}, p)$ étudié, 10 systèmes différents de 2×400 particules bidisperses (diamètres 1 et $1/1.4 \approx 0.71$, rugosité $\varepsilon = 3 \times 10^{-4}$) ont été cisaillés jusqu'à un maximum de $10\,000\%$. Pour ces simulations, les contacts ne sont pas dissipatifs ($\nu = 0$).
Pour chaque $(\dot{\gamma}, p)$, la simulation du cisaillement d'un système supplémentaire, identique à l'exception de contacts dissipatifs ($\nu = 100$), a été menée en complément jusqu'à un maximum de $20\,000\%$.
Toutes les simulations n'ont pas abouti, le tableau (7.1) récapitule le cisaillement accumulé par système au delà du transitoire. Pour chaque combinaison $(\dot{\gamma}, p)$, la colonne de gauche correspond aux simulations où les contacts ne dissipent pas, la colonne de droite correspond aux cas où les contacts dissipent.

Compte tenu des courbes d'écoulement obtenus en cisaillement à volume constant, les pressions et taux de cisaillement sont choisis pour explorer le domaine visqueux de la suspension.
Il apparaît que les simulations sont d'autant plus difficiles à mener que la pression (et donc l'échelle des forces mises en jeu dans le système) est élevée et le taux de cisaillement faible. Ces conditions correspondent au cisaillement de suspensions très denses, proches du blocage. Dans ces conditions, certaines difficultés numériques peuvent être à l'origine du non succès de certains essais. Ces difficultés peuvent provenir de la nécéssité de travailler avec un pas de temps extrêmement faible pour l'algorithme de calcul, ce qui empêche la simulation de réellement progresser. Dans d'autres circonstances, selon le détail microscopique des structures localement générées, des instabilités numériques pas toujours bien comprises semblent apparaître, entraînant l'arrêt de la simulation.

	$p = 0.01$		$p = 0.04$		$p = 0.1$		$p = 0.4$		$p = 1$		$p = 4$	
$\dot{\gamma} = 0.0001$	95		35									
$\dot{\gamma} = 0.0004$	95		95									
$\dot{\gamma} = 0.001$	95	195	95	195	7	195		70		25		
$\dot{\gamma} = 0.004$	95	195	95	195	95	195	3	195		115		25
$\dot{\gamma} = 0.01$	95	195	95	195	95	195	95	195		195		135
$\dot{\gamma} = 0.04$	95	195	95	195	95	195	95	195	35	195		195
$\dot{\gamma} = 0.1$	95	195	95	195	95	195	95	195	70	195	1	195

TABLE 7.1 – Récapitulatif du cisaillement accumulé au delà du transitoire pour différents couples $(p, \dot{\gamma})$ dans le domaine de comportement visqueux de la suspension. Pour chaque valeur de la pression, la colonne de gauche correspond à des systèmes où les contacts sont dissipatifs ($\nu = 100$), tandis que la colonne de droite correspond à des contacts qui ne dissipent pas ($\nu = 0$).

On cherche à déterminer une loi de comportement ne dépendant que du nombre visqueux $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$. Dans le régime visqueux, on peut construire un temps microscopique visqueux t_v en équilibrant la force de pression pa^2 avec la force de trainée visqueuse associée à la vitesse correspondant au déplacement d'une distance a pendant un temps t_v, [31] soit

$$\begin{aligned} pa^2 &= \eta_0 a \frac{a}{t_v} \ , \\ t_v &= \frac{\dot{\gamma}}{p} \ . \end{aligned} \tag{7.1}$$

Le nombre visqueux J est alors défini comme le rapport entre le temps t_v vu comme un temps de réarrangement microscopique et le temps typique de convection par l'écoulement imposé $t_c = 1/\dot{\gamma}$:

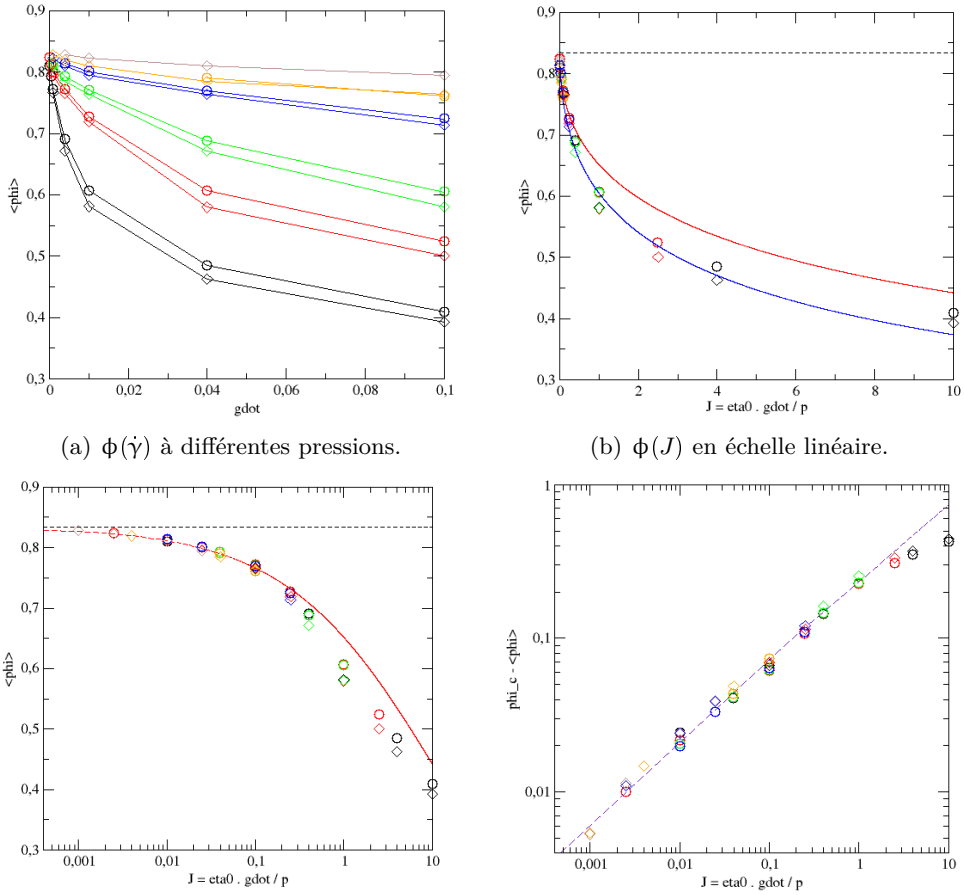
$$J = \frac{\eta_0\dot{\gamma}}{p} = \frac{t_v}{t_c} \ . \tag{7.2}$$

La loi de comportement recherchée témoigne donc d'un comportement purement visqueux et peut se mettre sous la forme d'une loi pour la densité $\phi(J)$ et d'une loi de frottement macroscopique $\sigma_{xy}/p = \mu(J)$ [22].

Densité.

On peut directement mesurer la densité stationnaire atteinte par ces systèmes cisaillés plus ou moins vite à des pressions imposées plus ou moins grandes. La figure (7.1(a)) donne la représentation brute de ces données. On y voit que la densité diminue avec le taux de cisaillement et augmente avec la pression. Lorsque le taux de cisaillement tend vers zéro, toutes les courbes convergent vers une fraction surfacique maximale ϕ_c, qui correspond à la densité de divergence de la viscosité.

Deux jeux de données sont tracés : les losanges correspondent à des systèmes où les contacts sont purement élastiques ($\nu = 0$), tandis que les cercles représentent des systèmes où les contacts sont dissipatifs ($\nu = 100$). On observe que ces deux jeux de données ne sont pas exactement superposés, notamment loin du jamming. La densité obtenue pour les systèmes où les contacts dissipent est à pression et vitesse de cisaillement égales, systématiquement légèrement supérieure à celle des systèmes où les contacts sont purement élastiques.



(a) $\phi(\dot{\gamma})$ à différentes pressions.

(b) $\phi(J)$ en échelle linéaire.

(c) $\phi(J)$ en échelle semi-logarithmique.

(d) $\delta\phi(J)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.1 – Variations de la densité ϕ avec le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ que l'on normalise par la pression pour construire le nombre visqueux J. On représente les résultats issus de deux jeux de données : les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). La pression imposée est $p = 0.01$ (noir), $p = 0.04$ (rouge), $p = 0.1$ (vert), $p = 0.4$ (bleu), $p = 1$ (orange) et $p = 4$ (marron).

L'ensemble des points mesurés se superpose raisonnablement bien si l'on trace la densité en fonction du nombre visqueux $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$. Cette normalisation des données est représentée sur la figure (7.1(b)) en échelle linéaire, et sur la figure (7.1(c)) en échelle semi-logarithmique afin de distinguer le détail de la limite vers le jamming. Elle ne supprime pas le petit écart de densité observé pour les systèmes loin du jamming selon que les contacts dissipent ou non. On observe que cet écart est cantonné pour l'essentiel à la région $J \geqslant 0.1$.

Un ajustement de la fonction $\phi(J)$ sur les points mesurés donne une loi de la forme :

$$\phi(J) = \frac{\phi_c}{1 + a\sqrt{J}} \ , \tag{7.3}$$

où $\phi_c = \phi(J = 0)$ est bien la limite de la densité au jamming. Selon que les deux jeux de données sont inclus dans l'ajustement, ou que l'on réalise celui-ci séparément sur chacun des deux ensembles de points, on peut obtenir des valeurs légèrement différentes pour ϕ_c et pour le paramètre a (voir table (7.2)).

Pour effectuer une description aussi pertinente que possible de la limite de la densité au jamming, on souhaite éviter que les points obtenus dans la région $J \geqslant 0.1$ ne perturbent l'ajustement que l'on fait. En effet, le modèle de suspension uniquement lubrifiée est de moins en moins pertinent quand la densité devient faible. On fait donc le choix de ne conserver que les points correspondant à des nombres visqueux faibles (et des densités élevées) (soit arbitrairement les points où $J \leqslant 0.1$).

	$\nu = 0$	$\nu = 100$	$\nu = 0$ et $\nu = 100$	$\nu = 0$ et $\nu = 100$ et $J \leqslant 0.1$
ϕ_c	0.847	0.849	0.847	0.834
a	0.41	0.37	0.4	0.28

TABLE 7.2 – Récapitulatif des valeurs obtenues pour la densité de blocage ϕ_c et le paramètre a dans la loi (7.3) pour différentes procédures d'ajustement.

Enfin, il faut mentionner que la sensibilité de ces ajustements est sans doute un signe que l'on ne s'approche peut être pas suffisamment du blocage pour déterminer avec une précision idéale les paramètres de la loi (7.3). On représente l'ajustement obtenu avec la totalité des points en bleu sur la figure (7.1(b)) et l'ajustement obtenu avec les points pour lesquels $J \leqslant 0.1$ en rouge sur cette même figure et sur la figure (7.1(b)). La courbe bleue est plus pertinente lorsqu'il s'agit de prendre en compte la totalité des points, mais nous préferons utiliser l'ajustement rouge pour décrire ce qui se passe dans la limite ou la densité est proche du jamming :

$$\phi_c = 0.834 \ , \qquad a = 0.28 \ . \tag{7.4}$$

La valeur obtenue pour la densité de divergence est comparable à la densité de jamming de ce mélange déterminée par étude de sa compression isotrope quastistatique, et fixée à $\phi^* = 0.842$ [109].
Bien entendu, nous n'avons pas de moyen de déterminer précisément l'erreur que nous commettons lorsque nous déterminons ϕ_c, et la sensibilité de la valeur obtenue aux modalités de l'ajustement peut poser question. Néanmoins, l'accord est raisonnable, et il n'est de plus pas nécessairement évident que la densité où la viscosité en cisaillement simple diverge doive correspondre exactement à la densité de *random close packing* obtenue par compression isotrope du même mélange.
Enfin, la loi d'ajustement (7.3) est comparable à la loi obtenue expérimentalement pour des suspensions réelles (donc tridimensionnelles et frottantes) par ([Boyer, Guazzelli, Pouliquen 2011]), où le paramètre d'ajustement a est trouvé environ égal à l'unité.

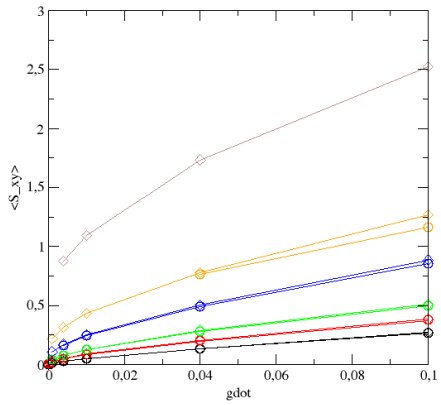
La loi (7.3) permet d'estimer l'exposant de convergence de la densité vers sa valeur limite au jamming. On peut développer $\delta\phi(J) = \phi_c - \phi(J) = a\phi_c\sqrt{J}/(1 + a\sqrt{J})$ pour $J \to 0$:

$$\delta\phi(J) \approx a \ \phi_c \ J^{1/2} \ . \tag{7.5}$$

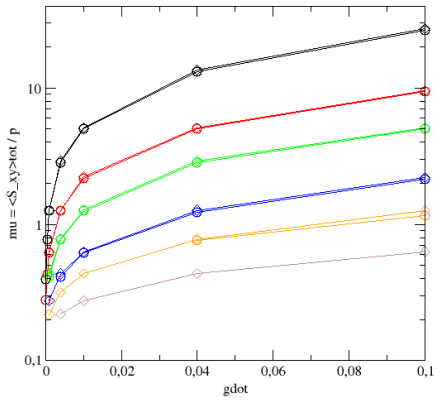
Utilisant la valeur de la limite $\phi_c = 0.834$, on représente sur la figure (7.1(d)) la loi $\delta\phi(J)$ au voisinage du jamming. On retrouve l'exposant de convergence $1/2$, la droite violette représente de fait exactement l'expression (7.5).

Frottement macroscopique.

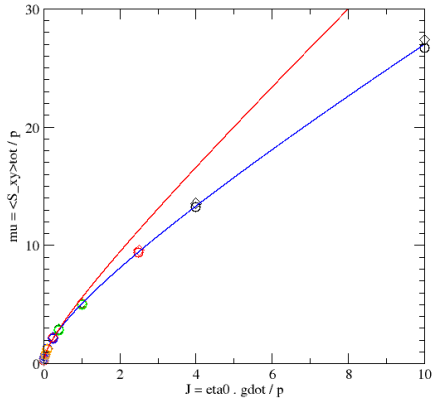
Le coefficient de frottement macroscopique d'un matériau cisaillé à pression constante se définit comme le rapport σ_{xy}/p. On peut mesurer la contrainte de cisaillement atteinte par des systèmes cisaillés plus ou moins vite à des pressions imposées plus ou moins grandes et voir que l'on trouve un scaling visqueux $\mu(J)$.



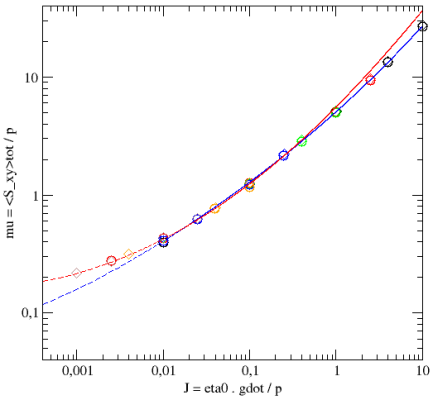
(a) $\sigma_{xy}(\dot{\gamma})$ à différentes pressions.



(b) $\mu(\dot{\gamma})$ à différentes pressions.



(c) $\mu(J)$ en échelle linéaire.



(d) $\mu(J)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.2 – Scaling du coefficient de frottement macroscopique μ avec le nombre visqueux $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$. Les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). La pression imposée est $p = 0.01$ (noir), $p = 0.04$ (rouge), $p = 0.1$ (vert), $p = 0.4$ (bleu), $p = 1$ (orange) et $p = 4$ (marron). Les courbes bleue et rouge correspondent à la loi (7.6) ajustée avec les paramètres de la table (7.3).

On cherche à ajuster les points mesurés sur une loi analytique $\mu(J)$. Compte-tenu de l'allure de la courbe maîtresse, on cherche une loi de la forme

$$\mu(J) = \mu_c + bJ + c\sqrt{J} \ . \tag{7.6}$$

Selon la procédure d'ajustement choisie (i.e. selon que l'on conserve tous les points, ou uniquemement ceux pour lesquels $J \leqslant 0.1$), on peut obtenir des valeurs différentes pour les paramètres b et c. Ces

ajustage sur	tous les points (bleu)	$J \leqslant 0.1$ (rouge)
μ_c	0.05	0.13
b	1.62	2.8
c	3.4	2.64

TABLE 7.3 – Récapitulatif des valeurs obtenues pour les paramètres d'ajustement μ_c, b et c de la loi de frottement macroscopique (7.6) pour différentes procédures d'ajustement. Les lois d'ajustement correspondantes sont tracées sur les figures (7.2(c)) et (7.2(d)).

valeurs sont récapitulées dans le tableau (7.3).

On peut néanmoins s'interroger sur la capacité de l'algorithme à représenter convenablement ce qui se passe dans la limite diluée, et ainsi sur la validité des lois (7.3) et (7.6) dans cette région. L'ajustement le plus raisonnable est finalement celui obtenu en se restreignant aux points pour lesquels $J \leqslant 0.1$, correspondant à des suspensions denses, et pour lesquels il apparaît que le taux de dissipation interne aux contacts n'a pas d'influence (courbes rouges les figures (7.1(b)), (7.1(c)), (7.2(c)) et (7.2(d))). Cet ajustement permet de déterminer le coefficient de frottement macroscopique au jamming. On peut écrire la loi $\mu(\phi)$ en inversant la relation (7.3) :

$$J(\phi) = \frac{1}{a^2}\left(\frac{\phi_c - \phi}{\phi}\right)^2 , \tag{7.7}$$

puis en remplaçant J par son expression en ϕ dans $\mu(J)$:

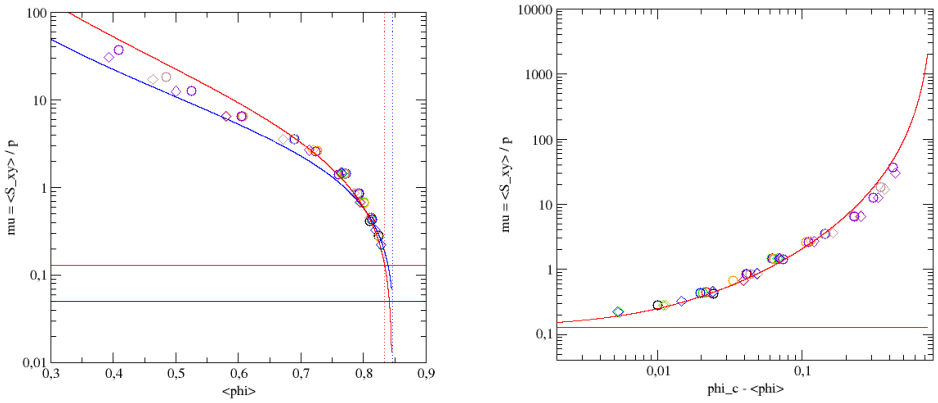
$$\mu(\phi) = \mu_c + \frac{b}{a^2}\left(\frac{\phi_c - \phi}{\phi}\right)^2 + \frac{c}{a}\frac{\phi_c - \phi}{\phi} . \tag{7.8}$$

Enfin, la limite $\phi \to \phi_c$ donne le coefficient de frottement macroscopique au jamming μ_c, qui n'est autre que le coefficient de frottement macroscopique dans la limite quasistatique $J \to 0$. On obtient alors un angle de repos φ_c :

$$\mu_c = 0.13 , \qquad \varphi_c = \tan^{-1}\mu_c \approx 7.4^\circ . \tag{7.9}$$

La loi (7.8) est représentée par dessus les points mesurés sur les diagrammes de la figure (7.3). Sur la figure de gauche est représentée la dépendance de μ avec la densité, ainsi que les lois d'ajutement obtenues en tenant compte de tout les points (bleu) et des seuls points où $J \leqslant 1$ (rouge). Les valeurs limites de ϕ_c et μ_c sont également représentées respectivement en pointillés verticaux, et traits pleins horizontaux.

Le coefficient de frottement macroscopique obtenu peut se comparer aux valeurs trouvées dans la littérature. Pour des systèmes secs non frottant cisaillés dans des conditions comparables, Peyneau et Roux trouvent un coefficient de frottement macroscopique $\mu_c \approx 0.1$ pour un angle de repos $\varphi_c = 5,76^\circ$ [113]. Hatano obtient lui $\mu_c \approx 0.06$ pour un angle de repos $\varphi_c = 3,4^\circ$ [67].
Expérimentalement, les mousses de fraction volumique en bulles très proche de la fraction théorique de blocage des granulaires durs sont des systèmes réels qui se rapprochent d'une suspension dense de particules non frottante. L'écoulement d'un tel système à pression constante a été étudié par Lespiat



(a) $\mu(\phi)$ en échelle semi-logarithmique.

(b) $\mu(\phi_c - \phi)$ pour $\phi_c = 0.834$.

FIGURE 7.3 – Scaling du coefficient de frottement macroscopique μ avec la densité. Les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). La pression imposée est $p = 0.01$ (noir), $p = 0.04$ (rouge), $p = 0.1$ (vert), $p = 0.4$ (bleu), $p = 1$ (orange) et $p = 4$ (marron). Les courbes bleue et rouge correspondent à la loi (7.8) ajustée avec les paramètres de la table (7.3). Les droites horizontales et verticales dans (7.3(a)) indiquent respectivement la position de μ_c et de ϕ_c.

et al. [94] et un coefficient de frottement macroscopique a été mis en évidence, correspondant à un angle de repos de $\varphi_c = 5,2°$.

