

Modélisation microscopique d'une pâte granulaire

François Durand
sous la direction du Dr. Lydéric Bocquet

Stage de recherche de la deuxième année du MIP
effectué du 14 janvier au 17 juillet 2002
au Laboratoire de Physique de l'ENS Lyon
46 allée d'Italie, 69364 Lyon cedex 07
UMR CNRS n° 5672

Résumé

Nous étudions une pâte granulaire formée de billes identiques en suspension dans un fluide, à une densité proche de la compaction aléatoire maximale. Nous développons une approche hydrodynamique démontrée entièrement à partir d'hypothèses microscopiques, et trouvons ainsi la dépendance des coefficients du milieu par rapport à la densité. Puis nous appliquons la théorie obtenue à une expérience classique, la cellule de Couette, et vérifions la validité de nos résultats par une simulation numérique.

Table des matières

1	Équations fluides	5
1.1	Préliminaires	5
1.1.1	Équation de Liouville	5
1.1.2	Équation de transport générique	6
1.2	Équation de continuité	6
1.3	Transport de l'impulsion	7
1.3.1	Terme cinétique	8
1.3.2	Terme de champ	8
1.3.3	Terme d'interaction	8
1.3.4	Synthèse : équation de l'impulsion	9
1.4	Transport de la pression cinétique	9
1.4.1	Terme de dépendance explicite en temps	10
1.4.2	Terme cinétique	11
1.4.3	Terme de champ	11
1.4.4	Terme d'interaction	12
1.4.5	Synthèse : équation de la pression	12
1.4.6	Remarque : interprétation énergétique de la pression	13
2	Grandeurs fluides exprimées <i>via</i> les fonctions à n points	14
2.1	Grandeurs cinétiques	14
2.2	Grandeurs de champ	15
2.3	Grandeurs liées aux interactions	15
2.3.1	Pression d'interaction	15
2.3.2	Source de pression	16
3	Grandeurs de champ	17
3.1	Force de champ moyennée sur les vitesses	17
3.2	Source de pression	18
4	Interactions indépendantes des vitesses	19
4.1	Pression d'interaction	19
4.1.1	Calculs préliminaires	20
4.1.2	Terme d'ordre zéro en nabla	20
4.1.3	Terme d'ordre un en nabla	20
4.1.4	Pression d'interaction en fonction de la densité	20
4.2	Source de pression	21
5	Forces dissipatives	23

5.1	Développement de la pression de lubrification	23
5.1.1	Développement de la pression à l'ordre un en ∇	24
5.1.2	Viscosité en fonction de la densité	24
5.2	Perte de pression par dissipation	25
5.2.1	Terme d'ordre zéro	25
5.2.2	Terme d'ordre deux	26
5.2.3	Dépendance en densité	26
6	Application à une cellule de Couette	27
6.1	Préliminaires	27
6.1.1	Inconnues et symétries du système	27
6.1.2	Tenseurs dus aux interactions	28
6.2	Équations du système	28
6.2.1	Équations fluides du système : cas général	28
6.2.2	Équations du système à l'équilibre	28
6.2.3	Équations de stabilité	29
6.3	Pâtes : pas de pression d'interaction	29
6.3.1	Pâte de température granulaire non nulle	29
6.3.2	Pâte de température granulaire nulle	30
6.4	Mousses : force d'interaction répulsive	31
6.4.1	Mousse de température granulaire non nulle	31
6.4.2	Mousse de température granulaire nulle : cas linéaire	31
6.5	Synthèse des résultats théoriques sur la cellule de Couette	32
7	Simulation numérique	33
7.1	Principe de la simulation	33
7.1.1	Équations d'évolution discrètes	33
7.1.2	Système étudié	34
7.1.3	Détermination des plus proches voisins	34
7.1.4	Modélisation des parois	34
7.1.5	Mesure des grandeurs fluides	35
7.2	Résultats de la simulation	35
7.2.1	Configuration et polydispersité	35
7.2.2	Profil de densité	35
7.2.3	Profil de vitesse	36
7.2.4	Profil de pression cinétique	37
A	Source de pression et flux de chaleur : rôle des interactions	40
A.1	Terme de volume : source de pression	40
A.2	Terme de surface : flux de chaleur	41
B	Calcul de deux intégrales tensorielles	42
B.1	Un tenseur d'ordre deux	42
B.2	Un tenseur d'ordre quatre	42
C	Programme utilisé pour la simulation	44
D	Bibliographie	59

Introduction

Depuis quelques années, l'étude des systèmes granulaires, aussi bien théorique qu'expérimentale, s'est considérablement développée. Ces systèmes présentent de nombreuses applications technologiques, de la pharmacie à l'industrie cosmétique en passant par le bâtiment.

Mais ces systèmes présentent surtout un défi théorique majeur. Les particules étant de taille mésoscopique ou macroscopique, elles possèdent des degrés de liberté internes qui permettent la dissipation de l'énergie liée aux modes translationnels macroscopiques.

Au repos, cette dissipation interdit une exploration, même locale, de l'espace des phases : le système est donc susceptible d'être piégé dans un certain nombre de positions métastables, le choix de la position étant lié à l'histoire du système. On peut ainsi considérer que le système est à une température nulle, étant entendu qu'il s'agit d'une température liée au mouvement des grains, la « température granulaire », et non pas de la température usuelle, celle de la matière constituant les grains.

Cependant, sous l'effet de contraintes, le granulaire peut, partiellement ou totalement, être fluidisé. Mais dans ce cas, il est fortement hors-équilibre, ce qui interdit *a priori* d'utiliser une théorie de réponse linéaire.

Description d'une pâte granulaire

La pâte granulaire que nous étudierons est une suspension de particules solides et sphériques, par exemple du polyméthacrylate de méthyle, ou PMMA, dans un liant fluide, souvent de nature organique. La concentration est proche de la compaction aléatoire maximale, ou *Random Close Packing*, notion difficile à définir théoriquement mais qui représente, empiriquement, la concentration maximale du système sans cristallisation. Macroscopiquement, le système a l'aspect d'une pâte qui, sous contrainte, peut être l'objet d'un écoulement.

Dans le propulseur de la fusée Ariane, par exemple, une pâte semblable est utilisée, mais elle est bidisperse : il y a deux types de grains de tailles très différentes, d'un facteur dix environ. Celle que nous étudierons sera monodisperse ou faiblement monodisperse : nous considérerons que toutes les particules sont identiques.

Nous appliquerons également nos résultats au cas des mousses de densité élevée, ces systèmes présentant certains points communs avec les pâtes granulaires.

Résultats expérimentaux : expérience de Couette

Expérimentalement, on constate qu'une telle pâte a un comportement très différent des fluides newtoniens. Placée dans une cellule de Couette, elle présente un profil de vitesse non linéaire. Au centre, la densité est forte et le milieu est presque solidifié ; au voisinage des parois, on observe des bandes de cisaillement, la vitesse décroissant rapidement quand on s'éloigne de la paroi.

Projet : Approche hydrodynamique fondée sur des hypothèses microscopiques

Nous avons choisi d'adopter une approche hydrodynamique, mais en prenant pour point de départ les propriétés microscopiques du système. Dans ce but, nous allons utiliser un formalisme qui permet de faire le lien entre les lois d'interaction entre particules et les grandeurs fluides du système.

Les équations fluides devront prendre en compte les variations de la quantité de mouvement, mais aussi celles de l'énergie, puisque le système est dissipatif. Pour cela, nous partirons d'un calcul, aussi général que possible, qui nous permettra d'écrire les équations de transport sans approximation. Ensuite, nous adopterons des hypothèses de travail pour évaluer les différents termes apparaissant dans ces équations.

Il est à noter qu'à l'heure actuelle, il n'existe ni phénoménologie ni description théorique ayant tenté de modéliser ces systèmes pâteux à partir de modèle « moléculaire », c'est-à-dire à l'échelle des particules. On ne s'étonnera donc pas si certaines hypothèses sont très approximatives : il s'agit essentiellement de poser les bases d'une telle approche.

Nous appliqueront la théorie hydrodynamique obtenue au cas de la cellule de Couette, puis nous utiliserons une méthode de simulation numérique pour vérifier la validité des résultats théoriques obtenus.

Chapitre 1

Équations fluides

Dans ce chapitre, nous partirons d'un modèle microscopique du milieu et développerons un formalisme qui nous amènera à des lois macroscopiques. Nous obtiendrons ainsi des équations de type hydrodynamique, et une première expression des divers tenseurs intervenant dans ces équations.

Soit un système de N particules, évoluant dans un espace à d dimensions, de coordonnées $\vec{\chi}_i(t) \equiv (\vec{\mathbf{x}}_i(t), \vec{\mathbf{v}}_i(t))$. Les points de l'espace des phases à Nd dimensions sont notés $\vec{\varphi} \equiv (\chi_1, \dots, \chi_N) \equiv (\vec{\mathbf{x}}_1, \vec{\mathbf{v}}_1, \dots, \vec{\mathbf{x}}_N, \vec{\mathbf{v}}_N)$.

Nous supposons que chaque particule est soumise à des forces de champ et à des forces d'interaction :

$$\vec{\mathbf{a}}_i(\vec{\varphi}, t) = \vec{\mathbf{g}}_i(\vec{\varphi}, t) + \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij}(\vec{\varphi}, t)$$

où $\vec{\mathbf{a}}_{ij} = -\vec{\mathbf{a}}_{ji}$, ce qui est vrai, en particulier, si les particules sont identiques.

Nous supposons que l'accélération de la particule i due à la particule j ne dépend des indices i et j que par l'intermédiaire des coordonnées des deux particules, et que la force de champ ne dépend de l'indice i que par l'intermédiaire des coordonnées de la particule i . Autrement dit, nous supposons que :

$$\vec{\mathbf{a}}_i(\vec{\varphi}) = \vec{\mathbf{g}}_{\varphi}(\vec{\chi}_i) + \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{\varphi}(\vec{\chi}_i, \vec{\chi}_j)$$

Ceci est vérifié, en particulier, lorsque toutes les particules sont identiques. La dépendance en $\vec{\varphi}$ que nous avons gardé permet de prendre en compte des phénomènes comme l'écrantage de la force d'interaction par des tierces particules, et nous avons sous-entendu la dépendance explicite des forces par rapport au temps pour alléger les notations.

1.1 Préliminaires

L'équation de Liouville, qui régit l'évolution de la densité de présence du système dans l'espace des phases à Nd dimensions, va nous permettre de trouver une équation de transport générique, permettant de prévoir l'évolution de toute grandeur définie à partir des coordonnées des particules.

1.1.1 Équation de Liouville

Définissons la densité de présence dans l'espace des phases :

$$P(\vec{\varphi}, t) \equiv \prod_{i=1}^N \delta(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_i(t)) \delta(\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{v}}_i(t))$$

Cette fonction représente la densité de probabilité de trouver le système au point $\vec{\varphi}$ à l'instant t . Sa donnée est donc équivalente à celle des N trajectoires.

Un calcul direct prouve qu'en tout point $\vec{\varphi}$, l'égalité suivante, dite équation de Liouville, est vérifiée :

$$\partial_t(P) + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial P}{\partial \vec{x}_i} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial \vec{v}_i} \cdot (P \vec{a}_i) = 0$$

Un développement du dernier terme montre que la dérivée convective de P dans l'espace des phases est égale à $-P \sum_{i=1}^N \vec{\nabla}_{v_i} \cdot \vec{a}_i$: s'il y a une dilatation du volume élémentaire au cours du mouvement, la densité de probabilité doit diminuer en conséquence, pour que son intégrale reste constante. Autrement dit, l'équation de Liouville exprime la conservation de la probabilité.

Si nous étudions un ensemble statistique de systèmes et que nous définissons une densité de présence moyenne, nous aurons la même équation. En effet, celle-ci étant linéaire, elle restera inchangée lors du passage à la moyenne.

1.1.2 Équation de transport générique

Soit A une fonction de $\vec{\varphi}, t$ et éventuellement d'autres variables. Posons :

$$\langle A \rangle \equiv \int d\vec{\varphi} A(\vec{\varphi}, t) P(\vec{\varphi}, t)$$

Si P est la densité de présence d'un système fixé, $\langle A \rangle$ est la valeur de A pour ce système à l'instant t : ainsi, si $A(\vec{x}, \vec{\varphi}, t) = \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{x} - \vec{x}_k)$, alors $\langle A \rangle(\vec{x}, t) = \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{x} - \vec{x}_k(t))$, ce qui est une définition de la densité de masse au point \vec{x} . Si plusieurs systèmes sont pris en compte dans la définition de P , alors $\langle A \rangle$ est la moyenne d'ensemble de A .

Pour calculer la dérivée temporelle de $\langle A \rangle$, il suffit de dériver l'intégrande puis de reporter l'équation de Liouville dans le terme faisant intervenir la dérivée de P . Ensuite, une simple mise en forme, par intégrations par parties et expression explicite de l'accélération, conduit à la relation suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t \langle A \rangle &= \left\langle \partial_t A \right\rangle \\ &+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial A}{\partial \vec{x}_i} \right\rangle \\ &+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{g}_\varphi(\vec{\chi}_i) \cdot \frac{\partial A}{\partial \vec{v}_i} \right\rangle \\ &+ \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{a}_\varphi(\vec{\chi}_i, \vec{\chi}_j) \cdot \frac{\partial A}{\partial \vec{v}_i} \right\rangle \end{aligned}$$

Cette relation se lit de la manière suivante : la dérivée totale de $\langle A \rangle$ par rapport au temps est égale à sa dérivée convective dans l'espace des phases. Cette équation de transport générique permet de démontrer toutes les équations fluides que nous dériverons dans la suite de ce chapitre.

1.2 Équation de continuité

Définissons la densité de masse ρ et la densité de particules n par :

$$\rho(\vec{x}, t) \equiv m n(\vec{x}, t) \equiv \left\langle \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{x} - \vec{x}_k) \right\rangle$$

L'équation de transport correspondante est particulièrement facile à obtenir, puisque seul le terme cinétique est non nul :

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho &= \left\langle \partial_t \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \Bigg\} = 0 \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{v}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}_i} \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{g}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \Bigg\} = 0 \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} \sum_{k=1}^N m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \Bigg\} = 0 \\
&= \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{v}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}_i} m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\
&= - \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}} \cdot \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle
\end{aligned}$$

Définissons donc la vitesse moyenne $\vec{\mathbf{u}}$ par :

$$\rho(\vec{\mathbf{x}}, t) \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \equiv \left\langle \sum_{k=1}^N m \vec{\mathbf{v}}_k \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle$$

Nous retrouvons alors l'équation bien connue :

$$\partial_t \rho + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{\mathbf{u}}) = 0$$

dont nous savons qu'elle exprime la conservation de la masse.

1.3 Transport de l'impulsion

En dérivant l'équation de la densité, nous avons naturellement été conduits à définir une nouvelle grandeur, la densité d'impulsion, définie par :

$$\rho(\vec{\mathbf{x}}, t) \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \equiv \left\langle \sum_{k=1}^N m \vec{\mathbf{v}}_k \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle$$

Nous allons à présent déterminer son équation de transport.

Pour cela, utilisons l'équation de transport générique :

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}}) &= \left\langle \partial_t \sum_{k=1}^N m \vec{\mathbf{v}}_k \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \Bigg\} = 0 \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{v}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}_i} m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{g}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle
\end{aligned}$$

L'expression est quelque peu baroque ; examinons donc ses termes un par un.

