



HAL
open science

Dérivation de modèles constitutifs : de la microstructure à la rhéologie des suspensions denses molles

Nicolas Cuny

► **To cite this version:**

Nicolas Cuny. Dérivation de modèles constitutifs : de la microstructure à la rhéologie des suspensions denses molles. Matière Molle [cond-mat.soft]. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2021. Français. NNT : 2021GRALY069 . tel-03579759

HAL Id: tel-03579759

<https://theses.hal.science/tel-03579759v1>

Submitted on 18 Feb 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Indiquer la spécialité qui figure sur votre carte d'étudiant**

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Nicolas CUNY

Thèse dirigée par

Eric BERTIN, Directeur de Recherche (CNRS)

et codirigée par

Romain MARI, Chargé de Recherche (CNRS)

préparée au sein du **Laboratoire Interdisciplinaire de Physique (UMR 5588)**

dans l'**École Doctorale de Physique**

Dérivation de modèles constitutifs : de la microstructure à la rhéologie des suspensions denses molles

Thèse soutenue publiquement le **Mercredi 10 Novembre 2021**, devant le jury composé de :

Madame Catherine BARENTIN

Professeur, Université Lyon I, Examinatrice

Monsieur Ludovic BERTHIER

Directeur de Recherche (CNRS), Université de Montpellier, Examineur

Monsieur Michel CLOITRE

Directeur de Recherche (CNRS), ESPCI Paris, Président du Jury

Monsieur Vincent DEMERY

Maître de Conférence, ESPCI Paris, Rapporteur

Monsieur Pierre SARAMITO

Directeur de Recherche (CNRS), Université Grenoble Alpes, Examineur

Monsieur Gilles TARJUS

Directeur de Recherche, Sorbonne Université, Rapporteur



Remerciements

Le présent mémoire est l'aboutissement de trois années de thèse sous la direction bienveillante d'Eric Bertin et de Romain Mari au sein du Laboratoire Interdisciplinaire de Physique à Grenoble. Je souhaite avant toute chose adresser à Eric et Romain mes remerciements les plus chaleureux pour m'avoir permis de travailler sur un sujet qui m'a beaucoup intéressé et sur lequel j'ai eu plaisir à travailler pendant ces trois ans. Si cette thèse fut pour moi une expérience agréable et profitable, leur encadrement y est pour beaucoup. J'ai bénéficié d'une grande autonomie qui m'a permis de m'épanouir scientifiquement tout en recevant de leur part une attention des plus appréciables aux moments les plus critiques de cette thèse. Leur complémentarité et leur bonne entente a fait de leur association un encadrement bénéfique et plaisant. Outre l'aspect scientifique de cette thèse, ils ont tous les deux veillé à ce qu'elle soit pour moi l'occasion de me familiariser avec tous les aspects du métier de chercheur et m'ont aidé dans la construction de mon projet professionnel. Pour toutes ces raisons, je leur suis reconnaissant et souhaite à tout doctorant de pouvoir bénéficier d'un tel encadrement.

Je remercie également Vincent Démary et Gilles Tarjus d'avoir accepté la lourde responsabilité de rapporteurs malgré un agenda que j'imagine déjà bien rempli. C'est également pour moi un grand plaisir et un grand honneur que de compter dans mon jury de thèse Catherine Barentin, Ludovic Berthier, Michel Cloitre et Pierre Saramito. Ayant eu l'occasion d'assister à des cours de chacun d'entre eux lors de ma scolarité à l'ENS Lyon ou pendant cette thèse, c'est un sentiment particulier que de leur soumettre un travail pour lequel j'ai pu mettre à contribution certains de leurs enseignements.

Au cours de ces trois années au LIPHY j'ai également eu l'occasion de côtoyer bien des personnes qui ont contribué à faire de cette thèse une expérience bénéfique. Je tiens en particulier à remercier l'ensemble de l'équipe PSM qui m'a fourni un cadre de travail agréable au quotidien. J'ai beaucoup apprécié de pouvoir découvrir d'autres thèmes de recherche que le mien et de pouvoir discuter de mes propres travaux avec les membres de l'équipe. Je remercie également Mourad Ismail et Benjamin Dollet d'avoir participé à mon comité de suivi de thèse pendant ces trois ans. Un grand merci aussi à Philippe Beys qui a toujours fait preuve d'une grande disponibilité pour répondre à mes différents problèmes et questions en matière d'informatique. Son aide fut toujours très précieuse et rapide. Je remercie également Jean-Louis Barrat qui, en acceptant de m'accorder l'asile sanitaire dans son bureau cette dernière année, m'a permis de conserver des conditions de travail acceptables au plus fort des restrictions sanitaires.

Je souhaite enfin profiter de cette occasion pour remercier ceux qui m'ont soutenus au quotidien, et ce bien avant que je ne commence cette thèse, à savoir ma famille. J'ai une pensée toute particulière pour mes parents, Michel et Laurence, qui m'ont toujours offert un soutien précieux et sans faille dans tous mes projets. Il m'est impossible de les remercier à la mesure de ce qu'ils méritent mais j'espère qu'ils verront dans cette thèse le fruit des efforts et des sacrifices accomplis pour moi ces trois dernières décennies. Je profite donc de ce mémoire, auquel ils ont indirectement contribué, pour leur exprimer ma gratitude et mon amour. Je remercie également mes grands-parents, René et Denise, pour le grand intérêt et la curiosité qu'ils ont témoigné pour mes études en général et cette thèse en particulier. J'ai bien peur de ne pas avoir toujours su leur expliquer clairement l'objet de mes recherches mais leur enthousiasme et leurs encouragements furent toujours une source de motivation. Je profite également de l'occasion de cette thèse pour souhaiter à ma petite sœur Anouk réussite dans ses études et la thèse qui s'annonce à l'horizon pour elle aussi. J'espère qu'il s'agira pour elle aussi d'une expérience enrichissante. Enfin, je souhaite réserver les dernières lignes de ces remerciements à ma femme Rukiye qui a vécu de près cette thèse. Je la remercie du fond du cœur pour sa patience, son soutien et les sacrifices qu'elle a consentis, en particulier lors de la rédaction de ce manuscrit.

Table des matières

Introduction	1
1 Rhéologie des suspensions denses molles	4
1.1 Rhéologie stationnaire : fluides à seuil et fluides rhéofluidifiants	4
1.2 Rhéologie transitoire	8
1.3 Rhéologie oscillatoire	12
2 Approches théoriques de la rhéologie des suspensions denses molles	14
2.1 Description macroscopique	15
2.2 Description mésoscopique : les modèles élastoplastiques	22
2.3 Description microscopique	31
3 Motivations	42
1 Dérivation d'un modèle constitutif exact non-fermé	44
1.1 Modèle de suspension dense de particules molles	44
1.2 Distribution de probabilité, fonctions de corrélation et tenseur des contraintes	45
1.2.1 Fonctions de distribution de probabilité	46
1.2.2 Fonctions de corrélation	47
1.2.3 Définition statistique du tenseur des contraintes	48
1.3 Dynamique de la microstructure	49
1.3.1 Conservation de la probabilité	49
1.3.2 Dynamique de la fonction de corrélation de paire	50
1.4 Équation d'évolution exacte du tenseur des contraintes	52
2 Fermeture du modèle dans le cas de suspensions au-dessus du jamming	55
2.1 Simulations numériques et microstructure des suspensions denses molles au-dessus du jamming	55
2.1.1 Simulations numériques	55
2.1.2 Étude de l'anisotropie de la fonction de corrélation de paire	57
2.2 Paramétrisation de g par un tenseur de structure	59
2.2.1 Paramétrisation de l'anisotropie de g pour de faibles déformations	59
2.2.2 Expression des tenseurs définis comme une intégrale de g	61
2.3 Fermeture de Kirkwood et expression des tenseurs définis par une intégrale de g_3	62
2.3.1 Fermeture de g_3	62
2.3.2 Expression des tenseurs définis par une intégrale de g_3	65
2.4 Paramétrisation de la partie isotrope de la fonction de corrélation de paire	65
2.5 Réduction à une équation tensorielle unique	67
3 Rhéologie 2D au-dessus du jamming	70
3.1 Écriture du modèle constitutif dans différents jeux de variables en écoulement 2D	70
3.1.1 Description des écoulements 2D	70
3.1.2 Écriture cartésienne du modèle constitutif	71
3.1.3 Écriture polaire du modèle constitutif	72
3.2 Rhéologie stationnaire	73
3.2.1 Écoulement stationnaire à faibles taux de déformations, fluide à seuil	73

3.2.2	Condition d'écoulement : critère de von Mises	78
3.2.3	Écoulements stationnaires à grands taux de déformation	80
3.3	Rhéologie transitoire	80
3.3.1	Incrément de taux de déformation, overshoot et undershoot	81
3.3.2	Relaxation des contraintes après arrêt de l'écoulement	84
3.3.3	Fluage	87
3.4	Rhéologie oscillatoire	89
3.4.1	Superposition parallèle	89
3.4.2	Modules de conservation et de perte au seuil de plasticité	90
3.4.3	Évolution des modules de conservation et de perte avec $\bar{\sigma}$	91
3.5	Effet d'un faible bruit thermique	95
3.5.1	Dynamique faiblement thermique de la fonction de corrélation de paire	96
3.5.2	Influence de la température sur la contrainte seuil	98
4	Fermeture du modèle dans le cas de suspensions en-dessous du jamming	100
4.1	Paramétrisation de g	101
4.2	Calcul des tenseurs définis par une intégrale de g en fonction de q	102
4.2.1	Expressions exactes en fonction de q	102
4.2.2	Développement au premier ordre en q	104
4.3	Calcul des tenseurs définis par une intégrale de g_3 en fonction de q	104
4.3.1	Calcul de Γ	104
4.3.2	Calcul de Υ	105
4.4	Modèle constitutif	106
4.5	Rhéologie stationnaire en-dessous du jamming en cisaillement simple	107
4.5.1	Comportement à déformation nulle	107
4.5.2	Courbes d'écoulement, rhéofluidification	108
	Discussions et perspectives	111
1	Originalité du passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique dans l'approche présentée	114
2	Comparaison des modèles constitutifs obtenus avec les modèles macroscopiques déjà existants	115
3	Vers un modèle 3D?	117
	Annexes	120
A	Évaluation des termes tensoriels	120
A.1	Expression du tenseur Λ	120
A.2	Décomposition de $\nabla u^\infty \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \nabla u^{\infty T}$	121
A.3	Démonstration des propriétés de calcul des tenseurs symétriques de trace nulle en dimension deux	122
B	Évaluation des intégrales impliquant g_3	124
B.1	Calcul de Γ	125
B.2	Calcul de Υ	127
C	Expression des coefficients en fonction de r^* et développement en p	129
C.1	Expression des coefficients en fonction de r^*	129
C.2	Développement en p	130
D	Calcul du tenseur Ψ	132

E	Dynamique des coefficients de Fourier	134
E.1	Développement de Fourier angulaire	134
E.2	Fermeture des équations	136
E.3	Résolution numérique	139
	Bibliographie	140

Introduction

Si, à notre échelle, nous percevons naturellement la plupart des matériaux composant notre environnement comme des milieux continus à l'état solide, liquide ou gazeux, la réalité physique s'avère plus complexe que cela. En effet, tous ces matériaux sont en réalité constitués d'un grand nombre d'entités interagissant les unes avec les autres. La plupart de ces matériaux se trouvent dans un état désordonné, soit qu'ils aient été « piégés » dans cet état à un moment de leur histoire (par exemple lors d'un procédé de trempe pour les verres), soit du fait des caractéristiques des entités les constituant (forme, polydispersité...). Ces matériaux sont appelés **matériaux amorphes**. La nature et la taille des entités constitutives ainsi que le type d'interactions à travers lesquelles elles interagissent entre elles varient. Il peut s'agir d'atomes ou de molécules interagissant à distance, de particules élastiques se repoussant à travers des forces de contact ou bien encore de bulles ou de gouttes interagissant par des effets de tension de surface. Les tailles caractéristiques peuvent ainsi varier de l'ångström au centimètre [Nicolas et al., 2018]. Nous présentons en Fig. 1 différents matériaux amorphes, classés selon la taille de leurs entités constitutives. Cette dernière détermine l'importance relative des différents effets physiques à l'échelle des entités. Ainsi, les entités les plus petites sont très sensibles au bruit thermique et très peu à la gravité tandis que la dynamique des plus grandes est, au contraire, essentiellement dominée par les effets de gravité tandis que le mouvement brownien est négligeable. Les matériaux amorphes peuvent se comporter aussi bien comme un solide que comme un fluide. Dans leur état fluide, leurs propriétés mécaniques s'avèrent bien plus complexes que celles des fluides newtoniens classiques, ce qui leur vaut l'appellation de **fluides complexes**. Ces derniers sont omniprésents dans la nature et dans nombre de domaines de l'activité humaine tels que l'alimentaire (mousses, sauces...etc) [Fischer and Windhab, 2011], les cosmétiques (crèmes de beauté, gels...etc) [Casanova and Santos, 2016], le génie civil (béton) [Banfill, 2003], l'industrie (peintures, plastiques, verres...etc) [Hester and Squire, 1997, Coussot, 2005] ou encore le médical (sang et autres fluides biologiques) [Haynes, 1961]. L'omniprésence et les propriétés remarquables de ces matériaux (rhéofluidification, rhéoépaississement, thixotropie...etc) font d'eux l'un des principaux objets d'étude des rhéologues tant du point de vue de la recherche fondamentale que de la recherche appliquée.

Trois grandeurs principales contrôlent le comportement mécanique des matériaux amorphes : la température du système, la densité en entités constitutives et la contrainte extérieure à laquelle est soumis le système [Liu and Nagel, 1998]. La Fig. 2 présente un diagramme de phase schématisé des matériaux amorphes en fonction de ces trois grandeurs. Dans les systèmes thermiques tels que les verres ou les gels, il est possible d'observer une transition solide-fluide à la **température de transition vitreuse**. En-dessous de cette température le matériau possède une certaine rigidité faisant de lui un solide tandis qu'il s'écoule comme un fluide pour des températures plus élevées. Il est également possible d'observer une transition fluide-solide en augmentant la densité en entités constitutives du système, la nature de cette transition variant cependant selon si le système est thermique ou non. Dans le cas d'un système thermique, cette transition est une transition vitreuse semblable à celle observée en faisant varier la température. Dans le cas de systèmes athermiques, cette transition est de nature purement géométrique, les entités constitutives ne pouvant pas s'organiser de façon à ne pas être en contact avec leurs voisines au-delà d'une certaine densité, appelée **densité de blocage** (ou de jamming) [Liu et al., 2011]. Elles forment alors un réseau capable de résister à une contrainte extérieure suffisamment faible. Dans ce cas, il est de nouveau possible d'observer une transition entre un état solide et un état fluide en augmentant la contrainte extérieure appliquée au matériau. Au-dessus d'une certaine contrainte, appelée **contrainte seuil**, le système est en effet fluidifié [Bonn et al., 2017]. Les matériaux présentant cette transition fluide-solide en contrainte sont qualifiés de **fluides à seuil**. Ces derniers font l'objet d'un grand intérêt puisqu'ils peuvent être

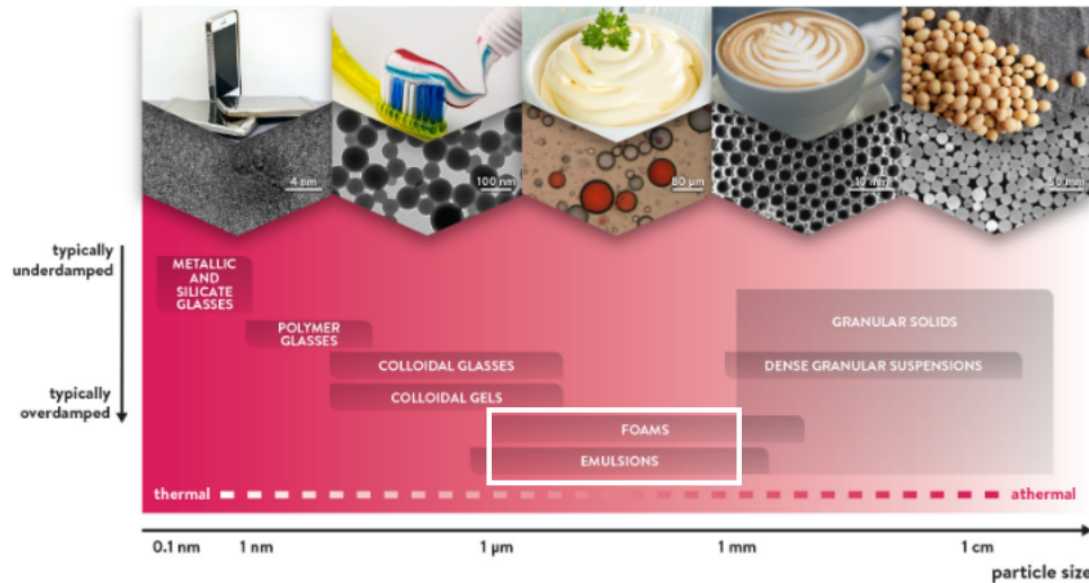


FIGURE 1 – **Vue d’ensemble de matériaux amorphes** (illustration tirée de [Nicolas et al., 2018], se référer à cet article pour les références des images). *De gauche à droite, première ligne* : (1) téléphone portable dont la plupart des composants sont des verres métalliques ; (2) dentifrice ; (3) mayonnaise ; (4) mousse de café ; (5) graines de soja. *Seconde ligne* : (1) image de microscopie électronique en transmission (MET) d’un verre métallique de $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{45}\text{Ti}_5$; (2) image MET d’un mélange de particules de PLLA et PS ; (3) émulsion de gouttes d’eau dans une huile de silicone ; (4) mousse de savon ; (5) empilement polydisperse de cylindres en nylon. *En-dessous* : Graphique présentant différents solides amorphes classés en fonction de la taille et du régime d’amortissement de leurs entités constitutives. Nous avons encadré en blanc le type de système concerné par le cadre de cette thèse.

déformé facilement tout en gardant leur forme une fois en l’absence de perturbation extérieure trop importante.

Les **suspensions**, dans lesquelles les entités constitutives sont immergées dans un fluide suspensant, forment un vaste sous-ensemble des matériaux amorphes. Dans celles-ci, des effets hydrodynamiques viennent alors s’ajouter aux autres interactions. Les entités constitutives interagissent alors entre elles à travers des interactions hydrodynamiques de longue portée mais également avec le fluide suspensant qui exercent sur elles une force de traînée visqueuse. Ces systèmes biphasiques sont étudiés depuis plus d’un siècle et les premiers travaux d’Einstein sur la viscosité de suspensions diluées [Einstein, 1906]. Les suspensions ont historiquement été traitées comme un problème de mécanique des fluides. Cette approche est particulièrement adaptée dans le régime dilué où la dynamique est dominée par les interactions hydrodynamiques entre entités constitutives. Cependant, dans le cas de **suspensions denses**, lorsque le matériau est constitué à plus de 10% en volume d’entités constitutives, la mécanique des fluides ne suffit plus à expliquer les propriétés du matériau [Denn and Morris, 2014, Guazzelli and Pouliquen, 2018]. La modélisation mécanique des suspensions denses à l’échelle macroscopique sous forme de milieu continu est un enjeu de taille tant à cause de ses applications industrielles que de son apport à la compréhension de la physique de ces matériaux. Il s’agit d’un problème mobilisant plusieurs domaines de la science tels que la mécanique des milieux continus, la mécanique des fluides, les mathématiques appliquées ou encore la physique statistique. Il n’existe pas à ce jour de théorie complète permettant de décrire les suspensions denses comme un milieu continu tel que l’analogie des équations de Navier-Stokes pour les fluides newtoniens, par exemple. S’il existe une quantité importante de modèles phénoménologiques permettant de décrire ponctuellement de façon satisfaisante les suspensions denses à l’échelle macroscopique, ces derniers ne dérivent pas de principes premiers et sont pour la plupart aveugles quant à ce qui se passe à l’échelle des entités constitutives, ne permettant pas, par exemple, d’expliquer les propriétés mécaniques macroscopiques par le comportement des entités constitutives [Oldroyd and Wilson, 1950, Thien and Tanner, 1977, Saramito, 2007, Kamani et al., 2021].

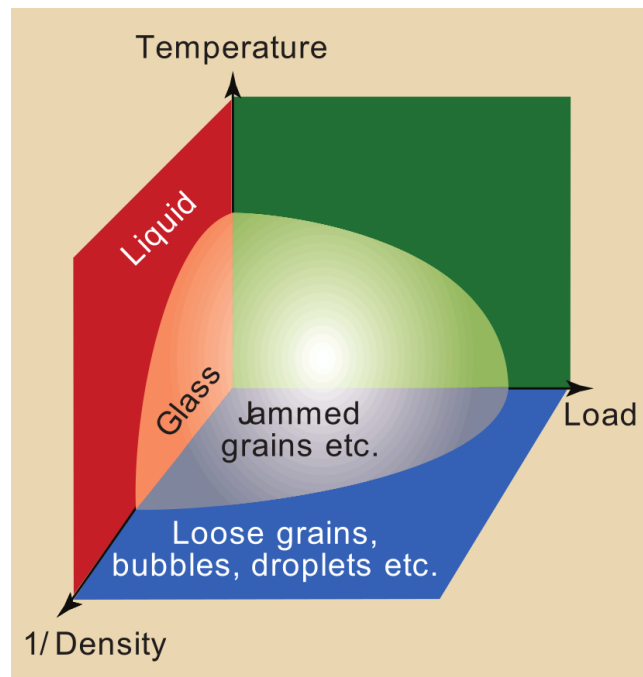


FIGURE 2 – **Diagramme de phase schématisé des matériaux amorphes.** Figure issue de [Liu and Nagel, 1998]

L'objet de cette thèse est de proposer une dérivation permettant d'obtenir des modèles constitutifs macroscopiques à partir de principes premiers à l'échelle des entités constitutives. Les modèles dérivés de la sorte permettent une description continue des suspensions au même titre que les modèles phénoménologiques déjà existant tout en gardant un lien avec l'échelle des entités constitutives. Il s'agit d'un travail original et exploratoire dont l'intérêt consiste à proposer une méthode permettant de dériver un modèle constitutif à partir de la dynamique des entités constitutives et d'illustrer l'intérêt d'un tel modèle. Il ne s'agit en aucun cas, à ce stade, de proposer un modèle permettant une meilleure description quantitative des suspensions denses que ce que proposent les modèles déjà existants. La richesse de la physique à l'œuvre dans les suspensions denses impliquant une complexité trop grande pour un travail exploratoire, nous avons réduit notre étude à l'ensemble plus restreint des **suspensions denses molles** où seuls les effets d'élasticité des particules et de couplage hydrodynamique au fluide suspensé ont une importance dans la mécanique du système. La taille caractéristique des entités constitutives de ces suspensions varie du micromètre au millimètre, si bien que celles-ci sont suffisamment grandes pour que les effets thermiques puissent être négligés, mais demeurent suffisamment peu massives, de sorte que les effets inertiels puissent aussi être négligés. Nous considérons par ailleurs des matériaux où la rigidité des entités constitutives est suffisante pour que les forces élastiques prédominent sur les effets thermiques. Nous nous intéressons toutefois à des systèmes où la rigidité des entités constitutives demeure finie et ne considérons donc pas les effets de volume exclu propres aux sphères dures. La Fig. 3 reproduit la classification de différentes particules rencontrées dans les suspensions denses en fonction de leur rigidité proposée par [Vlassopoulos and Cloitre, 2014] et où la rigidité des particules est quantifiée par le rapport $\mu a^3 / (k_B T)$, où μ est le module d'élasticité des particules, a leur taille caractéristique, k_B la constante de Boltzmann et T la température du système. Ce classement nous permet de déterminer un ensemble de systèmes de référence auxquels nous souhaitons nous comparer : suspensions de polymères en étoile, suspensions de microgels ou encore émulsions. Il est possible de rajouter à cette liste les mousses liquides, formées de bulles gazeuses dans une phase liquide, bien que celles-ci ne soient généralement pas considérées comme des suspensions. Nous nous intéressons à ces matériaux dans un régime suffisamment dense (généralement légèrement en-dessous ou au-dessus de la densité de jamming) pour que les interactions hydrodynamiques entre entités constitutives puissent être négligées à cause des effets d'écrantage.

Nous nous proposons dans cette introduction de présenter dans un premier temps les caractéristiques principales de la rhéologie des suspensions denses molles. Nous ferons ensuite une revue des différents modèles

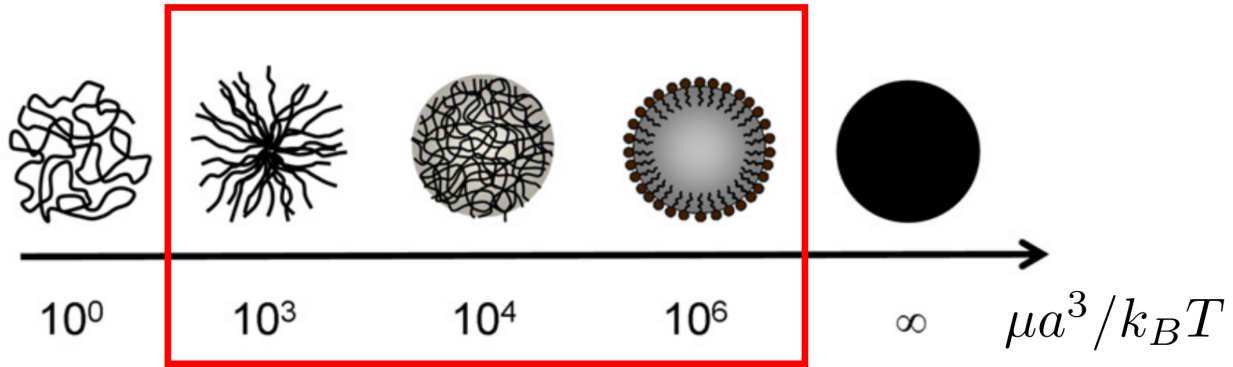


FIGURE 3 – **Classification de différentes particules en fonction de leur rigidité.** De gauche à droite : polymère simple, polymère en étoile, microgel, émulsion, sphère dure. La rigidité des particules est quantifiée par le rapport entre l'énergie élastique caractéristique des particules et l'énergie thermique du système $\mu a^3 / (k_B T)$, où μ est le module d'élasticité des particules, a leur taille caractéristique, k_B la constante de Boltzmann et T la température du système. Nous avons encadré en rouge, le type de particule pour lesquelles il est possible de considérer que la suspension est molle et athermique, ce qui correspond au cadre d'étude de cette thèse. Figure adaptée de [Vlassopoulos and Cloitre, 2014]

et théories élaborés jusqu'à présent pour décrire la rhéologie des suspensions denses avant de présenter plus en détail les motivations de cette thèse.