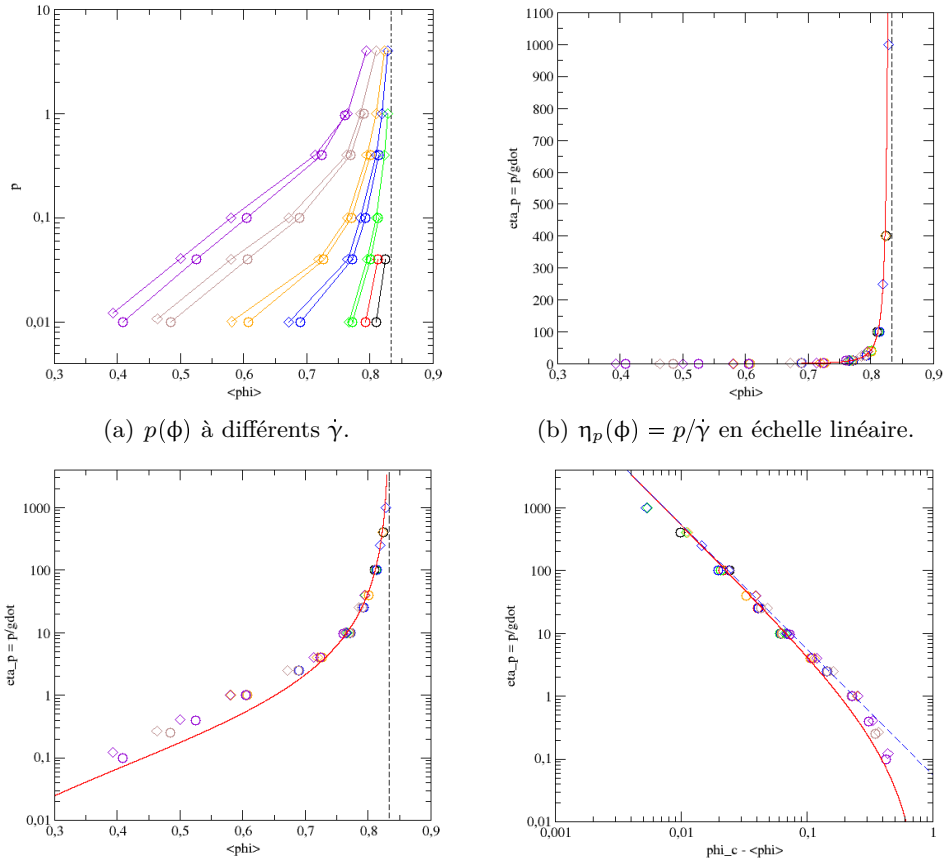
Le coefficient de frottement macroscopique que nous obtenons pour ce système est légèrement supérieure aux valeurs rapportées dans la littérature. Il faut noter néanmoins que ces valeurs concernent des systèmes différents (granulaires secs non frottants, ou suspensions de bulles). De plus, nous obtenons une valeur qui encore une fois est très sensible aux modalités de l'ajustement que nous effectuons, notamment en ce qui concerne la prise en compte des points obtenus pour des suspensions diluées.

7.1.2 Divergence de la contrainte en régime visqueux.

Dans cette partie, nous étudions la divergence de la pression et de la contrainte de cisaillement générées dans la suspension à l'approche de la densité de blocage.

Pression.

On peut représenter la divergence de la pression particulaire en la traçant en fonction de la densité obtenue lorsqu'on l'impose lors de cisaillements plus ou moins rapides. Les diagrammes de la figure (7.4) représentent les données brutes de pression particulaire en fonction de la densité, puis la viscosité normale en fonction de la densité (échelle linéaire et échelle semi-logarithmique pour voir le détail de la divergence). Connaissant ϕ_c, on représente également la viscosité normale en fonction de l'écart au blocage.



(a) $p(\phi)$ à différents $\dot{\gamma}$.

(b) $\eta_p(\phi) = p/\dot{\gamma}$ en échelle linéaire.

(c) $\eta_p(\phi)$ en échelle semi-logarithmique.

(d) $\eta_p(\phi_c - \phi)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.4 – Divergence de la pression particulaire avec la densité à différents taux de cisaillement. Les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). Le taux de cisaillement imposé est $\dot{\gamma} = 0.0001$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.0004$ (rouge), $\dot{\gamma} = 0.001$ (vert), $\dot{\gamma} = 0.004$ (bleu), $\dot{\gamma} = 0.01$ (orange), $\dot{\gamma} = 0.04$ (marron), $\dot{\gamma} = 0.1$ (violet).

La superposition des points sur une courbe unique pour la viscosité confirme que l'on se situe dans le

domaine visqueux de la suspension. La divergence de la pression en loi de puissance est immédiatement visible sur la figure 7.4(d) : on mesure un exposant 2 pour la divergence. Cet exposant est en accord avec la loi (7.3) qui exprime la densité en fonction de J.En effet, on peut écrire $\eta_p(\phi) = p(\phi)/\dot{\gamma} = \eta_0/J(\phi)$, soit :

$$\eta_p(\phi) = \eta_0 a^2 \left(\frac{\phi}{\phi_c - \phi}\right)^2 . \tag{7.10}$$

Cette loi correspond à la courbe rouge en traits pleins portés sur les diagrammes (7.4(b)), (7.4(c)) et (7.4). Au voisinage du jamming,

$$\eta_p(\phi) \approx \eta_0 \; a^2 \; \phi_c^2 \; (\phi_c - \phi)^{-2} . \tag{7.11}$$

On représente cette divergence en tirets bleus sur la figure (7.4(d)).

Contrainte de cisaillement.

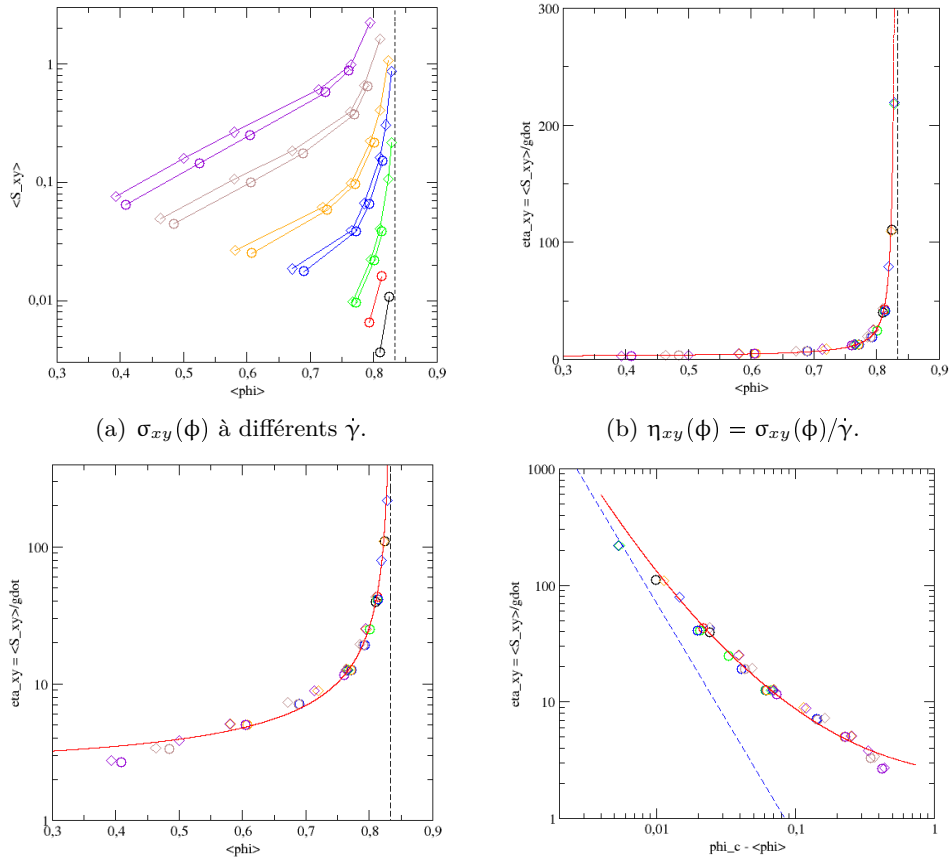
On représente les mêmes données pour la contrainte de cisaillement sur les diagrammes de la figure (7.5). Contrairement à la pression, la divergence de la contrainte de cisaillement en loi de puissance n'est pas immédiatement visible sur la figure 7.5(d). Cela peut s'expliquer en travaillant sur les lois de densité et de frottement macroscopique (7.3) et (7.6), qui permettent là encore d'estimer l'exposant de divergence. En effet,

$$\begin{aligned}
\eta_{xy}(\phi) &= \frac{\sigma_{xy}(\phi)}{\dot{\gamma}} = \frac{\mu(\phi)p(\phi)}{\dot{\gamma}} = \eta_0 \frac{\mu(\phi)}{J(\phi)} , \\
&= \eta_0 a^2 \left(\frac{\phi}{\phi_c - \phi}\right)^2 \left[\mu_c + \frac{b}{a^2}\left(\frac{\phi_c - \phi}{\phi}\right)^2 + \frac{c}{a}\frac{\phi_c - \phi}{\phi}\right] \\
&= \eta_0 a^2 \left[\frac{b}{a^2} + \frac{c}{a}\frac{\phi}{\phi_c - \phi} + \mu_c \left(\frac{\phi}{\phi_c - \phi}\right)^2\right] .
\end{aligned} \tag{7.12}$$

Au voisinage du jamming, la divergence en $1/(\phi_c - \phi)^2$ l'emporte sur les autres termes :

$$\eta_{xy}(\phi) \approx \eta_0 \, a^2 \; \mu_c \; \phi_c^2 \; (\phi_c - \phi)^{-2} . \tag{7.13}$$

La loi complète (7.12) est représentée en traits pleins rouges sur les diagrammes (7.5(b)), (7.5(c)) et (7.5(d)), tandis que la divergence (7.13) correspond à la droite en pointillés bleus sur le diagramme (7.5(d)). La loi complète ajuste raisonnablement bien les données mesurées, mais on observe que la divergence en pointillés bleus consitue tout au plus une asymptote un peu lointaine aux points obtenus. De fait, l'exposante apparent mesurable directement à partir des points du diagramme (7.5(d)), est plus petit que 2. Cette sous-évaluation de l'exposant provient du fait que les points mesurés ne s'approchent pas suffisamment du blocage pour entrer dans un régime de divergence « pure » en $1/\delta\phi^2$. Néanmoins, si l'on tient compte de la totalité de la loi (7.12) (ou notamment une seconde divergence en $1/\delta\phi$ est ajoutée à la divergence principale), on montre que ces données sont compatibles avec une divergence en $1/\delta\phi^2$.



(a) $\sigma_{xy}(\phi)$ à différents $\dot{\gamma}$.

(b) $\eta_{xy}(\phi) = \sigma_{xy}(\phi)/\dot{\gamma}$.

(c) $\eta_{xy}(\phi)$ en échelle semi-logarithmique.

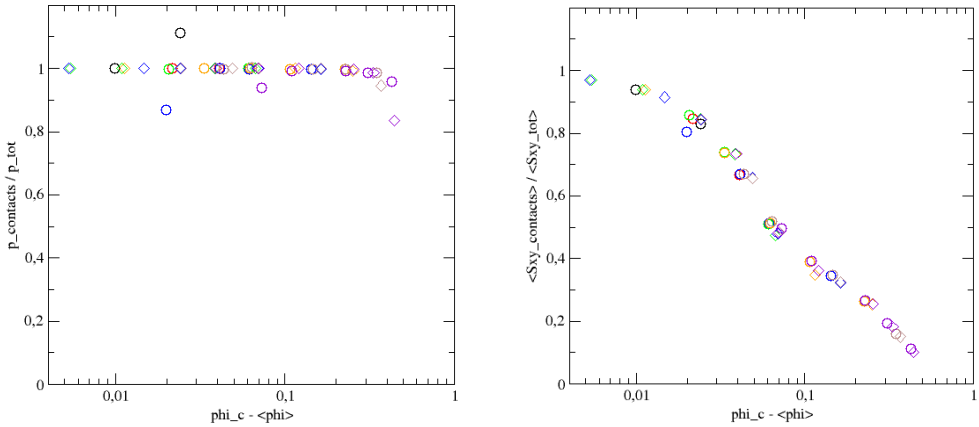
(d) $\eta_{xy}(\phi_c - \phi)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.5 – Divergence de la contrainte de cisaillement avec la densité à différents taux de cisaillement. Les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). Le taux de cisaillement imposé est $\dot{\gamma} = 0.0001$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.0004$ (rouge), $\dot{\gamma} = 0.001$ (vert), $\dot{\gamma} = 0.004$ (bleu), $\dot{\gamma} = 0.01$ (orange), $\dot{\gamma} = 0.04$ (marron), $\dot{\gamma} = 0.1$ (violet).

Contribution des contacts à la contrainte.

On s'intéresse dans ce paragraphe à la proportion de contrainte générée par les contacts comparée à la contrainte d'origine hydrodynamique. Les diagrammes de la figure (7.6) présentent les rapports de la pression de contact et de la contrainte de cisaillement de contact sur la pression et la contrainte de cisaillement totale en fonction de la distance à la densité de blocage.

On observe sans surprise que l'essentiel de la pression est générée par les contacts, le rapport mesuré valant l'unité pour l'essentiel de la gamme de densité sondé. Cela confirme les observations effectuées sur les quelques simulations que nous avons menées du cisaillement de suspensions de particules absolument lisses, donc incapables d'entrer en contact. Dans ces systèmes, la seule valeur stationnaire possible pour la pression est zéro. En revanche, la présence d'interactions non hydrodynamiques permet à une suspension de soutenir de façon stationnaire une pression non nulle. En ce qui concerne la contrainte de cisaillement, on observe que la contribution des contacts augmente progressivement



(a) $p_{\text{contacts}}/p_{\text{total}}(\phi_c - \phi)$.

(b) $\sigma_{xy,\text{contacts}}/\sigma_{xy,\text{total}}(\phi_c - \phi)$.

FIGURE 7.6 – Rapport de la pression due aux contacts sur la pression totale, et de la contrainte de cisaillement due aux contacts sur la contrainte de cisaillement totale en fonction de la distance $(\phi_c - \phi)$à la densité de blocage. Les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). Le taux de cisaillement imposé est $\dot{\gamma} = 0.0001$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.0004$ (rouge), $\dot{\gamma} = 0.001$ (vert), $\dot{\gamma} = 0.004$ (bleu), $\dot{\gamma} = 0.01$ (orange), $\dot{\gamma} = 0.04$ (marron), $\dot{\gamma} = 0.1$ (violet).

avec le rapprochement du blocage de la densité, possiblement selon une loi de puissance.

En raison de l'existence d'un coefficient de frottement macroscopique non nul, la pression et la contrainte de cisaillement divergent avec la même force lorsque la densité s'approche de la densité de blocage. En revanche, les diagrammes 7.4(d) et 7.5(d) illustrent clairement que le régime de divergence est plus rapidement atteint pour la pression que pour la contrainte de cisaillement. En effet, on observe une divergence assez propre en $1/\delta\phi^2$ de la pression dès $\delta\phi = 0.1$, alors que la divergence de la contrainte de cisaillement ne présente pas une signature forte d'une loi de puissance simple jusqu'à $\delta\phi = 0.01$.

Rapprochant ces observations de celles effectuées sur la contribution respective des contacts à la pression et à la contrainte de cisaillement, on peut émettre l'hypothèse que la divergence en $1/\delta\phi^2$ de la contrainte (pression et cisaillement) est une propriété de la contrainte générée dans un réseau de contacts élastiques. Pour la retrouver dans la divergence de la contrainte de cisaillement, il faut se placer dans une situation où elle est essentiellement générée dans le squelette élastique sous-jacent. Dès lors on retrouve la divergence en $1/\delta\phi^2$ très rapidement dans la pression, car celle-ci est entièrement générée par les contacts à toutes les densités. En revanche, la contrainte de cisaillement n'est essentiellement générée par les contacts que pour des densités très proches du blocage. Lorsque l'on s'éloigne de celui-ci, la contribution hydrodynamique de la contrainte, présentant possiblement un autre type de divergence (sous-dominante) devient non négligeable, « noyant » la divergence en $1/\delta\phi^2$ de la contrainte de cisaillement due aux contacts.
Ces observations peuvent être rapprochées des arguments théoriques développés par Mills et Snabre [105], et qui associent une viscosité de cisaillement divergeant en $1/\delta\phi$ pour sa composante hydrodynamique, et une viscosité de cisaillement divergeant en $1/\delta\phi^2$ dès que se forment des amas transitoires

de particules au contact qui introduisent un nouveau mécanisme de dissipation dans la suspension. La figure 7.7 représente la contribution des contacts en noir à la viscosité de cisaillement totale. La

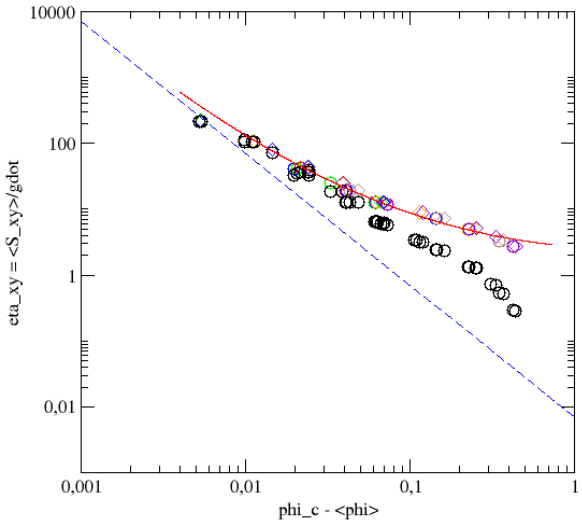
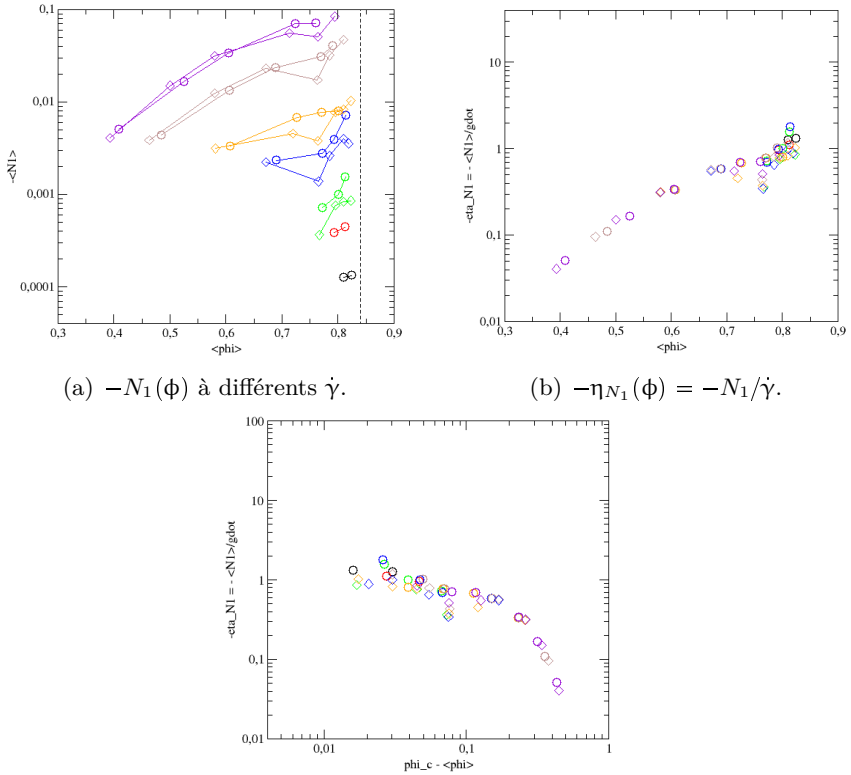


FIGURE 7.7 – Divergence de la viscosité de cisaillement due aux seuls contacts (noir) par rapport à la viscosité totale (même conventions de couleur que sur la figure 7.5). On représente également les ajustements donnés par les lois 7.12 en rouge et 7.13 en bleu.

divergence en $1/\delta\phi^2$ n'est pas parfaite, mais elle est meilleure que la divergence de la contrainte totale car on en a retiré la composante hydrodynamique.

7.1.3 Différences des contraintes normales.

On représente la différence des contraintes normales $N_1 = (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/2$, et la différence des viscosités normales $\eta_{N_1}(\phi) = N_1/\dot{\gamma}$ et fonction de la densité ou de l'écart à la densité de blocage. Pour



(a) $-N_1(\phi)$ à différents $\dot{\gamma}$.

(b) $-\eta_{N_1}(\phi) = -N_1/\dot{\gamma}$.

(c) $\eta_{N_1}(\phi_c - \phi)$.

FIGURE 7.8 – Divergence de la différence des contraintes normales avec la densité à différents taux de cisaillement. Les losanges correspondent à des simulations où les contacts ne dissipent pas ($\nu = 0$), tandis que les cercles correspondent à des simulations où les contacts dissipent ($\nu = 100$). Le taux de cisaillement imposé est $\dot{\gamma} = 0.0001$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.0004$ (rouge), $\dot{\gamma} = 0.001$ (vert), $\dot{\gamma} = 0.004$ (bleu), $\dot{\gamma} = 0.01$ (orange), $\dot{\gamma} = 0.04$ (marron), $\dot{\gamma} = 0.1$ (violet).

l'essentiel, la différence des viscosités normales est négative, traduisant un exces de forces répulsives (dues aux contacts) dans le quadrant de compression, par rapport aux forces attractives générées par l'hydrodynamique dans le quadrant de dilatation. La différence des viscosité normale ne diverge pas clairement à l'approche du blocage. Il semble même que l'on observe une forme de saturation.

7.1.4 Recherche d'un comportement inertiel à pression contrôlée.

L'étude de l'écoulement à pression constante nous a permis de déterminer finement la divergence de la contrainte au voisinage du blocage. Afin de determiner la dépendance en ϕ du taux de cisaillement de transition entre régimes visqueux et régimes inertiels, nous avons également besoin d'estimer cette divergence dans un régime purement inertiel.