1.3.1 Terme cinétique

Commençons par le terme purement cinétique :

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_K &= \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{v}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}_i} m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\ &= -\frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}} \cdot \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{\mathbf{v}}_i \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle\end{aligned}$$

Pour exprimer ce terme, introduisons le tenseur pression cinétique :

$$\overline{\overline{\Pi}}_K(\vec{\mathbf{x}}, t) \equiv \left\langle \sum_{k=1}^N m (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle$$

Le développement de cette définition donne facilement :

$$\left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{\mathbf{v}}_i \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle = \rho \vec{\mathbf{u}} \vec{\mathbf{u}} + \overline{\overline{\Pi}}_K$$

Nous pouvons donc mettre le terme cinétique sous la forme suivante :

$$\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_K = -\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{\mathbf{u}} \vec{\mathbf{u}} + \overline{\overline{\Pi}}_K)$$

1.3.2 Terme de champ

Étudions à présent la variation d'impulsion due aux forces de champ :

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_g &= \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{g}}_\varphi(\vec{\chi}_i) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{\mathbf{g}}_\varphi(\vec{\chi}_i) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle\end{aligned}$$

Nous allons définir la grandeur $\vec{\mathbf{G}}$ par :

$$\rho(\vec{\mathbf{x}}, t) \vec{\mathbf{G}}(\vec{\mathbf{x}}, t) \equiv \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{\mathbf{g}}_\varphi(\vec{\chi}_i) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle$$

Comme nous le verrons mieux dans le chapitre suivant, $\vec{\mathbf{G}}$ est une moyenne de la force de champ sur l'ensemble des vitesses.

Et nous obtenons :

$$\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_g = \rho \vec{\mathbf{G}}$$

1.3.3 Terme d'interaction

Nous allons voir qu'il est possible d'exprimer comme la divergence d'une pression le terme dû aux interactions :

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_\cap &= \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} m \vec{\mathbf{v}}_i \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} m \vec{\mathbf{a}}_{ij} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle\end{aligned}$$

Nous symétrisons ce terme en utilisant l'hypothèse d'action-réaction $\vec{\mathbf{a}}_{ij} = -\vec{\mathbf{a}}_{ji}$:

$$\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_\Omega = \frac{1}{2} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij} \left(\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) - \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_j) \right) \right\rangle$$

Puis nous introduisons une divergence dans l'expression par la remarque suivante :

$$\begin{aligned} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) - \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_j) &= - \int_0^1 d\lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \\ &= - \int_0^1 d\lambda (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}} \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \\ &= - \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}} \cdot (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) \int_0^1 d\lambda \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \end{aligned}$$

Ce qui donne, en reportant dans l'expression précédente :

$$\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_\Omega = - \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}} \cdot \frac{1}{2} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) \vec{\mathbf{a}}_{ij} \int_0^1 d\lambda \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \right\rangle$$

Définissons donc la pression d'interaction par :

$$\bar{\bar{\Pi}}_\Omega \equiv \frac{1}{2} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) \vec{\mathbf{a}}_{ij} \int_0^1 d\lambda \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \right\rangle$$

Le terme d'interaction dérive donc bien d'une pression :

$$\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}})_\Omega = - \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{\Pi}}_\Omega$$

1.3.4 Synthèse : équation de l'impulsion

La synthèse des résultats précédents donne l'équation de transport de l'impulsion :

$$\partial_t(\rho \vec{\mathbf{u}}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{\mathbf{u}} \vec{\mathbf{u}}) = - \vec{\nabla} \cdot (\bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{\Pi}}_\Omega) + \rho \vec{\mathbf{G}}$$

Cette équation rend compte du principe fondamental de la dynamique, appliqué à un volume élémentaire de pâte en mouvement. Celui-ci est soumis à des forces de pression d'origine cinétique, à des forces de pression dues aux interactions binaires entre particules, et aux forces de champ en ce point.

Grâce à l'équation de continuité, nous pouvons mettre cette équation sous sa forme usuelle :

$$\boxed{\rho \partial_t \vec{\mathbf{u}} + \rho \vec{\mathbf{u}} \cdot \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}} = - \vec{\nabla} \cdot (\bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{\Pi}}_\Omega) + \rho \vec{\mathbf{G}}}$$

Cette formulation a le mérite de faire apparaître la dérivée convective de la vitesse, et elle est plus simple pour les applications puisque certains facteurs sont « sortis » des opérateurs de dérivation.

1.4 Transport de la pression cinétique

L'équation précédente fait intervenir une nouvelle grandeur cinétique, la pression, qui vaut :

$$\bar{\bar{\Pi}}_K(\vec{\mathbf{x}}, t) \equiv \left\langle \sum_{k=1}^N m (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle$$

Remarquons d'ores et déjà que la demi-trace de ce tenseur n'est autre que l'énergie cinétique interne par unité de volume. Nous penserons donc souvent les équations qui suivent en termes d'énergie, ce qui rendra leur interprétation plus instinctive.

Pour déterminer l'équation de transport de la pression, nous reportons la définition précédente dans l'équation de transport générique :

$$\begin{aligned}
\partial_t \bar{\bar{\Pi}}_K &= \left\langle \partial_t \sum_{k=1}^N m (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{v}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}_i} m (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{\mathbf{g}}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} m (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\
&+ \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{v}}_i} m (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle
\end{aligned}$$

Puis nous étudions un par un les différents termes qui interviennent dans cette expression.

1.4.1 Terme de dépendance explicite en temps

Cette fois-ci, le terme de dépendance explicite par rapport au temps n'est *a priori* pas nul, puisque $\vec{\mathbf{u}}$ dépend de t . Évaluons donc ce terme :

$$\begin{aligned}
(\partial_t \bar{\bar{\Pi}}_K)_t &= \left\langle \partial_t \sum_{k=1}^N m (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \\
&= -\frac{\partial \vec{\mathbf{u}}}{\partial t} \left\langle \sum_{k=1}^N m (\vec{\mathbf{v}}_k - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle - \text{transposé} \\
&= \bar{\bar{0}}
\end{aligned}$$

En fait, il est encore une fois égal à zéro. Nous ne trouverions un terme « temporel » non nul qu'à partir de l'équation de transport suivante, celle du flux de chaleur, mais il ne nous sera pas nécessaire de la dériver.

1.4.2 Terme cinétique

Le deuxième terme de l'équation de la pression représente la variation d'origine cinétique. Il vaut :

$$\begin{aligned}
(\partial_t \bar{\bar{\Pi}}_K)_K &= \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}_i} m (\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle \\
&= - \left\langle \sum_{i=1}^N m (\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \vec{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle \\
&= - \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left((\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right) \right\rangle \\
&\quad + \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{v}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \left((\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle \\
&= - \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \cdot \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{v}_i (\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle \\
&\quad - \left\langle \sum_{i=1}^N m (\vec{v}_i - \vec{u}) \frac{\partial \vec{u}}{\partial \vec{x}} \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle - \text{transposé}
\end{aligned}$$

De même que nous avons défini la densité de masse, l'impulsion et la pression cinétique, nous définissons le tenseur flux de chaleur cinétique par :

$$\bar{\bar{Q}}_K(\vec{x}, t) = \left\langle \sum_{i=1}^N m (\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle$$

Avec cette définition, nous avons :

$$\begin{aligned}
(\partial_t \bar{\bar{\Pi}}_K)_K &= - \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{Q}}_K) \\
&\quad - \bar{\bar{\Pi}}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{u} - (\vec{\nabla} \vec{u})^T \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K
\end{aligned}$$

Dans la première ligne, nous trouvons un terme intervenant dans la dérivée convective de la pression, et un terme de conduction de chaleur. La deuxième ligne représente un échauffement dû aux forces de pression cinétiques.

1.4.3 Terme de champ

Évaluons à présent le terme de champ.

$$\begin{aligned}
(\partial_t \bar{\bar{\Pi}}_K)_g &= \left\langle \sum_{i=1}^N \vec{g}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_i} m (\vec{v}_i - \vec{u}) (\vec{v}_i - \vec{u}) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle \\
&= \left\langle \sum_{i=1}^N m \left(\vec{g}_i (\vec{v}_i - \vec{u}) + (\vec{v}_i - \vec{u}) \vec{g}_i \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle
\end{aligned}$$

Nous allons adopter la notation suivante :

$$\bar{\bar{\Gamma}}_g \equiv \left\langle \sum_{i=1}^N m \left(\vec{g}_i (\vec{v}_i - \vec{u}) + (\vec{v}_i - \vec{u}) \vec{g}_i \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle$$

Nous remarquons dans ce terme le produit d'une force par une vitesse : la version salaire de ce terme représente donc le travail des forces de champ.

1.4.4 Terme d'interaction

De la même façon, le terme d'interaction s'écrit :

$$\bar{\Gamma}_\rho = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} m \left(\vec{a}_{ij} (\vec{v}_i - \vec{u}) + (\vec{v}_i - \vec{u}) \vec{a}_{ij} \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \right\rangle$$

Nous montrons dans l'annexe A que ce terme peut souvent s'exprimer comme la somme d'un terme de conduction thermique et d'un terme de création de pression, mais ce n'est pas toujours judicieux. Nous verrons cela dans les cas particuliers.

1.4.5 Synthèse : équation de la pression

En regroupant les résultats précédents, nous obtenons l'équation suivante :

$$\partial_t \bar{\Pi}_K + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \bar{\Pi}_K) = - \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{Q}}_K - \bar{\Pi}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{u} - (\vec{\nabla} \vec{u})^T \cdot \bar{\Pi}_K + \bar{\Gamma}_\rho + \bar{\Gamma}_g$$

Cette équation est un bilan de pression appliqué à un volume élémentaire en mouvement. Le membre de gauche est la partie purement convective de la variation de pression, tandis que le membre de droite est constitué des termes conductifs et des termes de source ou de perte.

Nous n'avons considéré jusqu'à présent que la pression cinétique « microscopique », définie comme la matrice de variance de la vitesse des particules en \vec{x} . Mais nous pouvons aussi nous intéresser à la pression cinétique dirigée :

$$\bar{\Pi}_{Kdir} \equiv \rho \vec{u} \vec{u}$$

La pression cinétique totale sera alors définie comme la somme des pressions cinétiques microscopique et dirigée :

$$\bar{\Pi}_{Ktot} \equiv \bar{\Pi}_K + \bar{\Pi}_{Kdir} = \left\langle \sum_{k=1}^N m \vec{v}_k \vec{v}_k \delta(\vec{x} - \vec{x}_k) \right\rangle$$

Chez certains auteurs, c'est cette grandeur, et non la pression cinétique microscopique, qu'on désigne par le simple nom de pression cinétique.

En multipliant l'équation de continuité par $\vec{u} \vec{u}$ et l'équation de l'impulsion par \vec{u} à droite et à gauche, nous obtenons trois équations qui, recombinaées, donnent l'équation de transport de la pression dirigée :

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\Pi}_{Kdir} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \bar{\Pi}_{Kdir}) &= - \vec{\nabla} \cdot (\bar{\Pi}_K \vec{u}) - (\vec{\nabla} \cdot (\bar{\Pi}_K \vec{u}))^T \\ &+ \bar{\Pi}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{u} + (\vec{\nabla} \vec{u})^T \cdot \bar{\Pi}_K \\ &- \vec{\nabla} \cdot (\bar{\Pi}_\rho) \vec{u} - \vec{u} \vec{\nabla} \cdot \bar{\Pi}_\rho \\ &+ \rho \vec{G} \vec{u} + \rho \vec{u} \vec{G} \end{aligned}$$

Mise sous cette forme, cette équation montre que le terme d'échauffement dû aux forces de pression cinétique, que nous avons rencontré dans l'équation de la pression microscopique, est en fait un terme d'échange entre la pression dirigée et la pression microscopique ou, si l'on préfère, entre l'énergie cinétique dirigée et l'énergie cinétique interne.

Sommons cette équation et la loi de transport de la pression microscopique. Nous trouvons alors l'équation de transport de la pression totale :

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\Pi}_{Ktot} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{u} \bar{\Pi}_{Ktot}) &= - \vec{\nabla} \cdot \bar{\bar{Q}}_K - \vec{\nabla} \cdot (\bar{\Pi}_K \vec{u}) - (\vec{\nabla} \cdot (\bar{\Pi}_K \vec{u}))^T \\ &+ \bar{\Gamma}_\rho - \vec{\nabla} \cdot (\bar{\Pi}_\rho) \vec{u} - \vec{u} \vec{\nabla} \cdot \bar{\Pi}_\rho \\ &+ \bar{\Gamma}_g + \rho \vec{G} \vec{u} + \rho \vec{u} \vec{G} \end{aligned}$$

La première ligne du second membre ne contient que des termes sous divergence, qui représentent des transferts de pression entre volumes élémentaires voisins. $\bar{\Gamma}_\Omega$ est l'apport de pression microscopique dû aux forces d'interaction. Leur travail macroscopique est exprimé par les autres termes de la deuxième ligne : on multiplie la vitesse par la divergence de la pression, qui est la résultante des forces de pression cinétique. La troisième ligne est similaire à la deuxième, mais pour les forces de champ.

1.4.6 Remarque : interprétation énergétique de la pression

Définissons les grandeurs suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} e_T \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } \bar{\Pi}_K = \left\langle \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} m (\vec{\mathbf{v}}_k - u)^2 \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \\ e_c \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } \bar{\Pi}_{Kdir} = \frac{1}{2} \rho \vec{\mathbf{u}}^2 \\ e \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } \bar{\Pi}_{Ktot} = \left\langle \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} m \vec{\mathbf{v}}_k^2 \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \\ \vec{\mathbf{q}}_K \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } \bar{\mathbf{Q}}_K = \left\langle \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} m (\vec{\mathbf{v}}_k - u) (\vec{\mathbf{v}}_k - u)^2 \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_k) \right\rangle \\ \Gamma_\Omega \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } \bar{\Gamma}_\Omega = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} m \mathbf{a}_{ij} \cdot (\vec{\mathbf{v}}_i - u) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\ \Gamma_g \equiv \frac{1}{2} \text{Tr } \bar{\Gamma}_g = \left\langle \sum_{i=1}^N m \vec{\mathbf{g}}_i \cdot (\vec{\mathbf{v}}_i - u) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \end{array} \right.$$

Il s'agit de l'énergie cinétique interne, de l'énergie cinétique dirigée, de l'énergie cinétique totale, du vecteur flux de chaleur cinétique et de termes de source ou de perte d'énergie.

La demi-trace de chaque équation de transport de la pression donne l'équation de transport d'une énergie :

$$\begin{aligned} \partial_t e_T + \vec{\nabla} \cdot (e_T \vec{\mathbf{u}}) &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{q}}_K - \bar{\Pi}_K : \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}} + \Gamma_\Omega + \Gamma_g \\ \partial_t e_c + \vec{\nabla} \cdot (e_c \vec{\mathbf{u}}) &= -\vec{\nabla} \cdot \left((\bar{\Pi}_K + \bar{\Pi}_\Omega) \cdot \vec{\mathbf{u}} \right) + (\bar{\Pi}_K + \bar{\Pi}_\Omega) : \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}} + \rho \vec{\mathbf{G}} \cdot \vec{\mathbf{u}} \\ \partial_t e + \vec{\nabla} \cdot (e \vec{\mathbf{u}}) &= -\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\mathbf{q}}_K + (\bar{\Pi}_K + \bar{\Pi}_\Omega) \cdot \vec{\mathbf{u}} \right) \\ &\quad + \bar{\Pi}_\Omega : \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}} + \Gamma_\Omega + \rho \vec{\mathbf{G}} \cdot \vec{\mathbf{u}} + \Gamma_g \end{aligned}$$

Notons au passage que l'équation de l'énergie cinétique interne peut être réécrite en utilisant la partie symétrique du gradient de vitesse, puisque le terme lié à la partie antisymétrique est nul.

Dans les systèmes granulaires, on cherche souvent des équations sur e_T , parce que cette grandeur est la température « macroscopique » du système, appelée aussi « température granulaire ». Dans le cas de systèmes non dissipatifs, on s'intéresse plutôt à l'énergie totale, somme de l'énergie cinétique totale et de l'énergie potentielle, qui obéit à une loi de conservation.

Les équations ci-dessus donnent un version plus instinctive, quoiqu'affaiblie, des équations de transport de la pression. Elles sont suffisantes pour boucler le système si le flux de chaleur cinétique peut être exprimé en fonction des autres grandeurs et si, comme pour les fluides newtoniens, la pression cinétique est scalaire ; mais ce ne sera pas le cas pour les pâtes que nous projetons d'étudier.