1 Rhéologie des suspensions denses molles

Malgré la nature très diverse des entités les constituant, les suspensions denses molles présentent nombre de propriétés rhéologiques communes. Nous allons, dans cette section, faire une brève revue des principales caractéristiques rhéologiques communes à la plupart de ces matériaux.

1.1 Rhéologie stationnaire : fluides à seuil et fluides rhéofluidifiants

Une des grandeurs essentielles gouvernant la rhéologie des suspensions denses molles est la fraction volumique $\phi = V_p / V$, avec V_p le volume de la phase formée par l'ensemble des entités constitutives et V le volume du système total. Cette dernière est liée à la densité de particules du système par la relation $\phi = \bar{v}_p \rho$, avec \bar{v}_p la taille moyenne des particules du système (pour une suspension de particules sphériques monodisperses, par exemple, $\bar{v}_p = 4\pi a^3 / 3$, avec a le rayon des particules).

Dans le régime dilué ($\phi \lesssim 0.3$), les suspensions se comportent comme des **fluides newtoniens** avec une relation $\sigma = \eta_{\text{app}}(\phi) \dot{\gamma}$ entre la contrainte de cisaillement σ et le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ appliqué dans un protocole de cisaillement simple. La perturbation de l'écoulement du fluide suspendant par la présence des entités constitutives et les interactions hydrodynamiques entre celles-ci ont pour effet d'accroître la viscosité apparente de la suspension qui est plus élevée que η_s , la viscosité du fluide suspendant. Cette viscosité apparente augmente avec la fraction volumique, différentes expressions ayant été proposées pour cette dépendance, telles que les formules d'Einstein [Einstein, 1906], de Batchelor [Batchelor, 1977] ou de Krieger-Dougherty [Krieger and Dougherty, 1959].

À partir de $\phi \gtrsim 0.3$, des effets non-newtoniens commencent à apparaître et la viscosité apparente du système devient sensible au taux de cisaillement. Les suspensions denses molles sont qualifiées dans ce régime de **fluides rhéofluidifiants**, leur viscosité apparente diminuant avec le taux de cisaillement appliqué. La décroissance de η_{app} avec $\dot{\gamma}$ peut être décrite par la loi de Cross [Cross, 1965] :

$$\eta_{\text{app}} = \eta_{\infty} + \frac{\eta_0 - \eta_{\infty}}{1 + (\lambda \dot{\gamma})^m}, \quad (1)$$



FIGURE 4 – **Émulsions d’huile à différentes densités.** (*gauche*) En-dessous de la densité de jamming. (*droite*) Au-dessus de la densité de jamming.

avec η_0 la viscosité à cisaillement nul, η_∞ la viscosité à cisaillement infini, λ le temps caractéristique du système et m un exposant, chacune de ces quantités étant un paramètre du matériau. Dans son article original, Cross dérive cette équation à partir d’un modèle de particules en suspension formant des liens pouvant être rompus par l’écoulement et obtient un exposant $m = 2/3$. Expérimentalement, un exposant $m = 1$ est observé jusqu’à $\phi \approx 0.5$. Au-delà de cette fraction volumique m devient plus grand que 1 et peut prendre des valeurs allant jusqu’à 3.5 ([Larson, 1999], Chap.6.2). La loi de Carreau-Yasuda [Carreau, 1972], faisant apparaître un paramètre libre supplémentaire, est parfois utilisée pour décrire la rhéologie stationnaire des fluides rhéofluidifiants en cisaillement simple

$$\eta_{\text{app}} = \eta_\infty + \frac{\eta_0 - \eta_\infty}{(1 + (\lambda\dot{\gamma})^m)^{m'}}, \quad (2)$$

la loi de Cross étant simplement un cas particulier de la loi de Carreau-Yasuda, avec $m' = 1$.

Lorsque la suspension est suffisamment diluée, les entités constitutives ont suffisamment d’espace pour s’organiser sans toucher leurs voisines en l’absence de déformation. Le système se comporte alors comme un fluide (newtonien ou non en fonction de la densité). Il existe cependant une fraction volumique ϕ_J , dite **fraction volumique de jamming**, à partir de laquelle, même en l’absence de déformation, les entités sont obligées de s’organiser en formant des contacts les unes avec les autres (Fig. 4). Le système est alors capable de résister à une contrainte finie sans s’écouler. Tant que le système est soumis à une contrainte ne dépassant pas une valeur seuil σ_y , il se comporte comme un solide. Au-dessus de ce seuil, la suspension s’écoule comme un fluide rhéofluidifiant. En cisaillement simple, l’écoulement stationnaire peut-être décrit par la relation d’Herschel-Bulkley :

$$\sigma = \sigma_y + k\dot{\gamma}^n, \quad (3)$$

avec k , le paramètre de consistance, et $n < 1$, l’exposant d’Herschel-Bulkley, deux paramètres caractéristiques du matériau (Fig. 3.4). L’exposant d’Herschel-Bulkley est généralement proche de 0.5 mais des valeurs de variant de 0.2 jusqu’à 0.8 ont été observées dans certains fluides à seuil [Bonn et al., 2017].

Les suspensions denses athermiques peuvent donc subir un changement de phase d’un état solide à un état fluide soit sous l’effet d’une diminution de leur fraction volumique, soit sous l’effet de l’application d’un cisaillement lorsque la fraction volumique du système est plus grande que la fraction de jamming (Fig. 2). Le changement de phase sous l’effet d’un cisaillement est caractérisé par l’exposant d’Herschel-Bulkley. La transition de phase en fraction volumique est caractérisée en-dessous du jamming par une viscosité à densité nulle $\eta_0(\phi) \sim (\phi_J - \phi)^{-\alpha_1}$ devenant infinie lorsque l’on s’approche de la fraction de jamming ainsi que par une contrainte seuil $\sigma_y(\phi) \sim (\phi - \phi_J)^{\alpha_2}$ tendant vers 0 lorsque l’on s’approche de cette même fraction. Dans les deux cas (en-dessous et au-dessus du jamming), l’exposant critique observé expérimentalement est proche de 2 (Fig. 6). Il est possible de faire se superposer toutes les courbes d’écoulement au-dessus du jamming en une courbe maîtresse $\tilde{\sigma} = \sigma_0 + K\tilde{\gamma}^\beta$, avec $\tilde{\sigma} = \sigma/|\Delta\phi|^\Delta$, $\tilde{\gamma} = \dot{\gamma}/|\Delta\phi|^\Gamma$, $\Delta\phi = \phi - \phi_J$ et $\beta = \Delta/\Gamma$. Paredes *et al.* rapportent des exposants $\Delta \approx 2$ et $\Gamma \approx 4$ correspondant bien à un exposant d’Herschel-Bulkley $\beta \approx 0.5$

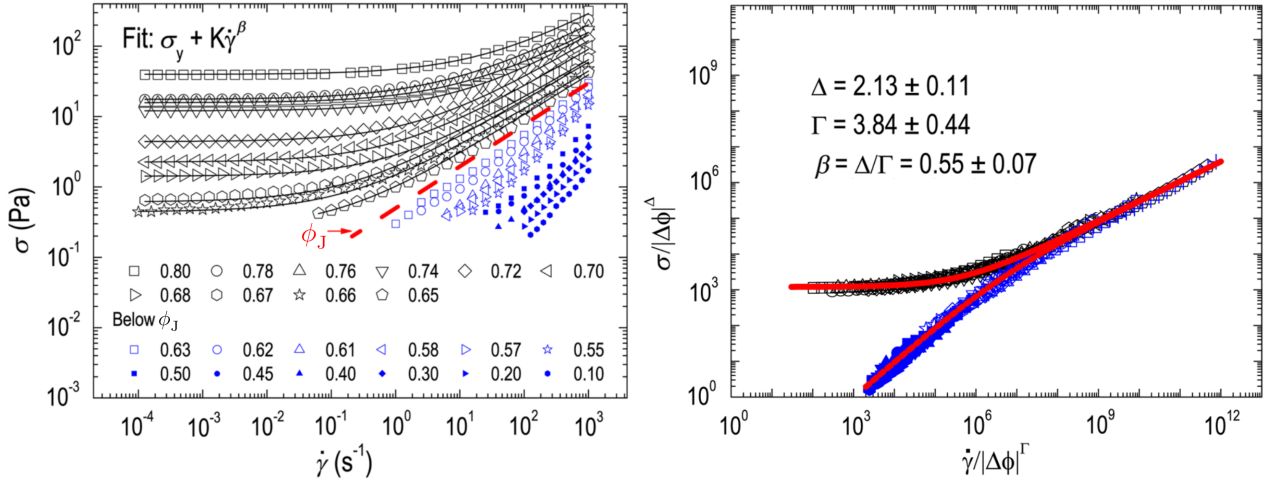


FIGURE 5 – **Rhéologie stationnaire des suspensions denses molles.** (*gauche*) Courbes d'écoulement pour des émulsions d'huile dans de l'eau pour différentes fractions volumique (la fraction de jamming est évaluée à 0.645). (*droite*) Toutes les courbes précédentes se superposent en deux courbes maîtresses (une en-dessous du jamming une au-dessus) par un rescaling de σ et $\dot{\gamma}$ en fonction de $\Delta\phi$. Figures adaptées de [Paredes et al., 2013]

[Paredes et al., 2013]. Les mêmes valeurs des exposants Δ et Γ permettent étonnamment de faire se superposer également toutes les courbes d'écoulement en-dessous du jamming en une même courbe maîtresse, les deux courbes maîtresses obtenues (en-dessous et au-dessus du jamming) se rejoignant dans la limite des grands $\tilde{\gamma}$ (Fig. 5). La valeur de ces exposants demeure par ailleurs assez insensible à la nature de la suspension. Des valeurs de Δ et Γ assez proches sont ainsi observées dans différentes émulsions et suspensions de microgels [Dinkgreve et al., 2015].

Critère de von Mises

Dans le cas des suspensions denses au-dessus du jamming (et des fluides à seuil en général), une question d'importance est de savoir à quelle condition le matériau s'écoule irréversiblement pour une géométrie de déformation quelconque. Dans le cas du cisaillement simple, la situation est simple : le matériau s'écoule lorsque la contrainte de cisaillement dépasse la contrainte seuil, en-dessous le matériau se comporte comme un solide élastique, la contrainte σ et la déformation γ variant proportionnellement, $\sigma = G_0\gamma$ avec G_0 le module de cisaillement. Ce régime élastique est assez restreint puisqu'il s'étend généralement jusqu'à des déformations d'ordre 0.1 au maximum. Dans le cas général, l'état de contrainte d'un matériau est caractérisé par un tenseur de contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ et non pas par un simple scalaire. La démarcation entre le domaine élastique, où le matériau se comporte comme un solide élastique, et le domaine plastique, où le matériau s'écoule de façon irréversible, doit alors reposer sur un critère tensoriel. Le critère généralement retenu, bien que formulé dès 1865 par J.C. Maxwell, est généralement attribué à R. von Mises et connu sous le nom de **critère de von Mises** [von Mises, 1913]. Ce dernier stipule que le matériau s'écoule lorsque

$$|\boldsymbol{\sigma}_d| = \sqrt{\frac{\boldsymbol{\sigma}_d : \boldsymbol{\sigma}_d}{2}} \geq \tau_c, \quad (4)$$

avec $\boldsymbol{\sigma}_d = \boldsymbol{\sigma} - (\text{tr } \boldsymbol{\sigma}/3) \mathbb{1}$, la partie déviatorique du tenseur des contraintes et τ_c une contrainte critique, aussi appelée **contrainte seuil**, indépendante de la géométrie de l'écoulement, et $\mathbf{A} : \mathbf{B} = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij}$. En trois dimensions, le critère de von Mises s'écrit donc :

$$\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2 + \frac{N_1^2 + N_2^2 - N_1 N_2}{3} \geq \tau_c^2, \quad (5)$$

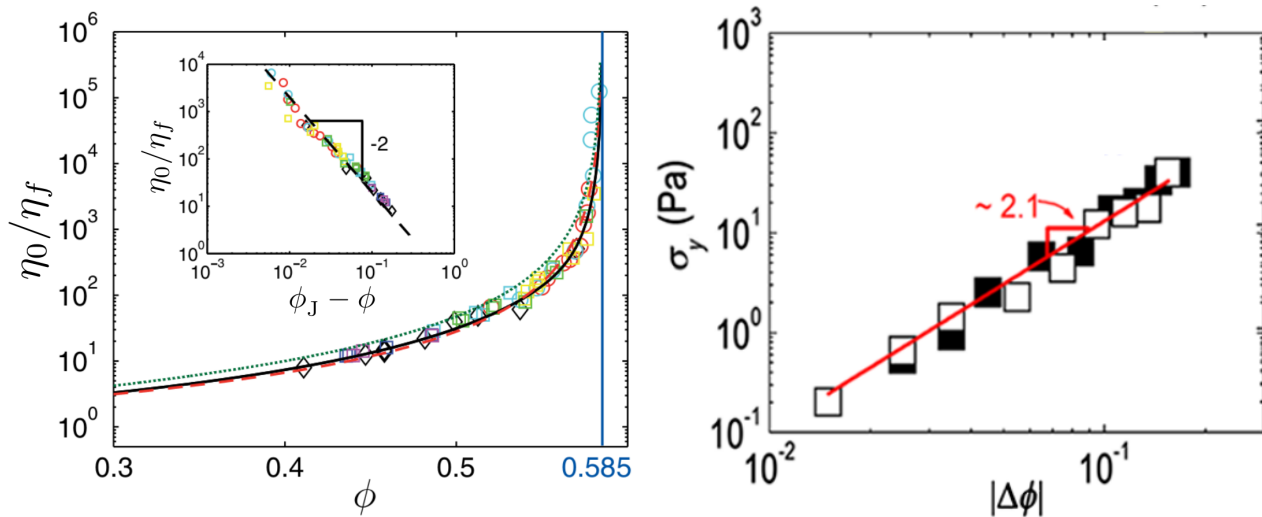


FIGURE 6 – **Lois d'échelle de η_0 et σ_y au voisinage du jamming.** (*gauche*) Évolution de la viscosité avec la fraction volumique ϕ pour différentes suspensions de PMMA et PS lors de protocoles de cisaillement à pression imposée. Les courbes continues représentent des ajustements par différents modèles. Figure adaptée de [Boyer et al., 2011]. (*droite*) Évolution de la contrainte seuil en fonction de la distance au jamming pour des émulsions d'huile dans de l'eau. Les différents symboles correspondent à différentes méthodes de détermination de σ_y . Figure issue de [Paredes et al., 2013]

avec $N_1 = \sigma_{xx} - \sigma_{yy}$ et $N_2 = \sigma_{xx} - \sigma_{zz}$ les première et seconde différences de contraintes normales. Les domaines élastique et plastique sont ainsi séparés par l'hypersphère $|\sigma_d| = \tau_c$ dans l'espace des composantes de la partie déviatorique du tenseur des contraintes (Fig. 7). Cette surface est désignée par le terme de **seuil de plasticité**. En pratique, la contrainte seuil τ_c est bien souvent confondue avec σ_y , la valeur de la contrainte au seuil de plasticité en cisaillement simple qui est généralement appelée contrainte seuil par abus de langage. En toute généralité, ces deux grandeurs sont différentes comme un rapide coup d'œil à l'Eq. (5) permet de s'en apercevoir. Cependant, les autres composantes de la partie déviatorique du tenseur des contraintes étant généralement considérées négligeables, il est d'usage de confondre ces deux grandeurs. Des différences de contraintes normales non-négligeables ont toutefois été observées dans certaines expériences [Thompson et al., 2018, Thompson and de Souza Mendes, 2020] et il est donc nécessaire de se montrer prudent avant de confondre ces deux grandeurs.

La question de l'écoulement des suspensions denses molles au-dessus du jamming (et des fluides à seuil en général) dans des géométries d'écoulement arbitraires a connu un regain d'intérêt ces dernières années [Zhang et al., 2018, Thompson et al., 2018, de Cagny et al., 2019, Thompson and de Souza Mendes, 2020]. Celui-ci s'explique par le développement de nouvelles techniques expérimentales permettant de mesurer les composantes pertinentes du tenseur des contraintes au seuil de plasticité dans les écoulements extensionnels [Zhang et al., 2018, Varchanis et al., 2020]. En effet, historiquement, la contrainte seuil sous cisaillement simple a été de loin la contrainte seuil la plus étudiée, servant de point de référence pour le développement de modèles constitutifs. L'étude de nouvelles géométries d'écoulement a donc permis de relancer le débat sur la condition d'écoulement des fluides à seuil. Ce débat s'articule autour de deux axes : (i) la validité du critère de von Mises et (ii) le poids des contraintes normales sous cisaillement simple dans le critère de von Mises lorsqu'il s'applique [Thompson et al., 2018]. Ces deux questions n'ont toujours pas été tranchées, avec des expériences montrant des résultats apparemment contradictoires. Certaines expériences trouvent un bon accord avec le critère de von Mises [Ovarlez et al., 2010, Shaikat et al., 2012, de Cagny et al., 2019] tandis que d'autres mettent en évidence des déviations à ce critère [Zhang et al., 2018, Thompson and de Souza Mendes, 2020]. Jusqu'à présent, les différences de contraintes normales au seuil de plasticité ont été très peu étudiées pour des raisons techniques mais aussi parce qu'elles sont généralement supposées négligeables. Cependant, certains travaux expérimentaux récents rapportent des différences de contraintes normales non-négligeables au seuil [Thompson et al., 2018, Thompson and de Souza Mendes, 2020]. Ces deux questions s'avèrent être liées

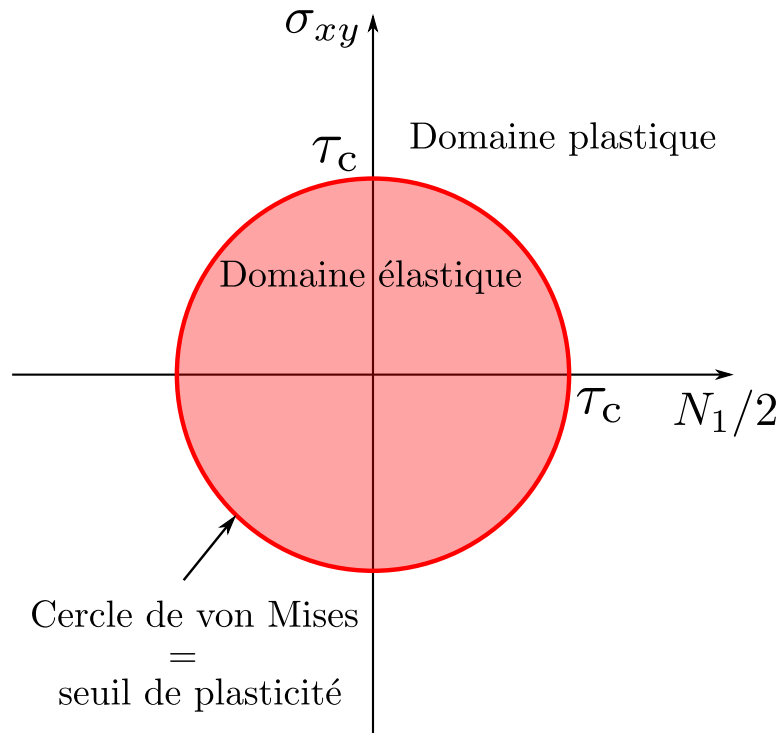


FIGURE 7 – **Représentation du critère de von Mises en 2D.** En 2D la partie déviatorique du tenseur des contraintes s'écrit $\sigma_d = \begin{pmatrix} N_1/2 & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & -N_1/2 \end{pmatrix}$, avec $N_1 = (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})/2$. Le seuil de plasticité associé au critère de von Mises (Eq. (15)) prend donc la forme d'un cercle de rayon τ_c dans le plan $(N_1/2, \sigma_{xy})$, appelé aussi cercle de von Mises. L'intérieur du cercle constitue le domaine élastique tandis que l'extérieur est le domaine plastique.

puisque le fait de négliger les différences de contraintes normales dans le critère de von Mises alors qu'elles ne le sont pas peut conduire à des écarts significatifs sur la valeur de τ_c observés dans différentes géométries d'écoulement.

1.2 Rhéologie transitoire

Courbe de charge, overshoot

Nous avons présenté en Sec. 1.1 les courbes d'écoulement associées à la rhéologie stationnaire des suspensions denses molles en cisaillement simple. Le comportement de ces matériaux dans le régime transitoire les amenant d'un état de repos à l'état stationnaire sous le cisaillement imposé s'avère lui aussi non-trivial. Lorsqu'un taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ constant est appliqué à une suspension dense initialement au repos, la contrainte de cisaillement, initialement nulle varie sur un temps fini pour rejoindre sa valeur stationnaire. Pour la plupart des suspensions, au-dessus ou en-dessous du jamming, cette évolution n'est pas monotone. La contrainte croît linéairement avec la déformation $\gamma = \dot{\gamma}t$ jusqu'au seuil de plasticité. Une fois ce seuil atteint, la contrainte continue de croître avec la déformation jusqu'à atteindre un maximum local, généralement désigné par le terme d'**overshoot**¹, avant de décroître vers sa valeur stationnaire (Fig. 8). La valeur maximale σ_m atteinte par la contrainte à l'overshoot est parfois appelée **contrainte seuil statique** et ne doit pas être confondu avec la contrainte seuil σ_y définie à partir de la courbe d'écoulement du matériau qui peut être appelée **contrainte seuil dynamique** afin de la distinguer de la première.

1. Le terme de « dépassement » est parfois utilisé en français. Cette terminologie étant peu commune et traduisant mal le caractère de maximum local, nous lui préférons sa terminologie anglaise.

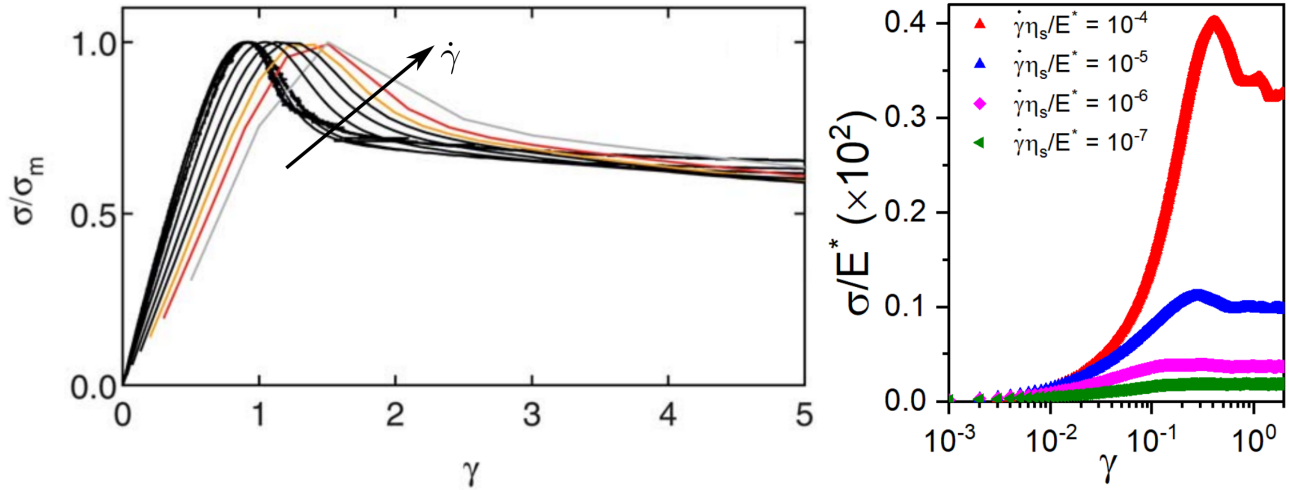


FIGURE 8 – **Courbes de charge des suspensions denses molles en cisaillement simple.** (*gauche*) Courbes de charge expérimentales pour une suspension de microgels de carbopol au-dessus du jamming pour différent taux de cisaillement. σ_m est la valeur de σ à l’overshoot. Figure issue de [Divoux et al., 2011b] (*droite*) Courbes de charge obtenue par simulation de dynamique moléculaire d’une suspension de sphères molles au-dessus du jamming. η_s est la viscosité du fluide suspensé et E^* le module d’élasticité des sphères. Figure adaptée de [Khabaz et al., 2021].

À faibles taux de cisaillement, la position γ_m et l’amplitude σ_m de cet overshoot ne dépendent pas du taux de cisaillement celui-ci étant atteint pour des déformations d’ordre 0.1 à 1. Pour de plus forts taux de cisaillements, la position comme l’amplitude de l’overshoot varient comme une loi de puissance du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ (Fig. 9). Des valeurs d’exposants comprises entre 0.1 et 0.3 pour l’exposant de γ_m et entre 0.1 et 0.5 pour σ_m sont rapportées [Divoux et al., 2011b, Khabaz et al., 2021]. Khabaz *et al.* montrent qu’en adimensionnant le taux de cisaillement par G_0/η_s et la contrainte par σ_y , un grand nombre de données expérimentales et numériques se superposent en une courbe maîtresse suivant une loi d’Herschel-Bulkley d’exposant ≈ 0.55 (Fig. 9). Les travaux récents de Benzi *et al.*, quant à eux, suggèrent que la variable pertinente pour l’étude des lois d’échelle de l’amplitude de l’overshoot est $\tilde{\sigma}_m = \sigma_m/\sigma_y - 1$ [Benzi et al., 2021a, Benzi et al., 2021b]. Les auteurs montrent qu’encore une fois il est possible de distinguer le régime de faibles taux de cisaillement et celui de forts taux de cisaillement dans lesquels $\tilde{\sigma}_m$ suit des lois de puissance d’exposants différents. Les données expérimentales de ces travaux montrent un bon accord avec des prédictions théoriques reliant les exposants des deux régimes à l’exposant d’Herschel-Bulkley n du matériau. L’exposant à faibles taux de cisaillement de $\tilde{\sigma}_m$ vaut ainsi $2n/3$ tandis que celui à forts taux de cisaillement vaut $4n/(9 - n)$. Les travaux de Benzi *et al.* semblent montrer que l’amplitude de l’overshoot tend vers la contrainte seuil σ_y pour les faibles taux de déformation. Ce n’est pas le cas avec la courbe maîtresse de Khabaz *et al.* qui semble indiquer que σ_m tend vers une valeur supérieure de 20% à la contrainte seuil.

Au niveau de la microstructure, Khabaz *et al.* montrent dans leurs simulations numériques que la phase initiale de croissance de la contrainte est associée à une accumulation des contacts selon l’axe compressionnel de l’écoulement et une diminution selon l’axe extensionnel, induisant ainsi une anisotropie dans la microstructure. Les contacts sont comprimés à mesure que la déformation augmente. À l’overshoot, l’anisotropie est maximale et la compression maximale. Après l’overshoot les contacts sont redistribués et l’anisotropie de la microstructure diminue.