Dans ce paragraphe, on présente des données résultant d'une recherche de ce régime inertiel dans un écoulement dense, menée à pression constante. Pour espérer atteindre ce régime, il faut cisailler plus vite, au delà de l'unité, en imposant des pressions très importantes pour maintenir une densité élevée (la densité étant une fonction décroissante du taux de cisaillement). Nous avons choisi de simuler le cisaillement à pression constante pour des couples $(\dot{\gamma}, p)$ récapitulés dans la table (7.4).

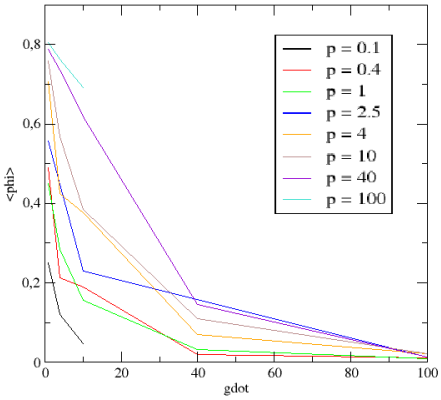
On peut directement mesurer la densité stationnaire atteinte par ces systèmes cisaillés plus ou moins

	p = 0.1	p = 0.4	p = 1	p = 2.5	p = 4	p = 10	p = 40	p = 100
$\dot{\gamma} = 1$	195	195	195	195	195	195	150	60
$\dot{\gamma} = 4$	195	195	195		195	195	195	195
$\dot{\gamma} = 10$	195	195	195	195	195	195	195	195
$\dot{\gamma} = 40$		195	195		195	195	195	
$\dot{\gamma} = 100$		195	195	195	195	195	195	

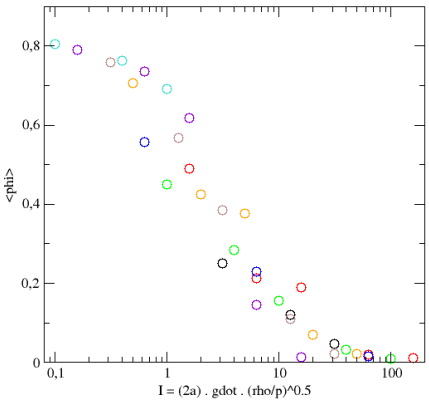
TABLE 7.4 – Récapitulatif du cisaillement accumulé au delà du transitoire pour différents couples $(p, \dot{\gamma})$ dans le domaine de comportement inertiel de la suspension.

vite à des pressions imposées plus ou moins grandes. Dans un régime inertiel, la rhéologie est piloté par le nombre inertiel $I = 2 < a > \dot{\gamma}\sqrt{\rho/p}$ [78, 54]. Si l'on trace la relation $\phi(I)$ (figure **??**), on n'observe pas exactement de rassemblement des points sur une courbe maîtresse.
En revanche, on vérifie en traçant la variation de la densité avec le nombre visqueux $\phi(I)$ (figure **??**) que l'on est plus dans le régime visqueux décrit dans la section précédente, représenté par la courbe rouge correspondant à la loi (7.3).

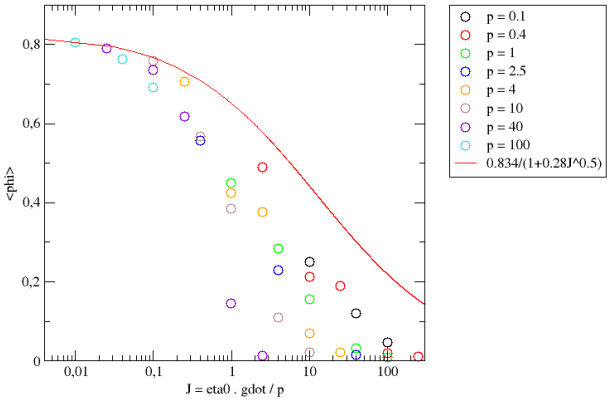
En réalité, les pressions que nous avois cherché à imposer ne sont pas du tout suffisante pour atteindre le régime inertiel d'une suspension dense. On voit que l'essentiel des points obtenus se situent à une fraction volumique inférieure à 50%. Dans les courbes d'écoulement à volume constant présentées à la section 6.3.2 du chapitre 6, on observe que le régime inertiel à des densités de 70% génère des pressions de l'ordre de 10^3 à 10^4 pour taux de cisaillement de quelques dizaines. Nous sommes clairement encore très loin de ces pressions, ce qui explique que nous n'atteignons pas un régime purement inertiel.



(a) Densité ϕ vs $\dot{\gamma}$.



(b) Densité ϕ vs I.



(c) Densité ϕ vs J.

FIGURE 7.9 – Recherche d'une loi inertielle pour la variation de la densité ϕ avec le taux de cisaillement à pression fixée, pour différentes pression.

7.2 Suspensions de particules rugueuses frottantes.

Dans cette section sont présentées des données concernant la rhéologie des suspensions de particules rugueuses frottantes. Comme dans les simulations précédentes, les contacts directs entre grains sont autorisés. En plus de la composante normale élastique (éventuellement dissipative), une composante tangentielle due aux frottements entre grains est ajoutée. La dynamique angulaire des grains est résolué, et les couples (hydrodynamiques et de contact) exercés sur les particules sont pris en compte.

Les simulations dont nous présentons ici les résultats ont été menées à pression constante. L'effet des frottements sur la loi d'écoulement à pression constante au voisinage du blocage, ainsi que sur la divergence de la contrainte sont examinées.

7.2.1 Effets des frottements sur la loi d'écoulement.

La loi d'écoulement à pression constante d'une suspension dans son régime visqueux est de la forme $\{\phi(J), \mu(J)\}$, où $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$ est le nombre visqueux. Afin de déterminer cette loi de comportement dans le cas de suspensions de particules frottantes, la simulation du cisaillement simple d'un système de

2×400 particules bidisperses (diamètres 1 et $1/1.4$) a été effectuée pour les couples $(\dot{\gamma}, p)$ récapitulés dans le tableau (7.5). Pour chacunes de ces valeurs, un cisaillement de $20\,000\%$ a été accumulé. Pour

paramètre varié	valeurs testées
$\dot{\gamma}$	0.01, 0.04, 0.1, 0.4, 1
p	0.01, 0.04, 0.1, 0.4, 1, 4

TABLE 7.5 – Récapitulatif des couples $(\dot{\gamma}, p)$ étudiés pour le cisaillement à pression constante d'une suspension de particules rugueuses frottantes.

ces simulations, le coefficient de friction entre deux grains au contact est pris égal à $\mu_{\text{micro}} = 0.3$, tandis que le coefficient de dissipation normale dans les contacts est pris nul $\nu = 0$.

Densité.

Les diagrammes de la figure (7.10) présentent la variation de la densité stationnaire atteinte en fonction du taux de cisaillement pour pour chaque pression testée, puis en fonction du nombre visqueux J. Le rassemblement de tous les points sur une loi unique confirme que l'on est toujours dans le domaine de comportement visqueux de la suspension. Les points qui avaient été obtenus pour des suspensions de grains non frottant sont également représentés pour comparaison (symboles et courbe noirs sur les diagrammes (b), (c) et (d)).

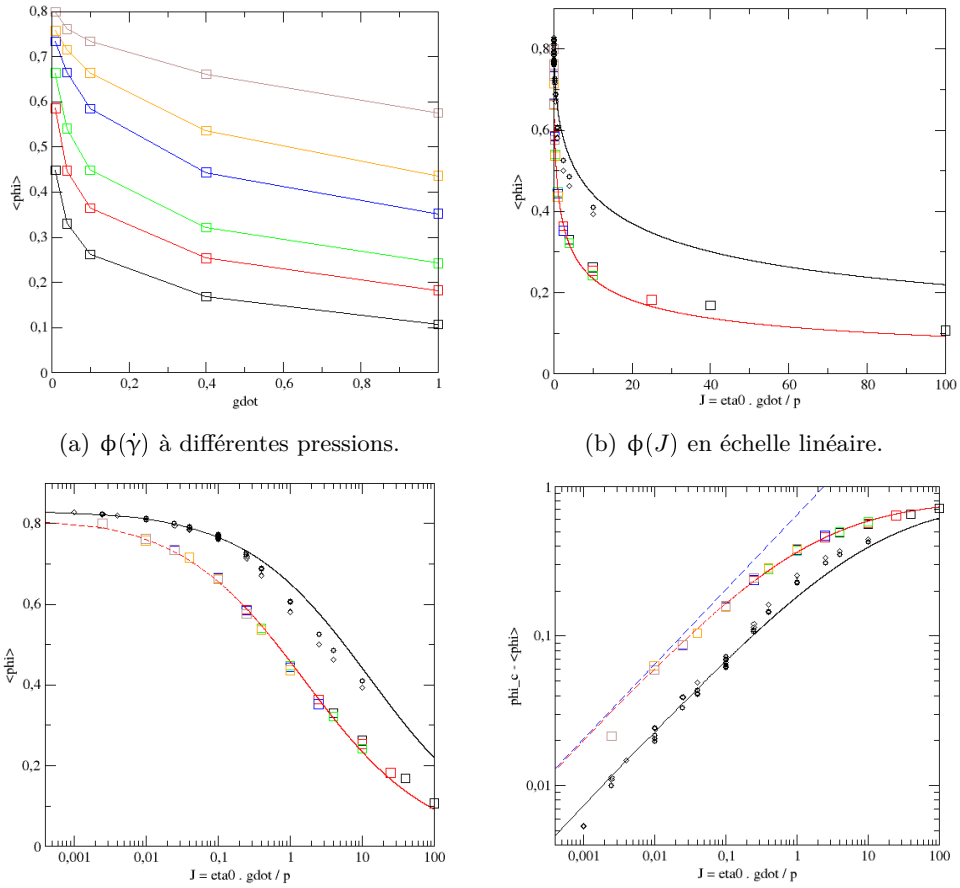
Comme dans le cas non frottant, on peut ajuster les points mesurées par une loi de la forme

$$\phi(J) = \frac{\phi_c}{1 + a\sqrt{J}} \ . \tag{7.14}$$

Là encore, on souhaite donner une certaine priorité aux points mesurés sur des configurations proches du blocage. Comparées aux simulations effectuées avec des grains non frottant présentées dans le paragraphe (7.1.1), les taux de cisaillement étudiés ici sont environ dix fois plus rapides. Il en résulte des nombres visqueux dix fois plus grand à pression identique. La première conséquence de celà est que nous nous approchons nécessairement moins de la divergence en ϕ_c. La seconde conséquence est que l'on ne peut pas se permettre d'ignorer tous les points pour lesquels $J > 0.1$, comme dans le cas des grains non frottant. En effet cela nous laisserait trop peu de points pour travailler. On choisit donc de ne conserver que les points pour lesquels $J \leqslant 1$. Ce faisant, on obtient les valeurs suivantes pour les paramètres a et ϕ_c :

$$a = 0.79 \ , \quad \phi_c = 0.821 \ . \tag{7.15}$$

La densité de blocage extrapolée à partir de la loi (7.14) est légèrement plus faible que dans le cas non frottant.



(a) $\phi(\dot{\gamma})$ à différentes pressions.

(b) $\phi(J)$ en échelle linéaire.

(c) $\phi(J)$ en échelle semi-logarithmique.

(d) $\delta\phi(J)$ en échelle logarithmique.

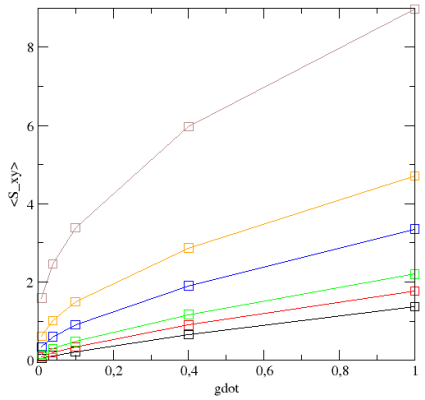
FIGURE 7.10 – Variations de la densité ϕ avec le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ (a), puis avec le nombre visqueux J (b) et (c). Les carrés de couleur correspondent à des simulations où les contacts sont frottants ($\mu_{\text{micro}} = 0.3$) et non dissipatifs ($\nu = 0$). La pression imposée est $p = 0.01$ (noir), $p = 0.04$ (rouge), $p = 0.1$ (vert), $p = 0.4$ (bleu), $p = 1$ (orange) et $p = 4$ (marron). La courbe rouge sur chaque figure correspond à la loi (7.14) ajustée avec les paramètres (7.15). Les figures noires (petits cercles et losanges) correspondent aux données non frottantes rappelées pour comparaison, ainsi la loi qui les ajuste (courbe noire).

Coefficient de frottement macroscopique.

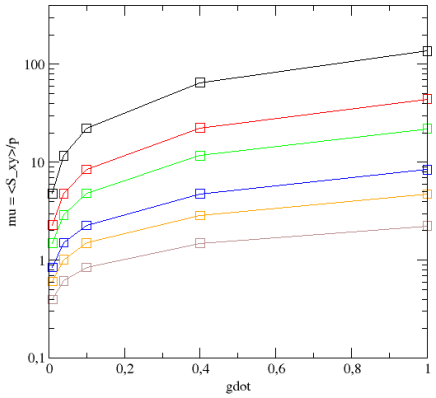
On représente dans la figure (7.11(a)) la courbe d'écoulement à pression constante de la suspension de grains frottants que l'on étudie. La contrainte de cisaillement augmente avec le taux de déformation, et tous les points se rassemble sur une courbe $\mu(J)$ lorsque l'on normalise la contrainte et le taux de cisaillement par la pression. Lorsque le nombre visqueux devient petit, l'asymptote horizontale de la loi $\mu(J)$ permet d'estimer le coefficient de friction macroscopique de la suspension.

Comme dans le cas non frottant, on ajuste les points mesurés par une loi de la forme

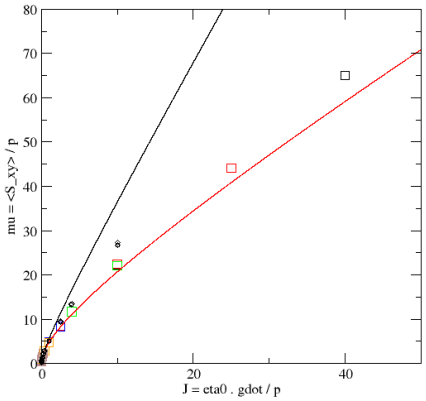
$$\mu(J) = \mu_c + bJ + c\sqrt{J} \ , \tag{7.16}$$



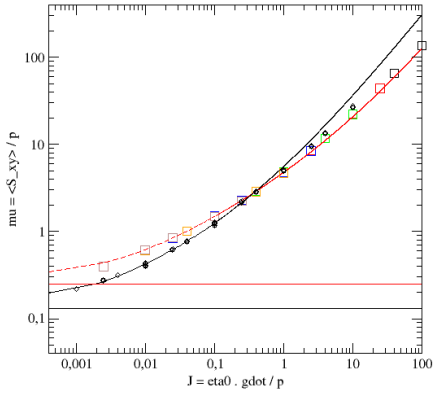
(a) $\sigma_{xy}(\dot{\gamma})$ à différentes pressions.



(b) $\mu(\dot{\gamma})$ à différentes pressions.



(c) $\mu(J)$ en échelle linéaire.



(d) $\mu(J)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.11 – Les carrés de couleur correspondent à des simulations où les contacts sont frottants ($\mu_{\text{micro}} = 0.3$) et non visqueux ($\nu = 0$). La pression imposée est $p = 0.01$ (noir), $p = 0.04$ (rouge), $p = 0.1$ (vert), $p = 0.4$ (bleu), $p = 1$ (orange) et $p = 4$ (marron). La courbe rouge correspond à la loi (7.16) ajustée avec les paramètres (7.17). Les figures noires (petits cercles et losanges) correspondent aux données non frottantes rappelées pour comparaison, ainsi la loi qui les ajuste (courbe noire).

où l'on ne conserve pas les points pour lesquels $J > 1$ afin de déterminer les paramètres μ_c, b et c. On obtient :

$$\mu_c = 0.25 \ , \quad b = 0.9 \ , \quad c = 3.62 \ . \tag{7.17}$$

Le coefficient de frottement macroscopique est environ deux fois plus important à conditions égales que pour une suspension de grains non frottants. L'angle de repos associé est

$$\varphi_c \approx 14^\circ \ . \tag{7.18}$$

On observe donc que la présence de frottements augmente le coefficient de friction macroscopique de la suspension.

7.2.2 Divergence de la contrainte en présence de frottements.

Dans ce dernier paragraphe, on estime l'influence des frottements microscopiques entre grains sur la divergence de la contrainte au blocage.

On représente sur les diagrammes de la figure 7.12 la divergence de la pression et sur les diagrammes de la figure 7.13 la divergence de la contrainte de cisaillement. Les données sont représentées en carrés de couleur, tandis que les données sans frottement sont rappelées pour comparaison (petits symboles noirs).

On voit immédiatement sur les diagrammes (7.12(a)) et (7.13(a)) que l'on ne s'approche pas autant de la divergence que dans le cas sans friction. On peut néanmoins ajuster les données avec les lois (7.10) et (7.13). En effet, nous avons vu que la présence de frottements ne modifie pas la forme des fonctions d'ajustement utilisées pour représenter les lois $\phi(J)$ et $\mu(J)$, mais uniquement la valeur des paramètres ϕ_c, μ_c, a, b et c. De fait, on a les lois :

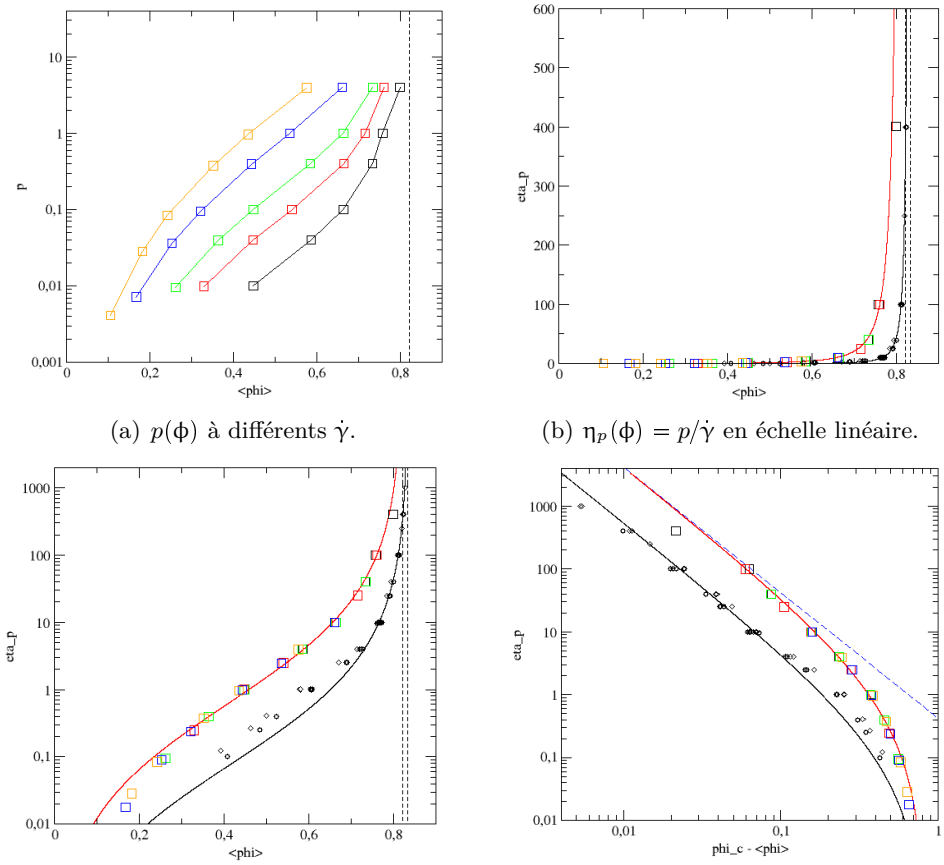
$$\eta_p(\phi) = \eta_0 a^2 \left(\frac{\phi}{\phi_c - \phi}\right)^2 , \tag{7.19}$$

$$\eta_{xy}(\phi) = \eta_0 a^2 \left[\frac{b}{a^2} + \frac{c}{a}\frac{\phi}{\phi_c - \phi} + \mu_c \left(\frac{\phi}{\phi_c - \phi}\right)^2\right] . \tag{7.20}$$

Ces lois d'ajustement sont représentées en traint continu rouge sur les diagrammes des figures 7.12 et 7.13. Les points mesurés se regroupent raisonnablement sur ces courbes. On représente également en pointillés bleus la divergence correspondante en loi de puissance au voisinage du blocage :

$$\eta_p(\phi) \approx \eta_0 \; a^2 \; \phi_c^2 \; (\phi_c - \phi)^{-2} , \tag{7.21}$$

$$\eta_{xy}(\phi) \approx \eta_0 \, a^2 \; \mu_c \; \phi_c^2 \; (\phi_c - \phi)^{-2} . \tag{7.22}$$



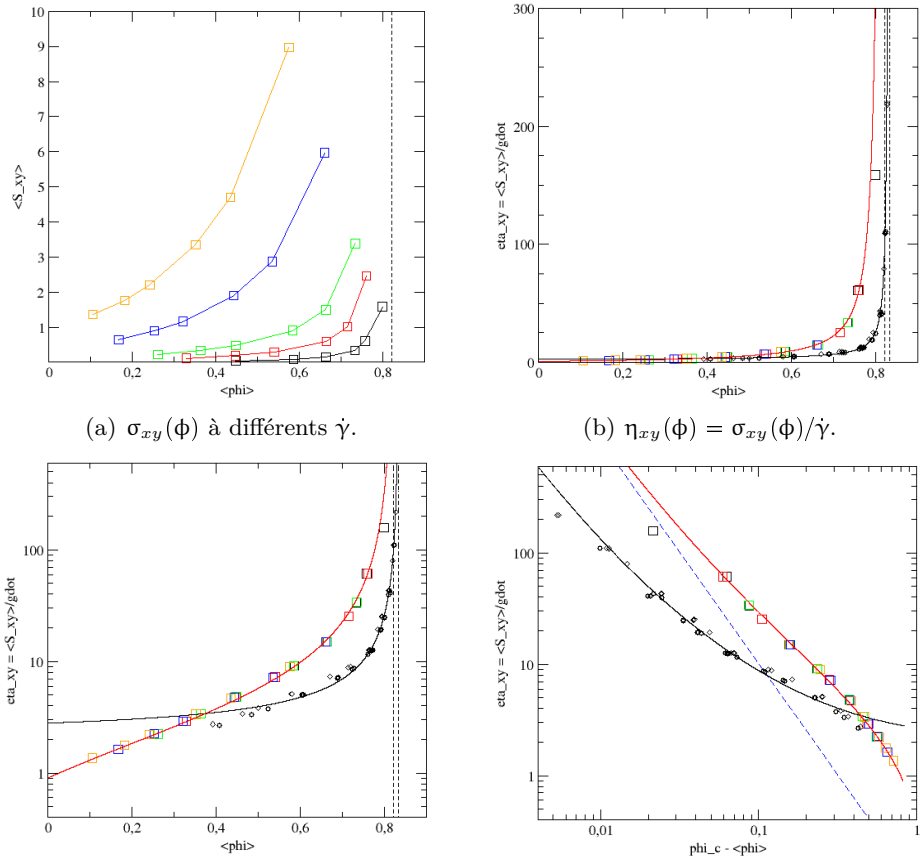
(a) $p(\phi)$ à différents $\dot{\gamma}$.