Chapitre 2

Grandeurs fluides exprimées *via* les fonctions à n points

Dans le chapitre précédent, nous avons dérivé des équations fluides portant sur diverses grandeurs tensorielles, que nous avons définies au fur et à mesure. À présent, nous allons exprimer ces grandeurs sous une forme plus usuelle, en utilisant les fonctions à un et deux points définies par :

$$f(\vec{\chi}) \equiv \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\vec{\chi} - \vec{\chi}_i) \right\rangle$$

$$f^{(2)}(\vec{\chi}, \vec{\chi}') \equiv \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \delta(\vec{\chi} - \vec{\chi}_i) \delta(\vec{\chi}' - \vec{\chi}_j) \right\rangle$$

La fonction à un point f est la densité de particules en $\vec{\chi}$, la fonction à deux points $f^{(2)}$ est la densité de couples de particules en $(\vec{\chi}, \vec{\chi}')$.

2.1 Grandeurs cinétiques

Nous prenons l'exemple de la densité; les autres expressions s'obtiennent exactement de la même façon.

$$\begin{aligned} \rho(\vec{\mathbf{x}}, t) &= \left\langle \sum_{i=1}^N m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^N \int d\vec{\mathbf{v}} m \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \delta(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{v}}_i) \right\rangle \\ &= \int d\vec{\mathbf{v}} m f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \end{aligned}$$

Nous avons ainsi :

$\begin{aligned} \rho &= \int d\vec{\mathbf{v}} m f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \\ \rho \vec{\mathbf{u}} &= \int d\vec{\mathbf{v}} m \vec{\mathbf{v}} f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \\ \overline{\overline{\Pi}}_K &= \int d\vec{\mathbf{v}} m (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \\ \overline{\overline{\overline{Q}}}_K &= \int d\vec{\mathbf{v}} m (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \end{aligned}$

Les grandeurs cinétiques que nous avons définies sont donc les premiers moments de la distribution des vitesses en $\vec{\mathbf{x}}$.

2.2 Grandeurs de champ

Là non plus, il n'y a pas de difficulté majeure. Nous trouvons de la même façon que précédemment :

$$\begin{aligned} \rho \vec{\mathbf{G}} &= \int d\vec{\mathbf{v}} m \overrightarrow{\mathbf{g}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \\ \overline{\Gamma}_g &= \int d\vec{\mathbf{v}} m \left(\overrightarrow{\mathbf{g}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) + (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) \overrightarrow{\mathbf{g}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \right) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \end{aligned}$$

Nous voyons ici, en particulier, que $\vec{\mathbf{G}}$ est une force de champ moyennée sur la distribution des vitesses.

Remarquons toutefois que ces expressions ne restent pas valables, en toute rigueur, quand on passe à l'ensemble statistique : en effet $\vec{\varphi}(t)$ n'est alors plus défini. On peut contourner ce problème en utilisant un champ moyen, mais alors des termes d'écart à la moyenne vont apparaître... On peut alors souvent les faire passer dans le terme d'interaction : ainsi, on sépare souvent les forces électromagnétiques en un terme de champ moyen et un terme de collision binaire, à courte portée.

Nous ne nous appesantirons pas sur ce problème, pour deux raisons. D'une part, la seule force de champ susceptible d'agir sur notre pâte granulaire est, *a priori*, la pesanteur, qui ne dépend pas de l'état global $\vec{\varphi}$ du système. D'autre part, dans le cas précis de notre cellule de Couette, nous supposons qu'il n'y a aucune force de champ : le plan de l'expérience est horizontal.

2.3 Grandeurs liées aux interactions

2.3.1 Pression d'interaction

Rappelons que la pression d'interaction est définie par :

$$\overline{\Pi}_\Omega \equiv \frac{1}{2} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) \vec{\mathbf{a}}_{ij} \int_0^1 d\lambda \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \right\rangle$$

Pour pouvoir faire sortir l'accélération du crochet, nous introduisons des fonctions delta et les intégrales correspondantes :

$$\begin{aligned} \overline{\Pi}_\Omega &= \frac{1}{2} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \int d\vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' \delta(\vec{\mathbf{R}} - (\vec{\mathbf{x}}_j - \vec{\mathbf{x}}_i)) \delta(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{v}}_i) \delta(\vec{\mathbf{v}}' - \vec{\mathbf{v}}_j) \right. \\ &\quad \left. (-\vec{\mathbf{R}}) \vec{\mathbf{a}}_\varphi(\vec{\chi}_i, \vec{\chi}_j) \int_0^1 d\lambda \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} \vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' \int_0^1 d\lambda \overrightarrow{\mathbf{a}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}} - \lambda\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}} + (1-\lambda)\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \\ &\quad \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \delta(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{v}}_i) \delta(\vec{\mathbf{v}}' - \vec{\mathbf{v}}_j) \delta(\vec{\mathbf{R}} - (\vec{\mathbf{x}}_j - \vec{\mathbf{x}}_i)) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \right\rangle \end{aligned}$$

La résolution du système à deux variables $\vec{\mathbf{x}}_i$ et $\vec{\mathbf{x}}_j$ défini par les deux dernières fonctions delta conduit à l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \overline{\Pi}_\Omega &= -\frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} \vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' \int_0^1 d\lambda \overrightarrow{\mathbf{a}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}} - \lambda\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}} + (1-\lambda)\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \\ &\quad \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \delta(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{v}}_i) \delta(\vec{\mathbf{v}}' - \vec{\mathbf{v}}_j) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \lambda\vec{\mathbf{R}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \delta(\vec{\mathbf{x}} + (1-\lambda)\vec{\mathbf{R}} - \vec{\mathbf{x}}_j) \right\rangle \end{aligned}$$

Nous venons donc de démontrer cette formule pour la pression d'interaction :

$$\bar{\Pi}_\cap = -\frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} \vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' \int_0^1 d\lambda \overrightarrow{\mathbf{a}_{\varphi(t)}}(\vec{\mathbf{x}}-\lambda\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+(1-\lambda)\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') f^{(2)}(\vec{\mathbf{x}}-\lambda\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+(1-\lambda)\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}')$$

Comme pour les grandeurs de champ, cette expression n'est pas valable si, d'une part, on s'intéresse à un ensemble statistique de systèmes et si, d'autre part, la loi d'interaction dépend effectivement de la configuration globale $\vec{\varphi}$. Heureusement, ce ne sera pas le cas des forces que nous utiliserons.

2.3.2 Source de pression

Rappelons que la source (ou perte) de pression due aux interactions est donnée par :

$$\bar{\Gamma}_\cap = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} m \left(\overrightarrow{\mathbf{a}_{ij}}(\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) + (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) \overrightarrow{\mathbf{a}_{ij}} \right) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle$$

La méthode est la même que dans le paragraphe précédent : nous introduisons les mêmes fonctions delta et les intégrales correspondantes. Le calcul est cependant un peu moins lourd, et donne finalement :

$$\bar{\Gamma}_\cap = \int d\vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' m \overrightarrow{\mathbf{a}_{\varphi(t)}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') (\vec{\mathbf{v}}-\vec{\mathbf{u}}) f^{(2)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') + \text{transposé}$$

Nous montrons dans l'annexe A qu'on peut aussi exprimer ce terme différemment, pour faire apparaître un terme de conduction thermique et un « vrai » terme de source. Mais ce n'est pas toujours pertinent, comme nous le verrons dans le cas des forces dissipatives.

Chapitre 3

Grandeurs de champ

Dans le premier chapitre, nous avons dérivé trois équations hydrodynamiques pour caractériser le comportement du milieu. La première régit le transport de la densité et fait intervenir l'impulsion, la deuxième régit le transport de l'impulsion et fait intervenir la pression, la troisième régit le transport de la pression et fait intervenir le flux de chaleur... Nous pourrions ainsi dériver une infinité d'équations, chacune régissant le transport d'un moment de la distribution de vitesse, et faisant intervenir le moment d'ordre supérieur.

Quel que soit l'ordre auquel nous nous arrêterions, nous aurions donc toujours une inconnue de plus que d'équations : le système ne serait pas « bouclé ». Pour résoudre ce problème, nous supposons que le moment d'ordre trois, le flux de chaleur cinétique Q_K , est nul ou négligeable. Nous pouvons par exemple supposer que la distribution de vitesse est une gaussienne locale : c'est une approximation d'ordre un de la distribution des vitesses. Dans une théorie plus poussée, il faudrait ajouter des corrections, de type Chapman-Enskog par exemple ; mais l'hypothèse de gaussienne locale est suffisante dans le cadre d'une première approche.

Il nous reste alors à exprimer les différents tenseurs intervenant dans les équations fluides en fonctions des inconnues du système, c'est-à-dire la densité, la vitesse, la pression cinétique et leurs dérivées. C'est l'objet de ce chapitre et des deux suivants. En premier lieu, nous nous concentrons sur les grandeurs liées à l'accélération de champ.

3.1 Force de champ moyennée sur les vitesses

Rappelons l'expression de la force de champ moyennée sur les vitesses :

$$\rho \vec{\mathbf{G}} = \int d\vec{\mathbf{v}} m \overline{\mathbf{g}_{\varphi(t)}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}})$$

Si $\vec{\mathbf{g}}$ est indépendante de $\vec{\mathbf{v}}$, elle sort de l'intégrale et la relation se réduit à $\rho \vec{\mathbf{G}} = \rho \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}})$. Sinon, nous pouvons développer $\vec{\mathbf{g}}$ en série de Taylor autour de $\vec{\mathbf{u}}$:

$$\vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) = \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}) + (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) \cdot \frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} + \frac{1}{2} (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}})(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) : \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \vec{\mathbf{g}} + \dots$$

À l'ordre zéro, nous retrouvons le cas où $\vec{\mathbf{g}}$ est indépendante de la vitesse :

$$\begin{aligned} \rho \vec{\mathbf{G}}_0 &= \int d\vec{\mathbf{v}} m \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \\ &= \rho \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}) \end{aligned}$$

Le terme d'ordre un est nul :

$$\begin{aligned} \rho \vec{\mathbf{G}}_1 &= \left(\int d\vec{\mathbf{v}} m (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \right) \cdot \frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \\ &= \vec{\mathbf{0}} \end{aligned}$$

Le premier terme correctif correspond par conséquent à l'ordre deux :

$$\begin{aligned}\rho \vec{\mathbf{G}}_2 &= \frac{1}{2} \left(\int d\vec{\mathbf{v}} m (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \right) : \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \vec{\mathbf{g}} \\ &= \frac{1}{2} \bar{\Pi}_K : \frac{\partial^2}{\partial \vec{\mathbf{u}} \partial \vec{\mathbf{u}}} \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}})\end{aligned}$$

Nous pourrions d'ailleurs facilement écrire une forme généralisée de cette expression pour le terme d'ordre quelconque, en utilisant les moments successifs de la distribution de vitesse et les dérivées successives de $\vec{\mathbf{g}}$.

Mais nous nous contenterons amplement de l'ordre deux :

$$\boxed{\rho \vec{\mathbf{G}} = \rho \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}) + \frac{1}{2} \bar{\Pi}_K : \frac{\partial^2}{\partial \vec{\mathbf{u}} \partial \vec{\mathbf{u}}} \vec{\mathbf{g}}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{u}}) + \dots}$$

En effet, si $\vec{\mathbf{g}}$ est au plus quadratique en $\vec{\mathbf{u}}$, l'expression reste exacte sans les points de suspension, et c'est le cas des champs les plus usuels : pesanteur, champ électrique et champ magnétique.

Par exemple, si $\vec{\mathbf{g}} = \frac{q}{m} \vec{\mathbf{v}} \wedge \vec{\mathbf{B}}$, on trouve $\vec{\mathbf{G}} = \frac{q}{m} \vec{\mathbf{u}} \wedge \vec{\mathbf{B}}$: nous retrouvons les résultats connus de magnétohydrodynamique.

3.2 Source de pression

Cherchons à présent à évaluer la source de pression due aux forces de champ. Elle est donnée par :

$$\boxed{\bar{\Gamma}_g = \int d\vec{\mathbf{v}} m \left(\overrightarrow{\mathbf{g}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) + (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) \overrightarrow{\mathbf{g}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \right) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}})}$$

Là encore, nous pouvons développer $\vec{\mathbf{g}}$ en série de Taylor autour de $\vec{\mathbf{u}}$. Le terme d'ordre zéro étant nul, nous calculons celui d'ordre un :

$$\begin{aligned}\bar{\Gamma}_{g1} &= \left(\int d\vec{\mathbf{v}} m (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) (\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \right) \cdot \frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} + \text{transposé} \\ &= \bar{\Pi}_K \cdot \frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} + \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \right)^T \cdot \bar{\Pi}_K\end{aligned}$$

Dans les cas les plus courants, les ordres zéro et un suffisent. Nous n'irons donc pas plus loin :

$$\boxed{\bar{\Gamma}_g = \bar{\Pi}_K \cdot \frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} + \left(\frac{\partial \vec{\mathbf{g}}}{\partial \vec{\mathbf{u}}} \right)^T \cdot \bar{\Pi}_K + \dots}$$

Pour la pesanteur et le champ électrique, la création de pression est donc nulle. Pour le champ magnétique, on trouve, grâce à l'expression précédente ou par un calcul direct :

$$\bar{\Gamma}_g = \frac{q}{m} \left(\bar{\Pi}_K \wedge \vec{\mathbf{B}} - \vec{\mathbf{B}} \wedge \bar{\Pi}_K \right)$$

Chapitre 4

Interactions indépendantes des vitesses

Dans ce chapitre et le suivant, nous évaluerons les tenseurs liés aux forces d'interaction : pression d'interaction et source de pression due aux interactions. Par exemple, nous trouverons une expression de la pression de dissipation en fonction du tenseur gradient de vitesse, c'est-à-dire que nous déterminerons les viscosités statique et dynamique du milieu.

Les expressions que nous trouverons mettront en jeu les inconnues cinétiques du système et leurs gradients. Nous arrêterons notre développement des équations fluides aux dérivées secondes, ce qui nous suffira pour comprendre l'essentiel de la physique du milieu.

Nous ferons l'approximation qu'il existe une fonction de corrélation g telle que :

$$f^{(2)}(\vec{x}, \vec{v}, \vec{x} + \vec{R}, \vec{v}') = g(\vec{x}, R) f(\vec{x}, \vec{v}) f(\vec{x} + \vec{R}, \vec{v}')$$

Si cette égalité était rigoureusement vraie, alors la fonction g ne saurait dépendre de \vec{x} , comme on peut le démontrer aisément. Mais cette approximation ne sera utilisée que sur des distances microscopiques, c'est pourquoi nous autorisons pour g des variations macroscopiques.

Dans le présent chapitre, nous nous concentrerons sur le cas de forces indépendantes des vitesses. Nous supposerons de plus qu'elles ne dépendent pas de l'état global $\vec{\varphi}$ du système. De ce fait, par symétrie galiléenne, elles seront nécessairement de la forme :

$$\vec{a}(\vec{x}, \vec{x}') = -a(R) \vec{e} \quad \text{où} \quad \vec{x}' - \vec{x} = R \vec{e}$$

Le signe moins n'est là que pour rendre compte du fait que, généralement, ces forces sont répulsives.

Désormais, le terme de pression d'interaction sera réservé à ces forces indépendantes de la vitesse ; pour les forces dissipatives que nous étudierons ensuite, nous utiliserons le terme de pression de dissipation, ou pression de lubrification.

4.1 Pression d'interaction

Rappelons l'expression de la pression d'interaction :

$$\begin{aligned} \bar{\Pi}_\Pi = & -\frac{1}{2} m \int d\vec{R} \vec{R} d\vec{v} d\vec{v}' \int_0^1 d\lambda \overrightarrow{a_{\varphi(t)}}(\vec{x}-\lambda\vec{R}, \vec{v}, \vec{x}+(1-\lambda)\vec{R}, \vec{v}') \\ & f^{(2)}(\vec{x}-\lambda\vec{R}, \vec{v}, \vec{x}+(1-\lambda)\vec{R}, \vec{v}') \end{aligned}$$

Puisque nous voulons obtenir les équations fluides à l'ordre deux en gradient, et que la pression d'interaction n'apparaît que sous forme dérivée dans ces équations, il suffit de développer la pression à l'ordre un par rapport au nabla.