Relaxation des contraintes, contrainte résiduelle

La viscoélasticité des suspensions denses molles peut également être mise en évidence lors de l’arrêt brusque de l’écoulement ($\dot{\gamma} = 0$) après avoir atteint l’état stationnaire en appliquant un taux de cisaillement non-nul. La réponse en contrainte d’un fluide newtonien est immédiate, cette dernière tombant immédiatement à 0.

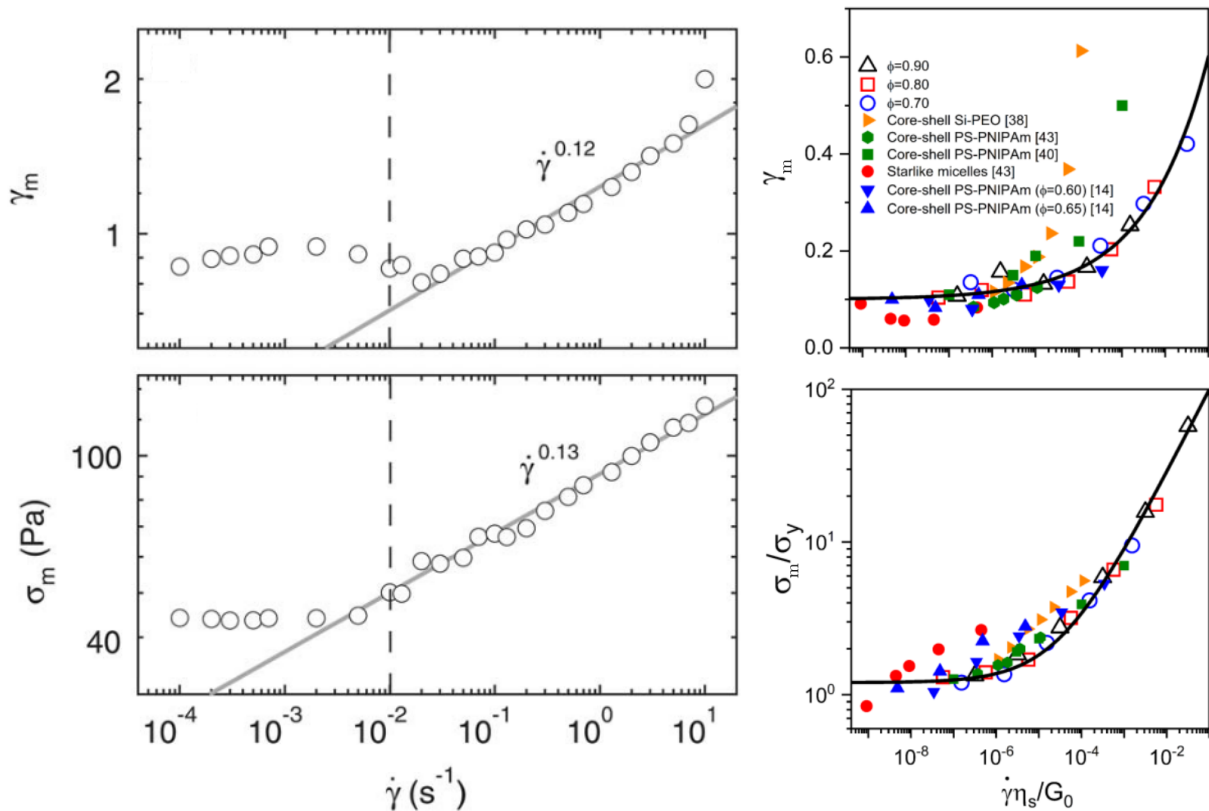


FIGURE 9 – **Lois d'échelle pour la position et l'amplitude de l'overshoot dans les suspensions denses molles.** (*gauche*) Évolution de γ_m et σ_m en fonction du taux de cisaillement pour une suspension de microgels de carbopol au-dessus du jamming. Figures issues de [Divoux et al., 2011b]. (*droite*) Évolution de γ_m et σ_m en fonction du taux de cisaillement pour différentes suspensions (marqueurs pleins) ainsi que pour des données de simulations numériques de sphères molles à différentes fractions volumiques au-dessus du jamming (marqueurs vides). La courbe en trait plein dans la figure du haut représente la courbe maîtresse $\gamma_m = 0.1 + (\dot{\gamma}\eta_s/G_0)^{0.3}$ tandis que la courbe en trait plein dans la figure du bas représente la courbe maîtresse $\sigma_m/\sigma_y = 1.2 + 350(\dot{\gamma}\eta_s/G_0)^{0.55}$. Figures adaptées de [Khabaz et al., 2021].

Dans le cas des suspensions denses, un régime transitoire est observé au cours duquel la contrainte relaxe vers une valeur non-nulle pour les suspensions au-dessus du jamming. Cette contrainte résiduelle a longtemps été considérée comme égale à la contrainte seuil mais il s'avère, qu'étonnamment, elle est systématiquement plus faible que cette dernière [Keentok, 1982]. Cette valeur résiduelle dépend en fait de l'état initial précédant l'arrêt de l'écoulement. Cette dépendance est non-triviale, la contrainte résiduelle étant d'autant plus faible que le précisaillement appliqué (et donc l'état de contrainte initial) est fort conduisant ainsi à une inversion de la contrainte [Mohan et al., 2013a, Mohan et al., 2014, Lidon et al., 2017]. Plus surprenant encore, les données expérimentales de [Mohan et al., 2013a] montrent que les courbes de relaxation se croisent approximativement toutes au même instant t après l'arrêt de l'écoulement (Fig. 10). Au croisement la contrainte est très proche de sa valeur au seuil de plasticité, ce qui semble indiquer que le matériau met toujours le même temps pour atteindre le seuil, quelque soit le précisaillement qui lui est appliqué. Ce constat est cependant moins net avec les données numériques présentées dans le même travail. La décroissance de la contrainte résiduelle avec le précisaillement est relativement lente : Mohan *et al.* observent une décroissance en $-\log \dot{\gamma}_{ps}$ tandis que Lidon *et al.* rapportent une loi de puissance d'exposant -0.2 .

En effet, en absence d'écoulement seules les forces élastiques agissent sur la structure du matériau. Ainsi lorsque l'écoulement s'arrête les contacts entre particules relaxent rapidement de façon élastique mais le système n'a pas le temps de recouvrer son isotropie. Une fois terminée cette relaxation, les particules demeurent bloquées dans leur cage de voisins et l'anisotropie perdure expliquant la contrainte résiduelle observée [Mohan et al., 2014]. Plus le précisaillement est fort, plus l'anisotropie dans l'état final est marquée

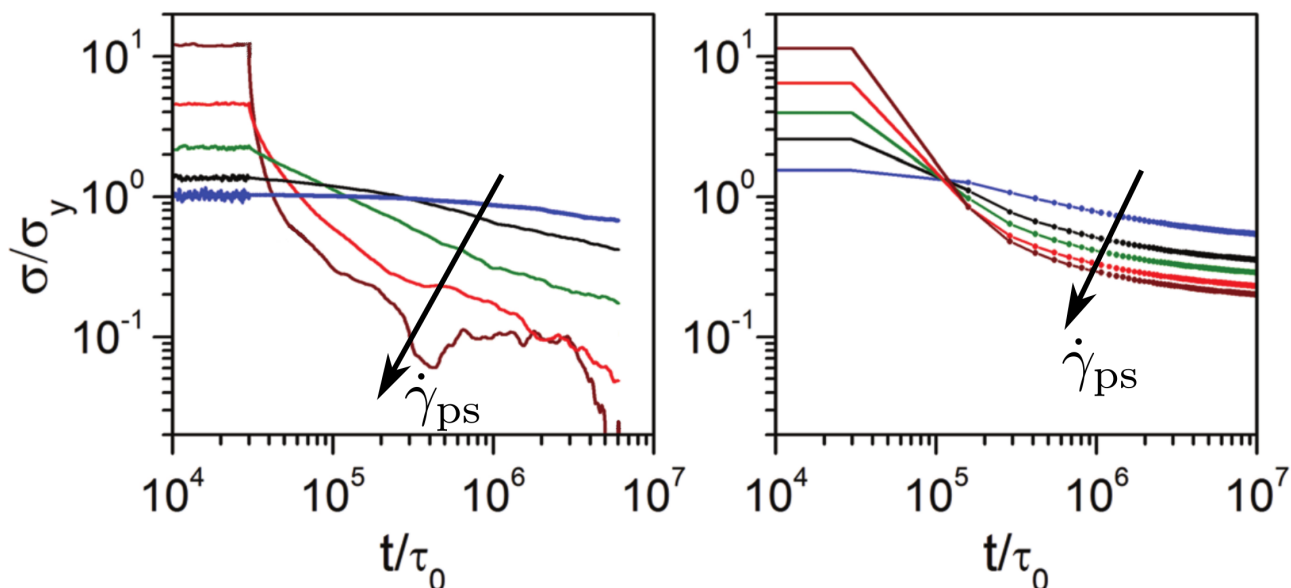


FIGURE 10 – **Relaxation de la contrainte après arrêt du cisaillement.** (*gauche*) Évolution de la contrainte de cisaillement avec le temps après arrêt du cisaillement dans des simulations de dynamique moléculaire pour différents précisaillements $\dot{\gamma}_{ps}$. (*droite*) Évolution de la contrainte de cisaillement avec le temps après arrêt du cisaillement pour une suspension de microgels avec les mêmes précisaillements $\dot{\gamma}_{ps}$. Figures adaptées de [Mohan et al., 2014]

conduisant ainsi à une contrainte résiduelle plus forte sans que ne soit très bien comprise la raison de cette dépendance non-triviale de l'anisotropie au précisaillement. Expérimentalement, si le matériau est étudié sur une échelle de temps suffisante, une seconde relaxation, lente celle-ci, est observée, ramenant le matériau dans un état de contrainte nulle [Mohan et al., 2014]. Cette dernière s'explique par le mouvement brownien, le système n'étant jamais parfaitement athermique, qui permet une réorganisation lente du système vers un état isotrope. Cette relaxation intervient sur une échelle de temps bien supérieure à celle de la première relaxation rapide, si bien qu'elle est rarement observée sur l'échelle de temps des expériences (dans [Mohan et al., 2014], il faut attendre près de 3h pour voir s'amorcer cette relaxation alors que la première relaxation s'opère sur une échelle de temps de l'ordre de 10s). Dans des simulations de particules non-browniennes cette relaxation lente n'est ainsi pas observée [Chaudhuri et al., 2012, Mohan et al., 2014].

Fluage

Nous avons jusqu'à présent considéré la réponse en contrainte des suspensions denses molles à une sollicitation en déformation en imposant un taux de cisaillement au système. Dans ce type de protocoles le fait que le matériau s'écoule (ou non) est imposé par l'opérateur. Il est possible de tester les propriétés d'écoulement des suspensions denses molles en choisissant comme paramètre de contrôle la contrainte de cisaillement. Ce type de protocole, appelé **fluage**, permet, en particulier, de mettre en évidence l'existence d'un seuil de plasticité dans le cas des suspensions au-dessus du jamming. Lorsqu'une contrainte est appliquée au matériau, ce dernier commence à se déformer. Si la contrainte appliquée est trop faible le taux de cisaillement effectif décroît vers 0. [Divoux et al., 2011a] rapportent une décroissance en loi de puissance avec le temps, avec un exposant $-2/3$ (Fig. 11). Si la contrainte appliquée est plus forte que la contrainte seuil σ_y , le taux de cisaillement effectif tend vers une valeur non-nulle. Dans le cas d'une contrainte légèrement supérieure à σ_y , [Divoux et al., 2011a] observent une première phase de décroissance de $\dot{\gamma}$ avant que ce dernier n'augmente significativement pour atteindre sa valeur finale.

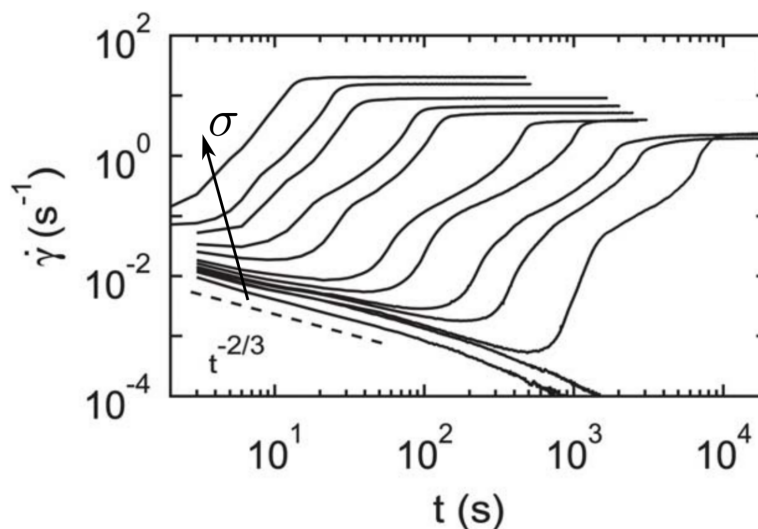


FIGURE 11 – **Fluage des suspensions denses molles.** Évolution temporelle du taux de cisaillement pour différentes valeurs de contrainte de cisaillement imposée dans une suspension de microgels de carbopol. Figure adaptée de [Divoux et al., 2011a]

1.3 Rhéologie oscillatoire

Essai harmonique

Une autre façon de mettre en évidence la transition solide-fluide des suspensions denses au-dessus du jamming est de leur appliquer une déformation de cisaillement simple oscillante $\gamma(t) = \gamma_0 \sin \omega t$ et d'étudier la réponse en contrainte $\sigma(t)$, ou inversement, d'imposer une contrainte de cisaillement oscillante et d'étudier sa réponse en déformation. Pour des oscillations de faibles amplitudes, $\gamma_0 \leq \gamma_y = \sigma_y/G_0$, ce protocole sollicite essentiellement l'élasticité du matériau, ce dernier demeurant toujours dans le domaine élastique. Pour de faibles amplitudes le matériau répond par ailleurs de façon linéaire, et la contrainte de cisaillement oscille à la même fréquence, avec un déphasage éventuel : $\sigma(t) = \sigma_0 \sin(\omega t + \varphi)$. Plutôt que de caractériser cette réponse par l'amplitude σ_0 et le déphasage φ , il est d'usage en rhéologie de définir un module de conservation $G' = \sigma_0 \cos \varphi / \gamma_0$ et de perte $G'' = \sigma_0 \sin \varphi / \gamma_0$, caractérisant le caractère viscoélastique du matériau. En effet, dans le cas d'un solide élastique, la contrainte oscille en phase avec la déformation et G'' est nul tandis que dans le cas d'un fluide visqueux, la contrainte oscille en phase avec le taux de déformation $\dot{\gamma}$ et G' est nul. Le module de conservation caractérise ainsi l'élasticité du matériau (il est également parfois appelé module élastique) tandis que le module de perte caractérise la viscosité de ce dernier (il est parfois appelé module visqueux). Dans le cas des faibles amplitudes de déformation (réponse linéaire), l'amplitude γ_0 n'a pas d'influence sur les modules de conservation et de perte. Ces derniers ne dépendent donc, dans ce régime, que de la fréquence de l'oscillation. Nous présentons en Fig. 12 les données expérimentales et numériques de [Mohan et al., 2013b] concernant l'évolution des modules de conservation et de perte en fonction de la fréquence. À faible fréquence, G' varie peu et est égal à G_0 , le module de cisaillement du matériau (G_0 est d'ailleurs généralement déterminé expérimentalement de cette façon). Dans ce régime, le module de perte est bien plus faible que celui de conservation, les données expérimentales suggérant que G'' tend vers 0 lorsque ω tend vers 0 tandis que les données de simulations laissent apparaître un plateau. Cette prédominance de G' sur G'' traduit le caractère élastique des suspensions denses dans ce régime. Lorsque la fréquence augmente, cependant, le caractère viscoélastique du matériau en-dessous du seuil de plasticité apparaît clairement, G'' devenant du même ordre de grandeur que G' . Le module d'élasticité, quant à lui, augmente légèrement avec la fréquence.

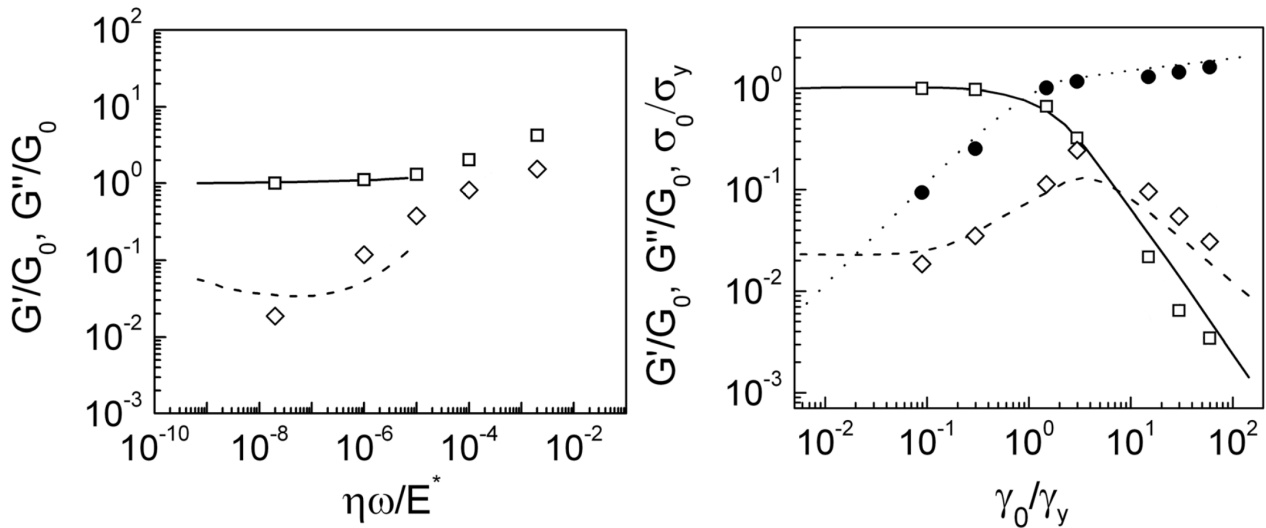


FIGURE 12 – **Influence de la fréquence et de l’amplitude de la déformation oscillante sur les modules de conservation et de perte.** (*gauche*) Évolution de G' (\square et $-$) et G'' (\diamond et $--$) avec la pulsation ω de l’oscillation en déformation pour $\gamma_0 = 0.09\gamma_y$. Les symboles sont des données expérimentales pour une suspension de microgels tandis que les lignes représentent des données issues de simulations de sphères molles. η est la viscosité du fluide suspendant, E^* le module d’élasticité des entités constitutives et G_0 le module de cisaillement du matériau. (*droite*) Évolution de G' (\square et $-$), G'' (\diamond et $--$) et σ_0 (\bullet et \cdots) avec l’amplitude γ_0 de l’oscillation en déformation pour $\eta\omega/E^* = 2 \times 10^{-8}$. Les symboles sont des données expérimentales pour une suspension de microgels tandis que les lignes représentent des données issues de simulations de sphères molles. Figures issues de [Mohan et al., 2013b].

Cisaillement oscillatoire à grande amplitude (LAOS)

Le protocole d’essai harmonique permet uniquement d’étudier la viscoélasticité des suspensions denses dans leur domaine élastique. Pour étudier la transition solide-fluide de ces matériaux, il est nécessaire d’appliquer des déformations suffisamment conséquentes pour dépasser le seuil de plasticité, tout en se plaçant à faibles fréquences afin d’avoir un comportement quasi-élastique en-dessous du seuil. Lorsque l’amplitude augmente, la réponse du matériau n’est plus linéaire et des harmoniques d’ordres supérieurs apparaissent dans la réponse en contrainte. Il est toujours possible de définir un module de conservation et de perte associés à la contribution harmonique d’ordre 1 en isolant la contribution de cette harmonique par analyse de Fourier. Dans le régime des faibles amplitudes, Nous présentons en Fig. 12 l’évolution de ces modules avec l’amplitude γ_0 de l’oscillation en déformation ainsi que celle de l’amplitude σ_0 l’amplitude de la première harmonique de la réponse en contrainte. À faibles amplitudes, G' et G'' présentent un plateau, avec $G'' \ll G'$. Seul le domaine élastique est exploré et σ_0 croît linéairement avec γ_0 , la pente de la courbe de σ_0 étant égale à G_0 . Lorsque γ_0 commence à devenir du même ordre de grandeur que γ_y , la réponse du système commence à devenir non-linéaire et G' décroît avec γ_0 contrairement à G'' qui augmente avec l’amplitude. Les deux courbes se croisent pour une valeur de γ_0 proche de γ_y , σ_y étant parfois définie comme la valeur de σ_0 à ce croisement, bien que cette valeur diffère en général de la valeur de σ_y déterminée à partir de la courbe d’écoulement. Lorsque γ_0 dépasse γ_y , le matériau commence à visiter son domaine plastique pendant une partie de l’oscillation. Pour de grandes amplitudes de déformation le matériau visite majoritairement le domaine plastique et se comporte comme un fluide. Dans ce régime σ_0 varie de façon sous-linéaire avec γ_0 , la contribution des harmoniques d’ordres supérieurs à la réponse étant non-négligeable, si bien que les modules décroissent avec γ_0 . Le module de perte, cependant, décroît plus lentement que celui de conservation et la réponse du matériau est essentiellement visqueuse.

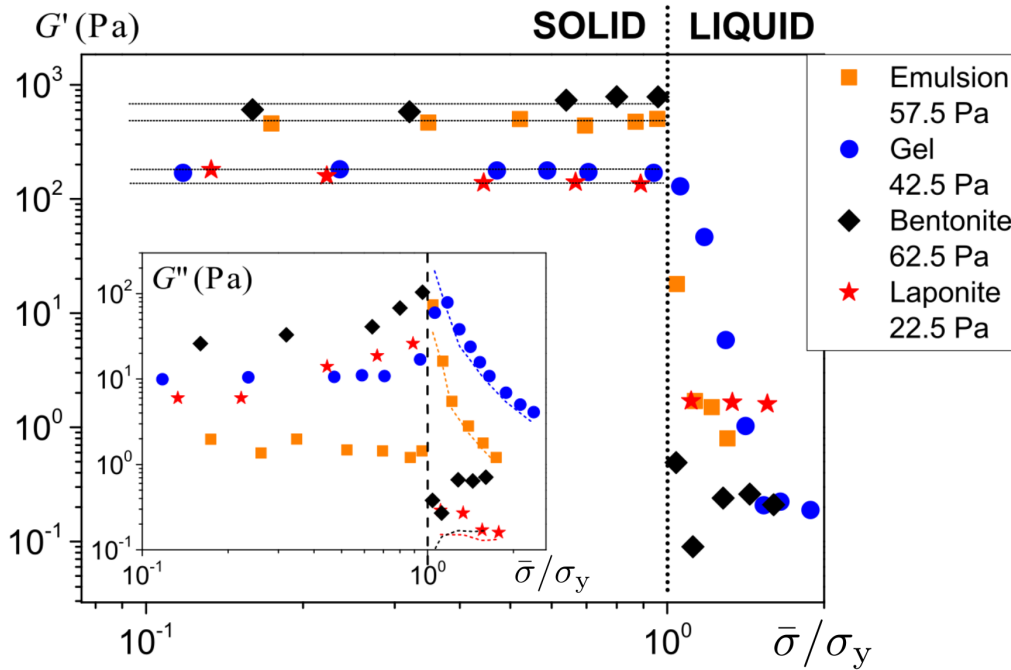


FIGURE 13 – **Protocole de superposition parallèle pour les suspensions denses molles.** Évolution des modules de conservation et de perte en fonction de la contrainte moyenne appliquée dans un protocole de superposition parallèle pour différents types de suspensions (la valeur de la contrainte de cisaillement de chacun de ces matériaux est indiquée en légende). Figure adaptée de [N’Gouamba et al., 2019].

Superposition parallèle

Les protocoles précédents permettent d’étudier la viscoélasticité des suspensions denses molles autour d’un état de contrainte nulle. Pour étudier la transition solide-fluide des fluides à seuil, il est intéressant de faire cette étude autour du seuil de plasticité. Pour ce faire, il est possible d’utiliser un protocole de **superposition parallèle**. Il s’agit de solliciter le matériau en contrainte en superposant une oscillation de faible amplitude σ_0 à une valeur moyenne de la contrainte $\bar{\sigma}$: $\sigma(t) = \bar{\sigma} + \delta\sigma \sin \omega t$, avec $\delta\sigma \ll \bar{\sigma}$. Si $\bar{\sigma}$ est inférieure à la contrainte seuil σ_y , le matériau se déforme en oscillant autour d’une valeur moyenne $\bar{\gamma}$ et dans l’état stationnaire la réponse en déformation du matériau est de la forme $\gamma(t) = \bar{\gamma} + \delta\gamma \sin(\omega t + \varphi)$. Si au contraire la contrainte moyenne dépasse la contrainte seuil, le matériau s’écoule et la réponse en déformation est de la forme $\gamma(t) = \bar{\gamma}t + \delta\gamma \sin(\omega t + \varphi)$. Dans les deux cas, il est possible de définir un module de conservation $G' = \delta\gamma \cos \varphi / \delta\sigma$ et un module de perte $G'' = \delta\gamma \sin \varphi / \delta\sigma$. Ces modules sont considérés dépendre très peu de la fréquence par [N’Gouamba et al., 2019]. Nous avons présenté en Fig. 13 l’évolution de G' et G'' en fonction de $\bar{\sigma}$ pour différentes suspensions. Pour des valeurs de $\bar{\sigma}$ inférieures à σ_y , les modules ne varient pratiquement pas avec encore une fois un module de perte beaucoup plus faible que le module de conservation, traduisant le comportement de solide quasi-élastique de ces matériaux en-dessous du seuil de plasticité. Lorsque la contrainte dépasse la valeur seuil, le module de conservation chute brutalement avec $\bar{\sigma}$. Dans [N’Gouamba et al., 2019], cette chute de G' est interprétée comme une perte du réseau élastique formé par les entités élastiques sous l’effet de l’écoulement. Le module de perte semble quant à lui présenter une discontinuité en $\bar{\sigma} = \sigma_y$ avant de diminuer lui aussi mais de façon moins dramatique que le module de conservation, devenant ainsi du même ordre de grandeur, voire plus grand que ce dernier.

2 Approches théoriques de la rhéologie des suspensions denses molles

Après avoir passé en revue la rhéologie des suspensions denses, nous nous intéressons dans cette section aux différentes façons de les décrire théoriquement. Il ne s’agit pas de faire une revue extensive de toutes les théories existantes mais plutôt de présenter les idées directrices sur lesquelles reposent les descriptions théoriques de

la rhéologie de ces systèmes. Dans la plupart des cas, il s'agit d'obtenir un **modèle constitutif** sous la forme d'une équation fermée sur une grandeur permettant de décrire le système. Les différentes théories se distinguent par l'échelle à laquelle elles se placent et peuvent ainsi être classées en trois familles : les théories à l'échelle macroscopique, celles à l'échelle mésoscopique et celles à l'échelle microscopique.