(b) $\eta_p(\phi) = p/\dot{\gamma}$ en échelle linéaire.

(c) $\eta_p(\phi)$ en échelle semi-logarithmique.

(d) $\eta_p(\phi_c - \phi)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.12 – Divergence de la pression particulaire avec la densité à différents taux de cisaillement. Les carrés de couleur correspondent à des simulations où les contacts sont frottants ($\mu_{\text{micro}} = 0.3$) et non visqueux ($\nu = 0$). Le taux de cisaillement est $\dot{\gamma} = 0.01$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.04$ (rouge), $\dot{\gamma} = 0.1$ (vert), $\dot{\gamma} = 0.4$ (bleu) et $\dot{\gamma} = 1$ (orange). La courbe rouge correspond à la loi (7.10) ajustée avec les paramètres (7.15) et (7.17). Les figures noires (petits cercles et losanges) correspondent aux données non frottantes rappelées pour comparaison, ainsi la loi qui les ajuste (courbe noire).



(a) $\sigma_{xy}(\phi)$ à différents $\dot{\gamma}$.

(b) $\eta_{xy}(\phi) = \sigma_{xy}(\phi)/\dot{\gamma}$.

(c) $\eta_{xy}(\phi)$ en échelle semi-logarithmique.

(d) $\eta_{xy}(\phi_c - \phi)$ en échelle logarithmique.

FIGURE 7.13 – Divergence de la contrainte de cisaillement avec la densité à différents taux de cisaillement. Les carrés de couleur correspondent à des simulations où les contacts sont frottants ($\mu_{\text{micro}} = 0.3$) et non visqueux ($\nu = 0$). Le taux de cisaillement est $\dot{\gamma} = 0.01$ (noir), $\dot{\gamma} = 0.04$ (rouge), $\dot{\gamma} = 0.1$ (vert), $\dot{\gamma} = 0.4$ (bleu) et $\dot{\gamma} = 1$ (orange). La courbe rouge correspond à la loi (7.13) ajustée avec les paramètres (7.15) et (7.17). Les figures noires (petits cercles et losanges) correspondent aux données non frottantes rappelées pour comparaison, ainsi la loi qui les ajuste (courbe noire).

Chapitre 8

Données microstructurales.

Dans ce chapitre final, nous présentons une étude de la microstructure de suspensions 2D non Browniennes cisaillées dans leur domaine visqueux. De nombreuses informations liée à la distribution moyenne des particules les unes par rapport aux autres, de leurs déplacements, et des efforts qui s'exercent entre elles peuvent être mesurées. Nous en présentons quelques unes ici, et les discutons au regard de la solution du problème dilué correspondant établi dans le chapitre 5.

Cette étude est organisée suivant deux axes. La première partie du chapitre concerne la description de la distribution relative des particules les unes par rapport aux autres. Cette information est habituellement représentée par la fonction de paire $g(\vec{r})$ qui n'est autre que la densité de probabilité de paire normalisée. La distribution des contacts est également étudiée.
Le second axe du chapitre se concentre sur l'étude de la dynamique moyenne d'une paire dans la suspension, vue comme un milieu effectif. Afin de visualiser comment se forment la microstructure moyenne stationnaire observée lors du cisaillement de la suspension, nous cherchons à voir comment l'augmentation de la densité affecte la dynamique du milieu dilué.

8.1 Fonction de distribution de paire.

8.1.1 Calcul numérique de la fonction de distribution de paire.

Afin de calculer en pratique la fonction de distribution de paire, on dispose de la sauvegarde de toutes les configurations générées au cours de l'écoulement. On dispose donc de N_s systèmes $\mathcal{S}_i$, de volume V_i, contenant chacun N particules. Afin de calculer la fonction de paire $g(\vec{r})$, on se donne un rayon r_{max}, et on collecte dans chaque $\mathcal{S}_i$ l'ensemble des paires de particules telles que $\|\vec{r}_{ij}\| < r_{\text{max}}$. L'espace $[-r_{\text{max}}, r_{\text{max}}]^2$ est ensuite découpé en cases carrées $\mathcal{C}_\alpha = [x_\alpha, x_\alpha + \Delta L[\times[y_\alpha, y_\alpha + \Delta L[$, de volume $\Delta V = \Delta L^2$ (constant dans un découpage cartésien). On note N_α le nombre total de paires qui tombe dans la case $\mathcal{C}_\alpha$, tout systèmes confondus.

En l'absence de toute information particulière, le nombre moyen de grains présents dans une case de volume ΔV doit converger vers $\sum_i n_i \Delta V$, où $n_i = N/V_i$ est la densité moyenne en particules du système $\mathcal{S}_i$. Ici, on examine la densité des rayons vecteurs $\vec{r}_{ij}$ des paires, c'est à dire le nombre de moyen de particule présent dans chaque case α sachant qu'il y a une particule à l'origine. Par définition de la fonction de corrélation de paire $g(\vec{r})$, le nombre N_α converge si N et N_s sont assez grands vers

une densité proportionnelle à la valeur g_α que prend $g(\vec{r})$ au point (x_α, y_α). On a alors

$$N_\alpha = \sum_i g_\alpha n_i \Delta V \approx N_s N g_\alpha \langle \frac{1}{V_i} \rangle \Delta V \ . \tag{8.1}$$

On calcule donc la valeur de $g(x_\alpha, y_\alpha)$:

$$g(x_\alpha, y_\alpha) = \frac{N_\alpha}{N N_s} \frac{1}{\langle \frac{\Delta V}{V_i} \rangle} \tag{8.2}$$

Connaissant la distribution bidimensionnelle des paires, on peut calculer la variation purement radiale en effectuant une moyenne angulaire

$$g(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} g(r, \theta) \mathrm{d}\theta \ . \tag{8.3}$$

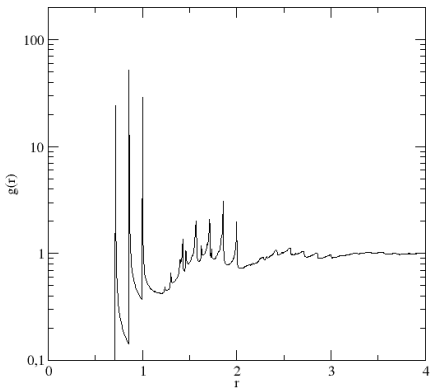
En pratique, le calcul se fait de la même façon que pour $g(\vec{r})$, sauf que les éléments de volume considérés sont des anneaux $\mathcal{A}_\alpha$ de rayon intérieur r_α et de rayon extérieur $r_\alpha + \Delta r$. L'aire d'un tel anneau est $\Delta V_\alpha = \pi[(r_\alpha + \Delta r)^2 - r_\alpha^2]$. On a alors

$$g(r_\alpha) = \frac{N_\alpha}{N N_s} \frac{1}{\langle \frac{\Delta V_\alpha}{V_i} \rangle} \tag{8.4}$$

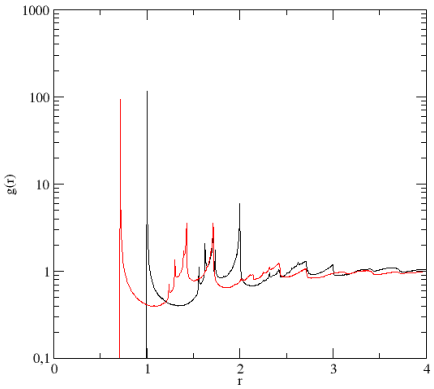
8.1.2 Fonction de paire radiale.

Les mélanges étudiés comprenant deux types de particules : les grosses (g) et les petites (p). Il y a donc trois types de paires qui sont générées : les paires $(g-g)$, $(g-p)$ et $(p-p)$.

La fonction de corrélation de paire d'un tel système, comporte trois pics de premier voisins, et de nombreux autres pics ensuite, dus à la réplication de la microstructure causée par l'existence de trois famille de paire qui se positionnent à des rayons différents. La figure 8.1(a) montre la microstructure brute que l'on extrait des résultats des simulations, laquelle présente cette démultiplication des motifs. On peut séparer les fonctions de corrélation associées à un type spécifique de paire en ne comptant que celles-ci dans le calcul et en adaptant la normalisation. Si l'on compare la microstructure obtenue pour deux types de paires - par exemple les paires $(g-g)$ et $(p-p)$, on trouve une corrélation identique, au décalage radial près du à la différence de taille des rayons.



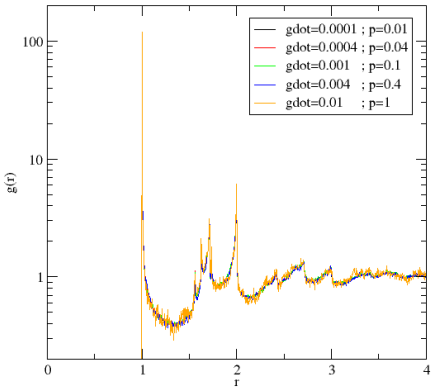
(a) Réplication de la microstructure due à l'existence de plusieurs types de paires.



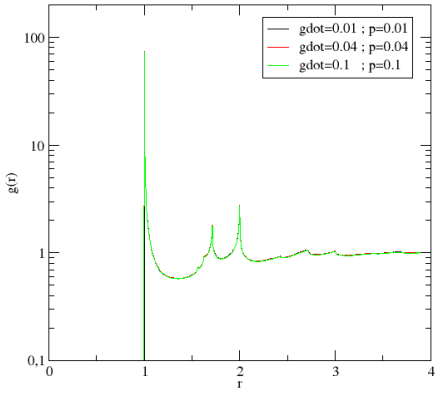
(b) Comparaison de la microstructure des paires $(g-g)$ (noir) et $(p-p)$ (rouge).

FIGURE 8.1 – Observations préliminaires de la fonction de paire $g(r)$: Illustration de la décomposition de la distribution totale des paires en distribution des paires de même rayon.

La figure 8.1(b) illustre la remaquable similarité des motifs dus aux seconds voisins et plus apparaissant dans la corrélation des paires $(g-g)$ et $(p-p)$. Dans la suite, on ne présentera que la microstructure associée aux paires $(g-g)$.



(a) Microstructure pour différents $(p, \dot{\gamma})$ tels que $J = 0.01$.



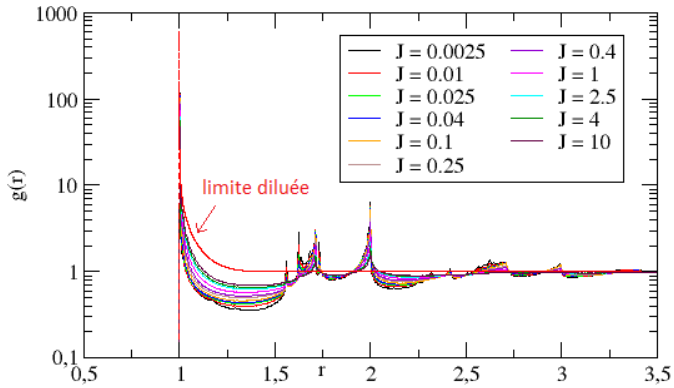
(b) Microstructure pour différents $(p, \dot{\gamma})$ tels que $J = 1$.

FIGURE 8.2 – Observations préliminaires de la fonction de paire $g(r)$: Ces figures illustrent que dans le régime visqueux ($J = 0.01$ à gauche, $J = 1$ à droite), la distribution de paire ne dépend que du nombre visqueux $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$.

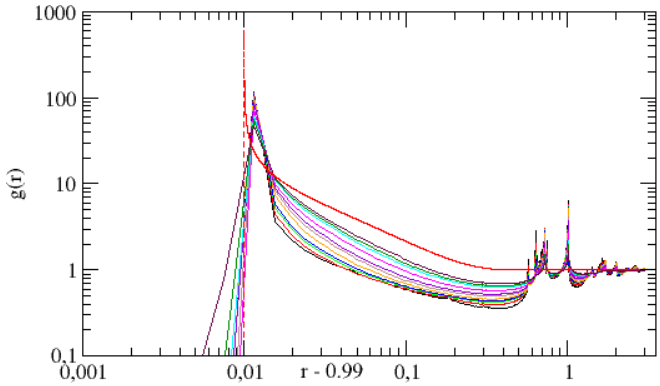
On observe de plus que la fonction de paire ne dépend (dans le régime visqueux) que de $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$. La microstructure ne dépend alors que de la densité ϕ (puisque $J = J(\phi)$ selon une fonction univoque). On présente les données en fonction du nombre visqueux J, mais on récapitule la relation entre ces deux paramètres dans le tableau 8.1 (voir en fin de chapitre).

Les diagrammes de la figure 8.3 présentent la fonction de corrélation de paire radiale $g(r)$ pour les différents J du tableau 8.1. On observe que plus le nombre visqueux est petit (et donc la fraction volumique ϕ proche de ϕ_c), plus la zone $1 < r < 1.5$ $(0 < h < 0.5)$ se vide. Les motifs plus

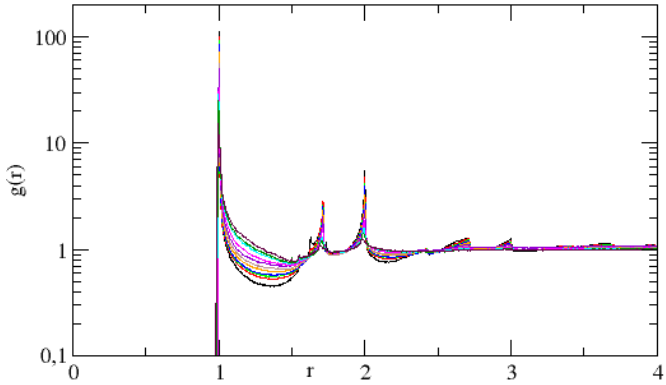
éloignés sont quasiment inchangés lorsque la fraction volumique augmente. Pour voir on se retrouvent les grains, on présente un détail du pic de premiers voisins sur la figure 8.3(b). On y voit clairement une accumulation de particules, correspondant aux particules au contact. La comparaison des figures 8.3(a) et 8.3(c) afin de visualiser les effets des frottements démontre finalement que leur existence n'a pas d'influence claire sur la distribution des paires dans la suspension.



(a) $g(r)$ pour différents J, sans friction.



(b) $g(r)$ pour différents J, sans friction (détail).

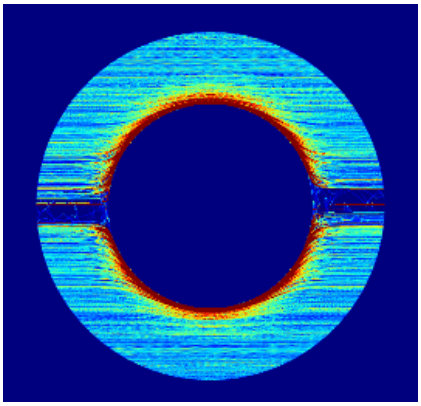


(c) $g(r)$ pour différents J, avec friction.

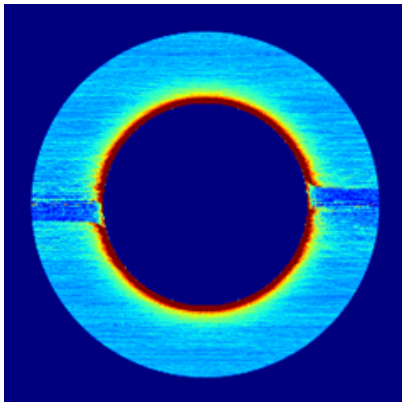
FIGURE 8.3 – Fonction de distribution de paire moyennée sur tous les angles pour deux suspensions cisaillées dans des conditions indentiques, pour des grains non frottants (a et b, détail) et des grains frottants (c) Les couleurs correspondent à des nombres visqueux de $J = 0.0025$ (noir) à $J = 10$ (bordeaux). On représente aussi en rouge la fonction de corrélation de paire (5.50) donnée par la résolution du problème dilué.

8.1.3 Cartes bidimensionnelles.

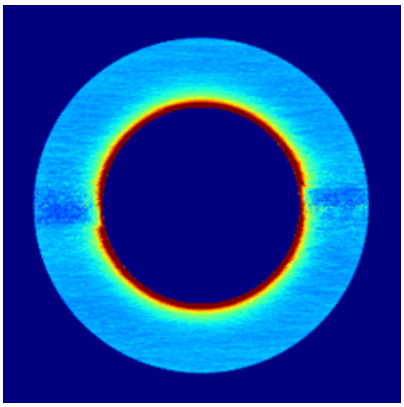
On peut représenter la distribution bidimensionnelle $g(\vec{r})$. Les images de la figure 8.4 donnent la répartition des paires dans le régime dilué ($\phi = 0.01$, $\phi = 0.1$), puis en illustrent la sortie progressive jusqu'à atteindre un régime plus dense ($\phi = 0.7$).



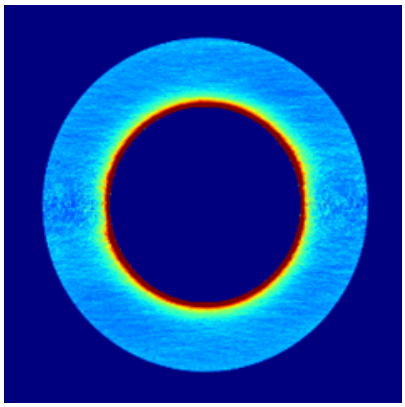
(a) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.01$.



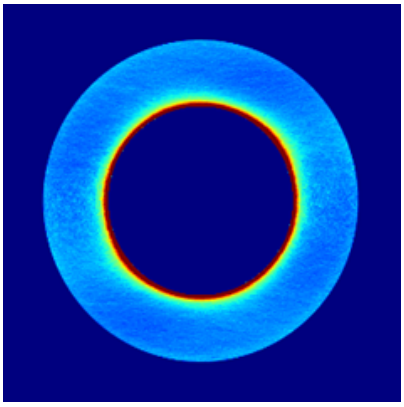
(b) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.1$.



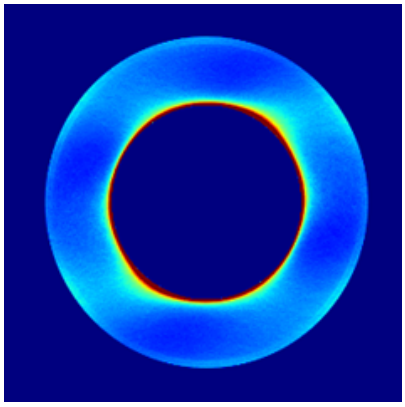
(c) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.2$.



(d) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.3$.



(e) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.5$.

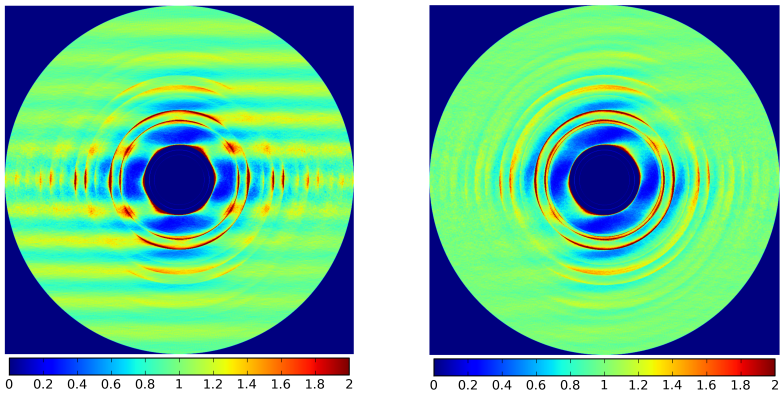


(f) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.7$.

FIGURE 8.4 – Fonction de paire $g(\vec{r})$ obtenues lors de simulations à volume constant. Les fractions volumiques représentées illustrent la sortie du régime dilué pour aller vers le régime dense.

À $\phi = 0.01$, peu de particules se rencontrent, ce qui a pour conséquence un petit nombre de paires sur lesquelles travailler pour dessiner une cartographie. L'image est faiblement moyennée, et on aperçoit nettement les trajectoires des particules en interaction. Ces trajectoires reproduisent parfaitement les trajectoires du problème à deux corps rugueux (figure 5.4(a)). On observe également la présence du sillage de dépletion généré par les aspérités qui chassent les particules s'approchant trop, rompant la symétrie avant-après des trajectoires.
Lorsque la fraction volumique augmente, des interactions à $N > 2$ corps surviennent, autorisant des grains à peupler la zone de dépletion. Ainsi, plus la suspension se densifie, plus le sillage se remplit, jusqu'à apparemment disparaître à $\phi \approx 0.5$. La distribution semble alors relativement symétrique. À $\phi = 0.7$, on observe une structure hexagonale qui émerge. Lorsque la fraction volumique devient très importante, les particules ont tendance à s'organiser en couches (même ici dans le cas d'une suspension bidisperse), et on observe ce motif dans la microstructure.