4.1.1 Calculs préliminaires

En reportant dans la définition précédente la forme de l'interaction et l'hypothèse de corrélation, nous obtenons, après réordonnement des facteurs :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Pi}}_{\rho} = & \frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} R a(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \int d\lambda g(\vec{\mathbf{x}}-\lambda\vec{\mathbf{R}}, R) \\ & \int d\vec{\mathbf{v}} f(\vec{\mathbf{x}}-\lambda\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}) \int d\vec{\mathbf{v}}' f(\vec{\mathbf{x}}+(1-\lambda)\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \end{aligned}$$

Puis nous évaluons les intégrales sur les vitesses, ce qui donne :

$$\bar{\bar{\Pi}}_{\rho} = \frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} R a(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \int d\lambda g(\vec{\mathbf{x}}-\lambda\vec{\mathbf{R}}, R) n(\vec{\mathbf{x}}-\lambda\vec{\mathbf{R}}) n(\vec{\mathbf{x}}+(1-\lambda)\vec{\mathbf{R}})$$

Nous développons le dernier intégrande, en négligeant les termes d'ordre deux. Après intégration sur lambda, l'expression devient alors :

$$\bar{\bar{\Pi}}_{\rho} = \frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} R a(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \left(g(\vec{\mathbf{x}}, R) n(\vec{\mathbf{x}})^2 - \frac{1}{2} \vec{\mathbf{R}} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{\mathbf{x}}}(\vec{\mathbf{x}}, R) n(\vec{\mathbf{x}})^2 \right)$$

Les termes liés au gradient de n se sont annulés au cours de l'intégration sur lambda.

4.1.2 Terme d'ordre zéro en nabla

Calculons tout d'abord le terme d'ordre zéro :

$$\bar{\bar{\Pi}}_{\rho 0} = \frac{1}{2} m n^2 \int d\vec{\mathbf{R}} R a(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}}$$

L'intégrale qui nous reste à calculer est un tenseur d'ordre 2 isotrope donc proportionnel à l'identité. Il suffit par conséquent de calculer un terme diagonal de ce tenseur, ce qui est fait dans l'annexe B. Ce calcul effectué, nous trouvons :

$$\bar{\bar{\Pi}}_{\rho 0} = \frac{m n^2 [Rag]}{2d} \bar{\mathbf{I}}$$

où le crochet désigne l'intégrale sur $\vec{\mathbf{R}}$.

4.1.3 Terme d'ordre un en nabla

Le terme d'ordre 1 donne une intégrale du type :

$$\bar{\bar{\Pi}}_{\rho 1} = \int d\vec{\mathbf{R}} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, R) \cdot \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}}$$

Soit, en introduisant l'angle solide Ω dans l'espace à d dimensions :

$$\bar{\bar{\Pi}}_{\rho 1} = \int dR R^{d-1} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{x}}, R) \cdot \int d\Omega \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}}$$

La seconde intégrale est un tenseur d'ordre 3 isotrope, complètement symétrique, et par conséquent nul. Le terme d'ordre un de la pression d'interaction est donc nul lui aussi.

4.1.4 Pression d'interaction en fonction de la densité

À l'ordre désiré, nous avons donc :

$$\boxed{\bar{\bar{\Pi}}_{\rho} = \frac{m n^2 [Rag]}{2d} \bar{\mathbf{I}}}$$

Remarquons que la fonction de corrélation g dépend essentiellement de la densité de particules. Il en est donc de même pour l'intégrale représentée par le crochet, et donc de la pression d'interaction. Nous noterons donc :

$$\bar{\bar{p}}_{\cap} \equiv p_{\cap}(n) \bar{\bar{I}}$$

Pour nous fixer les idées, nous pouvons supposer que les particules qui contribuent le plus à la pression se trouvent à une distance caractéristique R_0 . Nous approximerons donc g par une fonction delta qui, pour des raisons dimensionnelles, sera de la forme suivante :

$$g \propto R_0 \delta(R - R_0)$$

La distance typique R_0 sera liée à la densité de particules par une relation du type :

$$n = A R_0^{-d}$$

Avec cette approximation, nous pouvons calculer facilement le crochet :

$$\begin{aligned} [Rag] &= \int d\vec{\mathbf{R}} R a(R) g(R) \\ &\propto \int dR R^d R_0 a(R) \delta(R - R_0) \int d\Omega \\ &\propto R_0^{d+1} a(R_0) \end{aligned}$$

En reportant ceci dans l'expression de la pression et en exprimant tout en fonction de la densité de particules, nous obtenons :

$$p_{\cap} \propto n^{1-1/d} a((A/n)^{1/d})$$

Par exemple, supposons que l'accélération soit de la forme :

$$a(R) \propto \frac{1}{(R - D)^{\alpha}}$$

où D désigne le diamètre des particules.

Alors, la pression d'interaction présente la dépendance suivante en densité :

$$p_{\cap}(n) \propto \frac{n^{1+\frac{\alpha-1}{d}}}{\left(1 - \left(\frac{n}{AD^{-d}}\right)^{1/d}\right)^{\alpha}}$$

Nous voyons apparaître une densité maximale, pour laquelle la pression diverge. Cette densité maximale correspond à celle pour laquelle les plus proches voisins se touchent, entraînant des forces répulsives infinies.

4.2 Source de pression

Cherchons à présent à évaluer la source de pression due aux interactions :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_{\cap} &= \int d\vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' m \overrightarrow{\mathbf{a}}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') (\vec{\mathbf{v}}-\vec{\mathbf{u}}) f^{(2)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \\ &\quad + \text{transposé} \end{aligned}$$

En reportant dans cette expression la forme de l'accélération et l'hypothèse de corrélation, nous trouvons :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_{\cap} &= -m \int d\vec{\mathbf{R}} a(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \int d\vec{\mathbf{v}}' f(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \int d\vec{\mathbf{v}} (\vec{\mathbf{v}}-\vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) \\ &\quad + \text{transposé} \end{aligned}$$

L'intégrale suivant $\vec{\nabla}$ est nulle, donc $\overline{\overline{\Gamma}}_\Omega$ l'est également.

Nous montrons dans l'annexe A que $\overline{\overline{\Gamma}}_\Omega$ peut être exprimé, de manière générale, comme la somme d'un terme de conduction thermique et d'un « vrai » terme de source. Mais en l'occurrence, nous trouverions que les deux termes sont nuls.

L'hypothèse que nous avons faite sur les corrélations est trop grossière pour trouver une source non nulle. Pour mettre en lumière le phénomène de conduction thermique due aux interactions, par exemple, il faudrait faire une analyse plus fine des corrélations.

Le cadre habituel pour cela est une théorie de type Chapman-Enskog, mais développer une telle théorie pour un système non thermostaté pose de réels problèmes théoriques, et nous n'avons pu pousser les recherches dans cette direction.

Chapitre 5

Forces dissipatives

Dans ce chapitre, nous allons développer la pression de dissipation et la source (ou plutôt la perte) de pression liée aux forces dissipatives. Nous allons supposer que ces forces sont de la forme :

$$\vec{a}_\varphi(\vec{x}, \vec{v}, \vec{x} + \vec{R}, \vec{v}') = -w(R) (\vec{v} - \vec{v}') \cdot \vec{e} \vec{e}$$

où \vec{e} est le vecteur unitaire de même sens et direction que \vec{R} .

Il s'agit de la force de lubrification agissant entre deux particules en mouvement dans un liquide. Si les deux particules se rapprochent, il faut éjecter le fluide qui se trouve entre les deux, ce qui coûte de l'énergie et fait ralentir les particules. De même, si elles s'éloignent, il faut aspirer du liquide entre les deux, ce qui ralentit également les particules. Bref, il s'agit d'une version à deux particules du problème de Stokes.

Ces forces ne dépendent pas de $\vec{\varphi}$: on a approximé le phénomène d'écrantage par une simple dépendance en distance. Typiquement, on considère que la force est nulle au-dessus d'une certaine distance de coupure, légèrement supérieure à la distance typique entre plus proches voisins.

L'avantage théorique de cette approximation, c'est qu'elle permet également de dissiper les problèmes théoriques liés au passage à l'ensemble statistique, évoqués au chapitre 2.

5.1 Développement de la pression de lubrification

En reportant la forme explicite de la force de lubrification et l'hypothèse de corrélation dans l'expression générale de la pression d'interaction, nous obtenons la pression de dissipation :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Pi}}_D = & \frac{1}{2} m \int d\vec{R} R w(R) \vec{e} \vec{e} \vec{e} \cdot \int_0^1 d\lambda g(\vec{x} - \lambda \vec{R}, R) \\ & \int d\vec{v} d\vec{v}' (\vec{v} - \vec{v}') f(\vec{x} - \lambda \vec{R}, \vec{v}) f(\vec{x} + (1-\lambda)\vec{R}, \vec{v}') \end{aligned}$$

Nous intégrons ensuite sur les vitesses, pour trouver :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Pi}}_D = & \frac{1}{2} m \int d\vec{R} R w(R) \vec{e} \vec{e} \vec{e} \cdot \int_0^1 d\lambda g(\vec{x} - \lambda \vec{R}, R) \\ & n(\vec{x} - \lambda \vec{R}) n(\vec{x} + (1-\lambda)\vec{R}) \left(\vec{u}(\vec{x} - \lambda \vec{R}) - \vec{u}(\vec{x} + (1-\lambda)\vec{R}) \right) \end{aligned}$$

Nous allons à présent développer l'intégrande en série de Taylor, pour pouvoir évaluer cette expression.

5.1.1 Développement de la pression à l'ordre un en nabla

Nous voulons un développement des équations fluides à l'ordre 2 ; la pression apparaissant dans une divergence, il suffit de la développer à l'ordre 1 — en fait, le terme d'ordre 2 serait nul de toute façon. Développons donc l'intégrande à l'ordre 1 en nabla, et intégrons par rapport à lambda. Nous obtenons :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Pi}}_D &= -\frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} R w(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \cdot g(\vec{\mathbf{x}}, R) n(\vec{\mathbf{x}})^2 \left(\vec{\mathbf{R}} \cdot \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}) \right) \\ &= -\frac{1}{2} m n^2 \left(\int d\vec{\mathbf{R}} R^2 w(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \right) : \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}}\end{aligned}$$

La seconde expression résulte d'un simple réordonnement des facteurs.

L'intégrale est un tenseur d'ordre 4, isotrope et totalement symétrique, donc proportionnel à $\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}$. Le coefficient de proportionnalité est calculé dans l'annexe B, et permet de trouver :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Pi}}_D &= -\frac{1}{2} m n^2 \frac{[R^2 w g]}{d(d+2)} (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \nabla_\alpha u_\beta \\ &= -\frac{m n^2 [R^2 w g]}{2d(d+2)} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{I}} + \vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}} + (\vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}})^T \right)\end{aligned}$$

La pression de dissipation est proportionnelle aux différences de vitesses entre particules voisines : les forces de lubrification sont la cause de la viscosité du milieu.

Traditionnellement, on exprime la pression en utilisant la partie symétrique et sans trace du gradient de la vitesse :

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}} = \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}} + (\vec{\nabla} \vec{\mathbf{u}})^T \right) - \frac{1}{d} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{I}}$$

D'une part, on supprime ainsi la partie antisymétrique, qui correspond au phénomène de tourbillon et n'intervient pas dans les forces visqueuses. D'autre part, on isole ainsi la partie divergente du gradient, qui représente la variation d'un volume élémentaire au cours du mouvement et est souvent nulle.

Avec cette notation, nous avons :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Pi}}_D &= -\frac{m n^2 [R^2 w g]}{d(d+2)} \bar{\bar{\mathbf{D}}} - \frac{m n^2 [R^2 w g]}{2d^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{I}} \\ &\equiv -2 \eta_D \bar{\bar{\mathbf{D}}} - \zeta_D \vec{\nabla} \cdot \vec{\mathbf{u}} \bar{\mathbf{I}}\end{aligned}$$

Nous venons de déterminer une première expression des viscosités du milieu.

Nous allons à présent montrer que ces viscosités dépendent essentiellement de la densité de particules.

5.1.2 Viscosité en fonction de la densité

Comme pour la pression d'interaction, nous pouvons estimer la dépendance des viscosités par rapport à la densité de particules. L'intégrale représentée par le crochet vaut cette fois :

$$[R^2 w g] = R_0^{d+2} w(R_0)$$

En reportant ce résultat dans l'expression de la viscosité et en exprimant le résultat en fonction de n , nous trouvons :

$$\eta_D = n^{1-2/d} w((A/n)^{1/d})$$

où A est une constante liant la distance typique entre plus proches voisins et la densité.

Aux faibles distances, on montre théoriquement que la force de lubrification du problème de Stokes à deux particules est proportionnelle à l'inverse de la distance. Nous prendrons donc :

$$w(R) \propto \frac{1}{R-D}$$

Ce qui nous donne pour la viscosité :

$$\eta_D \propto \frac{n^{1-1/d}}{1 - \left(\frac{n}{AD^{-d}}\right)^{1/d}}$$

La viscosité diverge donc au voisinage de la compaction maximale.

Nous avons ainsi estimé la forme de la loi qui lie la viscosité à la concentration, ce qui revêt bien sûr une importance cruciale pour le comportement du système aux concentrations élevées.

5.2 Perte de pression par dissipation

Rappelons l'expression du terme de perte de pression dû aux forces de dissipation :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_D &= \int d\vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' m \mathbf{a}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') (\vec{\mathbf{v}}-\vec{\mathbf{u}}) f^{(2)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \\ &+ \text{transposé} \end{aligned}$$

En introduisant l'expression de la force de dissipation et l'hypothèse de corrélation, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_D &= -m \int d\vec{\mathbf{R}} w(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \cdot \\ &\int d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' (\vec{\mathbf{v}}-\vec{\mathbf{v}}') (\vec{\mathbf{v}}-\vec{\mathbf{u}}) f(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}) f(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}') \\ &+ \text{transposé} \end{aligned}$$

Puis nous évaluons l'intégrale sur les vitesses, ce qui donne :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_D &= - \int d\vec{\mathbf{R}} w(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \cdot n(\vec{\mathbf{x}}+\vec{\mathbf{R}}) \bar{\bar{\Pi}}_K(\vec{\mathbf{x}}) \\ &+ \text{transposé} \end{aligned}$$

Le tenseur de pression cinétique étant symétrique positif, la demi-trace de $\bar{\bar{\Gamma}}_D$ est négative : il n'y a donc que des pertes d'énergie. Aucun terme de conduction thermique ne peut donc se « cacher » dans cette expression, et il n'aurait pas été judicieux d'essayer de décomposer ce tenseur comme dans l'annexe A.

Il nous faut développer cette expression à l'ordre 2. Pour cela, nous développons n en série de Taylor autour de $\vec{\mathbf{x}}$.

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_D &= - \int d\vec{\mathbf{R}} w(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \cdot \left(n + \vec{\mathbf{R}} \cdot \vec{\nabla} n + \frac{1}{2} \vec{\mathbf{R}} \vec{\mathbf{R}} : \vec{\nabla} \vec{\nabla} n \right) \bar{\bar{\Pi}}_K(\vec{\mathbf{x}}) \\ &+ \text{transposé} \end{aligned}$$

Il ne nous reste plus qu'à évaluer chacun des termes.

5.2.1 Terme d'ordre zéro

À l'ordre zéro, nous trouvons :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_{D0} &= -n \left(\int d\vec{\mathbf{R}} w(R) g(\vec{\mathbf{x}}, R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \right) \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K(\vec{\mathbf{x}}) \\ &+ \text{transposé} \end{aligned}$$

L'intégrale entre parenthèse est un tenseur d'ordre deux isotrope, donc proportionnel à l'identité. Le coefficient de proportionnalité est calculé dans l'annexe B, et permet d'obtenir :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Gamma}}_{D0} &= -n \frac{[wg]}{d} \bar{\bar{\Gamma}} \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K + \text{transposé} \\ &= -\frac{2n [wg]}{d} \bar{\bar{\Pi}}_K\end{aligned}$$

Le terme d'ordre un est similaire, mais avec un tenseur d'ordre trois, isotrope et totalement symétrique, donc nul. Par conséquent, nous pouvons tout de suite passer à l'ordre deux.