2.1 Description macroscopique

La description de la rhéologie des matériaux est historiquement une description macroscopique. En effet, la science n'a réellement accès à ce qu'il se passe à des échelles très inférieures aux nôtres que depuis un peu plus d'un siècle. La nécessité de décrire le comportement macroscopique des matériaux nous entourant est quant à elle bien plus ancienne. Dans cette approche, le matériau est considéré comme un milieu continu pouvant être modélisé par un assemblage d'éléments mécaniques simples caractérisant les propriétés élastiques, visqueuses ou plastiques du matériau et permettant de relier la contrainte σ du système γ à sa déformation. Depuis un siècle et demi nombre de modèles rhéologiques ont vu le jour permettant de décrire différents matériaux. Nous ne ferons bien évidemment pas une liste exhaustive de ceux-ci mais nous nous contenterons de présenter les trois principales classes de modèles pouvant être utilisés pour décrire la rhéologie des suspensions denses molles et les principes les dirigeant.

Modèles viscoélastiques

Les premiers modèles rhéologiques sont des modèles scalaires cherchant à décrire les propriétés rhéologiques d'un matériau en cisaillement simple. Il s'agit dans un premier temps de **modèles viscoélastiques (VEM)** permettant de rendre compte d'effets transitoires dans des matériaux se déformant élastiquement, c'est-à-dire revenant à leur état initial une fois que la contrainte ou la déformation appliquée cesse. Le premier VEM fut proposé en 1867 par Maxwell [Maxwell, 1867] suivi par Lord Kelvin et Voigt en 1890 [Voigt, 1890, Thomson, 1890]. Dans ces deux modèles le matériau est modélisé par l'association d'un ressort (décrit par un module d'élasticité μ) avec un amortisseur linéaire (décrit par une viscosité η), en série dans le modèle de Maxwell, en parallèle dans celui de Kelvin-Voigt (Fig. 14). Tandis que le modèle de Maxwell décrit un fluide (la contrainte est proportionnelle au taux de cisaillement dans l'état stationnaire à contrainte imposée), celui de Kelvin-Voigt décrit un solide (la contrainte est proportionnelle à la déformation dans l'état stationnaire à déformation γ fixée).

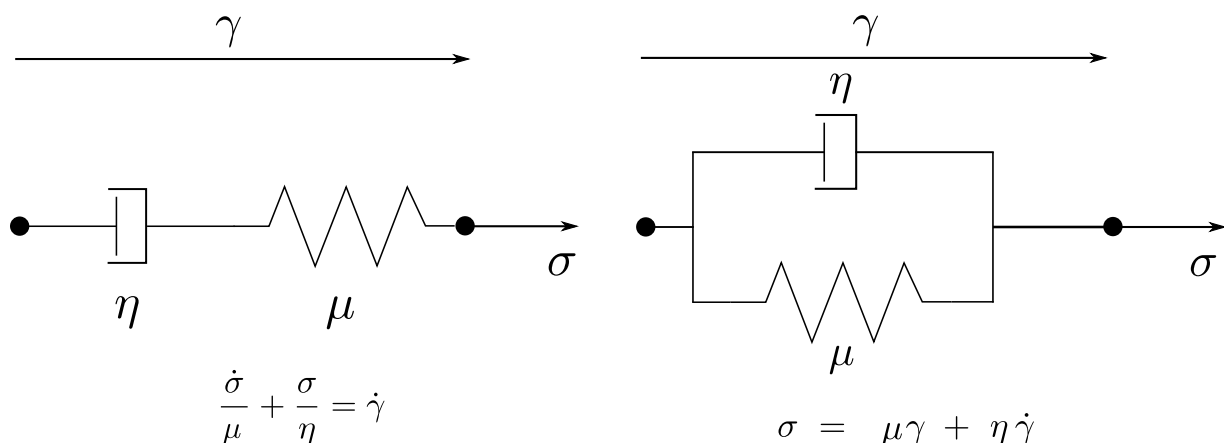


FIGURE 14 – **Modèles viscoélastiques** : (gauche) fluide viscoélastique de Maxwell, (droite) solide viscoélastique de Kelvin-Voigt. La contrainte σ_r engendrée par le ressort est proportionnelle à sa déformation γ_r ($\sigma_r = \mu\gamma_r$) tandis que la contrainte σ_a générée par l'amortisseur est proportionnelle à son taux de déformation $\dot{\gamma}_a$ ($\sigma_a = \eta\dot{\gamma}_a$). Dans une association en série les contraintes sont égales et les déformations s'additionnent tandis que le comportement est inverse dans une association en parallèle.

Les modèles de Maxwell et Kelvin-Voigt ne donnent cependant aucune information sur les autres compo-

santes du tenseur des contraintes, et ne permettent pas de décrire d'autres types de déformation que le cisaillement simple. C'est Oldroyd qui, le premier, généralise en 1950 les modèles viscoélastiques à des écoulements tridimensionnels [Oldroyd and Wilson, 1950]. Dans ce modèle tensoriel, le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ remplace la contrainte de cisaillement scalaire σ tandis que le tenseur des taux de déformations $\mathbf{E}(\mathbf{u}) = (\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T)/2$ (où \mathbf{u} est le champ de vitesse au sein du matériau) joue un rôle équivalent au taux de déformation $\dot{\gamma}$ dans les modèles scalaires. Le modèle d'Oldroyd est la généralisation tensorielle d'un fluide viscoélastique de Maxwell (phase élastique) de module μ et de viscosité η_p couplé à un fluide Newtonien (solvant) de viscosité η_s (Fig. 15).

$$\lambda \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{dt} + \boldsymbol{\sigma} = 2\eta_0 \mathbf{E}(\mathbf{u}) + 2\lambda\eta_s \frac{d\mathbf{E}(\mathbf{u})}{dt}, \quad (6)$$

où $\lambda = \eta_p/\mu$ est le temps de relaxation de la phase élastique et avec $\eta_0 = \eta_p + \eta_s$. En notant $\boldsymbol{\sigma}_e$ la contribution de la phase élastique au tenseur des contraintes, ce dernier s'écrit $\boldsymbol{\sigma} = 2\eta \mathbf{E}(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\sigma}_e$. Nous notons qu'en faisant cette décomposition, la contribution élastique de la contrainte est bien décrite par un modèle de Maxwell tensoriel :

$$\lambda \frac{d\boldsymbol{\sigma}_e}{dt} + \boldsymbol{\sigma}_e = 2\eta_p \mathbf{E}(\mathbf{u}). \quad (7)$$

Oldroyd reprend par ailleurs dans son modèle l'idée, qu'il avait déjà proposée en 1947 pour les modèles viscoplastiques [Oldroyd, 1947], de coupler la dynamique de $\boldsymbol{\sigma}$ à celle du champ de vitesse \mathbf{u} au sein du matériau, décrite par les équations de conservation de la quantité de mouvement (équation de Cauchy) et de la masse (équation d'incompressibilité). À l'équation tensorielle (6) viennent donc s'ajouter une équation vectorielle et une équation scalaire :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot (-p_0 \mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{f}, \quad (8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (9)$$

avec ρ la densité, p_0 la pression du solvant, \mathbf{f} la somme des forces extérieures s'appliquant sur le système, telles que la gravité par exemple. Il obtient ainsi un système de trois équations (une équation vectorielle, une équation tensorielle et une équation scalaire) pour un système de trois variables ($\boldsymbol{\sigma}$, \mathbf{u} , p_0) (un tenseur, un vecteur et un scalaire). En se donnant un jeu de conditions initiales et de conditions au bord il est donc possible de résoudre en espace et en temps le système obtenu, ce qui permet aujourd'hui d'utiliser les modèles macroscopiques pour simuler numériquement des fluides complexes par méthode d'éléments finis.

L'apparition de l'opérateur de dérivée temporelle dans les modèles tensoriels impose par ailleurs de choisir une définition appropriée de celui-ci. En effet, pour construire un modèle physique, il est nécessaire que ce dernier vérifie le principe de relativité et soit invariant par changement de référentiel inertiel. Pour ce faire, l'opérateur de dérivée temporelle doit être covariant. Oldroyd propose avec son modèle une forme covariante de la dérivée temporelle en absence d'inertie avant que Gordon et Schowalter n'en donnent en 1972 [Gordon and Schowalter, 1972] une forme plus générale :

$$\frac{d\boldsymbol{\sigma}}{dt} = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{u}) - \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\sigma} - a^* (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{u}) + \mathbf{E}(\mathbf{u}) \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (10)$$

avec $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{u}) = (\nabla\mathbf{u} - \nabla\mathbf{u}^T)/2$, la vorticité de l'écoulement et a^* un paramètre libre de la dérivée². Avec cette définition covariante de la dérivée temporelle en absence d'inertie, la contrainte n'est plus linéaire par rapport à la déformation, comme c'était le cas dans le modèle viscoélastique scalaire de Maxwell, l'utilisation d'un $a^* \neq 1$ suffisant à introduire des effets non-newtoniens. Ainsi, en cisaillement simple, le modèle d'Oldroyd prédit une viscosité apparente $\eta_{app} = \sigma_{xy}/\dot{\gamma}$ de la forme

$$\eta_{app} = \eta_s + \frac{\eta_0 - \eta_s}{1 + \lambda^2 (1 - a^{*2}) \dot{\gamma}^2}. \quad (11)$$

2. Si l'invariance par changement de référentiel est vérifiée pour n'importe quelle valeur de a^* , ce dernier est généralement choisi entre -1 et 1. Dans le cas d'un a^* général on parle de dérivée de Gordon-Schowalter, pour $a^* = 0$ de dérivée de Jaumann, pour $a^* = -1$ de dérivée sous-convectée (*lower-convected derivative*) et pour $a^* = 1$ de dérivée surconvectée (*upper-convected derivative*). Dans son article de 1950, Oldroyd présente la définition surconvectée de la dérivée temporelle ($a^* = 1$) qui apparaît naturellement lorsque l'advection est modélisée par un terme $\nabla\mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\mathbf{u}^\infty$. Ce sont Gordon et Schowalter qui généraliseront la forme de la dérivée en permettant au facteur devant le terme d'advection en \mathbf{E} de prendre une valeur quelconque. La version sous-convectée du modèle d'Oldroyd est appelé modèle d'Oldroyd-A tandis que sa version surconvectée est connue sous le nom de modèle d'Oldroyd-B.

Pour $|a^*| = 1$, le fluide demeure donc newtonien, tandis que pour toute valeur de a^* plus petite que 1 en valeur absolue, il est rhéofluidifiant et suit une loi de Cross d'exposant 2 (Eq. (1)). Pour $|a^*| > 1$, nous obtenons par ailleurs un fluide rhéoépaississant (Fig. 15). En 1977, Phan-Thien et Tanner proposent une forme plus générale du modèle d'Oldroyd dans le cas d'un réseau de polymères en solution dans un fluide visqueux [Thien and Tanner, 1977] :

$$\lambda \frac{d\sigma_e}{dt} + f(\sigma_e)\sigma_e = 2\eta_p \mathbf{E}(\mathbf{u}), \quad (12)$$

où η_p est la viscosité de la phase de polymères et $f(\sigma_e)$ le taux de destruction de liaisons entre polymères. Dans [Thien and Tanner, 1977], ce taux est approximé par $f(\sigma_e) = 1 + (\varepsilon\lambda/\eta_p) \text{tr } \sigma_e$, avec ε un paramètre appelé *paramètre d'extensibilité* permettant de retrouver le modèle d'Oldroyd lorsque $\varepsilon = 0$. Des expressions plus générales pour le taux de destruction de liaisons permettent de rendre le modèle plus réaliste pour des taux de déformation plus élevés [Phan-Thien, 1978, Ferrás et al., 2019]. Phan-Thien et Tanner donnent par ailleurs une signification physique au paramètre a^* apparaissant dans la dérivée de Gordon-Schowalter qui rend compte dans leur modèle du glissement des polymères par rapport au solvant. L'advection de ces derniers par l'écoulement n'étant pas parfaite, a^* peut prendre des valeurs plus petites que 1. Ce modèle permet par ailleurs d'obtenir de la rhéofluidification pour $|a^*| = 1$ lorsque ε est non nul (Fig. 15).

Si les VEM sont particulièrement adaptés pour décrire des fluides complexes rhéofluidifiants tels que des suspensions denses en-dessous du jamming, ils ne permettent pas de décrire la plasticité des fluides à seuil, puisqu'ils ne font pas apparaître de transition entre un comportement solide et un comportement fluide.

Modèles viscoplastiques

Les premiers modèles à décrire les fluides à seuil sont les **modèles viscoplastiques** dans lesquels le matériau se comporte comme un solide rigide ou élastique tant qu'il n'est pas déformé plastiquement. Dans le régime plastique, le matériau se comporte comme un fluide purement visqueux (mais potentiellement non-newtonien). Bingham propose en 1922 un premier modèle viscoplastique scalaire afin de décrire les courbes d'écoulement de fluides à seuil en cisaillement simple [Bingham, 1922]. Ce modèle peut être vu comme l'analogue de l'association en parallèle d'un amortisseur linéaire de viscosité η et d'un patin à frottement sec de seuil σ_y (Fig. 16), conduisant à la relation suivante :

$$\begin{cases} \dot{\gamma} = 0 & \text{si } \sigma \leq \sigma_y \\ \sigma = \sigma_y + \eta\dot{\gamma} & \text{si } \sigma > \sigma_y \end{cases}. \quad (13)$$

Ce modèle conduit ainsi à une dépendance affine de σ en $\dot{\gamma}$ dans la partie plastique de la courbe d'écoulement. Pour rendre compte de l'exposant plus petit que 1 observé expérimentalement dans certains fluides à seuil, Herschel et Bulkley proposent en 1926 leur célèbre loi [Herschel and Bulkley, 1926], désormais très largement utilisée pour modéliser la courbe d'écoulement des fluides à seuil :

$$\begin{cases} \dot{\gamma} = 0 & \text{si } \sigma \leq \sigma_y \\ \sigma = \sigma_y + k\dot{\gamma}^n & \text{si } \sigma > \sigma_y \end{cases}, \quad (14)$$

k étant le paramètre de consistance et n l'exposant d'Herschel-Bulkley compris entre 0 et 1. Ce modèle est l'équivalent d'un modèle de Bingham avec un amortisseur non-linéaire dont la viscosité dépend du taux de cisaillement selon la relation $\eta = k\dot{\gamma}^{n-1}$. Prager et Hohenemser donnent en 1932 la première formulation tensorielle d'un modèle viscoplastique [Hohenemser and Prager, 1932], en généralisation le modèle de Bingham. La condition scalaire d'écoulement des modèles de Bingham et Herschel-Bulkley est généralisée par le critère de von Mises introduit en Sec. 1.1, stipulant que le matériau s'écoule à condition que

$$|\sigma_{e,d}| \geq \tau_c \quad (15)$$

avec $\sigma_{e,d} = \sigma_e - (\text{tr } \sigma_e/3) \mathbf{I}$ la partie déviatorique de la contribution élastique du tenseur des contraintes et τ_c la contrainte critique déjà introduite en Sec. 1.1. Là encore, le taux de déformation $\dot{\gamma}$ du modèle unidimensionnel

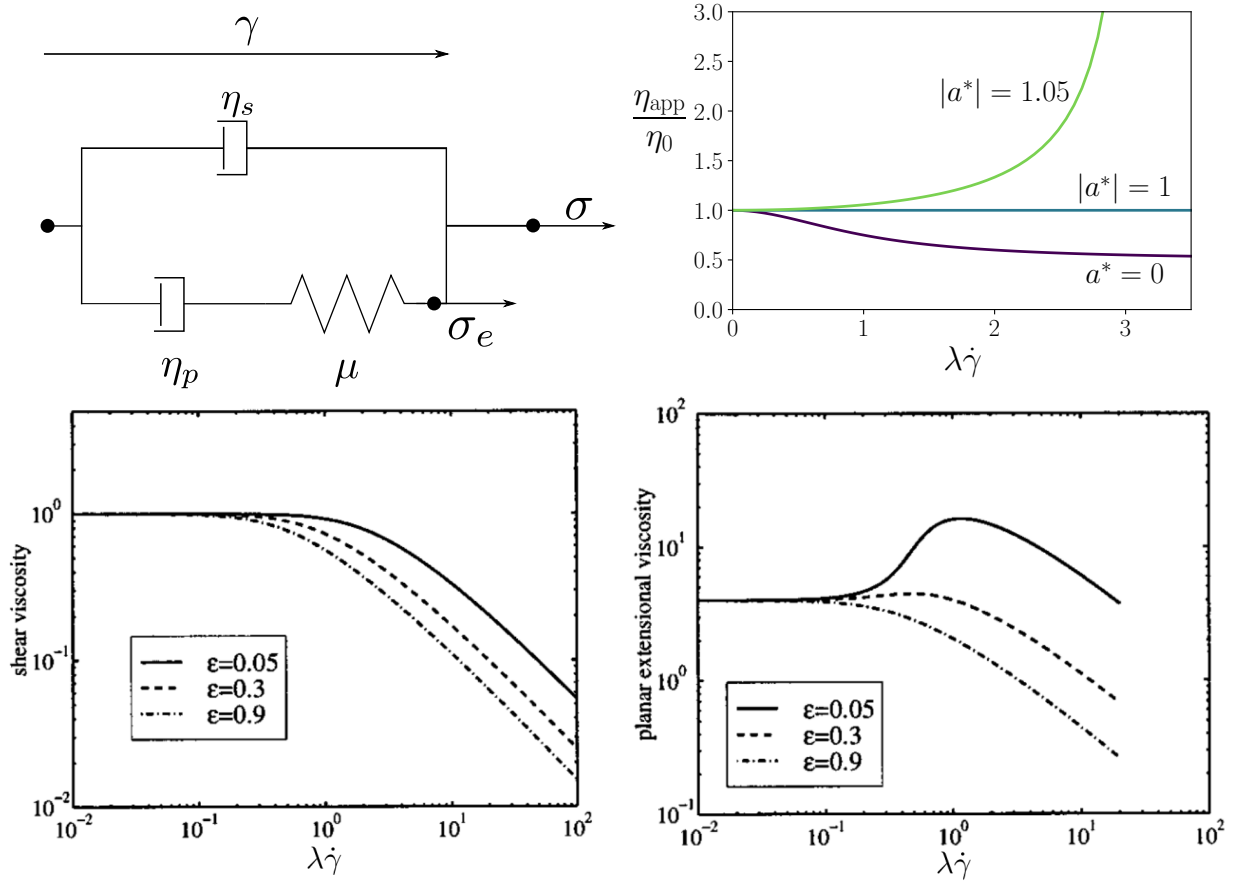


FIGURE 15 – **Rhéologie des modèles viscoélastiques** : (*haut, gauche*) Représentation mécanique 1D du modèle viscoélastique d’Oldroyd. (*haut, droite*) Évolution de la viscosité d’un fluide d’Oldroyd sous cisaillement simple en fonction du taux de cisaillement pour différentes valeurs de a^* et avec $\eta_0/\eta_s = 2$. (*bas*) Évolution de la viscosité de la phase de polymères en fonction du taux de déformation pour différentes valeurs de ε obtenue avec le modèle de Phan-Thien-Tanner de [Phan-Thien, 1978] ($f(\sigma_e) = \exp(\varepsilon \lambda \text{tr} \sigma_e / \eta_p)$, $a^* = 1$) : à *gauche* en cisaillement simple, à *droite* en écoulement extensionnel planaire. Le taux de déformation $\dot{\gamma}$ est défini pour un écoulement quelconque comme $\dot{\gamma} = \sqrt{2(\mathbf{E} : \mathbf{E})}$. Figures adaptées de [Grillet et al., 2002].

est remplacé par le tenseur des taux de déformations $\mathbf{E}(\mathbf{u})$. La version tensorielle du modèle de Bingham s’écrit alors :

$$\max\left(0, \frac{|\sigma_{e,d}| - \tau_c}{|\sigma_{e,d}|}\right) \sigma_e = 2\eta \mathbf{E}(\mathbf{u}). \quad (16)$$

Dans ce modèle, le matériau se comporte comme un solide rigide lorsqu’il ne s’écoule pas plastiquement. Oldroyd propose en 1947 une version adaptée du modèle de Bingham permettant de décrire l’élasticité du matériau en-dessous du seuil de plasticité avec une contrainte proportionnelle à la déformation dans le domaine élastique [Oldroyd, 1947]. De la même façon que le modèle de Bingham, le modèle d’Herschel-Bulkley peut être généralisé à un écoulement tridimensionnel sous la forme suivante :

$$\max\left(0, \frac{|\sigma_{e,d}| - \tau_c}{k|\sigma_{e,d}|^n}\right)^{\frac{1}{n}} \sigma_e = 2\mathbf{E}(\mathbf{u}). \quad (17)$$

Ces modèles construits pour reproduire les propriétés stationnaires des fluides à seuil ne permettent toutefois pas de reproduire la rhéologie transitoire de ces derniers, la contrainte n’ayant pas de dynamique propre à taux de déformation fixé.

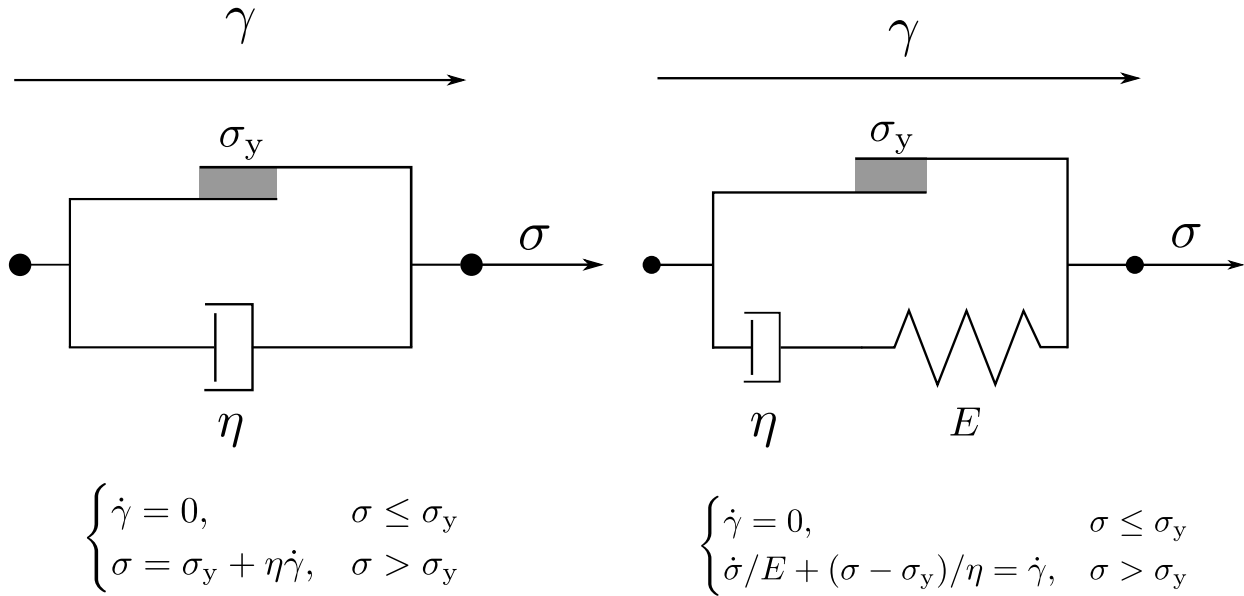


FIGURE 16 – (*gauche*) Représentation mécanique du **modèle viscoplastique de Bingham**. Le patin à frottement sec n'est pas déformé ($\dot{\gamma} = 0$) tant que la contrainte qui lui est imposée ne dépasse pas la contrainte seuil σ_y . Une fois le seuil franchit la contrainte générée par le patin est égale à σ_y . (*droite*) Représentation mécanique du **modèle viscoélastoplastique de Schvedoff**. Dans la limite $\mu \rightarrow \infty$, le modèle de Schvedoff se réduit au modèle de Bingham.

Modèles viscoélastoplastiques

Les travaux d'Oldroyd ont permis de définir un cadre précis pour le développement de modèles tensoriels en introduisant deux principes fondamentaux : l'utilisation d'une dérivée covariante et le couplage de la dynamique de la contrainte à celle du champ de vitesse (équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse). Les efforts conceptuels porteront après cela essentiellement sur la façon de régulariser les singularités de ces modèles afin de pouvoir les résoudre numériquement. Cet aspect des modèles rhéologiques ne concernant pas directement cette thèse nous ne nous y intéresserons pas dans cette introduction. Le lecteur intéressé peut se reporter à [Saramito and Wachs, 2017] pour avoir un aperçu du type de problèmes liés à la résolution numérique de modèles rhéologiques.

Ni les VEM, ni les VPM ne permettent de décrire tous les aspects de la rhéologie des fluides à seuil : les VPM permettent la description des fluides à seuil dans l'état stationnaire mais ne permettent pas de considérer la rhéologie transitoire de ceux-ci tandis que les VEM permettent d'intégrer une dépendance en temps mais sans capturer la plasticité, essentielle pour décrire les fluides à seuil. Pour cela, une nouvelle classe de modèles combinant les aspects transitoires des VEM et la plasticité des VPM est nécessaire : il s'agit des **modèles viscoélastoplastiques (VEPM)**. Ceux-ci décrivent des matériaux plastiques se comportant comme un solide élastique (ou viscoélastique) dans le régime élastique et comme un fluide viscoélastique dans le régime plastique.