On représente la fonction de paire de suspensions encore plus denses sur les images de la figure 8.5. Ces images ont été calculées à partir des données obtenues en simulant le cisaillement du système à pression imposée. On représente un domaine plus large autour de la particule et on retrouve bien visible l'organisation en couches des particules voisines.



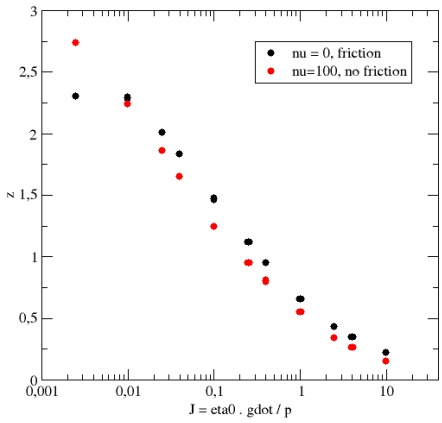
(a) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.76$. (b) $g(\vec{r})$ pour $\phi = 0.81$.

FIGURE 8.5 – Fonction de paire $g(\vec{r})$ pour des suspensions proches du blocage, obtenues lors de simulations à pression constante.

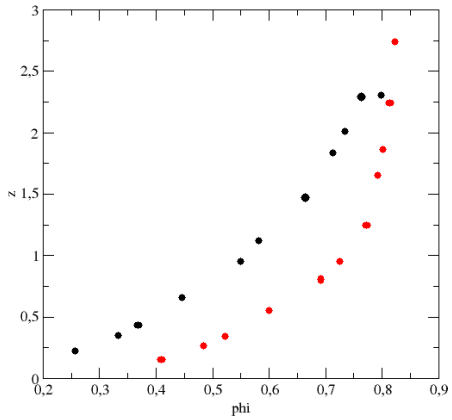
8.2 Contacts.

On mesure la coordinance du réseau des contacts dans la suspension, c'est à dire le nombre moyen z de contacts par particules dans la suspension.
Si N_c est le nombre total de contacts entre grains voisins dans un système de N grains, $z = 2N_c/N$. Au blocage, le système est hyperstatique. Il y a alors autant de forces de contact (soit N_c inconnues) que d'équations du mouvement pour les grains. En deux dimension, et pour des grains non frottant, on obtient alors $z_c N/2 = 2N$, soit $z_c = 4$. Pour des grains frottants en revanche, les forces de contact ont une composante tangentielle également inconnue (soit 2 inconnues par contact, pour un total de $2N_c$ inconnues), mais chaque particule fournit une équation de plus de par son équilibre en rotation. On a alors $z_c N = 3N$, soit $z_c = 3$.

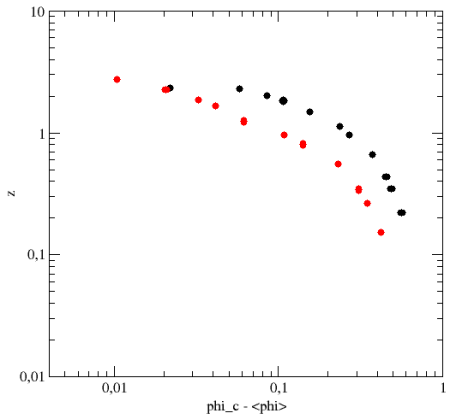
On représente sur les diagrammes de la figure 8.6 l'évolution de la coordinance z en fonction du nombre visqueux J, de la fraction volumique ϕ, ou de l'écart à la fraction volumique de blocage ϕ_c, pour une suspension de grains non frottant (rouge) ou une suspension de grains frottants (noir).



(a) $z(J)$.



(b) $z(\phi)$.



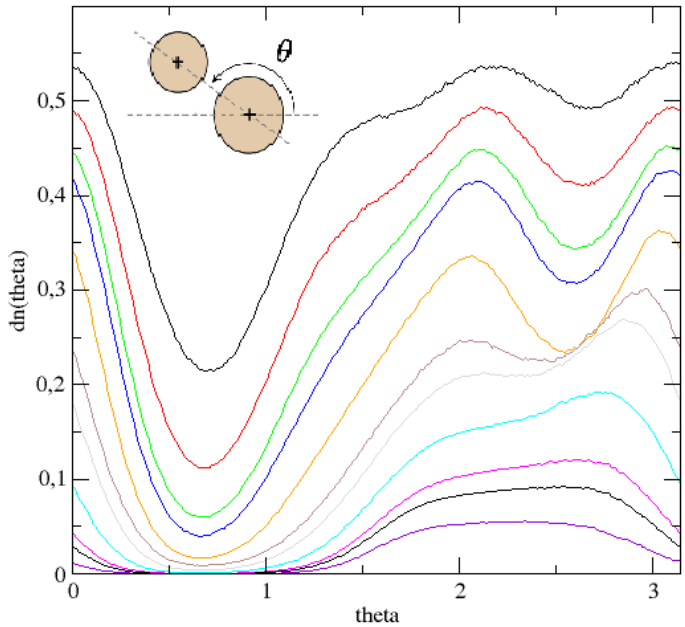
(c) $z(\phi_c - \phi)$.

FIGURE 8.6 – Représentation du nombre de coordinance z en fonction du nombre visqueux J, de la densité ϕ ou de l'écart au blocage $\delta\phi = \phi_c - \phi$. Les points rouges correspondent à une suspension de grains non frottants, les points rouge à une suspension de grains frottants.

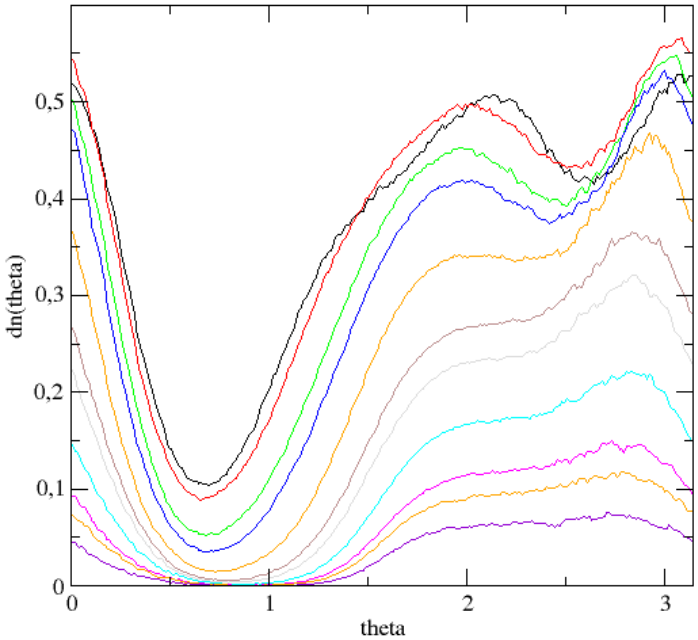
La coordinance augmente avec la fraction volumique. L'augmentation est à peu près linéaire jusqu'à $\phi \approx 0.7$ pour le système non frottant, ou $\phi \approx 0.5$ pour le système frottant. Dans ce régime, le nombre de contacts formés par particule est proportionnel à ϕ, donc à n, ce qui est cohérent avec l'expression obtenue dans le régime dilué pour la densité angulaires de contact (**??**). Lorsque l'on se rapproche du blocage, l'augmentation du nombre de contact par particule varie plus vite que linéairement avec la fraction volumique ϕ. De fait, nous avions déjà observé sur l'allure des fonctions de corrélation radiales $g(r)$, l'existence d'un régime où la population des paires lubrifiées proches (non en contact) s'amenuise, leur conversion en paires au contact générant un excès de coordinance quand la suspension se densifie.

Nous avions également observé la disparition du sillage de déplétion pour $\phi > 0.5$ sur les cartes bidimensionnelles de $g(\vec{r})$ établies pour des suspensions non frottantes. Ce sillage est le signe visible majeur d'anisotropie de la microstructure, que l'on remarque immédiatement sur ces images de la fonction de paire. Or, les différences de contraintes normales se développent essentiellement dans le régime dense, où il n'y a plus d'asymétrie clairement visible de la distribution des paires en interaction hydrodynamique sur ces images. Il faut donc que l'asymétrie vienne des paires au contact, difficilement représentables sur les images 8.4 et 8.5.
On trace donc sur les diagrammes de la figure 8.7 la distribution angulaire des contacts, c'est à dire leur nombre moyen par particule et par unité d'angle. La figure du haut correspond à une suspension sans frottements, tandis qu'en bas, les frottements existent. On observe de manière très claire l'asymétrie du positionnement des contacts, dans les deux systèmes. En régime dilué, les contacts sont, sans surprise, uniquement localisés dans le quadrant de compression ($\pi/2 < \theta < \pi$). Leur distribution se rappoche d'une distribution constante dans la limite diluée, comme le prévoit la loi (**??**). Lorsque la densité augmente, on augmente le nombre de contacts : quelques contacts seulement se forment d'abord dans le quadrant de dilatation, alors que leur nombre augmente bien plus nettement dans le quadrant de compression. Lorsque ϕ atteint une valeur d'environ 0.7 (courbe orange à gauche, bleue à droite), on voit apparaître un motif de bosses régulières dans le quadrant de compression, cohérent avec l'organisation en couche déjà observée dans les représentations 2D de $g(\vec{r})$. Progressivement, on forme également, et de plus en plus, des contacts dans le quadrant de dilatation. Ainsi, on observe que la zone de déplétion se comble également sur ces figures, résultant en une resymétrisation partielle de la distribution des forces de contacts. Il n'est ainsi pas surprenant d'observer une saturation de la différence des contraintes normales lorsque l'on se rapproche du blocage.

La comparaison des figures 8.7(a) et 8.7(b) permet d'estimer qualitativement les effets de l'existence de frottements sur la distribution des contacts. En cas de contacts frottants, on observe que la resymétrisation de la distribution aux hautes fractions volumiques est bien moins efficace que dans le cas non frottant. De fait, aux hautes densités, le nombre de contact généré dans le quadrant de dilatation augmente plus faiblement que dans le cas non frottant.



(a) Distribution angulaire des contacts, sans friction.



(b) Distribution angulaire des contacts, avec friction.

FIGURE 8.7 – Nombre de contacts formés en moyenne dans la suspension, par unité d'angle et par particule. Les particules sont non frottantes (haut), ou frottantes (bas). Les densités correspondent aux nombres visqueux de la figure 8.3, et sont récapitulées dans le tableau 8.1.

8.3 Dynamique moyenne d'une paire dans la suspension.

Considérons le devenir des grains formant un contact dans le quadrant de compression. Ces grains ont tendance sous l'effet des forces hydrodynamiques qu'ils subissent à se déplacer le long de l'interface jusqu'à sortir du quadrant de compression et entrer dans le quadrant de dilatation.
Dans la limite diluée, le contact se romp immédiatement car les forces hydrodynamiques (qui se résument alors à la traînée de Stokes) cessent d'exercer une compression. La force de contact est assymétrique et ne peut pas résister à une traction. Le contact est donc immédiatement rompu.

Lorsque l'on quitte le régime infiniment dilué, l'existence d'interactions à $N > 2$ corps est à l'origine d'une force générée sur les particules de la paire dont on examine la dynamique, par les autres particules autour d'elle dans la suspension. Il faut corriger les équations du mouvement des particules de la paire seule (**??**), qui s'écrivent alors :

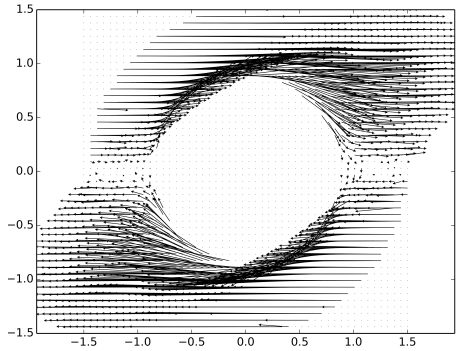
$$\begin{aligned} \vec{0} &= -6\pi a_i \vec{c}_i + \vec{f}_{ij} + \vec{f}_i^{\mathsf{susp}} \ , \\ \vec{0} &= -6\pi a_j \vec{c}_j - \vec{f}_{ij} + \vec{f}_j^{\mathsf{susp}} \ , \end{aligned} \tag{8.5}$$

où

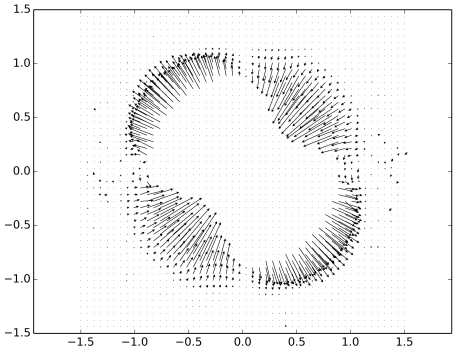
$$\vec{f}_i^{\mathsf{susp}} = \sum_{k \neq i,j} \vec{f}_{ik} \ , \quad \vec{f}_j^{\mathsf{susp}} = \sum_{k \neq i,j} \vec{f}_{jk} \ . \tag{8.6}$$

Afin de visualiser la façon dont la dynamique d'une paire se modifie lorsque l'on quitte le régime dilué, on représente sur les diagrammes des figures 8.8 et 8.9 la distribution moyenne de la vitesse des particules, dans le référentiel d'une particule test. La colonne de gauche représente la vitesse relative totale $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ tandis que la colonne de droite montre la vitesse non affine $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle = \langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle - \dot{\gamma} y_{ij} \vec{e}_x$. Les champs vectoriels sont représentés à la même échelle. Pour des densités faibles, on retrouve le champ de vitesse théorique correspondant au régime dilué, calculé au chapitre 5 et représenté sur la figure 5.1.

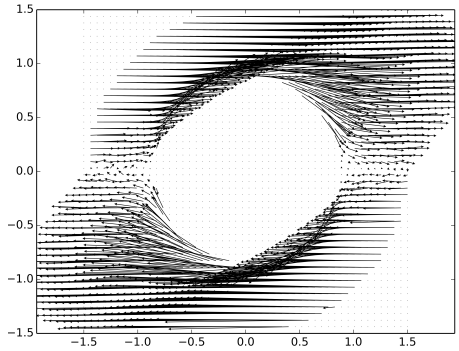
Si les particules ont le même rayon, le problème de la dynamique de la paire dans la suspension vue comme un milieu effectif présente en moyenne une symétrie centrale. Ainsi, si on définit $\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}) \rangle$ comme la force exercée par la suspension sur une particule située en $\vec{r}$ dans le référentiel de la particule test, tel que, en moyenne pour une paire ij, on ait $\langle \vec{f}_i^{\mathsf{susp}} \rangle = \langle \vec{f}_{\mathsf{susp}}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ (la particule j étant la particule test), et $\langle \vec{f}_j^{\mathsf{susp}} \rangle = \langle \vec{f}_{\mathsf{susp}}(-\vec{r}_{ij}) \rangle = -\langle \vec{f}_{\mathsf{susp}}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ (la particule i étant la particule test). Ce faisant, on décrit la dynamique de la paire ij comme la dynamique dans ce champ de force d'un problème à deux corps équivalent. Le champ $\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}) \rangle$ représente dans ce problème une sorte de traînée moyenne que ressentent les deux particules tout au long de leur interaction de paire. Cette traînée de milieu effectif a une résultante sur la paire qui est nulle en moyenne, mais chaque particule en ressent individuellement les effets. On représente cette distribution $\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}) \rangle$ en fonction de la densité de la suspension sur les diagrammes de la figure 8.10.



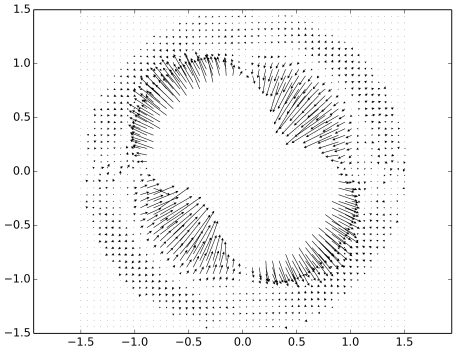
(a) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.01$.



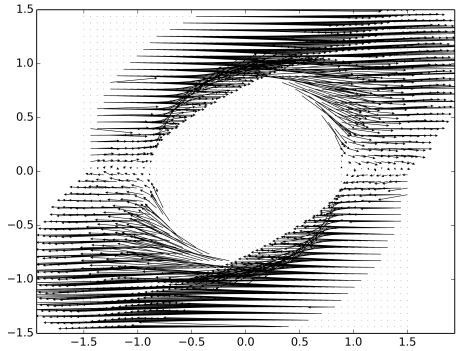
(b) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.01$.



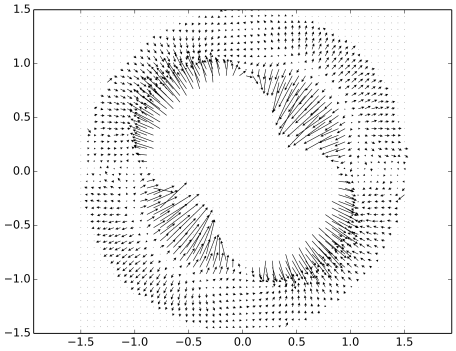
(c) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.1$.



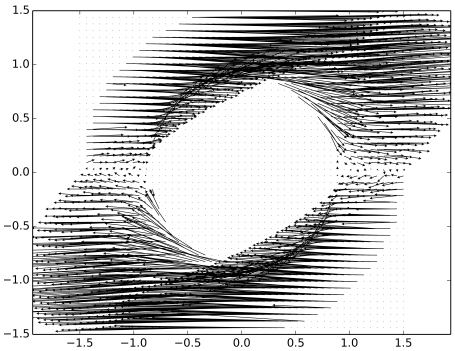
(d) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.1$.



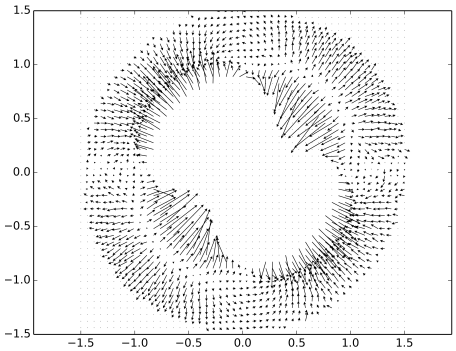
(e) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.2$.



(f) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.2$.

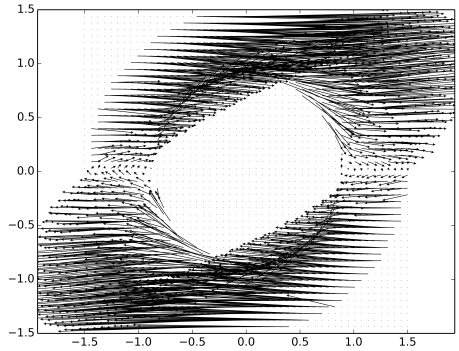


(g) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.3$.

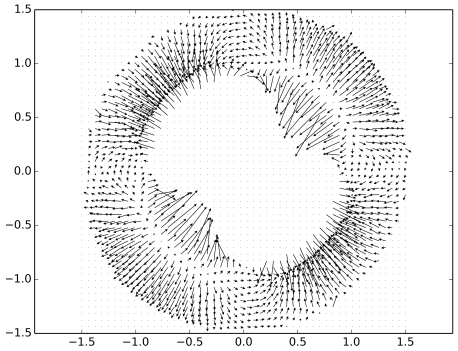


(h) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.3$.

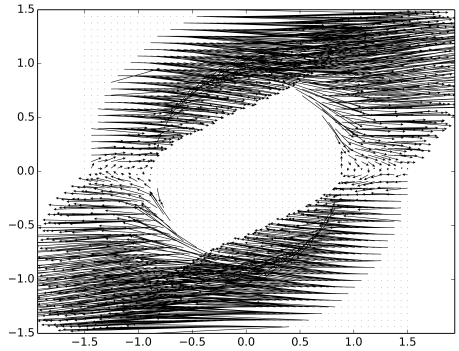
FIGURE 8.8 – Distribution de la vitesse relative totale (gauche) et non affine (droite) moyenne entre paires de particules voisines à différentes densités.



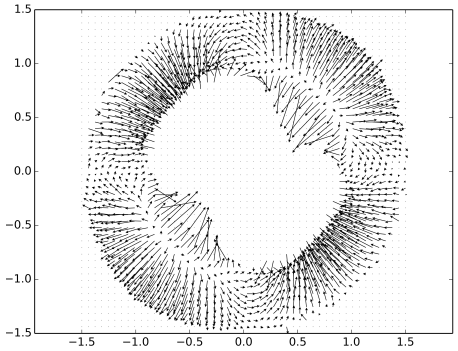
(a) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.4$.



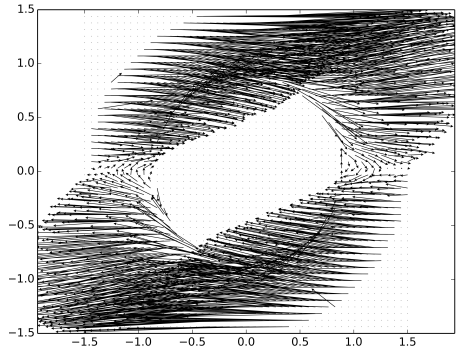
(b) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.4$.



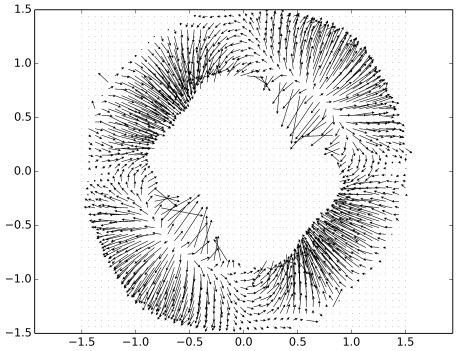
(c) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.5$.