5.2.2 Terme d'ordre deux

Le terme d'ordre deux donne par un calcul semblable :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Gamma}}_{D2} &= -\frac{1}{2} \frac{[R^2 wg]}{d(d+2)} (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) (\nabla_\alpha \nabla_\beta n) \Pi_{K\gamma\epsilon} + \text{transposé} \\ &= -\frac{[R^2 wg]}{d(d+2)} \left(\Delta n \bar{\bar{\Pi}}_K + (\vec{\nabla} \vec{\nabla} n) \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{\Pi}}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{\nabla} n \right) \\ &= -\frac{2\eta_D}{\rho^2} \left(\Delta \rho \bar{\bar{\Pi}}_K + (\vec{\nabla} \vec{\nabla} \rho) \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{\Pi}}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{\nabla} \rho \right)\end{aligned}$$

Ce terme est une correction au terme d'ordre zéro : la dissipation d'énergie subie par les particules en \vec{x} ne dépend pas de la densité en ce point mais dans un certain voisinage autour. C'est le sens de l'ajustement représenté par le laplacien et par les termes similaires faisant intervenir la matrice hessienne.

5.2.3 Dépendance en densité

Nous avons donc déterminé la perte de pression par dissipation, à l'ordre deux en nbla :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Gamma}}_D &= -\frac{2n [wg]}{d} \bar{\bar{\Pi}}_K \\ &\quad -\frac{2\eta_D}{\rho^2} \left(\Delta \rho \bar{\bar{\Pi}}_K + (\vec{\nabla} \vec{\nabla} \rho) \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{\Pi}}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{\nabla} \rho \right) \\ &\equiv -\gamma_D \bar{\bar{\Pi}}_K - \delta_D \left(\Delta \rho \bar{\bar{\Pi}}_K + (\vec{\nabla} \vec{\nabla} \rho) \cdot \bar{\bar{\Pi}}_K + \bar{\bar{\Pi}}_K \cdot \vec{\nabla} \vec{\nabla} \rho \right)\end{aligned}$$

Le coefficient δ_D qui apparaît s'exprime en fonction de la viscosité, ce qui n'a rien de surprenant.

Un nouveau coefficient apparaît également, et nous pouvons nous faire une idée de sa dépendance en densité. De la même manière que pour la pression d'interaction, nous trouvons :

$$\gamma_D \propto w((A/n)^{1/d})$$

Soit, en supposant une loi de proportionnalité inverse :

$$\gamma_D(n) \propto \frac{n^{1/d}}{1 - \left(\frac{n}{AD^{-d}}\right)^{1/d}}$$

De même que la viscosité, la perte d'énergie due aux forces de friction diverge au voisinage de la compaction maximale.

Chapitre 6

Application à une cellule de Couette

À présent, nous allons appliquer les théories précédentes à une expérience d'hydrodynamique très simple : une cellule de Couette bidimensionnelle. Le milieu se trouve entre deux parois infinies, parallèles à l'axe des x , et se déplaçant aux vitesses $U\vec{e}_x$ et $-U\vec{e}_x$.

Nous ferons l'hypothèse du frottement sans glissement le long des parois.

6.1 Préliminaires

Avant de poser les équations du système, nous posons les inconnues et symétries du système, puis nous utilisons les résultats des chapitres 4 et 5 pour exprimer les différents tenseurs liés aux interactions entre particules.

6.1.1 Inconnues et symétries du système

Nous voudrions trouver les solutions en régime stationnaire ; mais pour étudier leur stabilité, nous serons amenés à utiliser des variables dépendantes du temps. Pour simplifier la résolution, nous supposons que ces variables respectent les symétries du système, en particulier la symétrie de translation. Ainsi nous aurons :

$$\begin{aligned}\rho(y, t) &= m n(y, t) \\ \vec{\mathbf{u}}(y, t) &= \begin{bmatrix} u_x(y, t) \\ u_y(y, t) \end{bmatrix} \\ \overline{\overline{\Pi}}_K(y, t) &= \begin{bmatrix} p_x(y, t) & p_{xy}(y, t) \\ p_{xy}(y, t) & p_y(y, t) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Rappelons que nous supposons le flux de chaleur cinétique négligeable.

6.1.2 Tenseurs dus aux interactions

Les formules des précédents chapitres permettent de calculer les différents tenseurs dus aux interactions. Nous avons ainsi :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\Pi}}_{\Gamma} &= \begin{bmatrix} p_{\Gamma}(\rho) & 0 \\ 0 & p_{\Gamma}(\rho) \end{bmatrix} \\ \bar{\bar{\Pi}}_D &= -\eta_D(\rho) \begin{bmatrix} \partial_y u_y & \partial_y u_x \\ \partial_y u_x & 3\partial_y u_y \end{bmatrix} \\ \Gamma_x &= -\left(\gamma_D(\rho) + \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_x \\ \Gamma_{xy} &= -\left(\gamma_D(\rho) + 2\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_{xy} \\ \Gamma_y &= -\left(\gamma_D(\rho) + 3\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_y\end{aligned}$$

Les différentes dépendances en densité ont été estimées au cours des précédents chapitres.

6.2 Équations du système

À présent que nous avons l'expression des différents tenseurs d'interaction, nous pouvons écrire les équations hydrodynamiques du système.

6.2.1 Équations fluides du système : cas général

Pour commencer, nous posons les équations dans le cas général, *a priori* non stationnaire.

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \partial_y(\rho u_y) = 0 \\ \rho \partial_t u_x + \rho u_y \partial_y u_x = -\partial_y(p_{xy} - \eta_D(\rho) \partial_y u_x) \\ \rho \partial_t u_y + \rho u_y \partial_y u_y = -\partial_y(p_y + p_{\Gamma}(\rho) - 3\eta_D(\rho) \partial_y u_y) \\ \partial_t p_x + \partial_y(u_y p_x) = -2p_{xy} \partial_y u_x - \left(\gamma_D(\rho) + \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_x \\ \partial_t p_{xy} + \partial_y(u_y p_{xy}) = -p_{xy} \partial_y u_y - p_y \partial_y u_x - \left(\gamma_D(\rho) + 2\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_{xy} \\ \partial_t p_y + \partial_y(u_y p_y) = -2p_y \partial_y u_y - \left(\gamma_D(\rho) + 3\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_y \end{array} \right.$$

Nous disposons bien d'un système bouclé, avec six équations et six inconnues.

6.2.2 Équations du système à l'équilibre

Nous recherchons les solutions stationnaires du système. En particulierisant les équations précédentes, nous obtenons :

$$\boxed{\left\{ \begin{array}{l} 0 = u_y \\ 0 = -\partial_y(p_{xy} - \eta_D(\rho) \partial_y u_x) \\ 0 = -\partial_y(p_y + p_{\Gamma}(\rho)) \\ 0 = -2p_{xy} \partial_y u_x - \left(\gamma_D(\rho) + \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_x \\ 0 = -p_y \partial_y u_x - \left(\gamma_D(\rho) + 2\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_{xy} \\ 0 = -\left(\gamma_D(\rho) + 3\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho\right) p_y \end{array} \right.}$$

La première équation a été obtenue grâce aux conditions aux limites, et exprime l'équilibre de la densité. Les deuxième et troisième équations expriment l'équilibre de la vitesse suivant les deux directions : la somme des forces agissant sur une « couche » infinitésimale d'abscisse y est nulle. Enfin, les trois dernières équations expriment l'équilibre de la pression suivant xx , xy et yy : les termes de perte et de gain d'énergie suivant chaque axe doivent s'équilibrer.

6.2.3 Équations de stabilité

Pour étudier la stabilité des solutions stationnaires trouvées, nous introduirons des petites perturbations dépendantes du temps. Par exemple, nous supposons que la vitesse suivant x est la somme de la solution stationnaire étudiée $u_x(y)$ et d'une perturbation $\varepsilon_{ux}(y, t)$.

Ensuite, nous développons les équations fluides à l'ordre un par rapport à ces perturbations. Enfin, nous réordonnons les équations obtenues afin d'avoir un système aussi triangulaire que possible. Nous avons alors le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \varepsilon_{px} = -(A+B)\varepsilon_{px} - 2p_{xy}\partial_y \varepsilon_{ux} - 2\partial_y u_x \varepsilon_{pxy} \quad -p_x(A'+B') \quad -\partial_y(p_x \varepsilon_{uy}) \\ \rho \partial_t \varepsilon_{ux} = \quad \quad \partial_y(\eta \partial_y \varepsilon_{ux}) \quad -\partial_y \varepsilon_{pxy} \quad +\partial_y(\partial_y u_x \partial_\rho \eta \varepsilon_\rho) \quad -\rho \partial_y u_x \varepsilon_{uy} \\ \partial_t \varepsilon_{pxy} = \quad \quad -p_y \partial_y \varepsilon_{ux} \quad -(A+2B)\varepsilon_{pxy} \quad -p_{xy}(A'+2B') \quad -\partial_y p_{xy} \varepsilon_{uy} \quad -\partial_y u_x \varepsilon_{py} \\ \quad -2p_{xy} \partial_y \varepsilon_{uy} \\ \partial_t \varepsilon_\rho = \quad -\partial_y(\rho \varepsilon_{uy}) \\ \rho \partial_t \varepsilon_{uy} = \quad -\partial_y(\partial_\rho p \varepsilon_\rho) \quad +3\partial_y(\eta \partial_y \varepsilon_{uy}) \quad -\partial_y \varepsilon_{py} \\ \partial_t \varepsilon_{py} = \quad -p_y(A'+3B') \quad -\partial_y p_y \varepsilon_{uy} \quad -(A+3B)\varepsilon_{py} \\ \quad -3p_y \partial_y \varepsilon_{uy} \end{array} \right.$$

où $A = \gamma_D$, $B = \delta_D \partial_y^2 \rho$, $A' = \partial_\rho \gamma_D \varepsilon_\rho$, $B' = \partial_\rho \delta_D \partial_y^2 \rho \varepsilon_\rho + \delta_D \partial_y^2 \varepsilon_\rho$

6.3 Pâtes : pas de pression d'interaction

Nous allons étudier le comportement du système quand il n'y a pas de pression d'interaction. Il est vraisemblable que ce soit le cas pour les pâtes granulaires. En effet, il n'y a *a priori* pas de force à distance entre les billes mésoscopiques, et il n'est pas nécessaire d'introduire une force de cœur dur, puisque les forces de lubrification suffisent à empêcher l'interpénétration des particules.

Dans ce cas, l'équation d'équilibre de u_y impose que :

$$0 = -\partial_y(p_y)$$

Nous allons distinguer deux cas, suivant que p_y est nulle ou non.

6.3.1 Pâte de température granulaire non nulle

Supposons que p_y soit non nulle. Alors son équation d'équilibre impose que :

$$\gamma_D(\rho) + 3\delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho = 0$$

ce qui détermine le profil de la densité, montrant en particulier qu'elle est concave. Les symétries imposant qu'elle soit paire, elle est maximale au centre.

Cette relation nous permet de réécrire les équations d'équilibre de p_x et p_{xy} sous la forme :

$$\begin{cases} 0 &= -2 p_{xy} \partial_y u_x - \frac{2}{3} \gamma_D(\rho) p_x \\ 0 &= -p_y \partial_y u_x - \frac{1}{3} \gamma_D(\rho) p_{xy} \end{cases}$$

En particulier, on a :

$$p_{xy} = -\frac{3 p_y}{\gamma_D(\rho)} \partial_y u_x$$

En reportant cette relation dans l'équation d'équilibre de u_x , on obtient :

$$\boxed{\partial_y \left(\left(\eta_D(\rho) + \frac{3 p_y}{\gamma_D(\rho)} \right) \partial_y u_x \right) = 0}$$

Reste à savoir si ces solutions sont effectivement stables. Il faudrait faire une analyse plus poussée pour le savoir, mais nous nous concentrerons plutôt sur les cas sans pression.

6.3.2 Pâte de température granulaire nulle

Examinons à présent le cas où p_y est nulle. Alors le système des équations de stabilité est triangulaire. En particulier, l'équation de stabilité de ε_{py} devient :

$$\partial_t \varepsilon_{py} = -\left(\gamma_D(\rho) + 3 \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho \right) \varepsilon_{py}$$

Pour que ce système ne diverge pas, il faut que :

$$\gamma_D(\rho) + 3 \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho \geq 0$$

Trivialement, nous avons alors :

$$\begin{cases} \gamma_D(\rho) + \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho &> 0 \\ \gamma_D(\rho) + 2 \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho &> 0 \end{cases}$$

Les deux membres de gauche sont donc différents de zéro. En utilisant cette information dans les équations d'équilibre de p_x et p_{xy} , nous voyons que ces deux pressions sont nulles, tout comme p_y :

$$p_x = p_{xy} = 0$$

L'équation d'équilibre de u_x montre alors que :

$$\boxed{\partial_y \left(\eta_D(\rho) \partial_y u_x \right) = 0}$$

C'est en fait la même formule que dans le cas avec pression cinétique, prise pour $p_y = 0$. Notons bien que tous les profils vérifiant cette relation et ayant une pression nulle sont effectivement solutions du système, s'ils vérifient les conditions aux limites. Mais on sait déjà que pour être stables, elles doivent avoir une densité qui vérifie l'inégalité ci-dessus.

Ces solutions sont-elles stables ? Pour le savoir, commençons par réécrire les équations de stabilité des pressions. Nous trouvons :

$$\begin{cases} \partial_t \varepsilon_{px} &= -(\gamma_D + \delta_D \partial_y^2 \rho) \varepsilon_{px} & -2 \partial_y u_x \varepsilon_{pxy} \\ \partial_t \varepsilon_{pxy} &= & -(\gamma_D + 2 \delta_D \partial_y^2 \rho) \varepsilon_{pxy} & -\partial_y u_x \varepsilon_{py} \\ \partial_t \varepsilon_{py} &= & & -(\gamma_D + 3 \delta_D \partial_y^2 \rho) \varepsilon_{py} \end{cases}$$

Pour être certains que p_y est stable, nous allons supposer que l'inégalité vue plus haut est stricte :

$$\gamma_D(\rho) + 3 \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho > 0$$

Le système ci-dessus est alors particulièrement facile à résoudre, puisqu'il ne met pas en jeu les dérivées des perturbations par rapport à y . Nous pouvons donc résoudre le système pour chaque y séparément. Les valeurs propres du système sont toutes strictement négatives, donc le système est stable.

Les pressions nulles constituent donc une configuration stable. Réécrivons donc les équations de stabilité des autres grandeurs, en supprimant les termes dus aux perturbations de pression :

$$\begin{cases} \rho \partial_t \varepsilon_{ux} &= \partial_y(\eta_D \partial_y \varepsilon_{ux}) + \partial_y(\partial_y u_x \partial_\rho \eta_D \varepsilon_\rho) - \rho \partial_y u_x \varepsilon_{uy} \\ \partial_t \varepsilon_\rho &= - \partial_y(\rho \varepsilon_{uy}) \\ \rho \partial_t \varepsilon_{uy} &= 3 \partial_y(\eta_D \partial_y \varepsilon_{uy}) \end{cases}$$

L'équation de stabilité de u_y est une équation de diffusion ; elle assure la stabilité de u_y .

En revanche, quand ε_{uy} varie, il entraîne des variations sur ε_ρ qu'aucune rétroaction ne vient compenser. Le temps que ε_{uy} revienne à zéro, le profil de la densité va donc se déplacer pour atteindre un nouvel équilibre. De ce fait, le profil de u_y va lui aussi se déplacer.

Une analyse plus rigoureuse serait nécessaire pour être sûrs de nos conclusions, mais nous pouvons tout de même deviner ce qui se passe. Les différents équilibres donnés par l'équation vue plus haut sont en fait indifférents, et le système peut « dériver » entre ces équilibres.

6.4 Mousses : force d'interaction répulsive

Dans le cas des mousses par exemple, nous pouvons supposer qu'il y a une force de ressort entre les différentes bulles, en particulier quand elles viennent au contact et se déforment l'une contre l'autre.

Le système devient alors plus complexe, et il est plus difficile de faire une liste exhaustive des solutions. Nous allons juste nous attarder sur deux cas particuliers : quand p_y est non nulle partout, et quand elle est nulle partout.