Le premier VEPM est proposé par Schvedoff en 1900 [Schvedoff, 1900]. Là encore, il s'agit d'un modèle scalaire. Schvedoff propose de coupler un patin à frottement sec en parallèle d'un modèle de Maxwell (Fig. 16). Ainsi, tant que la contrainte ne dépasse pas une valeur seuil σ_y , le système n'est pas déformé. Lorsque la contrainte dépasse ce seuil, l'excès de contrainte $\sigma - \sigma_y$ suit un modèle de Maxwell classique. Dans l'état stationnaire, le modèle de Schvedoff se réduit au modèle de Bingham (Eq. (13)). Si ce premier VEPM scalaire apparaît très tôt (avant même les premiers VPM), les premiers VEPM tensoriels n'apparaissent que dans les années 1990. Les principaux modèles tensoriels sont les modèles d'Isayev-Fan [Isayev and Fan, 1990], de Puzrin-Houlsby [Puzrin and Houlsby, 2001] ou de Saramito [Saramito, 2007, Saramito, 2009]. Ce dernier propose de décrire la phase élastique par un modèle d'Herschel-Bulkley associé en série à un ressort de module d'élasticité μ . Cette phase élastique est associée en parallèle à un fluide newtonien de viscosité η_s (Fig. 17). La dynamique de la partie élastique de la contrainte est ainsi décrite par l'équation suivante (couplée avec les

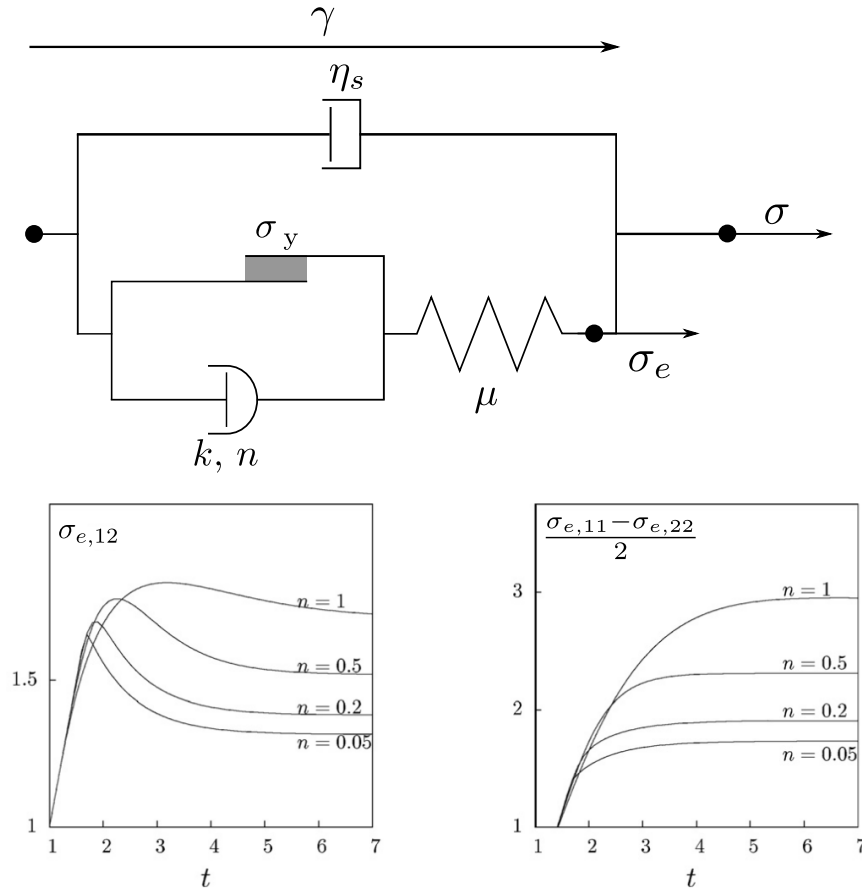


FIGURE 17 – **Modèle viscoélastoplastique de Saramito** : (*haut*) représentation mécanique 1D du modèle de Saramito, faisant apparaître un amortisseur non-linéaire de paramètres k et n , liant contrainte et déformation à travers la relation $\sigma = k\dot{\gamma}^n$ (dans le cas $n = 1$, il s’agit d’un amortisseur linéaire classique et k est une viscosité). Ce modèle combine les caractéristiques des VEM et des VPM. Ainsi, dans la limite $\mu \rightarrow \infty$, il se réduit à un modèle viscoplastique d’Herschel-Bulkley (Eq. (17)) pour la phase élastique tandis que pour $\sigma_y = 0$ et $n = 1$ nous retrouvons le modèle viscoélastique d’Oldroyd (Eq. (6)). Dans son domaine élastique, le matériau se comporte comme un solide viscoélastique de Kelvin-Voigt. (*bas*) Évolution de la contrainte de cisaillement élastique (à gauche) et de la première différence de contraintes normales élastiques (à droite) en fonction du temps pour un écoulement de cisaillement simple, pour différentes valeurs de l’exposant n , avec $a^* = 1$, $\lambda\dot{\gamma} = 1$ et $\sigma_y/\mu = 1$, où $\lambda = k\dot{\gamma}^{n-1}/\mu$ (figures issues de [Saramito, 2009]).

équations de conservation de la quantité de mouvement et de la masse) :

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d\sigma_e}{dt} + \max\left(0, \frac{|\sigma_{e,d}| - \tau_c}{2k|\sigma_{e,d}|^n}\right)^{\frac{1}{n}} \sigma_e = \mathbf{E}(\mathbf{u}). \quad (18)$$

En-dessous du seuil de plasticité le matériau se comporte dans ce modèle comme un solide viscoélastique de Kelvin-Voigt tandis qu’un écoulement d’Herschel-Bulkley (cf. Eq. (14)) d’exposant n est obtenu dans l’état stationnaire au-dessus du seuil. Appliqué au cas du cisaillement simple avec un écoulement homogène ($\mathbf{u} = \dot{\gamma}y\mathbf{e}_x$), ce modèle décrit qualitativement bien le comportement en transitoire d’un fluide à seuil et capture notamment l’overshoot sur la contrainte de cisaillement (quelle que soit la valeur de l’exposant n , cf. Fig. 17). Il a par ailleurs été testé quantitativement dans différents protocoles en comparaison avec des résultats expérimentaux pour différents types de systèmes, essentiellement dans sa version la plus simple où $n = 1$ (fluide de Bingham). Il permet, par exemple, de décrire la rhéologie dans un écoulement de Couette ou au voisinage d’un obstacle cylindrique pour des systèmes de mousses humides

Un modèle récent propose par ailleurs une équation unifiée pour un comportement unifié dans les domaines

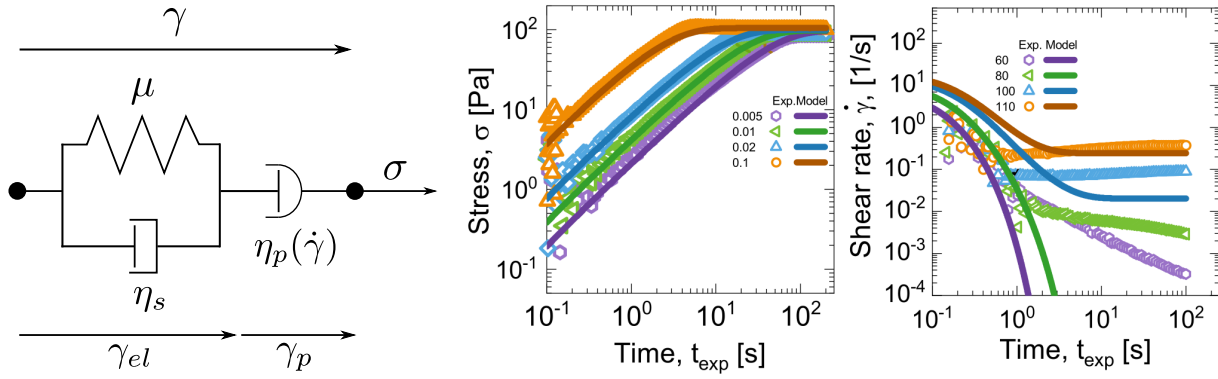


FIGURE 18 – **Modèle viscoélastoplastique unifié** : (gauche) Représentation mécanique du modèle viscoélastoplastique de Kamani *et al.*. La déformation du système est la somme de déformations élastiques (modélisées par un solide de Kelvin-Voigt) et de déformations plastiques modélisées par un amortisseur non-linéaire dont la viscosité est donnée à l'équation (20). (milieu) Comparaison des courbes de charge de la version scalaire du modèle de Kamani *et al.* à celles obtenues expérimentalement pour des suspensions de carbopol (les différentes valeurs de $\dot{\gamma}$ sont données en légende en s^{-1}), figure adaptée de [Kamani *et al.*, 2021]. (droite) Comparaison de l'évolution du taux de cisaillement en fonction du temps en cisaillement simple à contrainte imposée dans une la version scalaire du modèle de Kamani *et al.* et des données expérimentales de suspensions de carbopol (les différentes valeurs de σ sont données en légende en Pa), figure adaptée de [Kamani *et al.*, 2021].

élastique et plastique des fluides à seuil [Kamani *et al.*, 2021]. Ce modèle associe en série un solide de Kelvin-Voigt de module μ et de viscosité η_s , modélisant les déformations élastiques (réversibles) du matériaux, à un amortisseur non-linéaire de viscosité $\eta_p(\dot{\gamma})$ (avec $\dot{\gamma} = |\dot{\mathbf{E}}|$), modélisant les déformations plastiques (irréversibles). La relation d'Herschel-Bulkley dans l'état stationnaire en cisaillement simple est imposée en choisissant la forme de η_p :

$$\eta_p(\dot{\gamma}) = \frac{\sigma_y}{|\dot{\gamma}|} + k|\dot{\gamma}|^{n-1}. \quad (19)$$

Le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ suit alors la dynamique suivante :

$$\lambda(\dot{\gamma}) \frac{d\boldsymbol{\sigma}}{dt} + \boldsymbol{\sigma} = 2\eta_p(\dot{\gamma}) \left(\mathbf{E} + \frac{\eta_s}{\mu} \frac{d\mathbf{E}}{dt} \right), \quad (20)$$

avec $\lambda(\dot{\gamma}) = [\eta_s + \eta_p(\dot{\gamma})]/\mu$. Dans la limite $|\dot{\gamma}| \rightarrow 0$, le matériau se comporte comme un solide de Kelvin-Voigt tandis que pour tout $\dot{\gamma} \neq 0$ nous retrouvons la loi d'Herschel-Bulkley dans l'état stationnaire. Ce modèle montre des résultats en accord avec des résultats expérimentaux pour des suspensions de carbopol dans des protocoles de cisaillement oscillatoire (à faible et haute amplitude) ou de cisaillement simple à taux de cisaillement ou contrainte imposée ([Kamani *et al.*, 2021], cf. Fig. 18). Dans ce modèle il n'existe pas de démarcation nette entre domaine élastique et plastique, la transition entre élasticité et plasticité se faisant de manière continue.

Avec les VEPM nous obtenons ainsi une classe de modèles permettant de décrire de façon adéquate les fluides à seuil tels que les suspensions molles au-dessus de leur densité de jamming auxquelles s'intéresse une grande partie de cette thèse. Notons que le développement de modèles rhéologiques est encore un domaine de recherche actif, les modèles cherchant à intégrer toujours plus de caractéristiques des fluides complexes telles que la fragilité, par exemple (cf. [Saramito, 2021]). Dans le cas des systèmes étudiés dans le cadre de cette thèse les trois classes de modèles présentées ici suffisent à décrire les caractéristiques rhéologiques d'intérêt, si bien que nous n'irons pas plus loin dans la présentation des modèles rhéologiques.

Règles de Hand

De façon relativement indépendante au développement classique des modèles rhéologiques, G. L. Hand, en usant d'arguments d'invariance par changement de référentiel et d'algèbre linéaire établi, en 1962, la forme la plus générale que peut prendre une équation « physique » d'évolution pour n'importe quel tenseur symétrique

décrivant un fluide anisotrope [Hand, 1962] (en supposant que cette équation différentielle est d'ordre un par rapport au temps). Cette approche fut initialement pensée pour le développement d'équations constitutives pour des tenseurs dits de structure permettant de décrire la microstructure d'un système fait d'un grand nombre d'entités constitutives mais est valable pour tout tenseur symétrique et donc pour le tenseur des contraintes élastiques. Ainsi en appliquant le résultat de Hand pour ce dernier en dimension 3, il est possible de montrer que le tenseur des contraintes de la phase élastique doit obligatoirement suivre une équation d'évolution de la forme :

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma_e = & -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \sigma_e + \boldsymbol{\Omega} \cdot \sigma_e - \sigma_e \cdot \boldsymbol{\Omega} + \lambda_0 (\mathbf{E} \cdot \sigma_e + \sigma_e \cdot \mathbf{E}) + \lambda_1 \mathbb{1} + \lambda_2 \sigma_e + \lambda_3 \mathbf{E} + \lambda_4 \sigma_e^2 + \lambda_5 \mathbf{E}^2 \\ & + \lambda_6 (\mathbf{E} \cdot \sigma_e^2 + \sigma_e^2 \cdot \mathbf{E}) + \lambda_7 (\mathbf{E}^2 \cdot \sigma_e + \sigma_e \cdot \mathbf{E}^2) + \lambda_8 (\mathbf{E}^2 \cdot \sigma_e^2 + \sigma_e^2 \cdot \mathbf{E}^2), \end{aligned} \quad (21)$$

où les λ_i sont des scalaires, fonctions des neuf invariants suivants : $\text{tr} \sigma_e$, $(\sigma_e : \sigma_e)$, $(\sigma_e : \sigma_e^2)$, $(\mathbf{E} : \mathbf{E})$, $(\mathbf{E} : \mathbf{E}^2)$, $(\sigma_e : \mathbf{E})$, $(\sigma_e^2 : \mathbf{E})$, $(\sigma_e : \mathbf{E}^2)$ et $(\sigma_e^2 : \mathbf{E}^2)$. Les premiers termes du membre de droite sont les mêmes que ceux provenant de la définition covariante (10) de la dérivée temporelle dans les modèles rhéologiques, λ_0 pouvant être identifié à a^* , à la différence que λ_0 peut dans ce cas être fonction d'invariants reliés à σ_e et \mathbf{E} . Cette approche de mécanique théorique est intéressante en ce qu'elle liste les « ingrédients » qu'il est possible d'utiliser pour construire un modèle constitutif.

La description macroscopique des fluides complexes par des modèles rhéologiques permet de modéliser et simuler de façon satisfaisante ces derniers. Cependant, il s'agit d'une approche phénoménologique visant à obtenir des modèles constitutifs permettant de reproduire des phénomènes *a posteriori* mais ne permettant pas une compréhension physique très avancée. Il s'agit de modèles descriptifs avec un nombre élevé de paramètres libres (jusqu'à cinq paramètres libres pour les modèles les plus complexes) reliés à des caractéristiques rhéologiques macroscopiques du matériau et non pas aux propriétés des entités microscopiques le composant. À titre d'exemple, il est possible de fixer les valeurs des paramètres σ_y , k et n apparaissant dans les modèles de Saramito et de Kamani pour un matériau donné à partir de la courbe d'écoulement de ce dernier mais pas de les prédire à partir de la nature des entités microscopiques et de la fraction volumique de celles-ci. En particulier, ces modèles ne permettent pas d'expliquer l'origine de la valeur non-triviale de l'exposant de la loi d'Herschel-Bulkley.

2.2 Description mésoscopique : les modèles élastoplastiques

Afin d'obtenir une compréhension physique plus précise des phénomènes à l'œuvre dans les solides amorphes, il est nécessaire de considérer ce qu'il se passe dans ces matériaux à des échelles plus petites. Bien sûr, l'idéal pour ce faire est de considérer ce qu'il se passe à l'échelle des entités élémentaires constituant le matériau, en s'intéressant à la dynamique de celles-ci. Cependant le nombre très élevé d'entités rend le problème très complexe et la dérivation exacte d'un modèle constitutif à partir de l'échelle microscopique presque impossible. À côté de cela, le comportement des fluides à seuil à faible taux de cisaillement peut être considéré comme un phénomène critique proche d'une transition de phase. Il est donc naturel de s'attendre à ce que ce comportement soit dominé par des effets collectifs, d'où l'idée de se placer à une échelle intermédiaire suffisamment faible pour permettre d'intégrer les entités constitutives à la description du système mais suffisamment grande pour n'avoir à considérer que quelques caractéristiques simples de leur comportement. Ces trois dernières décennies ont ainsi vu la naissance de modèles coarse-grainés (ou gros grains), dits élastoplastiques, dans lesquels le matériau est décomposé en un grand nombre de cellules de taille mésoscopique (une cellule contient typiquement une dizaine d'entités constitutives, cf Fig. 20) se comportant de manière simple et interagissant les unes avec les autres. Le terme de **modèle élastoplastique (EPM)** désigne ici une classe de modèles mésoscopiques considérant des entités élémentaires élastiques où l'écoulement peut être décomposé en succession de déformations irréversibles (plastiques) à l'échelle mésoscopique. Le qualificatif « élastoplastique » ne se rapporte ainsi pas aux caractéristiques rhéologiques macroscopiques du matériau comme c'est le cas pour les modèles constitutifs macroscopiques mais à celles des cellules mésoscopiques. Les modèles élastoplastiques permettent, par exemple, de décrire la rhéologie du même type de fluides à seuil que les modèles rhéologiques viscoélastoplastiques. Nous présentons ici les idées principales sur lesquelles reposent ces modèles sans pour autant faire une revue détaillée des différents modèles élastoplastiques ayant vu le jour. Le lecteur intéressé par une revue plus détaillée peut se reporter à [Nicolas et al., 2018].

Évènements plastiques et relief énergétique

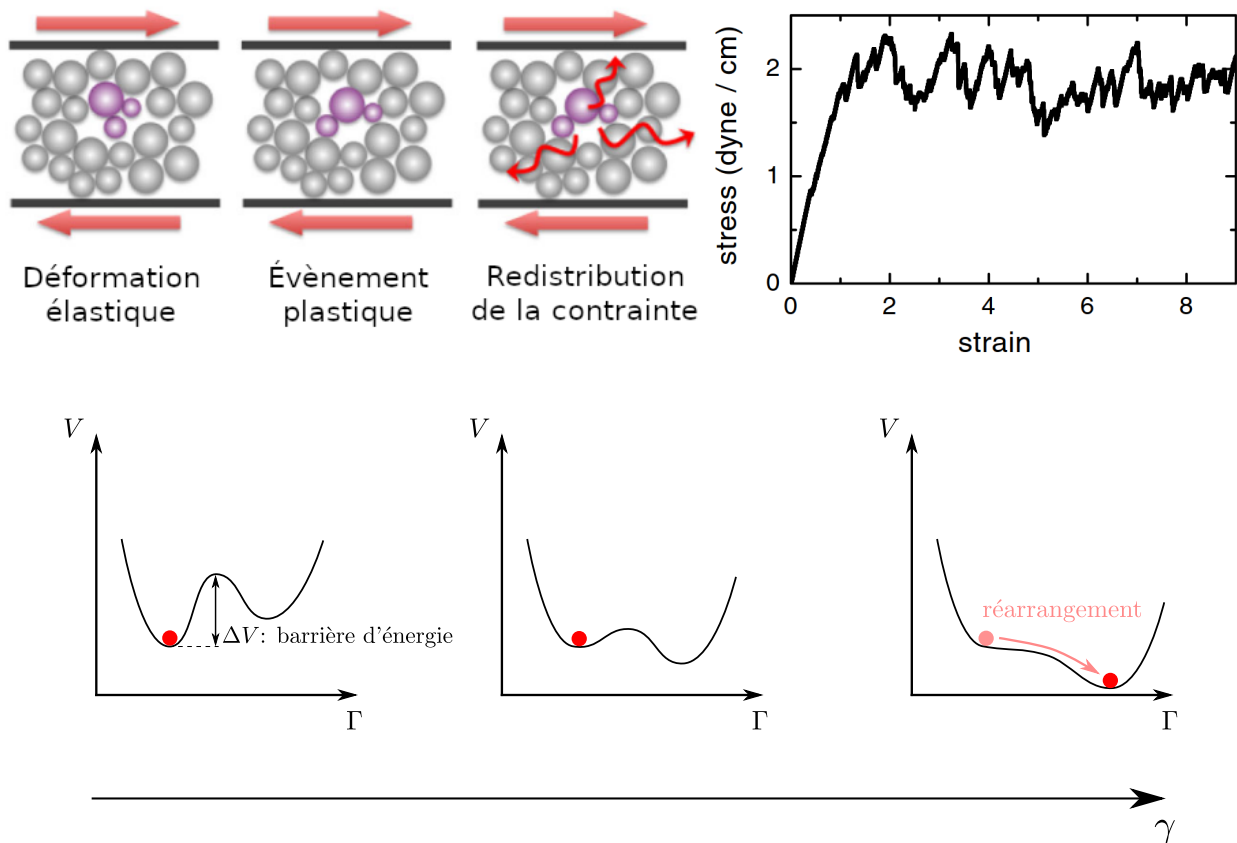


FIGURE 19 – **Évènements plastiques** : (*haut, gauche*) Illustration des réarrangements plastiques et de la redistribution de contrainte, figure adaptée de [Bocquet et al., 2009]. (*haut, droite*) Illustration des fluctuations de contrainte dans la courbe de charge d’une mousse 2D : la succession d’évènements plastiques à l’échelle mésoscopique se traduit par une évolution bruitée de la contrainte de cisaillement macroscopique, figure issue de [Lauridsen et al., 2002]. (*bas*) Évolution du relief énergétique avec la déformation. Initialement le système est piégé dans un minimum local tandis que la déformation du système abaisse progressivement la barrière de potentiel le séparant d’un autre minimum local, jusqu’à ce que celle-ci disparaisse et que le système rejoigne un état plus favorable énergétiquement : il y a alors réarrangement plastique.

Les modèles élastoplastiques reposent sur la notion d’**évènement plastique**, introduite pour la première fois par Argon en 1979 [Argon, 1979, Argon and Kuo, 1979] et désignant le réarrangement local et irréversible, sous l’effet du cisaillement, de blocs de particules en contact. La contrainte locale d’un bloc de particules augmente progressivement sous l’effet de la déformation, jusqu’à devenir trop importante et donner lieu à une réorganisation plastique des particules dans une configuration plus favorable mécaniquement (Fig. 19). La contrainte locale relaxe alors et est redistribuée non-localement dans l’ensemble du matériau, pouvant ainsi activer de nouveaux évènements plastiques ailleurs dans le matériau. Une autre façon de concevoir la notion d’évènement plastique consiste à adopter une description énergétique du système, inspirée du modèle de pièges de [Bouchaud, 1992]. Dans cette description, le système est considéré comme se déplaçant dans l’espace de ses configurations³ Γ à la surface d’un **relief énergétique** V . Ce relief est ponctué de « pièges », des minima locaux séparés les uns des autres par des barrières d’énergie. Ainsi le système peut se retrouver piégé dans un minimum local moins favorable énergétiquement qu’un minimum voisin sans pouvoir pour autant rejoindre ce dernier, la barrière d’énergie l’en empêchant. Dans un système thermique, le bruit thermique permet au

3. Si le système est composé de N particules, chacune repérée par un indice $i = 1, \dots, N$, une configuration correspond à un jeu de vecteurs $\{r_1, \dots, r_N\}$, chaque vecteur repérant la position de la particule de même indice.

système de franchir une telle barrière au bout d'un certain temps plus ou moins long, voire potentiellement infini si le système est complètement piégé. Dans les EPM, c'est la déformation mécanique du système qui vient transformer le relief et notamment abaisser les barrières d'énergie entre certains minima. Ainsi lorsque la barrière entre un minimum local de haute énergie et un minimum voisin plus favorable énergétiquement est suffisamment abaissée, le système se déplace dans l'espace des configurations pour rejoindre ce dernier, donnant lieu à un réarrangement plastique (Fig. 19).

Principes fondamentaux des EPM

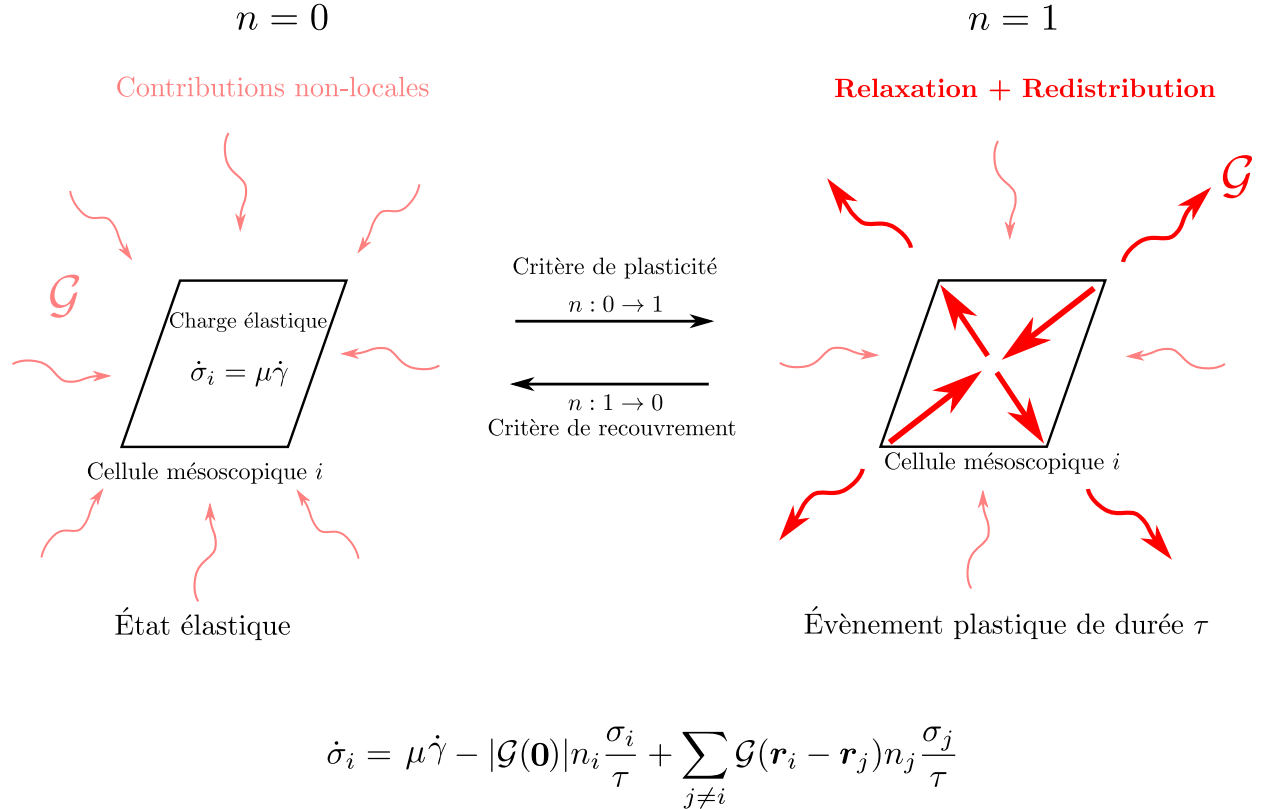


FIGURE 20 – Principe schématisé des modèles élastoplastiques mésoscopiques.