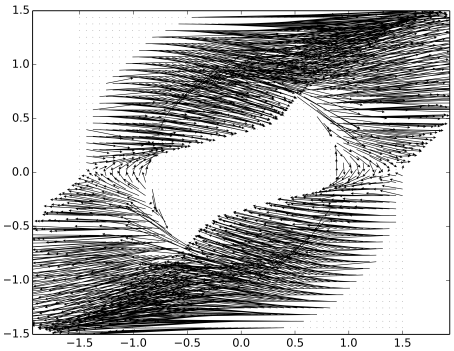
(d) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.5$.



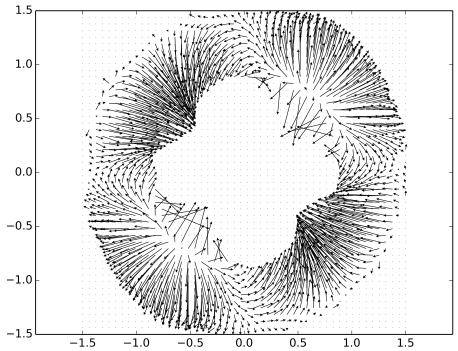
(e) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.6$.



(f) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.6$.

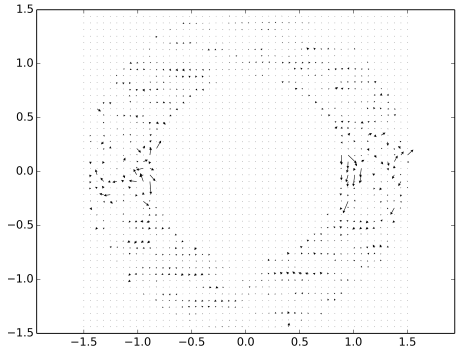


(g) $\langle \vec{v}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.7$.

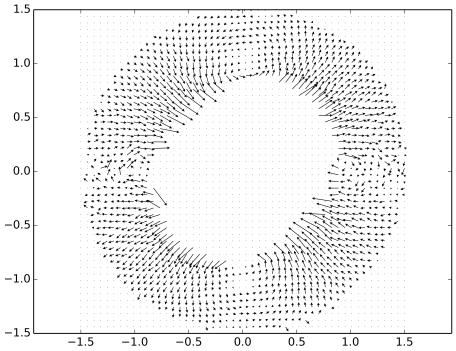


(h) $\langle \vec{c}_{ij}(\vec{r}_{ij}) \rangle$ pour $\phi = 0.7$.

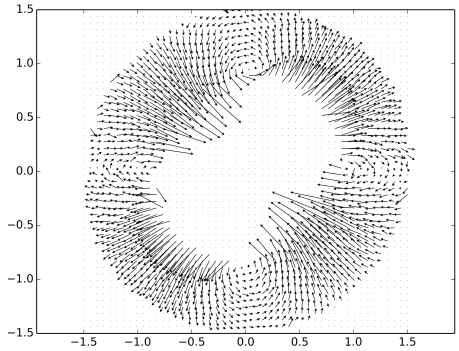
FIGURE 8.9 – Distribution de la vitesse relative totale (gauche) et non affine (droite) moyenne entre paires de particules voisines à différentes densités.



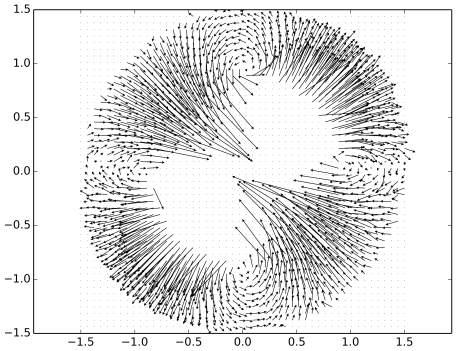
(a) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.01$.



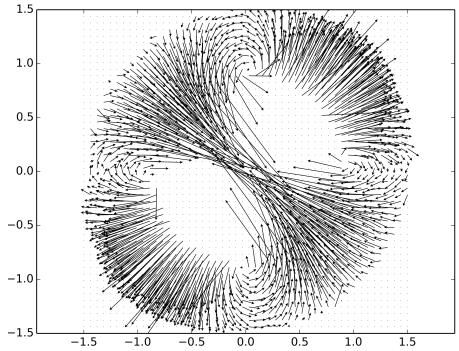
(b) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.1$.



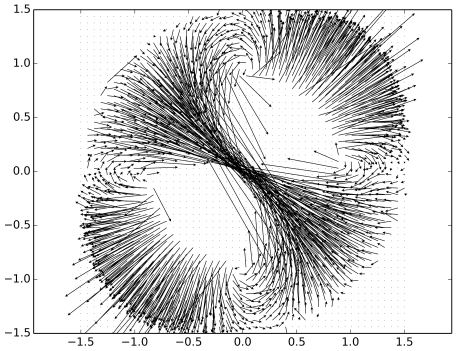
(c) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.2$.



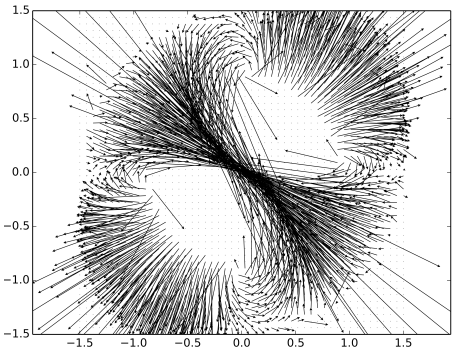
(d) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.3$.



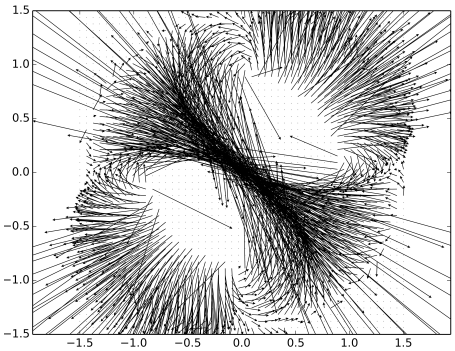
(e) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.4$.



(f) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$pour $\phi = 0.5$.



(g) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.6$.



(h) $\left\langle \vec{f}^{\mathrm{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ pour $\phi = 0.7$.

FIGURE 8.10 – Distribution de la force exercée par la suspension environnante sur unbe paire à différentes densités.

On cherche donc à représenter le problème de la dynamique moyenne d'une paire de grains dans une suspension concentrée comme la limite diluée d'un problème équivalent :

$$\begin{aligned}\vec{0} &= -6\pi a_i \vec{c}_i + \vec{f}_{ij} + \left\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle \ , \\ \vec{0} &= -6\pi a_j \vec{c}_j - \vec{f}_{ij} - \left\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle \ ,\end{aligned} \tag{8.7}$$

où le champ extérieur $\left\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$ est à déterminer de telle façon que la résolution de ce problème à deux corps permette de retrouver la microstructure générée dans une suspension concentrée en cisaillement simple. Qualitativement, l'allure de ce champ de force dans le régime dense rend compte d'une force essentiellement radiale, qui comprime la paire dans le quadrant de compression et qui l'étire dans le quadrant de dilatation. Nous proposons donc un modèle pour la force moyenne exercée par la suspension sur une paire ij de grains en son sein, qui s'écrit

$$\left\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(r_{ij}, \theta_{ij}) \right\rangle = F(r_{ij}) \cos(\theta_{ij}) \sin(\theta_{ij}) \vec{n}_{ij} \ , \tag{8.8}$$

où la dépendance radiale $F(r_{ij})$ est à déterminer par la mesure. Pour cela, on projeette sur la radiale $\vec{n}_{ij}$ les champs $\left\langle \vec{f}^{\mathsf{susp}}(\vec{r}_{ij}) \right\rangle$, des diagrammes de la figure 8.10, puis on effectue une coupe radiale à $\theta_{ij} = 135°$ et ajuster la fonction de r_{ij} mesurée sous la forme d'une loi de puissance. On représente ces coupes et les ajustements correspondants sur la figure 8.11 :

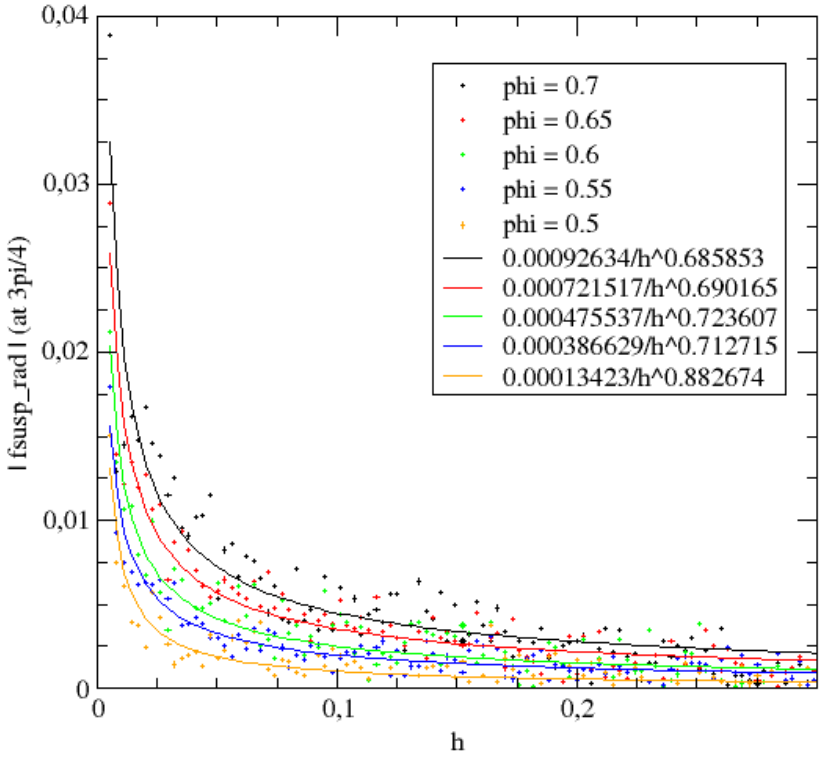


FIGURE 8.11 – Ajustement en loi de puissance pour la composante radiale de la force exercée en moyenne par la suspension sur une paire de particule disposées à un angle $\theta_{ij} = 135°$. Les points correspondent aux mesures obtenues en effectuant une coupe à 135° de la projection radiale du champ vectoriel $\langle \vec{f}^{\text{susp}}(\vec{r}_{ij}) \rangle$, représenté sur les diagrammes de la figure 8.10. Les courbes pleines sont les ajustements effectués. Les couleurs correspondent aux différentes fractions volumiques étudiées : $\phi = 0.5$ (orange), $\phi = 0.55$ (bleu), $\phi = 0.6$ (vert), $\phi = 0.65$ (rouge), $\phi = 0.7$ (noir).

On obtient finalement une loi de la forme :

$$\langle \vec{f}^{\text{susp}}(r_{ij}, \theta_{ij}) \rangle = \frac{C(\phi)}{h_{ij}^{\alpha(\phi)}} \cos(\theta_{ij}) \sin(\theta_{ij}) \vec{n}_{ij} \ , \tag{8.9}$$

où la constante $C(\phi)$ et l'exposant $\alpha(\phi)$ dépendent de la fraction volumique selon la table 8.2 (voir fin de chapitre).

Le fait est que même sous l'effet de la force additionnelle moyenne due au confinement dans la suspension, il reste difficile pour un contact de subsister dans le quadrant de dilatation. Cette force moyenne est en effet une force de traction qui s'additionne à la traînée de Stokes pour séparer les grains en contact, sans que celui ne puisse génèrer la moindre résistance.
Afin d'expliquer néanmoins l'existence de contacts dans le quadrant de dilatation, il faut qu'il arrive de temps à autre que la configuration locale des autres particules autour de la paire soit à l'origine d'une force $\vec{f}^{\text{susp}}$ de compression, à l'encontre du comportement moyen de la suspension dans ce quadrant. Cette force doit de plus être assez forte pour vaincre la traînee de Stokes, et ainsi empêcher au moins temporairement la disparition d'un contact qui se serait transporté dans le quadrant de dilatation

depuis le quadrant de compression. Il apparaît alors une population, petite mais non nulle, de paires orientées selon l'axe de dilatation, mais néanmoins localement en compression et au contact. Il est toujours difficile pour ces paires de survivre car il faut une configuration des grains autour d'elles qui puissent soutenir ce contact au moins temporairement. Nous avons mesuré que la force appliquée en moyenne sur une paire dans le quadrant de dilation est une traction et non une compression. L'existence de contacts dans le quadrant de dilatation ne peut alors s'expliquer que par les fluctuations de $\vec{f}^{\mathsf{susp}}$.

On peut penser que le nombre de contacts dans le quadrant de dilatation augmente avec la densité car il est de moins en moins difficile de générer une structure locale autorisant transitoirement un tel équilibre, le couplage avec un plus grand nombre de particules augmentant la probabilité que cela arrive. Même très proche du blocage ces structures ne peuvent être que métastables car elles contreviennent à l'écoulement global moyen qui impose une dilatation dans cette direction. La distribution angulaire des contacts reste donc asymétrique, même si cette asymétrie diminue avec la densité.

Selon ce scénario, la population de contacts orientés dans le quadrant de dilatation est directement alimentée par le flux de contacts provenant du quadrant de compression. En présence de frottements, les particules en contact subissent une force tangentielle qui résiste à leur mouvement le long de la surface de contact, et ce d'autant plus que la charge normale qu'ils subissent est importante. Cette force est à l'origine d'une réduction du flux de particules en contact vers le quadrant de dilatation, et ce d'autant plus que la suspension est dense, car la charge normale sur les contacts en compression et donc la force de frottement qui les freine augmente avec la densité.
Ce scénario est compatible avec l'observation selon laquelle la resymétrisation de la distribution des contacts aux hautes fractions volumiques est bien moins efficace dans le cas frottant que dans le cas non frottant. Cette observation donne alors une information sur l'origine des particules qui remplissent progressivement la zone de dépletion quand la suspension se densifie.

J	0.0025	0.01	0.025	0.04	0.1	0.25
ϕ (n. r.)	0.82	0.81	0.79	0.78	0.76	0.73
ϕ (r)	0.81	0.75	0.70	0.67	0.59	0.56

J	0.4	1	2.5	4	10
ϕ (n. r.)	0.70	0.65	0.57	0.534	0.442
ϕ (r)	0.53	0.47	0.35	0.31	0.25

TABLE 8.1 – Rappel de la relation entre ϕ et J pour des suspensions rugueuses (r) ou non rugueuses (n.r.).

ϕ	0.5	0.55	0.6	0.65	0.7
$C(\phi)$	1.34×10^{-4}	3.87×10^{-4}	4.75×10^{-4}	7.21×10^{-4}	9.26×10^{-4}
$\alpha(\phi)$	0.88	0.71	0.72	0.69	0.68

TABLE 8.2 – Paramètres d'ajustement $C(\phi)$ et $\alpha(\phi)$ pour la loi (8.9)

Chapitre 9

Conclusion de ce travail.

Dans ce travail, nous avons mis en place un code de calcul discret permettant la simulation du cisaillement simple d'une suspension bidimensionnelle de disques rigides rugueux. Ce code permet :

- Une prise en compte fine des interactions de lubrifications entre grains, et de leur équilibre subtil avec les forces de contact, incluant possiblement des frottements,
- Une prise en compte de l'inertie des grains, rendant possible l'obersvation d'effets inertiels dans la rhéologie du système,
- La possibilité d'approcher la fraction volumique de blocage à $\delta\phi \approx 0.01$,
- La possibilité de simuler un cisaillement à volume constant ou à pression constante,
- La possibilité d'étudier de façon détaillée la microstructure stationnaire générée lors du cisaillement de ces systèmes,
- L'étude de la rhéologie quasistatique des suspensions modérément denses de particules lisses grâce à un algorithme alternatif.

Après trois chapitres d'introduction et de contextualisation scientifique du problème étudié, nous avons présenté en détail dans le chapitre 4 le code de calcul que nous avons en place (modèle choisi et implémentation numérique de ce modèle).
Dans le chapitre 5 nous présentons la résolution analytique du problème à deux corps correspondant au modèle que nous avons choisi. Ce calcul nous permet d'estimer les vitesses et trajectoires dans chaque paire de particule en interaction, ainsi que les distributions de paires et de contacts associées.

Dans les chapitres 6 et 7 nous présentons des résultats de rhéologie macroscopique.

Le cisaillement a volume constant de suspensions de particules lisses nous a confirmé le rôle essentiel des contacts dans l'atteinte d'un état stationnaire et le développement d'une pression finie au sein d'une suspension cisaillée.
Le cisaillement à volume constant de suspensions de particules rugueuses non frottantes sur une vaste gamme de taux de cisaillement nous a permis de mettre en évidence deux régime d'écoulement. Dans le régime visqueux, les interactions de lubrification dominent l'inertie des grains et les interactions de contact s'alignent avec la lubrification. Il en résulte une contrainte proportionnelle au taux de cisaillement. Dans le régime inertiel, l'inertie des grains domine les interactions de lubrification, et les forces de contact s'alignent avec l'inertie des grains. Dans ce régime la contrainte varie comme le carré du taux de cisaillement. Des arguments théoriques prédisent la variation du taux de cisaillement de transition $\dot{\gamma}_c$ entre ces deux régimes avec la fraction volumique ϕ de la suspension. Cette variation

est pertinente au voisinage de la fraction volumique de blocage ϕ_c, où les effets de la différence de divergence de la viscosité entre les deux régimes se font le plus sentir. Nous avons cherché à mesurer la loi de variation $\dot{\gamma}_c(\phi)$. Cette loi de variation ne s'est malheureusement pas révélée très marquée dans le domaine de densité que nous avons pu atteindre pour du cisaillement à volume constant. Il est nécessaire de plus se rapprocher de la divergence de la viscosité pour que ces effets soient pertinents.

Afin de se rapprocher de la divergence, une étude du cisaillement à pression constante d'une suspension de particules rugueuses non frottantes a été effectuée. Ces simulations nous ont permis d'évaluer la rhéologie à des fractions volumiques proches de la fraction volumique de blocage, et à des taux de cisaillement suffisamment faible pour être dans le domaine de comportement visqueux de la suspension. Nous avons alors confirmé que l'on pouvait écrire une loi d'écoulement de la forme $\phi = \phi(J)$, $\sigma_{xy} = \mu(J)p$, où $J = \eta_0\dot{\gamma}/p$ est le nombre visqueux, construit comme le rapport entre un temps caractéristique de réarrangement microscopique sous l'effet des forces visqueuses et un temps typique de convection par l'écoulement imposé. Cette description nous a permis de mesurer la fraction de divergence $\phi_c = \phi(J \to 0)$, et un coefficient de friction macroscopique $\mu_c = \mu(J \to 0)$.
Une mesure de la divergence au blocage des composantes du tenseur des contraintes a également été réalisée. Nous avons obtenu une divergence claire de la pression en $1/\delta\phi^2$. Concernant la contrainte de cisaillement, l'existence d'un coefficient de frottement macroscopique fini nous assure une divergence similaire. Celle-ci est néanmoins plus difficile à mettre en évidence : nous avons montré que l'on mesurait en fait la somme de la contrainte de cisaillement due aux contacts divergeant en $1/\delta\phi^2$, et la contrainte de cisaillement hydrodynamique divergeant en $1/\delta\phi$. Comme il faut se rapprocher très près de ϕ_c pour que les contacts dominent pleinement la contrainte de cisaillement, il est difficile d'observer très proprement la seule divergence en $1/\delta\phi^2$.
Enfin nous avons effectuée les mêmes simulations avec des particules rugueuses frottantes, et avons mis en évidence la diminution de la fraction volumique de divergence ϕ_c et l'augmentation du coefficient de friction macroscopique μ_c.

Nous avons également cherché à caractériser la divergence de la contrainte en régime inertiel proche de la fraction volumique de blocage en augmentant le taux de cisaillement imposé. Malheureusement, les pressions de contrôle que nous avons choisies se sont révélées trop faible pour développer un régime à la fois dense et pleinement inertiel. Nous avons néanmoins simulés des écoulements pour lesquels les lois de comportement visqueuses valables pour des taux de cisaillement plus faibles ne fonctionnent plus. Les systèmes générés lors de ces calculs sont néanmoins bien trop dilués pour espérer en tirer une quelconque information sur la divergence de la contrainte. Ainsi, nous n'avons pu établir la relation $\dot{\gamma}_c(\phi)$ pour $\phi \to \phi_c$.

Enfin, dans le chapitre 8, nous présentons des données microstructurales sur les configurations générées lors du cisaillement dans le domaine visqueux de la suspension.
Dans le régime dilué, nous montrons que l'on retrouve les éléments calculés par la résolution analytique du problème à deux corps : champ des vitesses relatives moyennes, sillage de déplétion et distribution des contacts constante dans le domaine de compression et nulle dans le domaine de dilatation.
Lorsque la fraction volumique augmente, on observe une resymétrisation de la microstructure due à l'encombrement de plus en plus aigu de la suspension. Le sillage de déplétion se comble, les particules exhibent une tendance à s'organiser en couches, et des contacts se forment dans le quadrant de dilatation. La distribution des contacts restent néanmoins profondément asymétrique, notamment en présence de frottements qui semblent limiter la resymétrisation de la distribution.
Enfin, nous proposons de décrire la dynamique moyenne d'une paire confinée au sein de la suspension par un problème à deux corps équivalent, tenant compte de la force moyenne exercée par le milieu

environnant sur les particules de la paire. Nous mesurons cette force moyenne et montrons qu'elle est essentiellement radiale, qu'elle exerce une compression sur la paire dans le quadrant de compression, et une traction dans le quadrant de dilatation. Ainsi, cette seule force moyenne ne peut expliquer l'existence de contacts dans le quadrant de dilatation : il semble qu'il faille tenir compte de ses fluctuations.

Annexe A

Formule de Irving-Kirkwood pour la contrainte granulaire.