6.4.1 Mousse de température granulaire non nulle

Supposons p_y non nulle partout. Alors l'équation de stabilité de p_y donne :

$$\gamma_D(\rho) + 3 \delta_D(\rho) \partial_y^2 \rho = 0$$

Pour les mêmes raisons que dans le cas sans pression d'interaction, on trouve ensuite :

$$\partial_y \left(\left(\eta_D(\rho) + \frac{3 p_y}{\gamma_D(\rho)} \right) \partial_y u_x \right) = 0$$

Donc, en utilisant l'équation d'équilibre de u_y :

$$\boxed{\partial_y \left(\left(\eta_D(\rho) + \frac{cte - 3 p_\Gamma(\rho)}{\gamma_D(\rho)} \right) \partial_y u_x \right) = 0}$$

Reste à savoir si ces solutions sont stables, ce qui n'est pas trivial.

6.4.2 Mousse de température granulaire nulle : cas linéaire

Examinons à présent l'hypothèse $p_y = 0$. Pour les mêmes raisons de stabilité que dans le cas sans pression d'interaction, les autres pressions doivent être nulles.

L'équation d'équilibre de u_y donne par ailleurs :

$$0 = \partial_y (p_\cap(n))$$

ce qui prouve que la densité est constante.

En reportant tout ceci dans l'équation d'équilibre de u_x , nous trouvons alors :

$$0 = \eta_D(\rho) \partial_y^2 u_x$$

ce qui prouve que le profil de vitesse est linéaire, comme dans le cas des fluides newtoniens.

Comme dans le cas sans pression d'interaction, les pressions sont stables à zéro. Il ne nous reste plus qu'à examiner la stabilité des autres grandeurs :

$$\begin{cases} \rho \partial_t \varepsilon_{ux} &= \eta_D \partial_y^2 \varepsilon_{ux} + \partial_\rho \eta_D \partial_y u_x \partial_y \varepsilon_\rho - \rho \partial_y u_x \varepsilon_{uy} \\ \partial_t \varepsilon_\rho &= - \rho \partial_y \varepsilon_{uy} \\ \rho \partial_t \varepsilon_{uy} &= - \partial_\rho p_\cap \partial_y \varepsilon_\rho + 3 \eta_D \partial_y^2 \varepsilon_{uy} \end{cases}$$

Les termes croisés entre ε_ρ et ε_{uy} sont des termes de transferts mutuels : les différentiels de vitesse créent des flux de matière, ce qui entraîne un différentiel de pression, qui lui-même régule le profil de vitesse. Le terme diagonal est un terme de diffusion de u_y , qui stabilise également le système.

Les perturbations extérieures qui agissent sur ε_{ux} restent donc infinitésimales. Comme de plus ε_{ux} possède un terme de diffusion qui le stabilise, ε_{ux} est stable.

La solution linéaire est donc globalement stable.

6.5 Synthèse des résultats théoriques sur la cellule de Couette

Le cas avec pression d'interaction présente donc peut-être des solutions non linéaires stables, mais comme le profil linéaire est stable, il sera peut-être plus difficile de les observer, d'après la théorie développée ici.

Dans le cas sans pression d'interaction, en revanche, nous prévoyons une classe d'équilibres indifférents, avec possibilité d'une dérive entre ces équilibres due aux perturbations. Et en effet, dans les expériences, on constate des dynamiques très lentes de ces systèmes, qui pourraient bien être dues à ce phénomène de dérive.

Chapitre 7

Simulation numérique

Pour aborder le problème sous un autre angle, nous avons mis en place un programme de simulation numérique de la cellule de Couette décrite précédemment. Cette simulation est basée sur des hypothèses sur la forme de l'interaction entre les particules, et permet de mesurer des densités, des vitesses moyennes, etc. Elle permet ainsi de vérifier le traitement théorique qui nous a permis de passer du microscopique au macroscopique.

Bien sûr, cette simulation ne peut valider les hypothèses microscopiques elles-mêmes : pour cela, il faut s'en remettre aux résultats expérimentaux.

7.1 Principe de la simulation

7.1.1 Équations d'évolution discrètes

Le temps est discrétisé. Nous supposons connaître l'état du système à un instant t donné, et nous déterminons son état à un instant $t + dt$, où dt est un pas de temps fixé.

Notre système fait intervenir des forces dépendantes de la vitesse, ce qui interdit d'utiliser certaines méthodes de simulation classiques. Signalons en particulier la méthode de Verlet, basée sur la remarque suivante :

$$\vec{\mathbf{x}}_i(t + dt) \simeq 2\vec{\mathbf{x}}_i(t) - \vec{\mathbf{x}}_i(t - dt) + dt^2 \vec{\mathbf{a}}_i(t)$$

Au moment où on calcule $\vec{\mathbf{a}}_i(t + dt)$, on ne dispose pas de $\vec{\mathbf{v}}_i(t + dt)$ mais seulement de $\vec{\mathbf{v}}_i(t + dt/2)$, ce qui rend la méthode beaucoup plus imprécise. En effet, dans le cas où les forces ne dépendent pas de la vitesse, cette méthode est exacte à des termes d'ordre quatre près.

Dans d'autres méthodes, on calcule l'accélération à un instant donné avant de calculer la vitesse. Dans d'autres, dites méthodes par saut de grenouille, on calcule les vitesses et les accélérations à des instants différents, décalés de $dt/2$. Etc.

Nous avons donc dû adopter une méthode de simulation adaptée tout spécialement aux problèmes de dynamique de particules dissipatives (DPD). Nous commençons par déterminer les positions au temps incrémenté :

$$\vec{\mathbf{x}}_i(t + dt) = \vec{\mathbf{x}}_i(t) + dt \vec{\mathbf{v}}_i(t) + \frac{1}{2} dt^2 \vec{\mathbf{a}}_i(t)$$

Ensuite, nous faisons une première estimation de la vitesse, en utilisant un paramètre ajustable λ (que nous avons en fait toujours pris égal à 1) :

$$\tilde{\mathbf{v}}_i(t + dt) = \vec{\mathbf{v}}_i(t) + \lambda dt \vec{\mathbf{a}}_i(t)$$

Cette estimation nous permet d'évaluer l'accélération :

$$\vec{\mathbf{a}}_i(t + dt) = \vec{\mathbf{a}}\left(\vec{\mathbf{x}}_i(t + dt), \tilde{\mathbf{v}}_i(t + dt)\right)$$

Enfin, nous pouvons réévaluer la vitesse de manière plus précise :

$$\vec{v}_i(t+dt) = \vec{v}_i(t) + dt \frac{\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t+dt)}{2}$$

Si la première estimation des vitesses est correcte, cette méthode est exacte à des termes d'ordre quatre près.

7.1.2 Système étudié

Nous étudions un système de N particules placées dans une boîte rectangulaire, sachant que les particules qui sortent par la droite rentrent par la gauche et inversement : topologiquement, l'espace est donc un cylindre fini.

L'interaction est la somme de deux termes. Le premier est dû aux forces de lubrification :

$$\vec{a}_{ij}^{\text{lubr}} \propto -\frac{1}{R_{ij}-D} (\vec{v}_i - \vec{v}_j) \cdot \vec{e}_{ij} \vec{e}_{ij} \quad \text{si } R \leq R_{c1}$$

Il est nul au-delà du rayon de coupure R_{c1} . Le second terme est dû à des forces indépendantes des vitesses, de type ressort :

$$\vec{a}_{ij}^{\text{inter}} \propto -\frac{1}{R} \vec{e}_{ij} \quad \text{si } R \leq R_{c2}$$

Au-delà du rayon de coupure $R_c = \max(R_{c1}, R_{c2})$, l'accélération est donc nulle.

Nous avons essayé de mener une simulation sans force de ressort, mais nous avons été confrontés à d'importants problèmes de stabilité de l'algorithme. La simulation utilisant des pas de temps finis, les forces de lubrification n'assurent pas forcément que les particules ne s'interpénètrent pas. En effet, à chaque pas de temps, elles effectuent des « sauts » qui peuvent les mener à des positions impossibles en principe. En pratique, les forces de ressort permettent d'éviter en grande partie ce problème.

7.1.3 Détermination des plus proches voisins

Pour calculer les forces qui s'exercent entre les particules, nous déterminons les couples de particules qui sont à une distance inférieure à la distance de coupure.

Une solution naïve consiste à calculer toutes les distances entre deux particules, puis ne retenir que celles inférieures à la distance de coupure. Mais ceci représente un algorithme en N^2 , et nous pouvons faire plus rapide.

Pour cela, nous découpons la boîte en cellules carrées de côté R_c . Nous savons ainsi que deux particules qui interagissent sont nécessairement dans la même case ou dans deux cases voisines.

Pour chaque particule, nous déterminons donc dans quelle case elle se trouve (algorithme en N). Puis, pour chaque couple de cases voisines, nous calculons effectivement les distances entre chaque particule de la première case et de la seconde case, puis la force correspondante. À densité fixée, cet algorithme est en N .

7.1.4 Modélisation des parois

Pour modéliser chaque paroi, nous pouvons procéder de plusieurs façons, par exemple en faisant subir à chaque particule une accélération supplémentaire, dérivant d'un potentiel divergent au voisinage de la paroi. Mais pour que la paroi entraîne les particules à sa vitesse, il faut que le potentiel dépende de x et se déplace à la vitesse de la paroi. Par exemple, on peut prendre une paroi de forme sinusoïdale qui se déplace, et un potentiel dépendant de la distance à la paroi. Cette solution est proche d'un modèle réaliste, tenant compte des rugosités de la surface de la paroi. Mais elle nécessite quelques réglages pour assurer la condition de non-glissement à l'interface.

Nous avons utilisé une méthode plus simple : pour chaque paroi, nous plaçons une rangée de particules côte à côte, dont le mouvement n'est pas libre mais imposé à la vitesse constante choisie pour la paroi. En pratique, nous avons constaté qu'il y avait alors effectivement non-glissement.

7.1.5 Mesure des grandeurs fluides

Au fur et à mesure de la simulation, des grandeurs macroscopiques peuvent être mesurées sur le système, par moyenne.

Par exemple, pour déterminer $u_x(y)$, nous choisissons une distance dy assez petite et nous prenons la valeur de \vec{v}_x pour toutes les particules entre $y - dy$ et $y + dy$ pendant un certain nombre de pas de temps. Puis nous faisons la moyenne.

La mesure peut être effectuée à nouveau après un certain temps de simulation, pour voir si le système avait déjà atteint l'équilibre au moment de la première mesure.

7.2 Résultats de la simulation

7.2.1 Configuration et polydispersité

Nos simulations portent sur un millier de particules. Nous introduisons une légère polydispersité dans le système, c'est-à-dire que nous prenons des diamètres légèrement différents pour les particules ; les différences sont de l'ordre de 15 %. Si nous ne le faisons pas, le système risquerait de cristalliser et d'avoir ensuite le comportement de cisaillement d'un cristal, ce qui n'est pas ce que nous voulons étudier.

Visualisons donc la configuration du système après un certain temps de simulation.

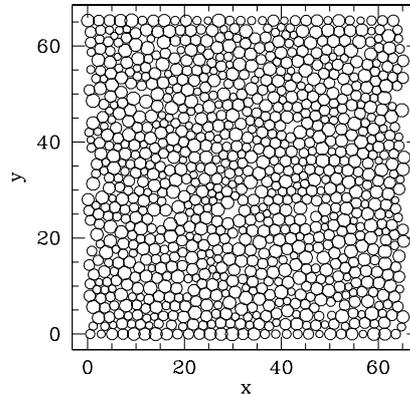


FIG. 7.1 – Visualisation du système

La polydispersité a été légèrement exagérée sur cette figure. Nous voyons que le système, pourtant très dense, n'a pas cristallisé.

7.2.2 Profil de densité

Observons un profil de densité observé lors des simulations.

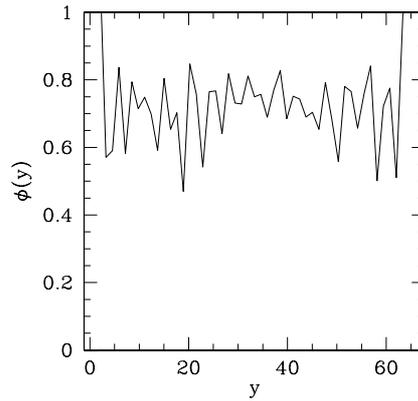


FIG. 7.2 – Profil de densité

La grandeur représentée ici est en fait la fraction d’occupation surfacique, proportionnelle à la densité.

La première remarque qu’on peut faire est que ce profil est assez fluctuant, malgré les moyennes effectuées pour l’obtenir. En fait, l’évolution vers l’état d’équilibre est extrêmement lente, et bien que nos simulations portent sur cinq à dix millions de pas de temps, il semblerait que l’équilibre ne soit toujours pas atteint. Il faudra donc reprendre ces simulations sur des pas de temps plus longs, ce que nous n’avons hélas pas pu faire, faute de temps.

On peut voir une tendance à une plus grande densité au centre, mais les fluctuations rendent cette interprétation discutable. Ceci confirmerait tout de même ce que nous attendions pour les solutions non linéaires, trouvées dans le cas où la pression cinétique est non nulle.

7.2.3 Profil de vitesse

Examinons à présent un profil de vitesse observé lors des simulations.

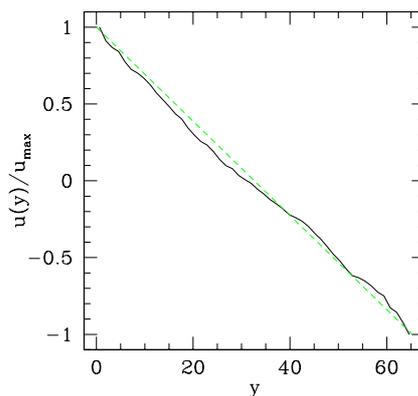


FIG. 7.3 – Profil de vitesse

Ce profil de vitesse ne s’écarte que très légèrement du profil linéaire. C’est un peu décevant, mais nous n’avons hélas pas réussi à trouver de jeu de paramètres donnant des résultats plus concluants.

7.2.4 Profil de pression cinétique

Sur la figure suivante, on représente l'écart-type de la vitesse selon x , qui est proportionnelle à la racine carrée de p_x .

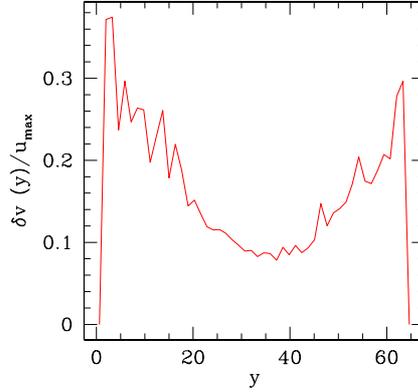


FIG. 7.4 – Profil de l'écart-type de la vitesse selon x

On voit que cette composante de la pression cinétique est minimale au centre de la cellule. Ceci est cohérent avec les résultats de la partie théorique.

En effet, quand la densité est élevée, la pression d'interaction l'est aussi, donc la pression cinétique suivant y est plus faible. Or nous avons une relation du type :

$$p_x \propto \frac{(\partial_y u_x)^2}{\gamma_D(\rho)} p_y$$

Et nous venons de voir que le gradient de vitesse est presque constant. Comme de plus γ_D est maximale au centre de la cellule, p_x doit être minimale.

Autrement dit, la dissipation d'énergie due aux forces de lubrification aux fortes concentrations entraîne une pression cinétique plus faible.

Conclusion

Dans l'étude de notre pâte granulaire, nous avons utilisé une approche hydrodynamique très générale, dont la validité est bien plus étendue que cette pâte : mécanique des fluides, physique des plasmas, milieux granulaires, mousses...

Cependant, dans le cas des pâtes granulaires et des mousses, une telle théorie hydrodynamique, basée sur un modèle microscopique, n'avait pas encore été élaborée. Nous avons donc exploré cette voie, en utilisant parfois des hypothèses simplificatrices, mais en essayant de garder l'essentiel de la physique du système.

La première particularité de notre système est d'être « à température nulle », c'est-à-dire qu'il n'y a pas de force aléatoire due à un thermostat. La seconde est d'être un milieu fondamentalement dissipatif : les forces de lubrification constituent l'interaction majeure entre les particules.