Partant de cette image physique caractérisant l'écoulement à faible taux de cisaillement, les EPM décomposent le matériau en cellules de taille mésoscopique décrites chacune par un paramètre d'activité n caractérisant le caractère élastique ($n = 0$) ou plastique ($n = 1$) de la cellule considérée. Ainsi, un évènement plastique correspond au passage du paramètre d'activité d'une cellule de 0 à 1. Chaque EPM est par ailleurs muni d'un jeu de quatre règles décrivant l'évolution de la contrainte locale et du paramètre d'activité de chaque cellule i :

1 Une règle pour la charge élastique de la contrainte ($n = 0$) :

Dans l'état élastique, la contrainte locale σ_i de la cellule i croît proportionnellement à la déformation globale : $\dot{\sigma}_i = \mu \dot{\gamma}$, avec μ un module d'élasticité (identique pour toutes les cellules) et $\dot{\gamma}$ le taux de déformation. Cette règle est identique dans tous les EPM. Dans une description énergétique, l'augmentation de la contrainte locale modifie le relief énergétique et contribue à abaisser les barrières énergétiques. Dans la plupart des EPM cette charge élastique se poursuit également pendant que la cellule subit un évènement plastique. S'il est possible de s'interroger sur la pertinence physique d'une charge élastique pendant un évènement plastique, en pratique le terme de charge étant proportionnel à $\dot{\gamma}$ il est négligeable devant la relaxation de la contrainte, les EPM s'intéressant essentiellement à des écoulements à faible taux de cisaillement.

2 Un critère de plasticité ($n : 0 \rightarrow 1$) :

Ce critère permet de déterminer lorsque la cellule passe de l'état élastique à l'état plastique (événement plastique). Dans un EPM scalaire, la cellule devient plastique lorsque la contrainte dépasse une valeur seuil $\sigma_{y,i}$. Pour les EPM tensoriels, le passage à l'état plastique est déterminé par le critère de von Mises : $|\sigma_i| > \tau_{c,i} \Rightarrow n : 0 \rightarrow 1$. Dans les deux cas, ce critère revient à doter la cellule d'une contrainte seuil $\sigma_{y,i}$ (respectivement $\tau_{c,i}$), équivalente à une barrière d'énergie $\Delta V_{y,i}$ dans une description en termes de relief énergétique. Dans la plupart des EPM cette contrainte seuil est généralement choisie identique pour toutes les cellules mais il est également possible de prendre en compte le désordre structurel du matériau en utilisant une distribution de contraintes seuil (ou de barrières d'énergie) [Sollich et al., 1997, Baret et al., 2002, Jagla, 2007, Nicolas et al., 2014, Agoritsas et al., 2015]. Dans certains modèles, la cellule ne devient pas instantanément plastique une fois le seuil dépassé mais peut continuer à se comporter élastiquement au-dessus du seuil pendant un temps moyen τ_{pl} (Fig. 21).

3 Une règle pour la redistribution de la contrainte ($n = 1$) :

Une fois que la cellule subit un événement plastique, la contrainte locale associée à celle-ci relaxe et est redistribuée aux autres cellules dans le matériau. La façon de modéliser la redistribution de la contrainte locale constitue le point critique faisant la richesse et la diversité des EPM. Au gré du développement des EPM et des systèmes considérés, différentes solutions ont été proposées. La solution la plus classique consiste à décrire ces interactions non-locales par un propagateur \mathcal{G} . Une expression pour ce propagateur est proposée dans [Picard et al., 2004] en adaptant les travaux d'Eshelby [Eshelby and Peierls, 1957] sur la réponse élastique d'un milieu continu à une inclusion générant une déformation locale. Si l'on considère qu'un événement plastique génère une déformation locale $\epsilon^{pl} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_0 \\ \epsilon_0 & 0 \end{pmatrix}$ ponctuellement en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, cette dernière crée un champ de déplacement élastique dans le reste du matériau. En réutilisant les résultats obtenus par Eshelby pour une déformation cylindrique, il est possible d'obtenir une expression pour la réponse de la contrainte de cisaillement à la déformation ϵ^{pl} :

$$\sigma_{xy}(\mathbf{r}) = \sigma_i a^2 \mathcal{G}(\mathbf{r}), \quad (22)$$

avec a la taille de l'évènement plastique et $\mathcal{G}(\mathbf{r}) = \cos 4\theta / \pi r^2$, le propagateur d'Eshelby (r et θ sont les coordonnées polaires du vecteur \mathbf{r}) et $\sigma_i = 2\mu\epsilon_0$, la contrainte locale de l'évènement plastique. La réponse élastique du matériau possède ainsi une forme quadripolaire caractéristique également observée expérimentalement et numériquement (Fig. 21). Différentes formes peuvent être obtenues pour le propagateur selon que le milieu soit considéré infini ou que des conditions aux limites périodiques soient imposées. Les EPM sur réseaux les plus sophistiqués sont couplés à un calcul par éléments finis de la redistribution de contrainte dans le matériau causée par un événement plastique [Sandfeld et al., 2015, Nicolas et al., 2015]. Par ailleurs, il est possible de considérer la réponse sur les autres composantes du tenseur des contraintes en 2D ou 3D (cf. [Nicolas, 2014], Chap. 8, pour une expression tensorielle de \mathcal{G} en 2D et 3D). Quelle que soit la dimension du modèle, la géométrie quadripolaire de la réponse élastique du système est observée. Bien que certains modèles tridimensionnels aient pu être utilisés [Liu et al., 2016, Budrikis et al., 2017], la plupart des EPM tensoriels sont en pratique des modèles bidimensionnels, les écoulements étudiés étant généralement des écoulements en cisaillement simple où une géométrie bidimensionnelle est suffisante. La réponse élastique évolue en $1/r^d$, avec d la dimensionnalité du système. Il s'agit donc d'interactions à longue portée. La contrainte locale de chaque cellule est donc soumise, en plus de sa dynamique propre, à des fluctuations générées par l'ensemble des cellules dans l'état plastique.

4 Un critère de recouvrement élastique ($n : 1 \rightarrow 0$) :

Il permet de déterminer lorsque la cellule mésoscopique retourne à l'état élastique. La cellule peut redevenir élastique immédiatement lorsque l'évènement plastique se produit ou bien demeurer plastique (et donc redistribuer sa contrainte aux autres cellules) pendant un temps fini τ .

Ce jeu de règles, représenté de façon schématique en Fig. 20, constitue le socle commun de tous les EPM, les différents modèles consistant en différentes variations de ces règles. La contrainte locale obéit à la dynamique

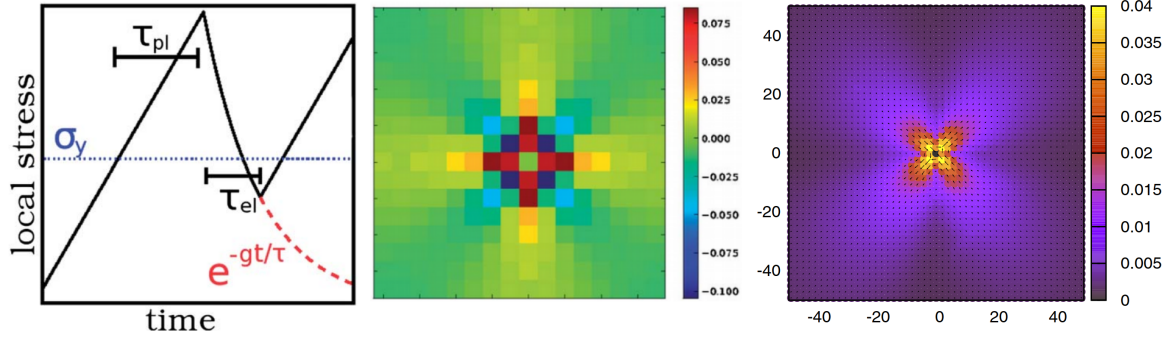


FIGURE 21 – Évènement plastique et redistribution de la contrainte dans les EPM. (gauche) Représentation schématique de l'évolution temporelle de la contrainte locale d'une cellule mésoscopique. Lorsque la contrainte locale dépasse la contrainte seuil σ_y , la cellule continue à se comporter élastiquement, un évènement plastique survenant avec une probabilité $1/\tau_{pl}$ à chaque unité de temps. Une fois qu'elle est devenue plastique sa contrainte relaxe exponentiellement et la cellule redevient élastique avec un taux $1/\tau_{el}$. Cette représentation ne prend pas en compte les effets de redistribution de la contrainte d'autres cellules qui ont pour effet de bruiser l'évolution de la contrainte locale. Figure issue de [Martens et al., 2012] (milieu) Forme théorique de la redistribution de contrainte (Eq. (22)) autour d'un évènement plastique se produisant au centre de la figure. Figure issue de [Martens et al., 2012] (droite) Champ de déformation moyen à temps long en réponse à une déformation induite localement au centre de la figure dans des simulations de dynamique moléculaire. figure issue de [Puosi et al., 2014].

générale suivante :

$$\dot{\sigma}_i = \underbrace{\mu\dot{\gamma}}_{\text{charge élastique}} - \underbrace{|\mathcal{G}(\mathbf{0})|n_i}_{\text{relaxation locale}} \frac{\sigma_i}{\tau} + \underbrace{\sum_{j \neq i} \mathcal{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)n_j}_{\text{contributions non-locales}} \frac{\sigma_j}{\tau}, \quad (23)$$

avec τ le temps caractéristique d'un évènement plastique. Dans le cas d'un modèle tensoriel chacune des composantes de la contrainte obéit à une dynamique équivalente, avec un propagateur spécifique pour chaque composante.

Modèles élastoplastiques sur réseau

Les **modèles sur réseau** permettent la résolution spatio-temporelle du système grâce à des méthodes numériques. Le matériau est alors découpé en cellules mésoscopiques carrées (ou cubique en 3D) possédant chacune une contrainte locale propre et se comportant selon le jeu de règles choisi. Chacune des cellules est repérée par la position de son centre, formant ainsi un réseau ordonné. Dans ce réseau, chaque cellule est repérée par un jeu d'indices (i, j) , la position de son centre se déduisant de ce jeu d'indice par $\mathbf{r}_{i,j} = a(i \times \mathbf{e}_x + j \times \mathbf{e}_y)$, avec a la taille des cellules. Chaque cellule (i, j) est caractérisée par une contrainte locale $\sigma_{i,j}$, un paramètre d'activité $n_{i,j}$ et un seuil de plasticité $\sigma_{y,i,j}$ (Fig. 22). Le grand nombre de cellules ne permet pas un traitement analytique du problème mais une résolution numérique est possible en discrétisant l'équation (23) en temps. La contrainte locale de chaque cellule est actualisée à chaque pas de temps grâce aux règles 1 et 3, et les paramètres $n_{i,j}$ et $\sigma_{y,i,j}$ grâce aux règles 2 et 4. La contrainte globale du système peut être obtenue à chaque pas de temps en moyennant les contraintes locales

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i,j} \sigma_{i,j}, \quad (24)$$

avec N le nombre total de cellules mésoscopiques. Les modèles sur réseau permettent ainsi de simuler la rhéologie macroscopique de solides amorphes. Ces modèles permettent d'obtenir des fluides à seuil suivant une loi d'Herschel-Bulkley avec un exposant proche de 0.5. Les EPM permettent également de capturer

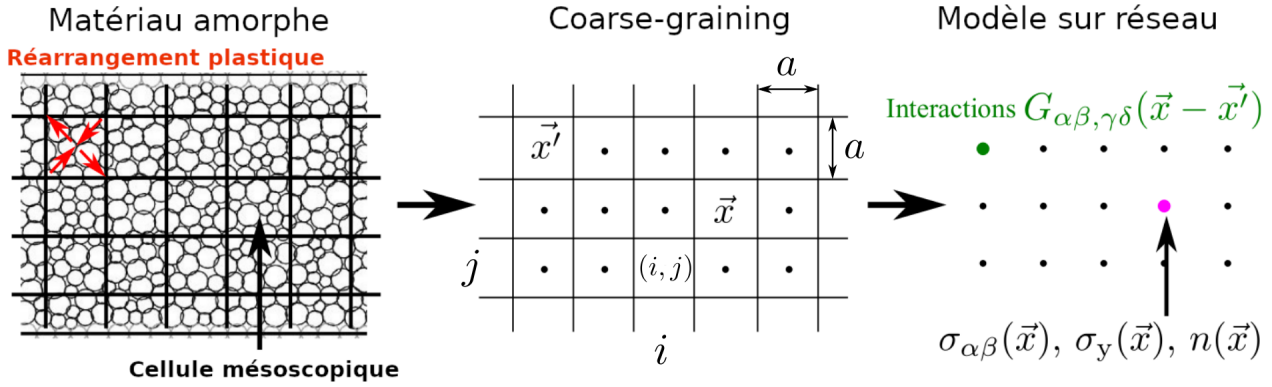


FIGURE 22 – **Modèle élastoplastique sur réseau.** Le matériau est découpé en cellules de taille égale décrite chacune par sa contrainte locale et son paramètre d'activité. Chaque cellule se voit par ailleurs attribuée une contrainte seuil intervenant dans le critère de plasticité (la contrainte seuil peut être uniforme ou distribuée). Les interactions entre cellules par redistribution de la contrainte locale au cours d'évènements plastique est décrite par un propagateur \mathcal{G} fonction du vecteur distance entre deux cellules. Figure adaptée de [Le Goff, 2021].

l'overshoot dans la courbe de charge en cisaillement simple (Fig. 23). Outre une description fidèle de la rhéologie macroscopique de ces systèmes, les EPM constituent une méthode de simulation alternative à la dynamique moléculaire permettant d'accéder à des informations spatiales. Ils permettent en particulier d'étudier toute sorte de phénomènes collectifs ou localisés tels que la formation de bande de cisaillement ou les effets de bord.

Modèles de champ moyen

Si les modèles sur réseaux permettent une résolution numérique spatiale et temporelle de la contrainte, ils sont trop complexes pour pouvoir être étudiés analytiquement. Pour ce faire, il est nécessaire de construire des modèles de champ moyen où les interactions non-locales sont traitées non plus de façon explicite mais comme un effet moyen. La dynamique du système est alors ramenée à une équation d'évolution sur une distribution de probabilité P permettant de décrire le système.

Le premier modèle de champ moyen est le **modèle SGR** (*Soft Glassy Rheology*) [Sollich et al., 1997]. Ce modèle est une généralisation du modèle de pièges de [Bouchaud, 1992] où le cisaillement du matériau agit comme un forçage externe permettant d'abaisser les barrières d'énergie. Chaque cellule est considérée comme piégée dans un puits de potentiel dans le relief énergétique. Un point essentiel du modèle est le désordre structurel du matériau, celui-ci étant modélisé par une distribution non-uniforme de la profondeur E des puits de potentiel $\rho(E) \propto \exp(-E/E_g)$, avec E_g une énergie caractéristique du matériau. Chaque cellule possède de plus une déformation locale l reliée à la déformation globale du matériau par $\dot{l} = \dot{\gamma}$. La cellule acquiert donc au fil du temps une énergie élastique $kl^2/2$ (avec k un module d'élasticité) toujours plus grande contribuant à abaisser la barrière de potentiel à franchir pour s'échapper du piège. L'approximation de champ moyen de ce modèle consiste à considérer les fluctuations de contrainte dues aux effets non-locaux comme un processus stochastique plutôt que de les calculer de façon explicite. Ces fluctuations sont ainsi considérées comme un « bruit mécanique » résultant en une température effective x permettant de franchir les barrières d'énergie par activation thermique. Cette température effective ne doit pas être confondue avec la température de systèmes thermiques, x n'est pas d'origine thermique mais joue un rôle équivalent à celui d'une température. Le taux d'échappement est ainsi supposé suivre une loi d'Arrhénius

$$\omega(E, l) \propto \exp\left(\frac{-E + kl^2/2}{x}\right), \quad (25)$$

Lorsqu'une cellule parvient à s'échapper, un évènement plastique se produit instantanément : la déformation de la cellule est réinitialisée à 0 et elle se retrouve piégée dans un nouveau puit dont la profondeur est à nouveau choisie dans la distribution $\rho(E)$. Le système est ainsi décrit par la distribution de probabilité $P(E, l; t)$ pour

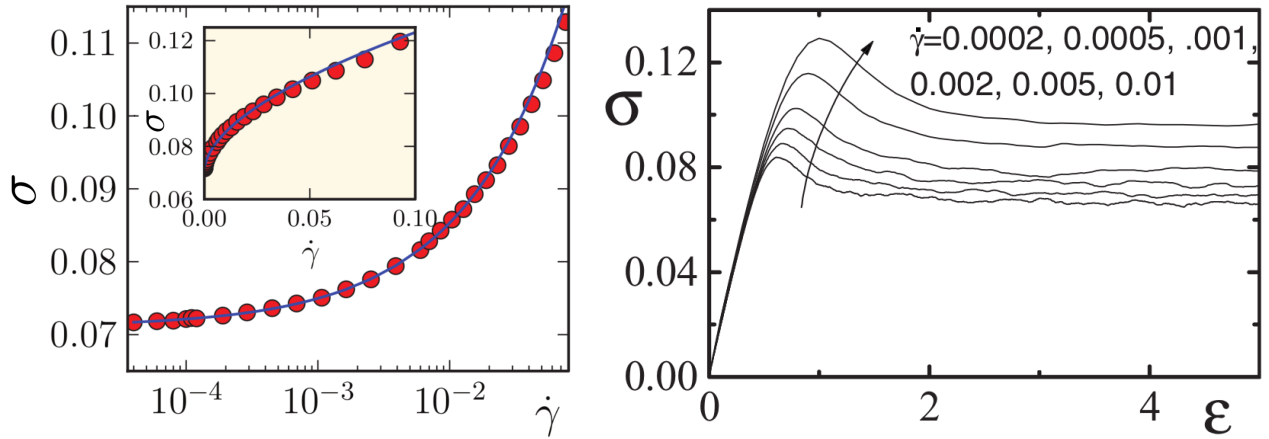


FIGURE 23 – **Rhéologie macroscopique de modèles élastoplastiques sur réseau.** (*gauche*) Courbe d'écoulement en cisaillement simple obtenu avec un EPM sur réseau. Les points sont les données obtenues en simulant le modèle tandis que la courbe en trait plein correspond à un fit des données de la forme $\sigma = A + B\dot{\gamma}^n$. L'exposant obtenu ici vaut $n = 0.56$, très proche de la valeur de 0.5 généralement retenue pour la loi d'Herschel-Bulkley. Figure adaptée de [Nicolas et al., 2014] (*droite*) Évolution de la contrainte de cisaillement avec la déformation en cisaillement simple obtenu en utilisant un EPM sur réseau pour différents taux de déformation, figure adaptée de [Jagla, 2007].

laquelle Sollich *et al.* proposent la dynamique suivante :

$$\partial_t P = -\dot{\gamma} \partial_l P - \omega(E, l) P + \langle \omega(E, l) \rangle_P \rho(E) \delta(l). \quad (26)$$

avec $\langle \omega(E, l) \rangle_P = \int \omega(E, l) P(E, l; t) dE dl$ et où δ est la fonction de Dirac. Le premier terme du membre de droite de cette équation décrit l'augmentation de la déformation locale induite par la déformation globale du matériau, le second la « disparition » des cellules lorsqu'elles franchissent la barrière d'énergie qui leur est attribuée et le dernier leur « réapparition » dans un état de déformation nulle et avec une nouvelle barrière d'énergie. La contrainte de cisaillement globale du système à l'instant t est alors obtenue par la relation

$$\sigma(t) = \langle kl \rangle_P = k \int l P(E, l; t) dE dl. \quad (27)$$

L'analyse de l'équation (26) à x fixé et dans la limite $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ met en évidence un comportement de fluide newtonien ($\sigma \sim \dot{\gamma}$ dans l'état stationnaire) lorsque $x > 2$. Pour $1 < x < 2$, $\sigma \sim \dot{\gamma}^{x-1}$ dans l'état stationnaire, tandis que dans le cas $x < 1$, une contrainte seuil apparaît et la rhéologie obéit à une loi d'Herschel-Bulkley d'exposant $1 - x$ (Fig. 24). Ce modèle permet également d'obtenir une loi d'échelle pour les modules de conservation et de perte en cisaillement oscillatoire. Si le modèle SGR est à l'origine une théorie scalaire, il a également été généralisé dans différentes versions tensorielles reposant sur les mêmes idées que le modèle scalaire [Cates and Sollich, 2003].

Le **modèle d'Hébraud-Lequeux** constitue un autre exemple de modèle élastoplastique en champ moyen [Hébraud and Lequeux, 1998]. Dans ce modèle, lorsque la contrainte d'une cellule mésoscopique dépasse une valeur critique σ_c (identique pour toutes les cellules) sous l'action du forçage extérieur, elle continue à se comporter élastiquement pendant un temps fini τ . Une fois qu'un élément plastique se produit, la contrainte de la cellule considérée est redistribuée au reste du matériau. L'approximation de champ moyen de ce modèle consiste à considérer que cette redistribution est uniforme, engendrant une fluctuation statistiquement identique sur la contrainte de toutes les autres cellules. La valeur de cette fluctuation est choisie aléatoirement à chaque évènement plastique dans une distribution centrée en 0. Le système est alors décrit par la distribution de probabilité de la contrainte de cisaillement $P(\sigma; t)$ dont la dynamique est semblable à celle du modèle SGR :

$$\partial_t P = -\mu \dot{\gamma} \partial_\sigma P - \omega(\sigma) P + \langle \omega(\sigma) \rangle_P \delta(\sigma) + D(t) \partial_\sigma^2 P, \quad (28)$$

avec μ le module élastique des cellules et D un coefficient de diffusion dépendant du temps. Comme dans SGR, le premier terme du membre de droite de cette équation décrit l'augmentation de la contrainte avec la

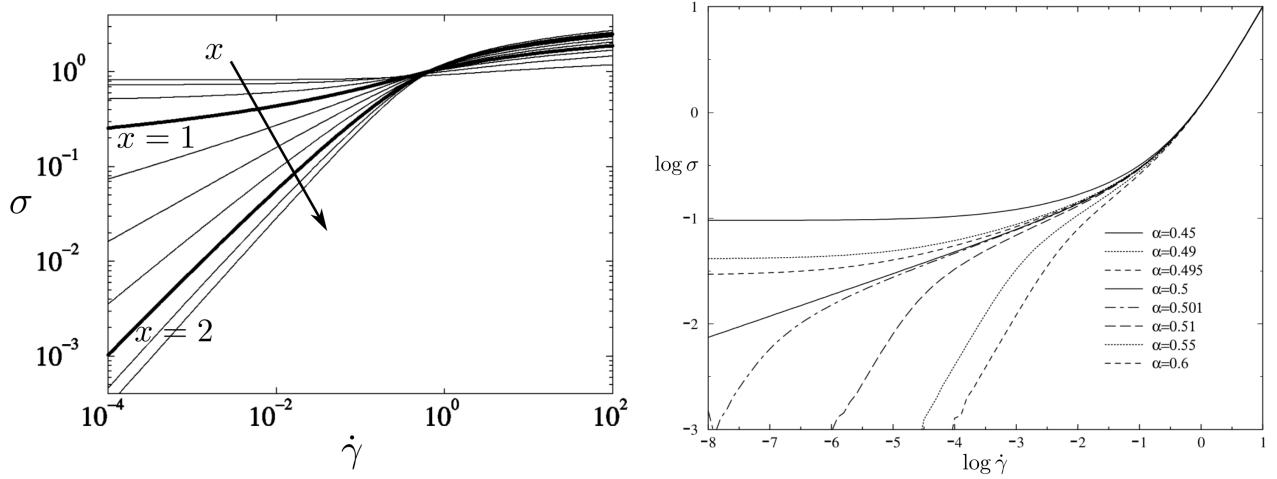


FIGURE 24 – **Courbes d’écoulement des modèles de champ moyen** : (gauche) Courbes d’écoulement en cisaillement simple du modèle SGR pour différentes valeurs de x (les valeurs vont de $x = 0.25$ à 2.5 avec un espacement de 0.25 entre chaque valeur), figure adaptée de [Sollich et al., 1997]. (droite) Courbes d’écoulement en cisaillement simple du modèle d’Hébraud-Lequeux pour différentes valeurs de α , figure issue de [Hébraud and Lequeux, 1998].

déformation globale, le second la « disparition » des cellules dont la contrainte est au-dessus de σ_c avec un taux $1/\tau$ et le troisième leur « réapparition » dans un état de contrainte nulle. Le taux de réarrangement prend cette fois la forme $\omega(\sigma) = H(|\sigma| - \sigma_y)/\tau$, avec H la fonction d’Heaviside. Le modèle d’Hébraud-Lequeux n’intègre pas d’activation thermique comme dans le modèle SGR, l’effet des fluctuations induites par la redistribution non-locale de la contrainte est prise en compte par l’ajout d’un terme diffusif sur la dynamique de la contrainte. Le point essentiel de ce modèle est de considérer que le coefficient de diffusion D de ce terme est proportionnel au taux de réarrangement

$$D(t) = \alpha \langle \omega(\sigma) \rangle_P = \frac{\alpha}{\tau} \int_{|\sigma| > \sigma_c} P(\sigma; t) d\sigma, \quad (29)$$

α étant un paramètre dépendant *a priori* des propriétés microscopiques du matériau. L’analyse de l’Eq. (28) dans la limite des petits taux de cisaillement permet alors de montrer que le matériau se comporte comme un fluide newtonien ($\sigma \sim \dot{\gamma}$) lorsque $\alpha > \sigma_c^2/2$, un fluide en loi de puissance $1/5$ ($\sigma \sim \dot{\gamma}^{1/5}$) pour la valeur critique $\alpha = \sigma_c^2/2$ et un fluide à seuil suivant une loi d’Herschel-Bulkley avec un exposant 0.5 et une contrainte seuil σ_y fonction de σ_c et α pour $\alpha < \sigma_c^2/2$ [Hébraud and Lequeux, 1998, Agoritsas et al., 2015] (Fig. 24). Contrairement au modèle SGR, le désordre structurel ne joue, dans le modèle d’Hébraud-Lequeux, aucun rôle majeur dans la rhéologie du système. La prise en compte du désordre structurel dans ce modèle par une distribution $\rho(\sigma_c)$ de la contrainte critique ne change pas qualitativement les résultats du modèle [Agoritsas et al., 2015].

Les modèles SGR et d’Hébraud-Lequeux diffèrent essentiellement dans la façon dont agit la redistribution non-locale de la contrainte. Dans SGR, cette dernière agit de façon analogue à une température, le bruit mécanique permettant de franchir les barrière par activation tandis que dans le modèle d’Hébraud-Lequeux, les barrières sont abaissées de manière diffusive, le temps de franchissement d’une barrière correspondant alors au temps nécessaire à la disparition par diffusion de la barrière. Ces dernières années certains résultats sont venus appuyer l’hypothèse d’une action diffusive de la redistribution de contrainte [Nicolas et al., 2014, Agoritsas et al., 2015]. L’utilisation de modèles sur réseaux a permis de montrer que le temps moyen $1/\omega(E)$ que prend une cellule pour s’échapper d’une barrière d’énergie E varie comme une loi de puissance $E^{0.75}$ et non pas comme une loi d’Arrhénus comme proposé en Eq. (25). Cette loi de puissance est caractéristique d’un phénomène de diffusion anormale. Dans le cas du modèle d’Hébraud-Lequeux, le temps pour atteindre une contrainte σ par diffusion varie comme σ^2 , l’énergie étant proportionnelle à σ^2 , le temps varie comme E . Il a été montré que l’utilisation d’une loi de Lévy biaisée pour $\omega(\sigma)$ permet d’obtenir la bonne théorie de champ moyen pour les EPM [Lin and Wyart, 2016].