Nous suivons l'approche de Goldhirsch [66, 58]. L'idée est d'utiliser une fonction de coarse-graining $\Phi(\vec{r})$, d'intégrale 1 sur tout l'espace, qui soit maximale en $\vec{r}$, et qui s'annule en dehors du volume de contrôle que l'on souhaite utiliser pour calculer la contrainte (de taille typique au moins une dizaine de taille de grains, assez grand pour qu'il y ait un sens à oublier l'aspect granulaire du milieu, mais assez petit pour que la notion de tenseur continu des contraintes soit correctement définie à l'échelle de l'observateur.).
Le but de la dérivation est d'exprimer la collection discrètes d'équations qui décrivent la dynamique des particules sous la forme d'une équation de conservation de champs continus de densité de masse, de vitesse, et de densité quantité de mouvement que l'on construit à partir des masses et positions des particules, et de la fonction de coarse-graining Φ :

$$\rho(\vec{r},t) = \sum_{i=1}^{N} m_i \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \ , \tag{A.1}$$

$$\rho(\vec{r},t)\vec{v}(\vec{r},t) = \sum_{i=1}^{N} m_i \vec{v}_i \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \ . \tag{A.2}$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement dans un milieu continu incompressible s'écrit (on adopte la convention d'Einstein de sommation des indices répétés) :

$$\frac{\partial \rho v_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_\alpha v_\beta}{\partial r_\beta} = \frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial r_\beta} \tag{A.3}$$

Dérivons par rapport au temps la densité de quantité de mouvement (A.2) :

$$\frac{\partial \rho v_\alpha(\vec{r},t)}{\partial t} = -\sum_{i=1}^{N} m_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta} \frac{\partial \Phi}{\partial r_\beta}(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) + \sum_{i=1}^{N} m_i \frac{\mathrm{d}v_{i,\alpha}}{\mathrm{d}t} \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \ . \tag{A.4}$$

La comparaison de ces deux équations (qui ne sont rien d'autre que la description continue et discrète du même phénomène physique, le transport de la quantité de mouvement) permet d'écrire ce que doit vérifier le tenseur des contraintes que l'on souhaite :

$$\frac{\partial \sigma_{\alpha\beta}}{\partial r_\beta} = \frac{\partial}{\partial r_\beta}\left[\rho v_\alpha v_\beta - \sum_{i=1}^{N} m_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta} \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t))\right] + \sum_{i=1}^{N} m_i \frac{\mathrm{d}v_{i,\alpha}}{\mathrm{d}t} \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \ . \tag{A.5}$$

Pour donner une expression du tenseur des contraintes à partir de cette expression, il faut intégrer le membre de droite, c'est à dire l'écrire sous la forme de la divergence d'un tenseur. C'est déjà le cas pour le premier terme. On peut simplifier son expression en réécrivant la somme dans le gradient, en fonction des fluctuations de vitesses des particules, définies comme l'écart à la vitesse moyenne coarse-grainée définie en (A.2) :

$$\delta v_i(\vec{r},t) = \vec{v}_i(t) - \vec{v}(\vec{r},t) \ . \tag{A.6}$$

Il faut noter que le point de référence pour le calcul de la vitesse moyenne est le centre $\vec{r}$ du moyennage [66, 58], et non la position précise $\vec{r}_i$ de la particule i sur laquelle on travaille. En effet, la fluctuation de vitesse est mesurée par rapport à la vitesse du centre de gravité des particules dans le volume de contrôle délimité par la fonction Φ autour de $\vec{r}$, c'est à dire précisément la vitesse $\vec{v}(\vec{r},t)$. On a :

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} m_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta} \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) &= \sum_{i=1}^{N} m_i [\delta v_{i,\alpha} + v_\alpha(\vec{r},t)][\delta v_{i,\beta} + v_\beta(\vec{r},t)]\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \\ &= v_\alpha v_\beta \sum_{i=1}^{N} m_i \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) + \sum_{i=1}^{N} m_i \delta v_{i,\alpha}\delta v_{i,\beta}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \ . \end{aligned} \tag{A.7}$$

Les termes croisés $v_\alpha \sum_i m_i \delta v_{i,\beta}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i)$ et $v_\beta \sum_i m_i \delta v_{i,\alpha}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i)$ sont nuls, en conséquence de la conservation de la masse. En effet,

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} m_i \delta\vec{v}_i \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) &= \sum_{i=1}^{N} m_i [\vec{v}_i - \vec{v}(\vec{r},t)]\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) \\ &= \sum_{i=1}^{N} m_i \vec{v}_i \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) - \vec{v}(\vec{r},t)\sum_{i=1}^{N} m_i \Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) \\ &= \rho(\vec{r},t)\vec{v}(\vec{r},t) - \vec{v}(\vec{r},t)\rho(\vec{r},t) = 0 \ . \end{aligned} \tag{A.8}$$

On déduit finalement de (A.7) que :

$$\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left[\rho v_\alpha v_\beta - \sum_{i=1}^{N} m_i v_{i,\alpha} v_{i,\beta}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t))\right] = \frac{\partial}{\partial r_\beta}\left[\sum_{i=1}^{N} m_i \delta v_{i,\alpha}\delta v_{i,\beta}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t))\right] \ . \tag{A.9}$$

Pour écrire le second terme du membre de droite de (A.5) comme un gradient, on part des équations de Newton qui décrivent la dynamique des particules :

$$m_i \frac{\mathrm{d}v_{i,\alpha}}{\mathrm{d}t} = \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha} \ . \tag{A.10}$$

On a alors :

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{N} m_i \frac{\mathrm{d}v_{i,\alpha}}{\mathrm{d}t}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ji,\alpha}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha}\left[\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) - \Phi(\vec{r}-\vec{r}_j(t))\right] \ , \end{aligned} \tag{A.11}$$

où l'on a utilisé la troisième loi de Newton $\vec{f}^{\,\mathsf{c}}_{ij} = -\vec{f}^{\,\mathsf{c}}_{ji}$ dans la seconde égalité, et a échangé les deux indices dans la seconde somme pour écrire la troisième égalité. Goldhirsch et Goldenberg montrent que l'on peut écrire la différence $\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) - \Phi(\vec{r}-\vec{r}_j)$ comme une divergence en l'écrivant comme une intégrale faisant intervenir le gradient de Φ le long du segment $\vec{r}_j - \vec{r}_i$:

$$\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) - \Phi(\vec{r}-\vec{r}_j) = -\int_{s=0}^{1} \frac{\partial\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})}{\partial s}\mathrm{d}s \tag{A.12}$$

Posant $\vec{x}(s) = \vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij}$ pour tout $s\in[0,1]$, on a :

$$\frac{\partial\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})}{\partial s} = \frac{\partial x_\beta}{\partial s}\frac{\partial\Phi(\vec{x})}{\partial x_\beta} = r_{ij,\beta}\frac{\partial\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})}{\partial r_\beta} \ , \tag{A.13}$$

soit,

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i) - \Phi(\vec{r}-\vec{r}_j) &= -r_{ij,\beta}\int_{s=0}^{1}\frac{\partial\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})}{\partial r_\beta}\mathrm{d}s \\ &= -\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left[r_{ij,\beta}\int_{s=0}^{1}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})\mathrm{d}s\right] \ , \end{aligned} \tag{A.14}$$

et donc :

$$\sum_{i=1}^{N} m_i\frac{\mathrm{d}v_{i,\alpha}}{\mathrm{d}t}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) = -\frac{\partial}{\partial r_\beta}\left[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha} r_{ij,\beta}\int_{s=0}^{1}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})\mathrm{d}s\right] \ . \tag{A.15}$$

Au final, (A.5) se réécrit :

$$\frac{\partial\langle\sigma_{\alpha\beta}\rangle}{\partial r_\beta} = \frac{\partial\langle\sigma^{\mathsf{K}}_{\alpha\beta}\rangle}{\partial r_\beta} + \frac{\partial\langle\sigma^{\mathsf{c}}_{\alpha\beta}\rangle}{\partial r_\beta} \ , \tag{A.16}$$

où intervient le tenseur des contraintes dites cinétiques $\langle\sigma^{\mathsf{K}}_{\alpha\beta}\rangle$, associé au transport de quantité de mouvement par les fluctuations de vitesses des particules, et le tenseur des contraintes de contact $\langle\sigma^{\mathsf{c}}_{\alpha\beta}\rangle$:

$$\langle\sigma^{\mathsf{K}}_{\alpha\beta}\rangle = \sum_{i=1}^{N} m_i\delta v_{i,\alpha}\delta v_{i,\beta}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_i(t)) \ , \tag{A.17}$$

$$\langle\sigma^{\mathsf{c}}_{\alpha\beta}\rangle = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha} r_{ij,\beta}\int_{s=0}^{1}\Phi(\vec{r}-\vec{r}_j+s\vec{r}_{ij})\mathrm{d}s \ . \tag{A.18}$$

Il suffit de prendre comme fonction de moyennage une fonction Φ qui vaut $1/V$ partout dans le domaine $\mathcal{V}$ dans lequel les paires sont décomptées, et zéro ailleurs. La contrainte cinétique et la contrainte de contacts s'écrivent alors :

$$\left\langle \sigma^{\mathsf{K}}_{\alpha\beta} \right\rangle = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N} m_i \delta v_{i,\alpha} \delta v_{i,\beta} \ , \tag{A.19}$$

$$\left\langle \sigma^{\mathsf{c}}_{\alpha\beta} \right\rangle = -\frac{1}{2V} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} f^{\mathsf{c}}_{ij,\alpha} r_{ij,\beta} \ . \tag{A.20}$$

Annexe B

Principe des méthodes de Runge-Kutta.

On considère un système dynamique dont on regroupe les variables en un vecteur $\mathbf{y}(t)$, et dont l'évolution temporelle obéit à une loi de forme générale

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = f(\mathbf{y}(t), t) \ . \tag{B.1}$$

On discrétise le temps en une suite d'instants $\{t_0, ..., t_n, t_{n+1}, ...\}$ non nécessairement équidistants. On note $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$. Dans un schéma à pas de temps fixe, les intervalles $\{\Delta t_n\}$ sont tous égaux au pas Δt. Dans un schéma à pas adaptatifs, il sont calculés au fur et à mesure que la dynamique avance, de manière à garantir une précision voulue. On note $\mathbf{y}(n)$ l'estimation numérique que l'on fait des variables $\mathbf{y}(t)$ au temps t_n.

Un pas d'Euler explicite permet d'estimer l'incrément entre $\mathbf{y}(n)$ et $\mathbf{y}(n+1)$ en fonction de la dérivée $\dot{\mathbf{y}}(n)$ au début de l'intervalle de temps :

$$\mathbf{y}(n+1) = \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \, f(\mathbf{y}(n), t_n) \ . \tag{B.2}$$

Comme la comparaison avec le développement de Taylor de la fonction $\mathbf{y}(t)$ au voisinage de t_n le montre, cette estimation commet une erreur proportionnelle à $(\Delta t_n)^2$. L'utilisation du pas d'Euler simple n'est pas très précise, et très souvent instable. L'idée des méthodes de Runge-Kutta est de reconstruire le développement de Taylor de $\mathbf{y}(t)$ autour de t_n jusqu'à un ordre arbitrairement élevé en Δt_n en combinant de façon astucieuse plusieurs pas d'Euler entre des points intermédiaires de l'intervalle $[t_n, t_{n+1}[$. De façon générale, un schéma de Runge-Kutta d'ordre q s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{y}(n+1) = \mathbf{y}(n) + \Delta t_n \sum_{i=1}^{q} b_i f(\mathbf{y}_i, t_i) \ , \tag{B.3}$$

où la fonction f qui donne la dérivée $\dot{\mathbf{y}}$ est estimée en des points intermédiaires $(\mathbf{y}_i, t_i)$ définis récursivement par :

$$t_i = t_n + c_i \Delta t_n \tag{B.4}$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \sum_{j=1}^{q} a_{ij} f(\mathbf{y}_j, t_j) \ . \tag{B.5}$$

Les coefficients $\{a_{ij}\}$, $\{b_i\}$ et $\{c_i\}$ sont choisis astucieusement de façon à ce que l'équation (B.3) dans laquelle tous les incréments intermédiaires ont été remplacés par leur expression reconstitue le

développement de Taylor de la fonction f à l'ordre q au voisinage de t_n. Si pour tout $j \geqslant i$ le coefficient a_{ij} est nul, le schéma est explicite et les estimations de la dérivée aux points intermédiaires peuvent se calculer itérativement à partir de $\mathbf{y}(n)$ et $\dot{\mathbf{y}}(n)$. Dans le cas contraire, le schéma est implicite, et nécessite l'inversion d'un système linéaire à chaque pas de temps.

Une méthode à pas de temps adaptatif a pour but de borner l'erreur commise entre l'estimation numérique $\mathbf{y}(n+1)$ et la vraie valeur $\mathbf{y}(t_{n+1})$ que prennent les variables au temps t_{n+1}, en diminuant autant que nécessaire le pas de temps Δt_n. Le calcul (B.3) est recommencé en diminuant le pas de temps, jusqu'à ce que l'erreur propagée entre t_n et t_{n+1} soit en deça d'un seuil fixé à l'avance. Bien entendu, cela nécessite d'être capable d'estimer l'erreur commise par un schéma de Runge-Kutta donné. Une façon de le faire est de travailler avec deux schémas de Runge-Kutta construits en évaluant la dérivée en des points intermédiaires identiques (c'est à dire que les coefficients $\{a_{ij}\}$ et $\{c_i\}$ utilisés sont les mêmes dans les deux schémas), mais combinées différemment (i.e. les coefficients $\{b_i\}$ sont différents : on notera ceux du second schéma $\{b_i^*\}$) de façon à générer une approximation d'ordre q et d'ordre $q+1$ de la solution. L'erreur $\mathbf{e}(n)$ commise par le premier schéma entre t_n et t_{n+1} peut alors s'estimer en comparant l'estimation d'ordre q qu'il donne à l'estimation à l'ordre $q+1$ obtenue avec le second schéma :

$$\mathbf{e}(n) = \sum_{i=1}^{q+1} (b_i - b_i^*) f(\mathbf{y}_i, t_i) \ . \tag{B.6}$$

Maintenant que l'on sait estimer l'erreur commise, il faut déterminer comment la forcer à demeurer dans des limites fixées. Si q est l'ordre du schéma que l'on utilise, l'erreur commise est proportionnelle à $(\Delta t_n)^q$: $|\mathbf{e}(n)| \propto (\Delta t_n)^q$. De même, si Δt^* est le pas de temps qu'il faut utiliser pour génerer l'erreur cible $\mathbf{e}^*$, on a que $|\mathbf{e}^*| \propto (\Delta t^*)^q$. Finalement,

$$\Delta t^* \propto \Delta t_n \left| \frac{\mathbf{e}^*}{\mathbf{e}(n)} \right|^{\frac{1}{q}} \ . \tag{B.7}$$

Ayant tenté un pas de temps Δt_n qui a généré une erreur $|\mathbf{e}(n)| > |\mathbf{e}^*|$, la relation (B.7) donne une indication pour le choix d'un nouveau pas de temps. Si au contraire $|\mathbf{e}(n)| \leqslant |\mathbf{e}^*|$, la tentative était bonne, et (B.7) permet d'estimer comment le pas de temps doit augmenter à la prochaine itération du schéma pour gagner du temps.

Annexe C

Calcul des trajectoires du problème à deux corps avec un cutoff continu.

Dans cette annexe, nous détaillons les calculs menés pour déterminer la solution du problème à deux corps correspondant à notre modèle, avec un cutoff continu $\phi(h) = \left(1 - h/h^*\right)^3$.

Il s'agit pour obtenir les trajectoires de calculer l'intégrale :

$$\begin{aligned}\int_0^t \frac{\dot{h}\left(1 + a\,\eta\left(h\right)\right)}{r}\mathrm{d}t &= \int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h} + a\left(1 - \tilde{h}/h^*\right)^3}{\tilde{h}\tilde{r}}\mathrm{d}\tilde{h} \\ &= \int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h} + a}{\tilde{h}\tilde{r}}\mathrm{d}\tilde{h} + \mathsf{corr}(r)\ ,\end{aligned} \tag{C.1}$$

où l'on a séparé le terme d'ordre 1 qui donne la trajectoire sans cut-off du reste $\mathsf{corr}(r)$ qui donne les corrections dues à l'existence et à la continuité du cutoff :

$$\mathsf{corr}(r) = a\int_{h^*}^{h} \frac{-3\tilde{h}/h^* + 3(\tilde{h}/h^*)^2 - (\tilde{h}/h^*)^3}{\tilde{h}\tilde{r}}\mathrm{d}\tilde{h}\ . \tag{C.2}$$

Le premier terme est la même intégrale que (5.21) :

$$\int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h} + a}{\tilde{h}\tilde{r}}\mathrm{d}\tilde{h} = \ln\left[\frac{h^{\alpha}r^{1-\alpha}}{h^{*\alpha}r^{*1-\alpha}}\right]\ . \tag{C.3}$$

Calculons les corrections :

$$\mathsf{corr}(r) = -\frac{3a}{h^*}\int_{h^*}^{h} \frac{\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{r}} + \frac{3a}{h^{*2}}\int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h}\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{r}} - \frac{a}{h^{*3}}\int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h}^2\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{r}}\ . \tag{C.4}$$

Évaluons tranquillement chacune de ces intégrales. On a :

$$\int_{h^*}^{h} \frac{\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{r}} = \ln\left[\frac{r}{r^*}\right] , \tag{C.5}$$

$$\begin{aligned}\int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h}\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{r}} &= \int_{r^*}^{r} \frac{(\tilde{r}-a_1-a_2)\mathrm{d}\tilde{r}}{\tilde{r}} = \int_{r^*}^{r} \mathrm{d}\tilde{r} - (a_1+a_2)\int_{r^*}^{r} \frac{\mathrm{d}\tilde{r}}{\tilde{r}} \\ &= (r-r^*) - (a_1+a_2)\ln\left[\frac{r}{r^*}\right] ,\end{aligned} \tag{C.6}$$

$$\begin{aligned}\int_{h^*}^{h} \frac{\tilde{h}^2\mathrm{d}\tilde{h}}{\tilde{r}} &= \int_{r^*}^{r} \frac{(\tilde{r}-a_1-a_2)^2\,\mathrm{d}\tilde{r}}{\tilde{r}} = \int_{r^*}^{r} \tilde{r}\mathrm{d}\tilde{r} - 2(a_1+a_2)\int_{r^*}^{r} \mathrm{d}\tilde{r} + (a_1+a_2)^2\int_{r^*}^{r} \frac{\mathrm{d}\tilde{r}}{\tilde{r}} \\ &= \frac{1}{2}\left(r^2-r^{*2}\right) - 2(a_1+a_2)(r-r^*) + (a_1+a_2)^2\ln\left[\frac{r}{r^*}\right] .\end{aligned} \tag{C.7}$$

Les corrections à la trajectoire sans cutoff s'écrivent donc :

$$\begin{aligned}\mathsf{corr}(r) &= -\frac{3a}{h^*}\ln\frac{r}{r^*} + \frac{3a}{h^{*2}}\left[(r-r^*) - (a_1+a_2)\ln\frac{r}{r^*}\right] \\ &\quad - \frac{a}{h^{*3}}\left[\frac{1}{2}\left(r^2-r^{*2}\right) - 2(a_1+a_2)(r-r^*) + (a_1+a_2)^2\ln\frac{r}{r^*}\right] \\ &= -A\ln\frac{r}{r^*} + B(r-r^*) - C\left(r^2-r^{*2}\right) ,\end{aligned} \tag{C.8}$$

où A, B et C sont des constantes positives dépendant de a_1, a_2, et h^* et données par :

$$\begin{aligned}A &= \frac{3a}{h^*} + (a_1+a_2)\frac{3a}{h^{*2}} + (a_1+a_2)^2\frac{a}{h^{*3}} , \\ B &= \frac{3a}{h^{*2}} + 2(a_1+a_2)\frac{a}{h^{*3}} , \\ C &= \frac{a}{2h^{*3}} .\end{aligned} \tag{C.9}$$

Dans le cas où les particules sont de taille identique et si l'on considère que la portée des interactions de lubrification est d'un rayon de particules, $a_1 = a_2 = h^* = 2a$, alors :

$$A = \frac{13}{2}, \quad B = \frac{7}{4a}, \quad C = \frac{1}{16a^2} . \tag{C.10}$$

Finalement,

$$\int_0^t \frac{\dot{h}\left(h + a\phi(h)\right)}{rh}\mathrm{d}t = \ln\left[\frac{h^{\alpha}r^{1-\alpha}}{h^{*\alpha}r^{*1-\alpha}}\right] - A\ln\left[\frac{r}{r^*}\right] + B(r-r^*) - C\left(r^2-r^{*2}\right) . \tag{C.11}$$

Bibliographie

[1] M. ABBAS. Auto-diffusion de particules dans un écoulement cisaillé : des interactions hydrodynamiques aux effets collisionnels. Thèse de doctorat à l'Institut National Polytechnique de Toulouse, 2008.

[2] M. ABBAS, E. CLIMENT, O. SIMONIN, M. MAXEY. Dynamics of bidisperse suspensions under Stokes flow : Linear shear flow and sedimentation. Physics of fluids 18, 121504, 2006.

[3] M.P. ALLEN, D.J. TILDESLEY. Computer Simulation of Liquids. Oxford University Press, 1987.

[4] C. ANCEY, P. COUSSOT. Transition frictionnelle/visqueuse pour une suspension granulaire. Comptes-Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, t. 327, II b, 515-522, 1999.

[5] B. ANDREOTTI, J-L. BARRAT, C. HEUSSINGER. Shear flow of non-Brownian suspensions close to jamming. PhysicalReview Letters 109, 105901, 2012.

[6] P. ANGOT, C-H. BRUNEAU, P. FABRIE. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. Numerische Mathematik, 81(4) :497-520, 1999.

[7] R.A. BAGNOLD. Experiments on a gravity-free dispesion of large solid spheres in a Newtonian fluid under shear. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 225, No. 1160, pp. 49-63, 1954.