Résultats : théorie hydrodynamique des pâtes granulaires

Nous avons montré que les équations hydrodynamiques de la pâte sont semblables aux équations de la mécanique des fluides, mais que la dépendance des différents coefficients, en particulier de la viscosité, par rapport à la densité, joue ici un rôle fondamental. En particulier, nous avons donné une estimation explicite de la divergence des coefficients de viscosité au voisinage de la compaction maximale.

En appliquant cette théorie à la cellule de Couette, nous espérons retrouver les résultats expérimentaux, en particulier un profil de vitesse non linéaire. Nous avons en effet exhibé de telles solutions, qui sont des équilibres indifférents : au gré des perturbations, le système peut « dériver » de l'une à l'autre. Ceci pourrait expliquer les dynamiques très lentes observées expérimentalement dans de telles pâtes.

Nous avons également appliqué notre théorie aux milieux où il y a des forces répulsives à distance entre les particules, comme les mousses. Les résultats sont assez différents, puisque dans ce cas, l'existence d'une pression d'interaction stabilise la solution linéaire. Nous trouvons aussi d'autres solutions, mais leur stabilité reste à démontrer.

Le programme de simulation numérique que nous avons développé ne nous a malheureusement pas permis de vérifier la validité de notre théorie pour les pâtes granulaires, mais a donné des résultats encourageants pour les mousses. Les profils de vitesses ne s'écartent que peu du cas linéaire, mais les profils de pression cinétique accusent bien un minimum net au centre de la cellule, comme prévu par la théorie.

Perspectives : vers un modèle mixte

Nous avons rencontré de nombreux problèmes avec notre programme de simulation numérique, et du temps est encore nécessaire pour les résoudre entièrement. En particulier, nous aimerions trouver des jeux de paramètres qui donnent des résultats plus convaincants dans le cas des mousses, et arriver à stabiliser la simulation pour les pâtes granulaires.

Une fois des résultats plus frappants obtenus, il faudrait aussi en faire une analyse plus quantitative, en faisant épouser aux courbes obtenues les profils théoriques, pour vérifier, en

particulier, les lois de dépendance en densité. Ces profils peuvent d'ailleurs être précisés par une analyse théorique plus complète de la stabilité des solutions, et éventuellement par une résolution numérique.

Pour compléter le modèle théorique proposé, nous pouvons essayer d'estimer plus finement les corrélations entre les coordonnées de deux particules. Pour cela, nous pensons à une théorie de type Chapman-Enskog, mais il est difficile de trouver une fonction qui pourrait vérifier un théorème H, point de départ de ces théories, puisque les systèmes sont « sans température ». Nous pouvons même douter qu'il en existe.

Nous pouvons également remettre en cause l'hypothèse ergodique, que nous avons utilisée implicitement en permanence, en particulier dans les zones de très forte densité, où l'écoulement constaté est souvent de type bouchon. En effet, dans ces zones, le milieu est pratiquement au repos, et on sait dans ce cas qu'il peut se figer dans des positions métastables, en raison des forces dissipatives. Un modèle mixte, mêlant l'approche hydrodynamique et une approche plus « solide », peut donc être envisagé.

Remerciements

Tout d'abord, mille mercis à Lydéric pour son sérieux, ses compétences et sa tolérance. Merci pour l'aide apportée tout au long de cette recherche. Merci enfin d'avoir dissipé mes doutes en tous genres et de m'avoir remonté le moral à maintes reprises.

Merci à Claire et à KloECKY pour leurs points de vue enrichissants. Merci à Sarah d'avoir supporté mes horaires de travail un peu exotiques. Merci à Mr et Mme Mathieu et à Hélène pour leur hospitalité.

Merci à ma joyeuse bande de relecteurs, Seb, Krocell et Vaurien, et à Minou qui m'a permis d'imprimer et de relier ce rapport.

Enfin, un énorme merci à Yvon, mon colocataire de choc, qui a supporté mes lubies granulaires pendant six mois, et à Fabien, pour son aide constante tant scientifique, matérielle, que morale.

Annexe A

Source de pression et flux de chaleur : rôle des interactions

La source de pression liée aux interactions, telle que nous l'avons définie, est donnée par :

$$\bar{\bar{\Gamma}}_{\cap} = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} m \mathbf{a}_{ij} (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle$$

+transposé

Nous allons voir qu'on peut décomposer cette expression, de façon à faire apparaître un terme de flux de chaleur. Tous nos calculs « oublieront » le second terme, puisque c'est simplement le transposé du premier.

Pour obtenir des termes plus symétriques, nous écrivons la relation sous la forme suivante :

$$\bar{\bar{\Gamma}}_{\cap} = \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} m \mathbf{a}_{ij} (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_i) - \vec{\mathbf{v}}_j + \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_j)) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle$$

$$+ \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \frac{1}{2} m \mathbf{a}_{ij} (\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_i) + \vec{\mathbf{v}}_j - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_j)) \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) \right\rangle$$

Nous allons à présent examiner chacun des termes.

A.1 Terme de volume : source de pression

Par la même méthode que celle utilisée dans le chapitre 2, nous mettons le premier terme sous la forme suivante :

$$\bar{\bar{\Gamma}}_{\cap vol} = \frac{1}{2} m \int d\vec{\mathbf{R}} d\vec{\mathbf{v}} d\vec{\mathbf{v}}' \mathbf{a}_{\varphi(t)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}')$$

$$\left(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}) - \vec{\mathbf{v}}' + \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{R}}) \right) f^{(2)}(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{v}}, \vec{\mathbf{x}} + \vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{v}}')$$

Remarquons le terme en $\vec{\mathbf{a}}(\vec{\mathbf{v}} - \vec{\mathbf{v}}')$: en version scalaire, c'est-à-dire énergétique, c'est la variation de l'énergie cinétique totale des deux particules. Si les vitesses sont égales, il n'y a pas de gain d'énergie et tout passe par des transferts entre les deux particules.

Ce terme représente donc bien une source d'énergie volumique. S'il implique les écarts de vitesse à la moyenne, et non les vitesses elles-mêmes, c'est parce que nous nous intéressons uniquement à l'énergie interne, et non à l'énergie totale.

A.2 Terme de surface : flux de chaleur

Le second terme de la source de pression peut être symétrisé sous la forme suivante :

$$\bar{\bar{\Gamma}}_{\cap surf} = \frac{1}{4} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \vec{\mathbf{a}}_{ij} \left(\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_i) + \vec{\mathbf{v}}_j - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_j) \right) \left(\delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i) - \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_j) \right) \right\rangle$$

De la même façon que nous avons procédé pour prouver l'existence d'une pression d'interaction, nous pouvons introduire une divergence en exprimant différemment la différence des fonctions delta. Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\Gamma}}_{\cap surf} = & -\frac{\partial}{\partial \vec{\mathbf{x}}} \cdot \frac{1}{4} m \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} (\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j) \vec{\mathbf{a}}_{ij} \left(\vec{\mathbf{v}}_i - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_i) + \vec{\mathbf{v}}_j - \vec{\mathbf{u}}(\vec{\mathbf{x}}_j) \right) \right. \\ & \left. \int_0^1 d\lambda \delta(\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{x}}_i + \lambda(\vec{\mathbf{x}}_i - \vec{\mathbf{x}}_j)) \right\rangle \end{aligned}$$

Ainsi, le second terme de la source de pression peut être exprimé comme la divergence d'un tenseur d'ordre trois, le tenseur flux de chaleur lié aux interactions. Il s'agit donc bien d'un terme de surface, correspondant à des échanges d'énergie entre volumes élémentaires voisins.

Annexe B

Calcul de deux intégrales tensorielles

Nous allons calculer deux intégrales tensorielles, utiles pour notre théorie.

B.1 Un tenseur d'ordre deux

Soit h une fonction de R . Nous cherchons à évaluer l'intégrale suivante :

$$\overline{\overline{S}} = \int d\vec{\mathbf{R}} h(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}}$$

où $\vec{\mathbf{e}}$ est le vecteur unitaire de mêmes sens et direction que $\vec{\mathbf{R}}$.

Remarquons que nous avons :

$$\begin{cases} \overline{\overline{S}} &= \int dR R^{d-1} h(R) \int d\Omega \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \\ \int d\vec{\mathbf{R}} h(R) &= \int dR R^{d-1} h(R) \int d\Omega \end{cases}$$

Le quotient de ces deux équations permet de trouver la relation suivante :

$$\overline{\overline{S}} = [h] \frac{\int d\Omega \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}}}{\int d\Omega}$$

où le crochet désigne l'intégrale sur $\vec{\mathbf{R}}$.

Le rapport qui apparaît dans l'expression précédente est un tenseur d'ordre deux symétrique et isotrope, donc proportionnel à l'identité. Pour calculer le coefficient de proportionnalité, il suffit de calculer un terme diagonal de ce tenseur. Il y a plusieurs méthodes ; par exemple, si on aime manipuler les fonction gamma, on peut passer par les coordonnées sphériques généralisées. Le coefficient trouvé est finalement $1/d$. Ainsi, nous avons :

$$\boxed{\int d\vec{\mathbf{R}} h(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} = \frac{[h]}{d} \overline{\overline{\mathbf{I}}}}$$

B.2 Un tenseur d'ordre quatre

Nous cherchons à déterminer une intégrale similaire à la précédente :

$$\overline{\overline{\overline{T}}} = \int d\vec{\mathbf{R}} h(R) \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}} \vec{\mathbf{e}}$$

De même que pour l'ordre deux, nous avons :

$$\overline{\overline{T}} = [h] \frac{\int d\Omega \vec{e} \vec{e} \vec{e} \vec{e}}{\int d\Omega}$$

Le rapport est cette fois-ci un tenseur d'ordre quatre, isotrope et complètement symétrique, donc proportionnel à $\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}$. Le coefficient de proportionnalité est trouvé par un calcul assez lourd, et vaut $1/d(d+2)$. Nous avons ainsi :

$$\boxed{\int d\vec{\mathbf{R}} h(R) \vec{e} \vec{e} \vec{e} \vec{e} = \frac{[h]}{d(d+2)} (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})}$$

Annexe C

Programme utilisé pour la simulation

Nous avons utilisé le langage de programmation Fortran 77, en particulier parce qu'un langage impératif est bien adapté aux lourdes tâches itératives nécessaires à une simulation numérique comme la nôtre.

```
program main

  implicit real*8 (a-h,o-y)
  implicit integer (i-n)
  implicit logical (z)
  character * 3 chainenombre
  character * 15 filerresult

  parameter(npartmax=1000,ndivymesure=50)

  common/niteration /npas
  common/freqmesure /nregarde,nwrite
  common/iteration /n

  common/nbilles /npart
  common/hauteur /ymax

  common/positions /r(npartmax,2)
  common/vitesses /v(npartmax,2)
  common/masses /poids(npartmax)

  common/resultdensi/resultrho(ndivymesure)
  common/resultvitss/resultvx(ndivymesure)
  common/resultvit2/resultv2x(ndivymesure),resultv2y(ndivymesure)
  common/except /nexceptun

  nsequence=1
  call initialisations()
  naccompli = 0
  isequence = 0

c    debut d une sequence

10    isequence = isequence + 1
1001  format(I3)
```

```

nexceptun = 0

do 11 i=1,ndivymesure
  resultrho(i) = 0.D0
  resultvx(i) = 0.D0
  resultv2x(i) = 0.D0
  resultv2y(i) = 0.D0
11 continue

do 20 n=naccompli+1,naccompli+npas
  call pasdebase()
  if (zregarde()) then
    call mesures()
  endif

  if (mod(n,nwrite).eq.0) then
    avancement = 1.D2*n/npas
    print*,avancement,' percent complete'

    open(1,file='config.txt',status='unknown')
    do i=1,npart
      vx=v(i,1)
      if (poids(i).lt.0.) then
        vx=99999
        if (r(i,2).lt.ymax/2) vx=-99999
      endif
      write (1,*) r(i,1),r(i,2),vx,v(i,2)
    enddo
    write (1,*) n
    close(1)

    inum=n/nwrite
    filerresult = 'result'
    call addnumtostring(filerresult,inum)

    open(1,file=filerresult,status='unknown')
    nmesures = n/nregarde
    do 21 i=1,ndivymesure
      y=(i-5.D-1)*ymax/ndivymesure
      rho = resultrho(i)/nmesures
      vx = resultvx(i)/nmesures
      v2x= resultv2x(i)/nmesures-vx**2
      v2y= resultv2y(i)/nmesures
      write (1,1000) y,rho,vx,v2x,v2y
21 continue

    close(1)

    open(1,file='config_ini.txt',status='unknown')
    do 22 i=1,npart
      vx=v(i,1)
      if (poids(i).lt.0.) then
        vx=99999
        if (r(i,2).lt.ymax/2) vx=-99999
      endif
      write (1,*) r(i,1),r(i,2),vx,v(i,2)

```

```

22      continue
        close(1)

        endif

20      continue

1000     format(5(e15.9,1x))

        naccompl = naccompl + npas

        if (isequence.lt.nsequence) then
          goto 10
        endif
        print*, 'exceptions', nexceptun

    end

c *****
c *****

subroutine initialisations()

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

    parameter(npartmax=1000)

    common/pidevache /pi

    common/pasdetemps /dt
    common/niteration /npas
    common/freqmesure /nregarde,nwrite
    common/magouille /coeflambd

    common/nbilles /npart
    common/largeur /xmax
    common/hauteur /ymax
    common/epsseurmur /ampliw
    common/pulsspatial/pulsationw
    common/vitessesemur /U
    common/vitlubr /Vlubr
    common/vitcore /Vcore
    common/vitmurs /Vmurs
    common/distcar /sigma
    common/rayoncoupur/rcut
    common/Hcut/ hcut, spring

    common/rmoy /rayonmoyen
    common/radius /rayon(npartmax)
    common/masses /poids(npartmax)

    common/temps /t
    common/positions /r(npartmax,2)
    common/vitesse /v(npartmax,2)
    common/vitetimee /vtilde(npartmax,2)

```

```

common/casierx      /kasepremierex,kasedernierex,dimcasex
common/casiery      /kasepremierey,kasedernierey,dimcasey

pi = acos(-1.D0)

open(16,file='parametres_simulation.txt',status='old')
  read(16,*) dt
  read(16,*) npas
  read(16,*) nregarde,nwrite
  read(16,*) coeflambda
close(16)

open(16,file='parametres_physiques.txt',status='old')
  read(16,*) npart
  read(16,*) xmax,ymax
  read(16,*) U
  read(16,*) Vlubr
  read(16,*) sigma
  read(16,*) rcut
  read(16,*) hcut,spring
close(16)

open(16,file='parametres_bibilles.txt',status='old')
  read(16,*) rayonmoyen
close(16)

open(16,file='carac_bibilles.txt',status='old')
  do 1 i=1,npart
    read(16,*) rayon(i),poids(i)
1    continue
close(16)

open(16,file='config_ini.txt',status='old')
  do 2 i=1,npart
    read(16,*) r(i,1),r(i,2),v(i,1),v(i,2)
    if (v(i,1).eq.99999.) then
      poids(i)=-99999
      v(i,1)=U/2.
      v(i,2)=0.
      r(i,2)=0.d0
    elseif (v(i,1).eq.-99999.) then
      poids(i)=-99999
      v(i,1)=-U/2.
      v(i,2)=0.
      r(i,2)=ymax
    endif
2    continue
close(16)

do 3 i=1,npart
  vtilde(i,1)=v(i,1)
  vtilde(i,2)=v(i,2)
3 continue

kasepremierex = 0