Régime de validité des EPM

Les EPM reposent sur l'image physique d'un écoulement constitué d'une succession d'évènements plastiques. Cette image physique est particulièrement pertinente pour les faibles taux de cisaillement où la dynamique des particules composant le matériau suit bien des phases d'arrêt où les particules en contact se déforment élastiquement et des déplacements soudains lorsqu'un évènement plastique impliquant la particule concernée se produit. Pour des taux de cisaillement plus élevés, l'importance des évènements plastiques dans la rhéologie macroscopique s'amointrit, les particules se mouvant de façon presque continue sans qu'il soit possible de distinguer des phases de charge élastique et des phases de réarrangements plastiques. Il est possible d'évaluer l'ordre de grandeur de la limite supérieure de ce régime par un raisonnement simple. Supposons qu'un système composé de N_c cellules mésoscopiques évolue pendant un temps Δt au cours duquel n_e évènements plastiques de durée moyenne τ se produisent. La proportion de temps que passe en moyenne une cellule dans l'état plastique vaut alors $n_e \tau / N_c \Delta t$. Cette grandeur mesure donc la pertinence de l'image physique sous-jacente aux EPM. Le régime de validité de ces derniers peut donc être considéré comme le régime où cette proportion de temps passant dans l'état plastique est faible. Par ailleurs pendant le temps Δt , le système aura été déformé de $\Delta \gamma = n_e \delta \gamma$, où $\delta \gamma$ représente la déformation moyenne que subit le système lorsqu'un évènement plastique ce produit. Cette déformation moyenne varie de façon inversement proportionnelle au nombre de cellules, $\delta \gamma \propto 1/N_c$ (en 2D). Le taux de cisaillement du système vérifie par ailleurs $\dot{\gamma} = \Delta \gamma / \Delta t \propto n_e / (N_c \Delta t)$, ce qui nous conduit à la condition suivante pour le régime de validité des EPM :

$$\dot{\gamma} \ll \frac{1}{\tau}, \quad (30)$$

Cette relation traduit le fait que la déformation des cellules doit être assez lente pour que les effets non-locaux de redistribution de la contrainte jouent un rôle dans les variations de contraintes locales amenant une cellule à franchir le seuil de plasticité.

La grande réussite des EPM est de capturer des effets non-triviaux de la rhéologie macroscopique des fluides à seuil à partir d'une image physique simple de l'écoulement à faibles taux de déformation dépendant de très peu de paramètres. En particulier, ils permettent de retrouver la loi d'Herschel-Bulkley en régime stationnaire sans avoir à l'intégrer explicitement dans la modélisation comme c'est le cas pour les VEPM. Ils permettent notamment d'interpréter l'exposant non-trivial de la loi d'Herschel-Bulkley comme un exposant critique à l'approche d'une transition de phase et mettent en évidence l'importance des effets collectifs dans l'émergence de cet exposant. Les modèles de champ moyen permettent même de proposer une prédiction analytique de la valeur de cet exposant. Dans certaines de leurs formulations sur réseau les EPM peuvent par ailleurs constituer une méthode d'éléments finis pour la simulation de fluides à seuil résolue en temps et en espace.

Les EPM constituent ainsi une illustration de l'apport en terme de compréhension physique que peuvent offrir des modèles construits à des échelles inférieures. Toutefois, ils ne permettent d'étudier la contrainte qu'*a posteriori*, une fois que le problème a été résolu à l'échelle mésoscopique, autrement dit, il ne s'agit pas de modèles constitutifs offrant une équation d'évolution pour le tenseur des contraintes macroscopiques, par exemple. Par ailleurs, ils ne permettent pas de faire le lien entre le comportement des entités constitutives microscopique et la dynamique du tenseur des contraintes à l'échelle macroscopique. En cela, ils n'éclairent pas les modèles rhéologiques macroscopiques sur les phénomènes microscopiques à l'origine de l'émergence de tel ou tel terme dans les équations constitutives macroscopique. Ils n'ont par ailleurs pas la même généralité que les modèles macroscopiques puisqu'ils sont conçus pour un problème très spécifique. Ces modèles permettent uniquement l'étude de fluides à seuil et ne peuvent être généralisés au cas de suspensions denses en-dessous du jamming, la description en terme d'évènements plastiques n'ayant pas de sens dans ce cas. Les EPM sont par ailleurs spécifiques aux écoulements à faibles taux de déformation comme discuté précédemment.

D'un autre côté, les EPM, de par leur nature mésoscopique, n'ont pas de lien direct avec l'échelle microscopique des entités constitutives. Là encore les paramètres du modèle tels que le module d'élasticité des cellules ou leur seuil de plasticité ne sont pas directement reliables de façon simple aux caractéristiques des entités constitutives. De plus, ces modèles n'offrent aucune information sur la structure microscopique du matériau. Ainsi, la plasticité du matériau est intégrée de façon explicite dans le modèle et n'émerge pas d'un phénomène microscopique.

2.3 Description microscopique

Comme nous l'avons vu avec les EPM, la dérivation de modèles à des échelles inférieures permet d'expliquer la rhéologie macroscopique par des phénomènes physiques impliquant les entités constitutives. L'échelle microscopique constitue de ce point de vue l'échelle la plus complète pour décrire la physique des suspensions denses molles. Connaissant les règles régissant la dynamique des entités microscopiques, il est, en principe, possible de déterminer le comportement de l'ensemble. En pratique, le grand nombre de particules rend le problème si complexe qu'il ne peut être traité que par simulations numériques de type dynamique moléculaire, par exemple. Pour un traitement analytique du problème, il est nécessaire d'adopter une image moyenne du système en utilisant des outils de physique statistique tels que les distributions de probabilité ou les fonctions de corrélation du système. Si l'obtention d'équations d'évolution (généralement non-fermées) pour ces fonctions constitue un raisonnement classique en physique statistique, il est bien moins aisé de dériver à partir de ces équations microscopiques des équations sur des quantités macroscopiques telles que le tenseur des contraintes. La dérivation d'une équation macroscopique exacte fermée sur le tenseur des contraintes à partir des équations microscopiques est impossible à réaliser de façon exacte et nécessite soit de faire des approximations physiquement motivées sur le système considéré soit de recourir à une résolution numérique à une étape de la dérivation. Nous présentons ici les principaux types de dérivations permettant de lier la rhéologie macroscopique à la structure microscopique des suspensions denses molles. Là encore, il ne s'agit pas de faire une liste exhaustive de tous les travaux existants mais plutôt de présenter les principales approches développées jusqu'à présent.

Approches microstructurelles

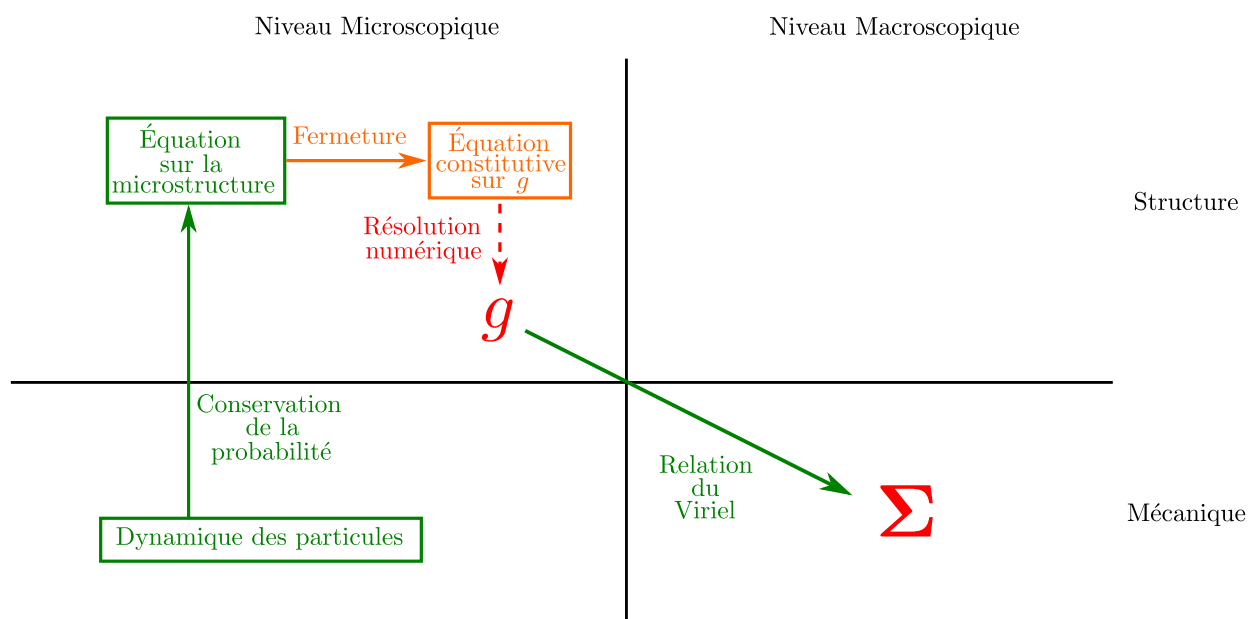


FIGURE 25 – **Représentation schématique des approches microstructurelles** : les cadres représentent les équations, les flèches les étapes de dérivation de la théorie. La couleur verte indique le caractère exact analytiquement de la relation, de l'équation ou de la grandeur obtenue et la couleur orange les approximations physiques tandis que la couleur rouge indique une rupture du lien avec le niveau microscopique.

Si le matériau est considéré comme la moyenne d'un nombre infini de réalisations d'un système de N entités constitutives, l'information la plus complète sur la microstructure est contenue dans la fonction de distribution à N corps P_N , $P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ représentant la probabilité de trouver le système dans une configuration où les particules $1, \dots, N$ se trouvent aux positions $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ ⁴. La connaissance de cette fonction permet d'accéder

4. En général, P_N est aussi fonction des vecteurs vitesse des particules mais dans le cas d'une dynamique suramortie pour les

à toutes les grandeurs macroscopiques, et en particulier au tenseur des contraintes, en réalisant une moyenne sur l'ensemble des configurations possibles pondérées par la fonction P_N . La dynamique de cette fonction est intimement liée à celle des entités constitutives du système à travers l'équation de Fokker-Planck traduisant la conservation de la probabilité totale [Pottier, 2007] :

$$\partial_t P_N + \sum_{i=1}^N \nabla_i \cdot (\dot{\mathbf{r}}_i P_N + D_{ij} \nabla_j P_N) = 0, \quad (31)$$

avec \mathbf{D} la matrice de diffusion du système (dans le cas de systèmes athermiques $\mathbf{D} = 0$). La spécification de la dynamique du système détermine ainsi la dynamique de P_N . En pratique, P_N dépend d'un grand nombre de variables et il est préférable de travailler avec les fonctions de corrélation associées à cette distribution de probabilité, dépendant d'un nombre réduit de variables. En particulier la fonction de corrélation de paire définie comme

$$g(\mathbf{r}) = \frac{N(N-1)}{\rho^2} \int P_N(\mathbf{0}, \mathbf{r}, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N \quad (32)$$

pour un système homogène de densité ρ constitue une information suffisante sur la microstructure et ne dépend plus que d'un seul vecteur centre-à-centre. En particulier, cette fonction permet de calculer la composante élastique du tenseur des contraintes macroscopique avec le même niveau d'exactitude que la fonction P_N . La contribution de l'élasticité des entités constitutives au tenseur des contraintes macroscopique est ainsi reliée à la fonction de corrélation de paire par la relation du Viriel :

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (33)$$

Une première approche que nous qualifierons de **microstructurelle** consiste à résoudre l'ensemble du problème au niveau microscopique en obtenant g et à remonter *a posteriori* au tenseur des contraintes grâce à la relation du Viriel. Pour cela, il est nécessaire de transformer l'équation (31) sur P_N en une équation sur g . Il est facile d'obtenir une équation sur des fonctions de corrélation associées à P_N à partir de cette équation en intégrant sur le bon nombre de vecteurs positions. Cependant, ce faisant l'équation obtenue sur g n'est plus fermée mais dépend également de la fonction de corrélation à trois corps g_3 . L'Eq. (31) se transforme alors en une hiérarchie d'équations sur les différentes fonctions de corrélation, ne permettant pas de réduire la complexité du problème. Pour ce faire, il est nécessaire d'arrêter la hiérarchie à un certain ordre et d'approximer la fonction de corrélation d'ordre le plus élevé en fonction des ordres inférieurs. Généralement, seule l'équation sur g est considérée et le système est fermé en choisissant une relation de fermeture permettant d'exprimer g_3 en fonction de g , ce qui constitue un problème classique de physique des liquides.

Cette approche a été développée dans [Nazockdast and Morris, 2012a, Nazockdast and Morris, 2012b, Nazockdast and Morris, 2013] pour des systèmes de sphères dures browniennes en-dessous de la densité de jamming. Partant d'une dynamique complète des particules, prenant en particulier en compte les interactions hydrodynamiques entre les sphères dures, il est possible d'établir une équation d'évolution pour g faisant apparaître g_3 . Cette dernière est fermée en utilisant une relation de fermeture classique entre g_3 et g . Une équation intégral-différentielle non-linéaire est ainsi obtenue. Cette dernière, si elle est bien fermée, demeure suffisamment complexe pour ne pouvoir être traitée analytiquement. Elle est résolue numériquement dans l'état stationnaire par une méthode itérative de discrétisation par éléments finis. La solution obtenue permet une analyse approfondie de la microstructure. En utilisant la relation du Viriel, il est également possible d'accéder au tenseur des contraintes et notamment à ses différentes contributions (totale, hydrodynamique, brownienne).

La comparaison, présentée en Fig. 26, des prédictions de modèles microstructurels à des données issues de simulations de dynamique moléculaire montre que cette approche permet des prédictions quantitativement satisfaisantes. Cela est permis par une description très précise de la dynamique du système au niveau microscopique. Ce niveau de détail résulte en une équation constitutive très complexe sur g . Si les travaux récents de [Banetta and Zaccone, 2019, Banetta and Zaccone, 2020] ont permis de développer une méthode semi-analytique pour résoudre cette équation constitutive pour des suspensions très diluées ($\phi \lesssim 0.2$), cette

entités constitutives, ce qui est le cas des systèmes auxquels nous nous intéressons, les vitesses n'étant plus des variables indépendantes des positions, la seule donnée des vecteurs positions suffit à décrire le système.

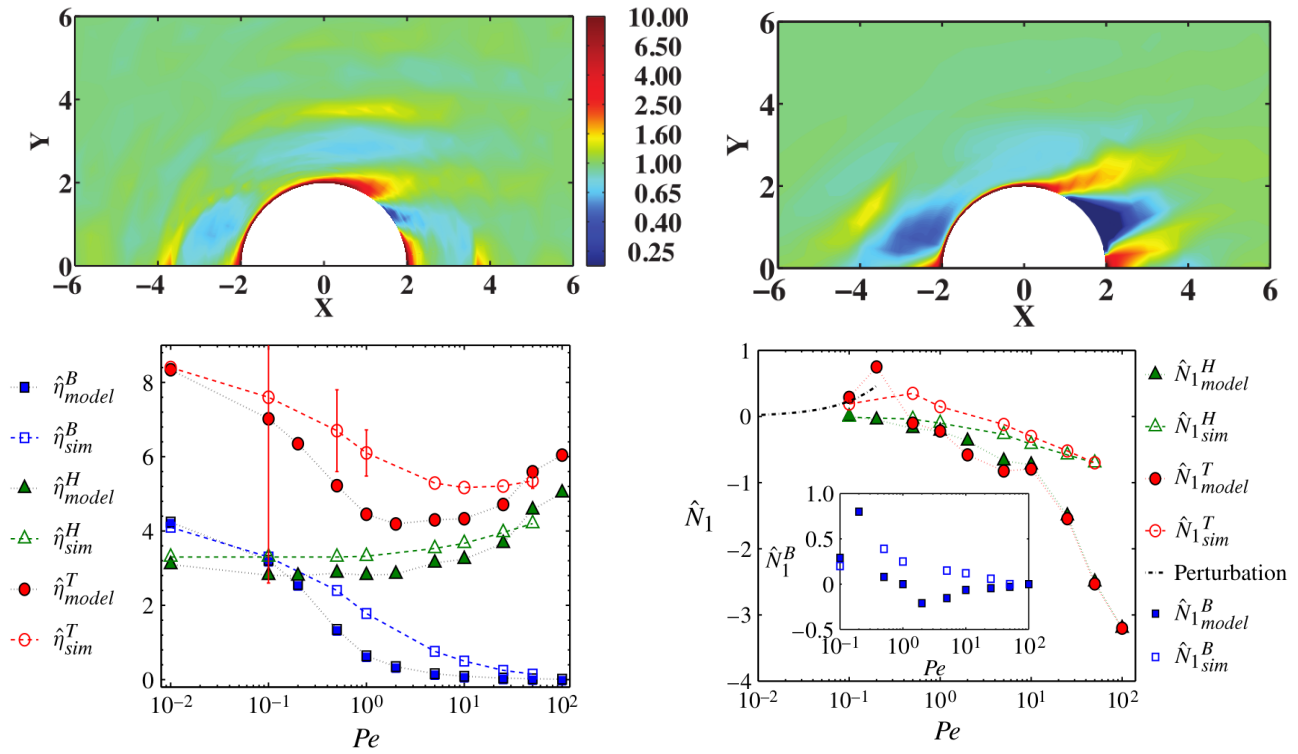


FIGURE 26 – **Microstructure et rhéologie par approche microstructurale.** (*haut*) Comparaison dans le plan de cisaillement entre la fonction de corrélation de paire obtenue par simulations de dynamique moléculaire (*à gauche*) et celle obtenue grâce à la résolution numérique d’un modèle microstructural (*à droite*). La fraction volumique de sphères dures en suspension vaut $\phi = 0.40$ et le nombre de Péclet 50 ($Pe = 6\pi\eta\dot{\gamma}a^3/k_B T$, avec η la viscosité du fluide suspensé et a le rayon des sphères dures). Figures adaptées de [Nazockdast and Morris, 2013] (*bas*) Évolution de la viscosité (*à gauche*) et de la première différence de contraintes normales (*à droite*) obtenues grâce à un modèle microstructural (traits pleins) et des simulations de dynamique moléculaire (traits pointillés) en fonction du nombre de Péclet à $\phi = 0.40$. La viscosité (resp. la première différence de contraintes normales) totale est représentée (en rouge) ainsi que sa composante hydrodynamique (en vert) et brownienne (en bleu). Figures adaptées de [Nazockdast and Morris, 2012b].

équation ne peut être étudiée que numériquement dans les régimes de plus fortes densités. Tout l’effort analytique porte alors sur le niveau microscopique (Fig. 25), la motivation principale de ce type d’approche étant la description la plus précise possible de la microstructure. La rhéologie du système ne constitue qu’un problème secondaire dans ce genre d’approche qui ne permet pas d’aboutir à quoi que ce soit d’analytique sur le tenseur des contraintes.

Théorie de Mode-Coupling par intégration à travers les transitoires (MCT-ITT)

La théorie de mode-coupling a vu le jour dans les années 1980 pour étudier la transition vitreuse dans les systèmes amorphes thermiques et repose sur l’idée que les variables dynamiques de ces systèmes relaxent lentement lorsque ceux-ci sont proche de la transition [Sjögren, 1980, Bengtzelius et al., 1984]. À partir des années 2000, celle-ci est adaptée à l’étude de la rhéologie des suspensions denses thermiques au-dessus de la densité de transition vitreuse [Fuchs and Cates, 2002, Cates et al., 2003, Miyazaki et al., 2004, Fuchs and Cates, 2009, Brader et al., 2009, Brader et al., 2012]. Il s’agit d’une approche microstructurale permettant d’obtenir l’évolution de la contrainte du système de façon analytique à partir de l’Eq. (31), plutôt que d’utiliser une résolution numérique de l’évolution de la microstructure. Le prix à payer pour ce faire est un niveau d’abstraction élevé reposant sur le formalisme de Zwanzig-Mori utilisant la représentation en opérateurs hermitiens et leurs projections. Ce formalisme en fait une théorie complexe et déroutante pour un public non averti mais permet des manipulations avec lesquelles il est possible d’aller bien plus loin dans l’exploitation de l’équation sur la

microstructure du système. Dans cette approche, les entités constitutives suivent une dynamique de Langevin suramortie, où

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{u}(\mathbf{r}_i) + \mathbf{f}_i(\Gamma) + \mathbf{b}_i, \quad (34)$$

avec $\Gamma = \{\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N\}$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}_i)$ la vitesse du fluide suspendant à la position de la particule i , \mathbf{f}_i la force exercée par l'ensemble des autres particules sur la particule i , \mathbf{b}_i une force aléatoire vérifiant $\langle \mathbf{b}_i(t) \rangle = 0$ et $\langle b_i^\alpha(t) b_j^\beta(t') \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t')$ et où toutes les grandeurs ont été adimensionnées et la température du système fixée à 1. Le gradient du champ de vitesse au sein du fluide suspendant est supposé uniforme, si bien que $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}$. L'équation de conservation de la probabilité peut alors s'écrire formellement sous la forme

$$\partial_t P_N(\Gamma, t) = \Omega(\Gamma, t) P_N(\Gamma, t), \quad (35)$$

avec $\Omega = \sum_{i=1}^N \nabla_i \cdot (\nabla_i - \mathbf{f}_i - \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{r}_i)$, un opérateur agissant sur P_N , appelé opérateur de Smoluchowski. Dans ce formalisme, la densité de probabilité évolue comme

$$P_N(\Gamma, t) = e^{\int_0^t \Omega(\Gamma, s) ds} P_N(\Gamma, 0), \quad (36)$$

avec

$$e^{\int_t^{t'} A(s) ds} = 1 + \int_t^{t'} ds_1 A(s_1) + \int_t^{t'} ds_1 \int_t^{s_1} ds_2 A(s_2) A(s_1) + \dots, \quad (37)$$

l'opérateur exponentiel ordonné par temps décroissants.

Dans cette représentation, la fonction de probabilité P_N évolue avec le temps, tandis que les observables, elles, ne dépendent pas du temps. La valeur moyenne d'une observable O , $\langle O \rangle(t) = \int O(\Gamma) P_N(\Gamma, t) d\Gamma$, quant à elle, évolue avec P_N . Il est possible d'adopter une représentation duale où P_N reste constante tandis que les observables évoluent avec le temps selon

$$O(\Gamma, t) = e^{\int_0^t \Omega^\dagger(\Gamma, s) ds} O(\Gamma, 0), \quad (38)$$

avec $\Omega^\dagger = \sum_{i=1}^N (\nabla_i + \mathbf{f}_i + \mathbf{r}_i \cdot \nabla \mathbf{u}^T) \cdot \nabla_i$, l'opérateur adjoint de Ω obtenu par intégration par partie (Cf. [Nicolas, 2014], Chap.2) et

$$e^{\int_t^{t'} A(s) ds} = 1 + \int_t^{t'} ds_1 A(s_1) + \int_t^{t'} ds_1 \int_t^{s_1} ds_2 A(s_2) A(s_1) + \dots, \quad (39)$$

l'opérateur exponentiel ordonné par temps croissants. Le passage de la représentation (36) à la représentation duale (38) est analogue à celui du formalisme de Schrödinger à celui d'Heisenberg en mécanique quantique ou bien de l'approche eulérienne à l'approche lagrangienne en mécanique des fluides.