[8] R.C. BALL, J.R. MELROSE. Lubrication Breakdown in hydrodynamic simulations of concentrated colloids. Advances in colloid and interface science, 59, 19-30, 1995.

[9] R.C. BALL, J.R. MELROSE. A simulation technique for many spheres in quasi-static motion under frame-invariant pair drag and Brownian forces. Physica A 247, 444-472, 1997.

[10] N.J. BALMFORTH, I.A. FRIGAARD, G. OVARLEZ. Yielding to Stress : Recent Developments in Viscoplastic Fluid Mechanics. Annual Review of Fluid Mechanics Vol. 46 : 121-146, 2014.

[11] H.A. BARNES. Shear-thickening (dilatancy) in suspensions of nonaggregating solid particles dispersed in newtonian liquids. Journal of Rheology. 33, 329, 1989.

[12] G. BATCHELOR. The stress system in a suspension of force free particles. Journal of Fluid Mechanics 41(03), 545-570, 1970.

[13] G. BATCHELOR. An introduction to Fluid Dynamics. Cambridge University Press, 1970.

[14] G. BATCHELOR, J. GREEN. The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field. Journal of Fluid Mechanics 56(02), 375-400, 1972.

[15] G. BATCHELOR, J. GREEN. The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2. Journal of Fluid Mechanics 56(03), 401-427, 1972.

[16] J.W. BENDER, N. WAGNER. Optical measurement of the contributions of colloidal forces to the rheology of concentrated suspensions. Journal of Colloid and Interface Science, 172, 171-184, 1995.

[17] E. BERTRAND, J. BIBETTE, V. SCHMITT. From shear thickening to shear-induced jamming. Physical Review E 66,060401, 2002.

[18] F. BLANC, F. PETERS, E. LEMAIRE. Experimental signature of the pair trajectories of rough spheres in the shear induced microstructure in non colloidal suspensions. Physical Review Letters 107(20), 208302, 2011.

[19] F. BLANC. Rhéologie et microstructure des suspensions concentrées non Browniennes. Thèse de doctorat à l'université de Nice-Sophia Antipolis. 2012.

[20] G. BOSSIS, J.F. BRADY. Dynamic simulation of sheared suspensions. I - General method. The journal of chemical physics 94(7), 5064-5070, 1984.

[21] F.P. BOWDEN, D. TABOR. The friction and lubrication of solids. Oxford University Press, pp337, 1950.

[22] F. BOYER, E. GUAZZELLI, O. POULIQUEN. Unifying suspension and granular rheology. Physical Review Letters 107, 188301, 2011.

[23] F. BOYER, O. POULIQUEN, E. GUAZZELLI. Dense suspensions in rotatating-rod flows : normal stresses and particle migration. Journal of Fluid Mechanics, 686, 5-25, 2011.

[24] J.F. BRADY, G. BOSSIS. The rheology of concentrated suspensions of spheres in simple shear flow by numerical simulation. Journal of Fluid Mechanics 155, 105-129, 1985.

[25] Stokesian Dynamics. Annual Review of Fluid Mechanics 20(1), 111-157, 1988.

[26] J.F. BRADY, J.F. MORRIS. Microstructure of strongly sheared suspensions and its impact on rheology and diffusion. Journal of Fluid Mechanics 348, 103-304, 1997

[27] H.C. BRINKMAN. A calculation of the viscous force exerted by a flowing fluid on a dense swarm of particles. Applied Scientific Research, 1, 27-34, 1949.

[28] E. BROWN, H.M. JAEGER. A dynamic jamming point for shear thickening suspensions. Physical Review Letters, 103, 086001, 2009.

[29] E. BROWN, H.M. JAEGER. Shear-thickening in concentrated suspensions : phenomenology, mechanisms and relations to jamming. Reports on Progress in Physics, 77, 046602, 2013.

[30] J.R. CASH, A.H. KARP. A variable order Runge-Kutta method for initial value problems with rapidly varying right hand sides. Transactions on mathematical software, 16, 3, 201-222, 1990.

[31] C. CASSAR, M. NICOLAS, O. POULIQUEN. Submarine granular flows down inclined planes. Physics of Fluids 17, 103301, 2005.

[32] C.Y. CHANG, R.L. POWELL. Effect of particle-size distribution on the rheology of concentrated suspensions. Journal of Rheology 38(1), 85-98.

[33] J. CHATTORAJ. Effect of finite temperature on the elementary mechanisms of plastic deformation in amorphous materials. Thèse de doctorat à l'université Paris-Est, 2011.

[34] S. CHEN, G.D. DOOLEN. Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows. Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 30, pp. 329-364, 1998.

[35] F. CHEVOIR. Écoulements granulaires. Sciences pour le Génie Civil, SI 16, ISSN 1167-4865, 2008.

[36] E. CLIMENT, M. MAXEY. Numerical simulations of random suspensions at finite Reynolds numbers. International Journal of Multiphase Flow 29(4), 579-601, 2003.

[37] P. COUSSOT, C. ANCEY. Rheophysical classification of concentrated suspensions and granular pastes. Physical Review E 59(4), 4445, 1999.

[38] P. COUSSOT, C. ANCEY. Rhéophysique des pâtes et des suspensions. EDP Sciences, 1999.

[39] E. COUTURIER, F. BOYER, O. POULIQUEN, E. GUAZZELLI. Suspensions in a tilted trough : second normal stress difference. Journal of Fluid Mechanics 686, 26-39, 2011.

[40] R.G. COX. The motion of suspended particles almost in contact. International Journal of Multiphase Flow 1, 343-371, 1974.

[41] P.A. CUNDALL, O.D.L. STRACK. A discrete numerical model for granular assemblies. Géotechnique 29(1), 47-65, 1979.

[42] F.R. DA CUNHA, E.J. HINCH. Shear induced dispersion in a dilute suspension of rough spheres. Journal of Fluid Mechanics 309, 211-223, 1996.

[43] R.H. DAVIS, Y. ZHAO, K.P. GALVIN, H.J. WILSON. Solid-solid contacts due to surface roughness and their effects on suspension behaviour. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A 361, 871-894, 2003.

[44] T. DBOUK, L. LOBRY, E. LEMAIRE. Normal stresses in concentrated non-brownian suspensions. Journal of Fluid Mechanics 715, 239-272, 2013.

[45] A. DEBOEUF, G. GAUTHIER, J. MARTIN. Particle pressure in a sheared suspension : A bridge from osmosis to granular dilatancy. Physical Review Letter 102, 108301, 2009.

[46] L. DURLOFSKY, J.F. BRADY, G. BOSSIS. Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles. Journal of Fluid Mechanics 180, 21-49, 1987.

[47] A. EINSTEIN. Zur theorie des brownschen bewegung. Annalen der physik 324(2), 371-381, 1906.

[48] D.J. EVANS, G.P. MORRISS. Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids. Academic Press London, 1990.

[49] M.L. EKIEL-JESEWSKA, F. FEUILLEBOIS, N. LECOQ, K. MASMOUDI, R. ANTHORE, F. BOSTEL, E. WAJNRYB. Hydrodynamic interactions between two spheres at contact. Physical Review E 59,3, 1999.

[50] A. FALL. Rhéophysique des fluides complexes : Écoulement et blocage de suspensions concentrées. Thèse de doctorat à l'Université Paris VII, 2008.

[51] A. FALL, A. LEMAÎTRE, F. BERTRAND, D. BONN, G. OVARLEZ. Shear thickening and migration in granular suspensions. Physical Review Letters 105, 268303, 2010.

[52] S. FAURE, S. MARTIN, B. MAURY, T. TAKAHASHI. Towards the simulation of dense suspensions : A numerical tool. ESAIM : Proceedings, Vol. 28, 55-79, 2009.

[53] M. FERMIGIER. Cours de Mécanique des fluides, ESPCI Paris-Tech, 2007.

[54] Y. FORTERRE, O. POULIQUEN. Flows of dense granular media. Annual Review of Fluid Mechanics 40, 1-24, 2008.

[55] D.R. FOSS, J.F. BRADY. Structure, diffusion and rheology of Brownian suspensions by Stokesian Dynamics simulation. Journal of Fluid Mechanics, 407, 167-200, 2000.

[56] S. GALLIER. Simulation numérique des suspensions frictionnelles. Application aux propergols solides. Thèse de doctorat.

[57] S. GARLAND, G. GAUTHIER, J. MARTIN, J.F. MORRIS. Normal stress measurements in sheared non-Brownian suspensions. Journal of Rheology, 57, 71-88, 2013.

[58] B.J. GLASSER, I. GOLDHIRSCH. Scale dependence, correlations, and fluctuations of stresses in rapid granular flows. Physics of Fluids 13, 407-420, 2001.

[59] R. GLOWINSKI, T-W PAN, J. PERIAUX. A fictitious domain method for Dirichlet problem and applications. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 111 :283-303, 1994a.

[60] R. GLOWINSKI, T-W PAN, J. PERIAUX. A fictitious domain method for external incompressible flow modeled by Navier-Stokes equations. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 112 :133-148, 1994b.

[61] R. GLOWINSKI, T-W PAN, J. PERIAUX. A Lagrange multiplier/fictitious domain method for the numerical simulation of incompressible viscous flow around moving rigid bodies : (I) Case where the rigid body motions are known a priori. C.R. Acad. Sci. Paris, 324 :361-369, 1997.

[62] R. GLOWINSKI, T-W PAN, T.I. HESLA, D.D. JOSEPH. A distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows, 1999.

[63] E. GUAZZELLI. Cours de microhydrodynamique, 2001.

[64] E. GUAZZELLI. Cours de rhéologie des fluides complexes, 2001.

[65] E. GUAZZELLI, J.F. MORRIS. A Physical Introduction to Suspension Dynamics. Cambridge University Press, 2012.

[66] I. GOLDHIRSCH. Stress, stress asymmetry and couple stress : from discrete particles to continuous fields. Granular Matter 12 :239-252, 2010.

[67] T. HATANO. Power-law friction in closely-packed granular materials. Physical Review E 75, 060301, 2007.

[68] C. HEUSSINGER. Shear-thickening in granular suspensions : Inter-particle friction and dynamically correlated clusters. Physical Review E 88, 050201, 2013.

[69] H. HERTZ, Über die Berührung fester elastischer Körper. Journal für die reine und angewandte Mathematik 92, 1882.

[70] I.D. HOWELLS. Drag due to the motion of a Newtonian fluid through a sparse random array of small fixed rigid objects. Journal of Fluid Mechanics 64, 449-475, 1974.

[71] H.H. HU. Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. Int. J. Multiphase Flow, 22(2) :335-352, 1996.

[72] H.H. HU, D.D. JOSEPH, M.J. CROCHET. Direct simulation of fluid particle motion. Theoret. Comput. Fluid Dynamics, 3 :285-306, 1992.

[73] N. HUANG, D. BONN. Viscosity of a dense suspension in Couette flow. Journal of Fluid Mechanics, 590, 497-507, 2007.

[74] J.H. IRVING, J.G. KIRKWOOD. The statistical mechanical theory of transport properties IV : The equations of hydrodynamics. Journal of Chemical Physics 18, 817-829 (1950).

[75] D.J. JEFFREY, Y. ONISHI. Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow. Journal of Fluid Mechanics 139, 261-290, 1984.

[76] D.J. JEFFREY. The calculation of the low reynolds number resistance functions for two unequal spheres. Physics of Fluids A : Fluid Dynamics 4, 16-29, 1992.

[77] A.A. JOHNSON, T.E. TEZDUYAR. Simulation of multiple spheres falling in a liquid-filled tube. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 134 :351-373, 1996.

[78] P. JOP, Y. FORTERRE, O. POULIQUEN. A constitutive law for dense granular flows. Nature 441, 727-730, 2006.

[79] T. KAWASAKI, D. COSLOVICH, A. IKEDA, L. BERTHIER. Diverging viscosity and soft granular rheology in non-Brownian suspensions. submitted.

[80] K. KHADRA, P. ANGOT, S. PARNEIX, J-P. CALTAGIRONE. Fictitous domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations. Int. J. Numer. Meth. Fluids, 34(8) :651-684, 2000.

[81] S. KHAMSEH. Rheophysics of granular materials with an intersticial fluid : A numerical simulation study. Thèse de doctorat à l'Université Paris-Est, 2014.

[82] S. KIM, S.J. KARRILA. Microhydrodynamics : Principles and Selected Applications. Dover Publications, 2005.

[83] S. KIM, R.T. MIFFLIN. The resistance and mobility functions of two equal spheres in low-Reynolds-number flow. Physics of Fluids 28, 2033, 1985.

[84] I.M. KRIEGER, T.J. DOUGHERTY. A mechanism for non Newtonian flow in suspensions of rigid spheres. Transactions of the Society of Rheology 3, 137-152, 1959.

[85] I.M. KRIEGER. A dimensional approach to colloid rheology. Transaction of the Society of Rheology, 7 :101-9, 1963.

[86] A.J.C. LADD. Numerical simulation of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part I. Theoretical foundation. J. Fluid Mech. 271, 285, 1994.

[87] A.J.C. LADD. Numerical simulation of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part II. Numerical results. J. Fluid Mech. 271, 311, 1994b.

[88] A.J.C. LADD. R. VERBERG. Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions. J. Stat. Phys. 104, 1191, 2001.

[89] A.W. LEES, S.F. EDWARDS. The computer study of transport processes under extreme conditions. Journal of Physics C : Solid State Physics 5, 1921-1929, 1972.

[90] A. LEFEBVRE. Modélisation numérique d'écoulements fluide/particules. Prise en compte des forces de lubrification. Thèse de doctorat à l'université Paris XI, 2007.

[91] A. LEFEBVRE. Numerical simulation of gluey particles. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis 43, 53-80, 2009.

[92] A. LEFEBVRE, B. MAURY. Apparent viscosity of a mixture of a Newtonian fluid and interacting particles. Comptes Rendus Mécanique 333(12), 923-933, 2005.

[93] A. LEMAÎTRE, J-N. ROUX, F. CHEVOIR. What do dry granular flows tell us about dense non-Brownian suspension rheology ? Rheologica Acta, 48 :925-942 ; 2009.

[94] R. LESPIAT, S. COHEN-ADDAD, R. HÖHLER. Jamming and Flow of Random-Close-Packed Spherical Bubbles : An Analogy with Granular Materials. Physical Review Letters 106, 148302, 2011.

[95] S. LUDING. About contact force-laws for cohesive, frictional materials in 2d and 3d. In P. WALZEL, S. LINZ, C. KRÜLLE, R. GROCHOWSKI, Behaviour of granular media, pages 137-147, Shaker Verlag, band 9, Schriftenreihe Mechanische Verfahrenstechnik, ISBN-3-8322-5524-9, 2006.

[96] S. LUDING. Cohesive, frictional powders : contact models for tension. Granular Matter, 10 :235-246, 2008.

[97] T.S. LUNDGREN. Slow flow through stationary random beds and suspensions of spheres. Journal of Fluid Mechanics 51, 2, 273-299, 1971.

[98] R. MARI, R. SETO, J.F. MORRIS, M.M.DENN. Shear thickening, frictionless and frictional rheologies in non Brownian suspensions. Journal of Rheology, 58, 1693, 2014.

[99] S.H. MARON, P.E. PIERCE. Application of ree-eyring generalized flow theory to suspensions of spherical particles. Journal of Colloid Science, 11, 80-95, 1956.

[100] B. MAURY. Direct simulation of 2D fluid-particle flows in biperiodic domains. J. Comp. Phys., 156 :325-351, 1999.

[101] B. MAURY. A gluey particle model. ESAIM : Proceedings, Vol. 18, 133-142, 2007.

[102] M. MAXEY, B. PATEL. Localized force representations for particles sedimenting in stokes flow. Journal of Multiphase Flow 27(9), 1603-1626, 2001.

[103] J.R. MELROSE, R.C. BALL. Continuous shear-thickening transitions in model concentrate colloids - The role of interparticle forces. Journal of Rheology, 48, 937, 2004.

[104] B. METZGER, P. PHAM, J. BUTLER. Irreversibility and chaos : Role of lubrication interactions in sheared suspensions. Physical Review E 87(5), 052304.

[105] P. MILLS, P. SNABRE. Apparent viscosity and particle pressure of a concentrated suspension of non-Brownian hard spheres near the jamming transition. The European Physical Journal E, 30, 3, 309-316, 2009.

[106] J.F. MORRIS. A review of microstructure in concentrated suspensions and its implications for rheology and bulk flow. Rheologica Acta, 48(8), 909-923, 2009.

[107] J.F. MORRIS, B. KATYAL. Microstructure from simulated Brownian suspension flow at large shear rate. Physics of Fluids, 14 :1920, 2002.

[108] N.Q. NGUYEN. A.J.C. LADD. Lubrication corrections for lattice-Boltzmann simulations of particle suspensions. Phys. Rev. E 66,046708, 2002.

[109] C.S. O'HERN, S.A. LANGER, A.J. LIU, S.R. NAGEL. Random packings of frictionless particles. Physical Review Letters 88, 075507, 2002.

[110] G. OVARLEZ, F. BERTRAND, S. RODTS. Local determination of the constitutive law of a dense suspension of noncolloidal particles through magnetic resonance imaging. Journal of Rheology, 50, 259, 2006.

[111] N.A. PATANKAR, P. SINGH, D.D. JOSEPH, R. GLOWINSKI, T-W PAN. A new formulation for the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. Int. J. Multiphase Flow, 26 :1509-152, 2000.

[112] C. PESKIN. Numerical Analysis of blood flow in the heart. Journal of Computational Physics 25(3), 220-252, 1977.

[113] P-E. PEYNEAU, J-N. ROUX. Frictionless bead packs have macroscopique friction but no dilatancy. Physical Review E 78, 011307, 2008.

[114] P-E. PEYNEAU. Étude du comportement et du compactage de pâtes granulaires par simulation numérique discrète. Thèse de doctorat à l'École Nationale des Ponts et Chaussées, 2009.

[115] O. REYNOLDS. On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion. Philosophical Transactions of the Royal Society of London 86, 123-164, 1895.

[116] P. ROGNON, C. GAY. Soft Dynamics simulation : 1 - Normal approach of deformable particles in a viscous fluid. The European Physical Journal E 27, 253-260, 2008.

[117] P. ROGNON, C. GAY. Soft Dynamics simulation : 2 - Elastic spheres undergoing a T1 process in a viscous fluid. The European Physical Journal E 30, 291-301, 2009.

[118] P. ROGNON, I. EINAV, C. GAY. Flowing resistance and dilatancy of dense suspensions : lubrication and repulsion. Journal of Fluid Mechanics 689, 75-96, 2011.

[119] G. SCOTT, D. KILGOUR. The density of random close packing of spheres. Journal of Physics D : Applied Physics 2, 863, 1969.

[120] A. SIEROU, J.F. BRADY. Accelerated Stokesian dynamics simulations. Journal of Fluid Mechanics 448, 115-146, 2001.

[121] A. SIEROU, J.F. BRADY. Rheology and microstructure in concentrated noncolloidal suspensions. Journal of Rheology 46, 1031, 2002.

[122] A. SINGH, P.R. NOTT. Normal stresses and microstructure in bounded sheared suspensions via Stokesian Dynamics simulations. Journal of Fluid Mechanics, 412, 279-301, 2000.

[123] A. SINGH, P.R. NOTT. Experimental measurements of the normal stresses in sheared stokesian suspensions. Journal of Fluid Mechanics, 490, 293-320, 2003.

[124] P. SINGH, T.I. HESLA, D.D. JOSEPH. Distributed Lagrange multiplier method for particulate flows with collisions. International Journal of Multiphase Flow 29(3), 495-509, 2003.

[125] J.J. STICKEL, R.L. POWELL, Fluid mechanics and rheology of dense suspensions. Annual Review of Fluid Mechanics 37, 129-149, 2005.

[126] S. TEITEL. Lecture 1 : Introduction to granular materials.

[127] S. TORQUATO, T.M. TRUSKETT, P.G. DEBENEDETTI. Is random close packing of spheres well defined ? Physical Review Letters 84(10) : 2064-7, 2000.

[128] M. TRULSSON, B. ANDREOTTI, P. CLAUDIN. Transition from viscous to inertial regime in dense suspensions. Physical Review Letters 109, 118305, 2012.

[129] N. VERDON, A. LEFEBVRE-LEPOT, L. LOBRY, P. LAURE. Contact problems for particles in shear flow. ECJM - 19/2010. Fluid structure interaction, 2010.

[130] L. VERLET. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. Physical Review 159, 11, 98-103, 1967.

[131] A. WACHS. A DEM-DLM/FD method for direct numerical simulation of particulate flows : Sedimentation of polygonal isometric particles in a Newtonian fluid with collisions. Computers and Fluids 38(8), 1608-1628, 2009.

[132] H.J. WILSON. An analytic form for the pair distribution function and rheology of a dilute suspension of rough spheres in plane strain flow. Journal of Fluid Mechanics 534, 97-114, 2005.

[133] K. YEO, M. MAXEY. Dynamics of concentrated suspensions of non colloidal particles in couette flow. Journal of Fluid Mechanics 649(1), 205-231, 2010.

[134] Simulation of concentrated suspensions using the force-coupling method. Journal of Computational Physics. 229(6), 2401-2421, 2010.

[135] Z. YU, A. WACHS, Y. PEYSSON. Numerical simulation of particle sedimentation in shear-thinning fluids with a fictitious domain method. J. Non Newtonian Fluid Mech., 136 :126-39, 2006.

[136] I.E. ZARRAGA, D.A. HILL, D.T. LEIGHTON Jr. The characterization of the total stress of concentrated suspensions of noncolloidal spheres in Newtonian fluids. Journal of Rheology 44, 185-220, 2000.

[137] I.E. ZARRAGA, D.T. LEIGHTON Jr. Normal stress and diffusion in a dilute suspension of hard spheres undergoing simple shear. Physics of fluids 13, 565, 2001.

[138] W. ZHENG, Y. SHI, N. XU. Signatures of shear thinning-thickening transition in dense athermal shear flows. submitted.