```

```

kasedernierex = int(xmax/rcut) - 1
dimcasex = xmax/(kasedernierex+1)
kasepremierey = 0
kasedernierey = int(ymax/rcut) - 1
dimcasey = ymax/(kasedernierey+1)
call cree_kouplescases()

t = 0.D0
call accelerationtotale()

end

c *****
c *****

subroutine cree_kouplescases()

implicit real*8 (a-h,o-y)
implicit integer (i-n)
implicit logical (z)

parameter(ncouplesmax=10000)

common/casierx /kasepremierex,kasedernierex,dimcasex
common/casiery /kasepremierey,kasedernierey,dimcasey
common/couplecases/kouplescases(ncouplesmax,5)
common/nbr couples /ncouplescases

icouplecases = 0

do 202 icase1 = kasepremierex,kasedernierex
  do 201 jcase1 = kasepremierey,kasedernierey-1
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = icase1
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,3) = icase1
    kouplescases(icouplecases,4) = jcase1 + 1
    kouplescases(icouplecases,5) = 0
201   continue
202   continue

do 204 icase1 = kasepremierex,kasedernierex-1
  do 203 jcase1 = kasepremierey,kasedernierey
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = icase1
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,3) = icase1 + 1
    kouplescases(icouplecases,4) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,5) = 0
203   continue
204   continue

do 206 icase1 = kasepremierex,kasedernierex-1
  do 205 jcase1 = kasepremierey,kasedernierey-1
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = icase1
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1

```

```

        kouplescases(icouplecases,3) = icase1 + 1
        kouplescases(icouplecases,4) = jcase1 + 1
        kouplescases(icouplecases,5) = 0
205     continue
206     continue

do 208 icase1 = kasepremierex,kasedernierex-1
do 207 jcase1 = kasepremierex+1,kasedernierex
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = icase1
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,3) = icase1 + 1
    kouplescases(icouplecases,4) = jcase1 - 1
    kouplescases(icouplecases,5) = 0
207     continue
208     continue

do 209 jcase1 = kasepremierex,kasedernierex
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = kasedernierex
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,3) = kasepremierex
    kouplescases(icouplecases,4) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,5) = 1
209     continue

do 210 jcase1 = kasepremierex,kasedernierex-1
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = kasedernierex
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,3) = kasepremierex
    kouplescases(icouplecases,4) = jcase1 + 1
    kouplescases(icouplecases,5) = 1
210     continue

do 211 jcase1 = kasepremierex+1,kasedernierex
    icouplecases = icouplecases + 1
    kouplescases(icouplecases,1) = kasedernierex
    kouplescases(icouplecases,2) = jcase1
    kouplescases(icouplecases,3) = kasepremierex
    kouplescases(icouplecases,4) = jcase1-1
    kouplescases(icouplecases,5) = 1
211     continue

    ncouplescases = icouplecases

end

c *****
c *****

subroutine pasdebase()

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

```

```

parameter(npartmax=1000)

common/nbilles      /npart

common/iteration    /n
common/pasdetemps  /dt
common/magouille   /coeflambda

common/temps       /t
common/positions   /r(npartmax,2)
common/vitesses    /v(npartmax,2)
common/vitetimee   /vtilde(npartmax,2)
common/accel       /a(npartmax,2)

common/masses      /poids(npartmax)
common/accelprev   /aprev(npartmax,2)

```

```
do 20 i=1,npart
```

c on separe le cas des particules du murs

```

if (poids(i).lt.0.) then
  xprov=r(i,1) + dt*v(i,1)
  yprov=r(i,2)
else
  xprov = r(i,1) + dt*v(i,1) + (dt**2/2)*a(i,1)
  yprov = r(i,2) + dt*v(i,2) + (dt**2/2)*a(i,2)
endif

if (znonsortie(i,xprov,yprov,t)) then
  r(i,1) = xprov
  r(i,2) = yprov
  if (poids(i).lt.0.) then
    vtilde(i,1) = v(i,1)
    vtilde(i,2) = v(i,2)
  else
    vtilde(i,1) = v(i,1) + coeflambda*dt*a(i,1)
    vtilde(i,2) = v(i,2) + coeflambda*dt*a(i,2)
  endif
  aprev(i,1) = a(i,1)
  aprev(i,2) = a(i,2)
else
  call exceptiontypeun(i)
endif

```

20 continue

```
call correctionscylinriques()
```

```
t = n * dt
call accelerationtotale()
```

```
do 30 i=1,npart
  if (poids(i).gt.0.) then
    v(i,1) = v(i,1) + dt*(a(i,1)+aprev(i,1))/2
    v(i,2) = v(i,2) + dt*(a(i,2)+aprev(i,2))/2
  endif

```

```

30      continue

      end

c *****
c *****

      subroutine accelerationtotale()

      implicit real*8 (a-h,o-y)
      implicit integer (i-n)
      implicit logical (z)

      parameter(npartmax=1000)

      common/nbilles      /npart
      common/accel        /a(npartmax,2)

      do 110 i=1,npart
         a(i,1) = 0.D0
         a(i,2) = 0.D0
110    continue

      call acceleration_interaction()

      end

c *****
c *****

      subroutine acceleration_interaction()

      implicit real*8 (a-h,o-y)
      implicit integer (i-n)
      implicit logical (z)

      parameter(ncouplesmax=10000)

      common/casierx      /kasepremierex,kasedernierex,dimcasex
      common/casiery      /kasepremierex,kasedernierex,dimcasey
      common/casier       /kasier(0:100,-10:100,0:40)

      common/couplecases/kouplescases(ncouplesmax,5)
      common/nbrcouples /ncouplescases

      call cree_casier()

      do 303 icouplecases = 1,ncouplescases
         icase1 = kouplescases(icouplecases,1)
         jcase1 = kouplescases(icouplecases,2)
         icase2 = kouplescases(icouplecases,3)
         jcase2 = kouplescases(icouplecases,4)
         korrec_cyl = kouplescases(icouplecases,5)
         noccupation1 = kasier(icase1,jcase1,0)
         noccupation2 = kasier(icase2,jcase2,0)
         do 302 k1 = 1,noccupation1
            i = kasier(icase1,jcase1,k1)

```

```

        do 301 k2 = 1,noccupation2
            j = kasier(icase2,jcase2,k2)
            call interaction(i,j,korrec_cyl)
301         continue
302     continue
303 continue

do 307 icase = kasepremierex,kasedernierex
do 306 jcase = kasepremierex,kasedernierex
    noccupation = kasier(icase,jcase,0)
do 305 k1 = 1,noccupation-1
do 304 k2 = k1+1,noccupation
    i = kasier(icase,jcase,k1)
    j = kasier(icase,jcase,k2)
    call interaction(i,j,0)
304         continue
305     continue
306     continue
307 continue

end

c *****
c *****

subroutine interaction(i,j,korrec_cyl)

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

    parameter(npartmax=1000)

    common/vitlubr      /Vlubr
    common/vitcore     /Vcore
    common/distcar     /sigma
    common/Hcut/ hcut,spring
    common/radius      /rayon(npartmax)
    common/masses      /poids(npartmax)

    common/positions   /r(npartmax,2)
    common/vitestimee  /vtilde(npartmax,2)
    common/accel       /a(npartmax,2)

    common/rayoncoupur/rcut
    common/largeur     /xmax

    dimension vectunit(2)

    fspring=0.
    dist = sqrt((r(i,1)-r(j,1)-korrec_cyl*xmax)**2
$           +(r(i,2)-r(j,2))**2)

    if (dist.le.rcut) then

        vectunit(1) = (r(j,1)+korrec_cyl*xmax-r(i,1))/dist
        vectunit(2) = (r(j,2)-r(i,2))/dist

```

```

        distbords = dist - (rayon(i) + rayon(j))
        vprojetee = (vtilde(i,1)-vtilde(j,1))*vectunit(1) +
$           (vtilde(i,2)-vtilde(j,2))*vectunit(2)
        if (distbords.lt.hcut) then
            fspring=spring*(distbords-hcut)
            distbords=hcut
        endif

        forcelubr = - (Vlubr/distbords)*vprojetee
        force=forcelubr+fspring
        a(i,1) = a(i,1) + force*vectunit(1)/poids(i)
        a(i,2) = a(i,2) + force*vectunit(2)/poids(i)
        a(j,1) = a(j,1) - force*vectunit(1)/poids(j)
        a(j,2) = a(j,2) - force*vectunit(2)/poids(j)

    endif

end

c *****
c *****

subroutine cree_casier()

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

    parameter(npartmax = 1000)

    common/nbilles      /npart
    common/positions   /r(npartmax,2)
    common/vitesses    /v(npartmax,2)
    common/masses      /poids(npartmax)
    common/casierx     /kasepremierex,kasedernierex,dimcasex
    common/casiery     /kasepremierey,kasedernierey,dimcasey
    common/casier      /kasier(0:100,-10:100,0:40)

c     On initialise le casier. Pas besoin de vider les listes,
c     il suffit de declarer qu elles sont de longueur 0

    do 620 icase = kasepremierex,kasedernierex
        do 610 jcase = kasepremierey,kasedernierey
            kasier(icase,jcase,0) = 0
610     continue
620     continue

c     On passe en revue toutes les particules et on les met dans
c     leur case.

    do 630 ipart = 1,npart

        icase = int(r(ipart,1)/dimcasex)
        if (icase.gt.100) then
            print*, 'Erreur : particule sortie par la droite'
        endif
        if (icase.lt.0) then

```

```

        print*, 'Erreur : particule sortie par la gauche'
    endif
    if (jcase.gt.100) then
        print*, 'Erreur : particule sortie par le haut'
    endif
    if (icase.lt.-10) then
        print*, 'Erreur : particule sortie par le bas'
    endif
    jcase = int(r(ipart,2)/dimcasey)
    if (jcase.gt.kasedernierey) then
        jcase=kasedernierey
    endif
    kasier(icase,jcase,0) = kasier(icase,jcase,0) + 1

    if (kasier(icase,jcase,0).gt.40) then
        print*, 'Erreur : trop de particules dans la cellule'
        PRINT*, ICASE, JCASE, r(ipart,2)
        open(16, file='config_ini.txt', status='old')
        do 2 i=1, npart
            read(16, *) r(i,1), r(i,2), v(i,1), v(i,2)
            if (v(i,1).eq.99999.) then
                poids(i)=-99999
                v(i,1)=U
                v(i,2)=0.
                r(i,2)=0.d0
            elseif (v(i,1).eq.-99999.) then
                poids(i)=-99999
                v(i,1)=0.
                v(i,2)=0.
                r(i,2)=ymax
            endif
2           continue
            close(16)
            stop
        endif

        kasier(icase,jcase,kasier(icase,jcase,0)) = ipart

630    continue

    end

c *****
c *****

subroutine correctionscyndriques()

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

    parameter(npartmax=1000)

    common/nbilles    /npart
    common/largeur    /xmax
    common/positions  /r(npartmax,2)

```

```

do 60 i=1,npart

    if (r(i,1).lt.(0.D0)) then
        r(i,1) = r(i,1) + xmax
    endif

    if (r(i,1).ge.xmax) then
        r(i,1) = r(i,1) - xmax
    endif

60    continue

end

c *****
c *****

logical function znonsortie(i,x,y,t)

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

    parameter(npartmax=1000)
    parameter (epsilon=1D-2)
    common/radius      /rayon(npartmax)
    common/epsseurmur /ampliw
    common/hauteur     /ymax

    if ((y.ge.-epsilon).and.(y.le.ymax+epsilon)) then
        znonsortie = .true.
    else
        znonsortie = .false.
    endif

end

c *****
c *****

subroutine exceptiontypeun(i)

    implicit real*8 (a-h,o-y)
    implicit integer (i-n)
    implicit logical (z)

    parameter(npartmax=1000)

    common/vitesses      /v(npartmax,2)
    common/vitestimee    /vtilde(npartmax,2)
    common/accelprev     /aprev(npartmax,2)

    common/except        /nexceptun

    nexceptun = nexceptun + 1

```

```

v(i,1)=0.D0
v(i,2)=0.D0
vtilde(i,1) = 0.D0
vtilde(i,2) = 0.D0
aprev(i,1) = 0.D0
aprev(i,2) = 0.D0

```

```
end
```

```

C *****
C *****

```

```
logical function zregarde()
```

```

implicit real*8 (a-h,o-y)
implicit integer (i-n)
implicit logical (z)

common/iteration /n
common/freqmesure /nregarde,nwrite

zregarde = (mod(n,nregarde).eq.0)

```

```
end
```

```

C *****
C *****

```

```
subroutine mesures()
```

```

implicit real*8 (a-h,o-y)
implicit integer (i-n)
implicit logical (z)

parameter(npartmax=1000,ndivymesure=50)

common/nbilles /npart
common/largeur /xmax
common/hauteur /ymax
common/rmoy /rayonmoyen

common/positions /r(npartmax,2)
common/vitesses /v(npartmax,2)

common/pidevache /pi

common/resultdensi/resultrho(ndivymesure)
common/resultvitss/resultvx(ndivymesure)
common/resultvit2/resultv2x(ndivymesure),resultv2y(ndivymesure)

dimension card(ndivymesure)
dimension sommevx(ndivymesure),sommev2x(ndivymesure)
$ ,sommev2y(ndivymesure)

pasymesure=ymax/ndivymesure

do 788 i=1,ndivymesure

```

```

        card(i) = 0
        sommevx(i) = 0.D0
        sommev2x(i) = 0.D0
        sommev2y(i) = 0.D0
788      continue

      do 798 ipart=1,npart
        lieu = 1 + int(r(ipart,2)/pasymasure)
        if (lieu.lt.1) lieu = 1
        if (lieu.gt.ndivymasure) lieu = ndivymasure
        card(lieu) = card(lieu) + 1
        sommevx(lieu) = sommevx(lieu) + v(ipart,1)
        sommev2x(lieu) = sommev2x(lieu) + v(ipart,1)**2
        sommev2y(lieu) = sommev2y(lieu) + v(ipart,2)**2
798      continue

      do 808 i=1,ndivymasure
        if (card(i).lt.1) goto 808
        resultrho(i) = resultrho(i)+
$           (card(i)*pi*rayonmoyen**2)/(pasymasure*xmax)
        resultvx(i) = resultvx(i)+sommevx(i)/card(i)
        resultv2x(i) = resultv2x(i)+sommev2x(i)/card(i)
        resultv2y(i) = resultv2y(i)+sommev2y(i)/card(i)
808      continue

      end

```

```

c *****
c *****

```

cc this subroutine adds the number 'number' to the string 'string'

```

      subroutine addnumtostring(string,number)

      implicit real*8(a-h,o-z)
      implicit integer(i-n)
      integer*4 i, strlen, number, nodig, num, snum
      character*(*) string

      snum=number
      do i=len(string),1,-1
        if (string(i:i) .ne. ' ') goto 10
      enddo
10     strlen=i

      nodig=int(log10(1.0*snum+0.1))+1
      if( snum .eq. 0 ) nodig=1
      do i=nodig,1,-1
        num=snum/10**(i-1)
        string(strlen+1:strlen+1)=char(48+num)
        strlen=strlen+1
        snum=snum-num*10**(i-1)
      enddo

      return

      end

```

```

c *****
c *****

c this function computes the length of a string
c c'est pour eviter qu'il y ait un blanc entre le nom du fichier
c et son numero

    integer*4 function strlen(string)

        character*(*) string
        integer i

        do i=len(string),1,-1
            if (string(i:i) .ne. ' ') goto 100
        enddo ! i

100    strlen=i

end

```

Annexe D

Bibliographie

Résultats expérimentaux

Profils de vitesses de pâtes granulaires

C. Barentin, B. Pouligny, communication privée, article en préparation.

Profils de vitesses de mousses

G. Debregeas, H. Tabuteau, J.-M. di Meglio, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 178305 (2001).

Théorie

Éléments d'une théorie hydrodynamique

Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions* (Addison Wesley, Reading, Mass. 1983).

Modèle d'un système de particules dissipatif avec thermostat

C. A. Marsh, G. Backx, M. H. Ernst, "Static and dynamic properties of dissipative particle dynamics", *Phys. Rev. E* **56**, 1676 (1997).

Théorie continue des bandes de cisaillement dans les granulaires

L. Bocquet, W. Losert, D. Shalk, T. C. Lubensky, J. Gollub, "Granular Flow Dynamics and Forces : Experiment and Continuum Theory", *Phys. Rev. E*, art. 011307, 6501 1307 (2002).

Simulation numérique

Simulation numérique de liquides

M. P. Allen et D. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford 1987).

Programmes utiles en Fortran

www.ulib.org/webRoot/Books/Numerical_Recipes/bookf.html