En l'absence de cisaillement, le système possède un état d'équilibre $P_N^{\text{eq}}(\Gamma)$ vérifiant $\Omega_{\text{eq}}(\Gamma) P_N^{\text{eq}}(\Gamma) = 0$, avec $\Omega_{\text{eq}}(\Gamma) = \sum_{i=1}^N \nabla_i \cdot (\nabla_i - \mathbf{f}_i)$, définissant une moyenne dans cet état d'équilibre de référence $\langle O \rangle_{\text{eq}} = \int O(\Gamma) P_N^{\text{eq}}(\Gamma) d\Gamma$. En considérant qu'à l'état initial le système est dans son état de référence, il est possible, en utilisant la condition d'incompressibilité du fluide et l'équilibre des forces dans l'état de référence, de montrer que

$$P_N(\Gamma, t) = P_N^{\text{eq}}(\Gamma) + \left(\int_0^t d\tau e^{\int_\tau^t \Omega(\Gamma, s) ds} \nabla \mathbf{u}(\tau) \right) : \Sigma(\Gamma) P_N^{\text{eq}}(\Gamma), \quad (40)$$

avec $\Sigma(\Gamma)$ le tenseur des contraintes macroscopiques du système dans la configuration Γ . Cette relation constitue l'un des points clef des approches de Mode-Coupling et justifie l'utilisation du formalisme de Zwanzig-Mori qui permet de relier n'importe quel état du système à un état de référence. En particulier, la moyenne $\langle \cdot \rangle$ associée à la distribution P_N se déduit désormais de la moyenne dans l'état de référence $\langle \cdot \rangle_{\text{eq}}$ associée à P_N^{eq} :

$$\langle O \rangle = \langle O \rangle_{\text{eq}} + \int_0^t d\tau \nabla \mathbf{u}(\tau) : \langle \Sigma e^{\int_\tau^t \Omega(\Gamma, s) ds} O \rangle_{\text{eq}}. \quad (41)$$

Par ailleurs, l'uniformité du gradient de vitesse implique que le système est invariant par translation pour une observable locale $O(\mathbf{r})$. Cette relation se traduit dans l'espace de Fourier par la relation

$$\langle O_{\mathbf{q}} \rangle(t) = \langle O \rangle(t) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{0}}, \quad (42)$$

où $O_{\mathbf{q}}$ désigne la transformée de Fourier de $O(\mathbf{r})$ sous le vecteur d'onde \mathbf{q} . De même, l'invariance par translation se traduit par la relation suivante pour la fonction de corrélation entre deux observables O_1 et O_2 :

$$\left\langle O_{1,\mathbf{q}}^*(t) O_{2,\mathbf{k}}(t') \right\rangle = \left\langle O_{1,\mathbf{q}}^*(t) e^{\int_t^{t'} \Omega^\dagger(s) ds} O_{2,\mathbf{k}}(t) \right\rangle_{\text{eq}} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t', t)}, \quad (43)$$

avec $\mathbf{E}(t', t) = e^{\int_t^{t'} \nabla \mathbf{u}(s) ds}$, le tenseur des déformations. Il est alors possible de définir un corrélateur pour la densité $\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$:

$$\Phi_{\mathbf{q}}(t', t) = \frac{\left\langle \rho_{\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t', t)}^* e^{\int_t^{t'} \Omega^\dagger(s) ds} \rho_{\mathbf{q}} \right\rangle_{\text{eq}}}{NS_{\mathbf{q}}}, \quad (44)$$

avec $S_{\mathbf{q}} = \langle \rho_{\mathbf{q}}^* \rho_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}} / N$ le facteur de structure dans l'état de référence. En remplaçant O par $\rho_{\mathbf{q}}$ dans l'Eq. (38), il est possible d'exprimer $\dot{\rho}_{\mathbf{q}}$. Un second point clef de l'approche MCT est de considérer que proche de la transition vitreuse la relaxation lente des variables dynamiques est contrôlée par les fluctuations de densité. Les variables dynamiques sont alors décomposées en leur projection sur les modes de Fourier $\rho_{\mathbf{q}}$ de la densité et leur projection orthogonale à ces derniers. En faisant certaines manipulations et approximations supplémentaires, il est alors possible de relier la dynamique de ces variables aux seules fluctuations de densité. En particulier, en décomposant $\dot{\rho}_{\mathbf{q}}$ en son projeté sur les $\rho_{\mathbf{q}}$ et en sa partie orthogonale, il est possible d'obtenir une équation d'évolution pour $\Phi_{\mathbf{q}}$:

$$\partial_t \Phi_{\mathbf{q}}(t, t') + \Gamma_{\mathbf{q}}(t', t) \left[\Phi_{\mathbf{q}}(t', t) + \int_t^{t'} d\tau m_{\mathbf{q}}(t', \tau, t) \partial_\tau \Phi_{\mathbf{q}}(\tau, t) \right] = \Delta_{\mathbf{q}}(t, t'), \quad (45)$$

où $m_{\mathbf{q}}$ et $\Delta_{\mathbf{q}}$ sont des fonctions inconnues et où $\Gamma_{\mathbf{q}}(t', t) = |\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t', t)|^2 / S_{\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t', t)}$. Le seul moyen de fermer cette équation est de faire certaines approximations peu contrôlées permettant d'annuler $\Delta_{\mathbf{q}}$ et d'obtenir l'expression suivante pour $m_{\mathbf{q}}$:

$$m_{\mathbf{q}}(t', \tau, t) = \frac{\rho}{16\pi^3} \int d\mathbf{k} \frac{S_{\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t, t')} S_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, \tau)} S_{\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(t, \tau)}}{|\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t, \tau)|^2 |\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t, t')|^2} V_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{p}}(\tau, t) V_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{p}}(t', t) \Phi_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, \tau)}(t', \tau) \Phi_{\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(t, \tau)}(t', \tau), \quad (46)$$

avec ρ la densité du système, $\mathbf{p} = \mathbf{q} - \mathbf{k}$ et où les vertex $V_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{p}}$ sont définis comme

$$V_{\mathbf{q}\mathbf{k}\mathbf{p}}(t', t) = \mathbf{q} \cdot \mathbf{E}(t, t') \cdot (\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, t') c_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, t')} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(t, t') c_{\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(t, t')}), \quad (47)$$

avec $c_{\mathbf{k}} = 1 - 1/S_{\mathbf{k}}$. Nous obtenons ainsi une dynamique fermée sur la fonction $\Phi_{\mathbf{q}}$ mesurant les fluctuations de densité. Il est alors possible d'obtenir une expression approchée de la contrainte moyenne $\langle \Sigma \rangle$ en appliquant l'expression (41) à Σ et en projetant cette expression sur des modes bien choisis [Brader et al., 2012]. Ce faisant, en utilisant de plus le fait que la contrainte est nulle dans l'état d'équilibre de référence, nous obtenons l'expression suivante :

$$\langle \Sigma \rangle(t) = - \int_0^{t'} dt' \int \frac{d\mathbf{k}}{32\pi^3} \partial_{t'} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{B}(t, t') \cdot \mathbf{k}) \frac{\mathbf{k} \otimes \mathbf{k}}{|\mathbf{k}| |\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, t')|} \frac{S'_k S'_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, t')}}{S_k^2} \Phi_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(t, t')}^2(t, t'), \quad (48)$$

avec $\mathbf{B}(t, t') = \mathbf{E}(t, t') \cdot \mathbf{E}^T(t, t')$, le tenseur de Finger. Ainsi la résolution de l'Eq. (45) nous permet d'obtenir l'évolution de $\Phi_{\mathbf{q}}$ et ce faisant celle de $\langle \Sigma \rangle$ grâce à l'Eq. (48). Comme il est possible de s'en rendre compte au vu des Eqs. (45), (46), (47) et (48) constituant ce modèle, il s'agit d'un système intégral-différentiel très lourd.

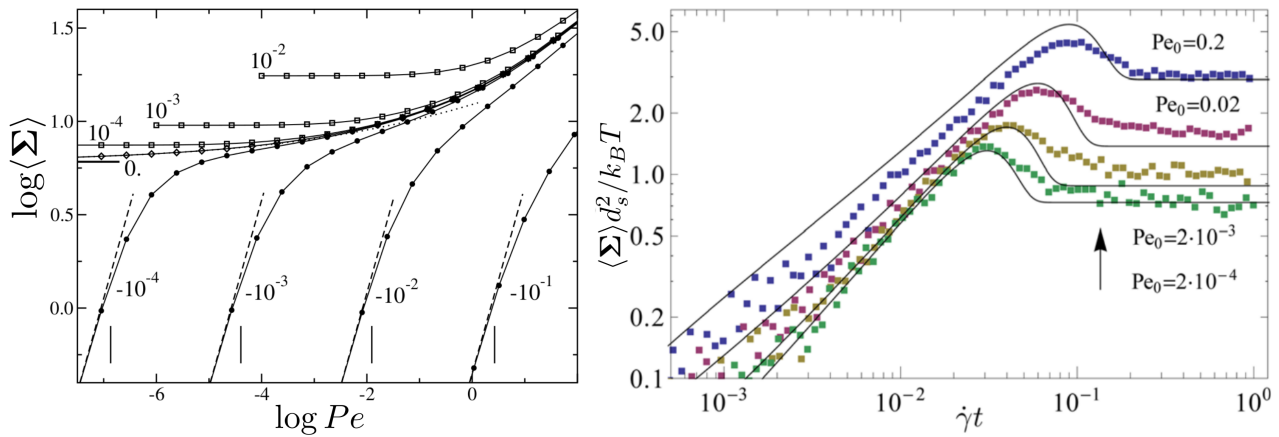


FIGURE 27 – **Rhéologie des modèles MCT-ITT.** (*gauche*) Courbes d'écoulement obtenues avec un modèle de type MCT-ITT 3D pour différentes fractions volumiques. L'étiquette de chaque courbe indique la valeur de $(\phi - \phi_c)$ à laquelle correspond cette dernière, avec ϕ la fraction volumique et ϕ_c la fraction volumique critique associée au modèle. Le nombre de Péclet Pe est défini de la sorte : $Pe = 6\pi\eta a^3 \dot{\gamma} / k_B T$, avec η la viscosité du fluide suspensé et a la taille des particules. Figure issue de [Fuchs and Cates, 2002]. (*droite*) Courbes de charge obtenues avec un modèle schématisé 2D pour différentes valeurs du nombre de Péclet (traits pleins), comparées à des résultats de simulations de dynamique moléculaire. La fraction volumique vaut 0.81 (la fraction volumique critique du modèle utilisé vaut 0.796). Figure issue de [Amann et al., 2013]

Le fait que celui-ci soit exprimé dans l'espace de Fourier rend par ailleurs difficile la compréhension physique des approximations qui sont faites, consistant essentiellement à faire des projections sur les modes de Fourier de la fonction de densité.

Par ailleurs, l'approche MCT est basée sur l'existence d'un état d'équilibre de référence en l'absence de déformation. Un tel état n'existe que dans le cas de systèmes thermiques où le mouvement brownien permet d'atteindre l'équilibre thermique. Cette approche est donc tout particulièrement indiquée pour des verres colloïdaux mais ne peut pas être étendue aux suspensions denses molles auxquelles nous nous intéressons, ces dernières étant athermiques. L'état de référence intervient dans les Eqs. (45), (46), (47) et (48) essentiellement à travers le facteur de structure S_q . Ce modèle permet de décrire un fluide à seuil au-dessus d'une certaine fraction volumique critique et un fluide rhéofluidifiant en-dessous (Fig. 27). Il faut cependant bien garder à l'esprit que la transition qui s'effectue à cette fraction volumique critique est de nature différente de celle s'opérant à la fraction volumique de jamming pour les systèmes athermiques. En effet, dans le cas de systèmes thermiques lorsque la fraction volumique augmente, le temps de relaxation du système vers l'état d'équilibre thermique augmente également, jusqu'à devenir très grand par rapport à l'échelle de temps de l'expérience et le système est « piégé » dans un état hors équilibre. Les particules constituant le matériau ne peuvent que se mouvoir au sein de la cage formée par leurs voisins. Il s'agit d'une transition vitreuse semblable à celle que subit un liquide surfondu lorsque sa température est subitement abaissée. Dans le cas de systèmes athermiques comme ceux dont il est question dans cette thèse, la transition est une transition de jamming purement géométrique : au-dessus d'une certaine fraction volumique les entités constitutives ne disposent pas d'assez de place pour s'organiser sans former de contact avec leurs voisins, le réseau de contact alors formé permettant de résister à de faibles contraintes. Les modèles de types MCT prédisent des valeurs de fraction volumique de transition vitreuse relativement proches de celles observées expérimentalement (dans [Fuchs and Cates, 2002], les auteurs obtiennent une valeur d'environ 0.52 pour la fraction volumique de transition vitreuse en 3D alors que des valeurs entre 0.58 et 0.60 sont observées expérimentalement [Bonn et al., 2017]) et capturent par ailleurs certaines caractéristiques rhéologiques non-triviales telles que l'overshoot dans la courbe de charge de la contrainte de cisaillement (Fig. 27).

Il est possible d'obtenir des modèles plus simples, appelés *modèles schématisés*, en abandonnant l'information sur les vecteurs d'onde. En considérant le problème isotrope par rapport aux vecteurs d'onde et en veillant à conserver l'invariance par rotation du système [Brader et al., 2009] réduisent le système formé par les

Eqs. (45), (46), (47) et (48) à

$$\partial_t \Phi(t, t_0) + \Gamma \left(\Phi(t, t_0) + \int_{t_0}^t dt' m(t, t', t_0) \partial_{t'} \Phi(t', t_0) \right) = 0, \quad (49)$$

$$m(t, t', t_0) = h(t, t_0) h(t, t') \left(2\Phi(t, t') + \tilde{\nu} \Phi^2(t, t') \right), \quad (50)$$

$$h(t, t') = \frac{\gamma_c^2}{\gamma_c^2 + (\nu \operatorname{tr} \mathbf{B}(t, t') + (1 - \nu) \operatorname{tr} \mathbf{B}^{-1}(t, t') - 3)}, \quad (51)$$

$$\langle \Sigma \rangle(t) = \nu_\sigma \int_{-\infty}^t dt' \partial_{t'} \mathbf{B}(t, t') \Phi^2(t, t'), \quad (52)$$

avec Γ , γ_c , ν et ν_σ des paramètres libres et $\tilde{\nu} = 2(\sqrt{2}-1) + \varepsilon/(\sqrt{2}-1)$, où ε est un paramètre de contrôle mesurant la distance à la fraction volumique critique (pour $\varepsilon < 0$, le système est en-dessous de la fraction volumique critique tandis que pour $\varepsilon > 0$ il est au-dessus). Il est intéressant de noter qu'en prenant $\Phi(t', t) = \exp(-\Gamma(t'-t))$, le modèle précédent est équivalent à un modèle de Maxwell surconvecté (Eq. (7) avec $a^* = 1$, cf [Nicolas, 2014], Sec.2.5.5). Il est cohérent d'obtenir un modèle viscoélastique dans ce cas puisque cette forme de Φ décrit un liquide viscoélastique de temps de relaxation Γ . Les corrélations décroissent exponentiellement avec le temps et les particules ne peuvent donc pas être piégées dans des cages de voisins.

Approches pseudomicroscopiques

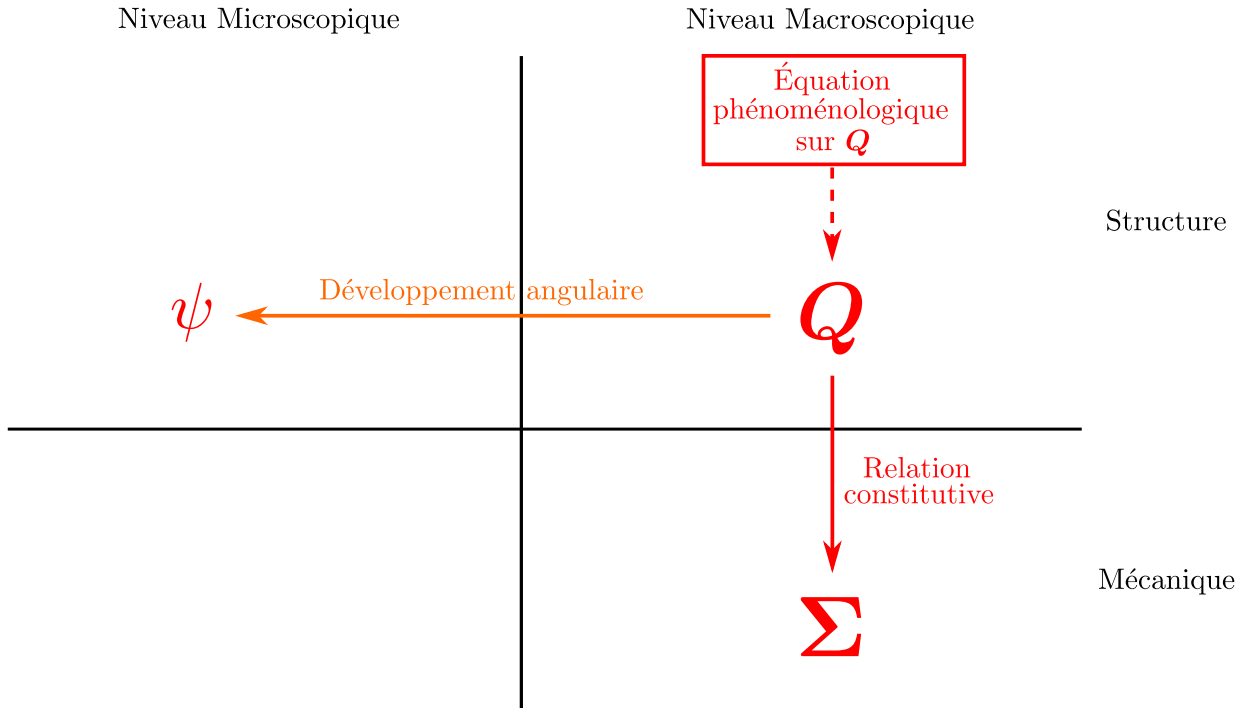


FIGURE 28 – **Représentation schématique des approches pseudomicroscopiques.** L'équation phénoménologique ainsi que la relation constitutive entre Σ et Q sont déterminées de façon à obéir aux prescriptions de Hand. La fonction de distribution d'orientation ψ peut être obtenue au premier ordre à partir de Q en utilisant le développement angulaire donné à l'Eq. (53).

La fonction de corrélation de paire, objet central des approches microstructurelles, contient bien plus d'information que ce qui est nécessaire pour calculer le tenseur des contraintes. En effet, même dans le cas de sphères dures interagissant par forces hydrodynamiques, les interactions dominant la contrainte sont de courte

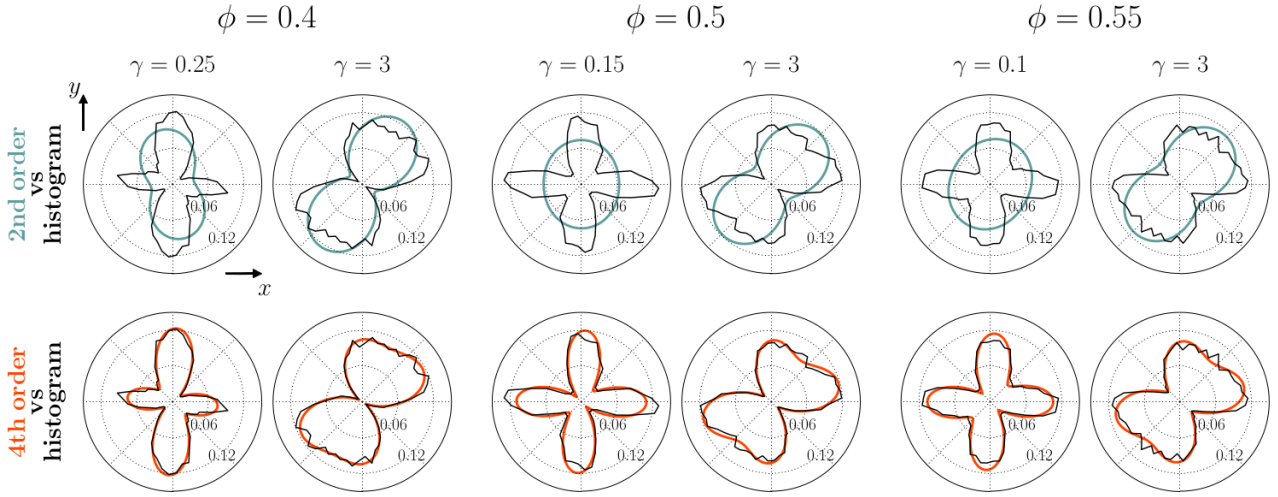


FIGURE 29 – **Distribution de l'orientation des contacts au cours d'une inversion de cisaillement.** Distribution de l'orientation des paires de particules voisines dans le plan de cisaillement d'un écoulement de sphères dures à différentes fractions volumiques ϕ . À $\gamma = 0$, la direction du cisaillement est renversée (le taux de cisaillement passe de $\dot{\gamma}$ à $-\dot{\gamma}$). La distribution obtenue peu après l'inversion de cisaillement et dans l'état stationnaire sont comparées avec leur développement angulaire à l'ordre deux (première rangée) et à l'ordre quatre (seconde rangée). Figure tirée de [Chacko et al., 2018].

portée. Par ailleurs, comme il est possible de le constater en Fig. 26, la fonction de corrélation de paire de ces systèmes est très fortement piquée proche du contact. Ainsi, seule la microstructure proche du contact joue vraiment un rôle dans la rhéologie macroscopique de ces systèmes. Plutôt que de décrire le système par la fonction de corrélation de paire $g(\mathbf{r})$ sur l'ensemble de l'espace, il est possible de le décrire par la distribution d'orientation des paires de particules voisines $\psi(\mathbf{p})$. Cette dernière représente la probabilité de trouver un couple de sphères voisines dont le vecteur reliant les deux centres est orienté selon la direction de $\mathbf{p} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$, vecteur unitaire. Au premier ordre, cette fonction ψ peut être décrite par un seul tenseur d'ordre deux. En effet, Ken-Ichi calcule en 1984 le développement angulaire de ψ en dimension 3 et montre qu'au premier ordre cette fonction peut s'écrire

$$\psi(\mathbf{p}) \approx \frac{1}{4\pi} \left(1 + \frac{15}{2} (\mathbf{Q} : \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}) \right), \quad (53)$$

avec $\mathbf{Q} = \langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle - (1/3) \mathbb{I}$, un tenseur d'ordre deux, symétrique et de trace nulle, appelé tenseur de structure ⁵ [Ken-Ichi, 1984] et $\langle \cdot \rangle$ la moyenne définie par ψ . Ainsi au premier ordre, la dépendance angulaire de ψ est décrite par une harmonique d'ordre deux entièrement paramétrisée par \mathbf{Q} . La donnée de ce tenseur permet ainsi de décrire, au premier ordre, la microstructure du système. Le passage d'une description du système par $\psi(\mathbf{p})$ ou $g(\mathbf{r})$ à une description du système par \mathbf{Q} présente deux intérêts majeurs. Premièrement, la complexité du système est fortement réduite puisque nous passons d'une fonction à deux ou trois variables à un tenseur à cinq composantes indépendantes dans le cas d'un système 3D. Deuxièmement, la quantité décrivant la structure du système est désormais une quantité macroscopique.

L'idée qu'un tenseur symétrique d'ordre deux soit suffisant pour décrire la structure du système avait déjà été formulée par Hand dans son article de 1962 dont nous avons extrapolé les résultats en Sec. 2.1 pour donner une forme générale pour tout modèle constitutif sur le tenseur des contraintes. Dans [Hand, 1962], il développe ainsi le cadre théorique d'une rhéologie des fluides anisotropes intimement liée à la structure du système. Plutôt que de décrire la dynamique de la structure au niveau microscopique avec une équation constitutive sur g , il propose de la décrire au niveau macroscopique avec un modèle constitutif sur un tenseur d'ordre deux décrivant la structure du système. Le raisonnement de Hand est indépendant de la définition retenue pour le tenseur décrivant la structure du système. Il peut s'agir du tenseur de structure apparaissant dans l'équation (53) où de

5. Le tenseur \mathbf{Q} est aussi appelé tenseur de fabrique ou tenseur de texture.

variantes de ce tenseur. Il est ainsi possible de choisir une version tracée de ce tenseur, d'en prendre l'inverse ou bien d'utiliser une définition faisant apparaître $\langle \mathbf{r} \otimes \mathbf{r} \rangle$ plutôt que $\langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle$, auquel cas la moyenne est définie avec la fonction de corrélation de paire g et non plus ψ . Quelle que soit la définition utilisée, nous appellerons ce tenseur **tenseur de structure** et le noterons \mathbf{Q} . En utilisant le théorème de Cayley-Hamilton et certains de ses corollaires, Hand détermine la forme la plus générale que peut prendre l'équation constitutive sur \mathbf{Q} : il s'agit de l'équation (21), où σ_e est remplacé par \mathbf{Q} dans l'équation ainsi que dans les invariants dont peuvent être fonctions les coefficients de cette dernière. Pour faire le lien entre structure et rhéologie, il démontre également avec le même genre d'arguments qu'il existe toujours une relation constitutive permettant de relier Σ à \mathbf{Q} et \mathbf{E} , le tenseur des taux de déformation, et donne la forme la plus générale pour une telle relation :

$$\begin{aligned} \Sigma = & \sigma_0 \mathbb{1} + \sigma_1 \mathbf{Q} + \sigma_2 \mathbf{E} + \sigma_3 \mathbf{Q}^2 + \sigma_4 \mathbf{E}^2 + \sigma_5 (\mathbf{Q} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{Q}) \\ & + \sigma_6 (\mathbf{Q}^2 \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{Q}^2) + \sigma_7 (\mathbf{Q} \cdot \mathbf{E}^2 + \mathbf{E}^2 \cdot \mathbf{Q}) + \sigma_8 (\mathbf{Q}^2 \cdot \mathbf{E}^2 + \mathbf{E}^2 \cdot \mathbf{Q}^2), \end{aligned} \quad (54)$$

où les coefficients σ_i sont fonctions des neuf invariants présentés à l'Eq. (21) (en remplaçant σ_e par \mathbf{Q}). Hand pose ainsi les bases d'une approche de la rhéologie des suspensions denses que nous qualifierons de **pseudomicroscopique**, consistant à spécifier une équation phénoménologique pour la dynamique de \mathbf{Q} en choisissant la forme des coefficients σ_i et une relation constitutive liant Σ à ce tenseur en respectant les prescriptions de Hand. La résolution de l'équation phénoménologique permet d'obtenir \mathbf{Q} en fonction du temps et de la déformation appliquée puis de calculer ensuite Σ grâce à la relation constitutive (Fig. 28). Si l'objet central de cette approche, le tenseur de structure \mathbf{Q} , contient une information sur la microstructure, notamment à travers la relation (53), tout le développement se fait au niveau macroscopique, si bien qu'il ne s'agit pas à proprement parler d'une approche microscopique. Les prescriptions de la théorie de Hand demeurent très générales et en pratique il est nécessaire de les compléter par d'autres considérations sur la dynamique du système afin d'obtenir un modèle avec un nombre raisonnable de paramètres. Pour des systèmes de sphères dures par exemple, le modèle obtenu doit être indépendant du taux de déformation $\dot{\gamma}$, l'inverse de celui-ci étant le seul temps caractéristique du système. En usant de tels arguments il est possible de construire des modèles constitutifs dépendants d'un certain nombre de paramètres libres, généralement plus d'une dizaine, à l'interprétation plus ou moins physique [Phan-Thien, 1995, Goddard, 2006, Stickel et al., 2006, Ozenda et al., 2018, Ozenda et al., 2020]. Ces paramètres peuvent ensuite être adaptés par comparaison à des données expérimentales et numériques afin de décrire au mieux le comportement du matériau considéré.

Les modèles ainsi obtenus sont proches dans l'esprit des modèles macroscopiques que nous avons présentés en Sec. 2.1 puisqu'ils ne sont pas dérivés à partir de principes premiers mais à partir de considérations générales. Ils permettent ainsi une description très quantitative de la rhéologie du matériau, mais cette description est une description *a posteriori* après avoir réglé les paramètres libres pour décrire au mieux le matériau considéré. Par ailleurs, la pertinence du seul tenseur \mathbf{Q} pour décrire la microstructure du système repose sur l'hypothèse qu'une harmonique d'ordre deux est suffisante pour décrire celle-ci. L'analyse, dans [Chacko et al., 2018], de données de simulations numériques révèle que pour des suspensions de sphères dures cette hypothèse est plutôt bien vérifiée en état stationnaire mais que dans certains phénomènes transitoires, notamment lors d'une inversion de cisaillement, les harmoniques d'ordres supérieurs jouent un rôle important, en particulier l'ordre 4 (Fig. 29). Pour prendre en compte ces effets, il serait nécessaire de considérer l'ordre suivant du développement de Ken-Ichi, faisant ainsi apparaître un tenseur d'ordre quatre en complément de \mathbf{Q} pour décrire la structure du système. Cependant, le grand nombre de paramètres libres permet généralement de capturer malgré tout de façon satisfaisante le comportement du système même en ne conservant que l'harmonique d'ordre 2.

Approches par passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique

Les approches pseudomicroscopiques présentent l'avantage d'établir un lien simple entre microstructure et rhéologie macroscopique. Le fait que l'équation phénoménologique sur laquelle elles reposent ne découle pas de principes premiers de la physique demeure toutefois une limitation de ces approches. Il est possible d'obtenir une équation similaire reposant sur de tels principes en reprenant le raisonnement des approches microstructurelles. En effet, en couplant la définition du tenseur \mathbf{Q} (faisant apparaître la fonction de corrélation de paire g ou la distribution des orientations de paires de particules ψ), à la dynamique de $g(\mathbf{r})$ ou $\psi(\mathbf{p})$ (les deux pouvant

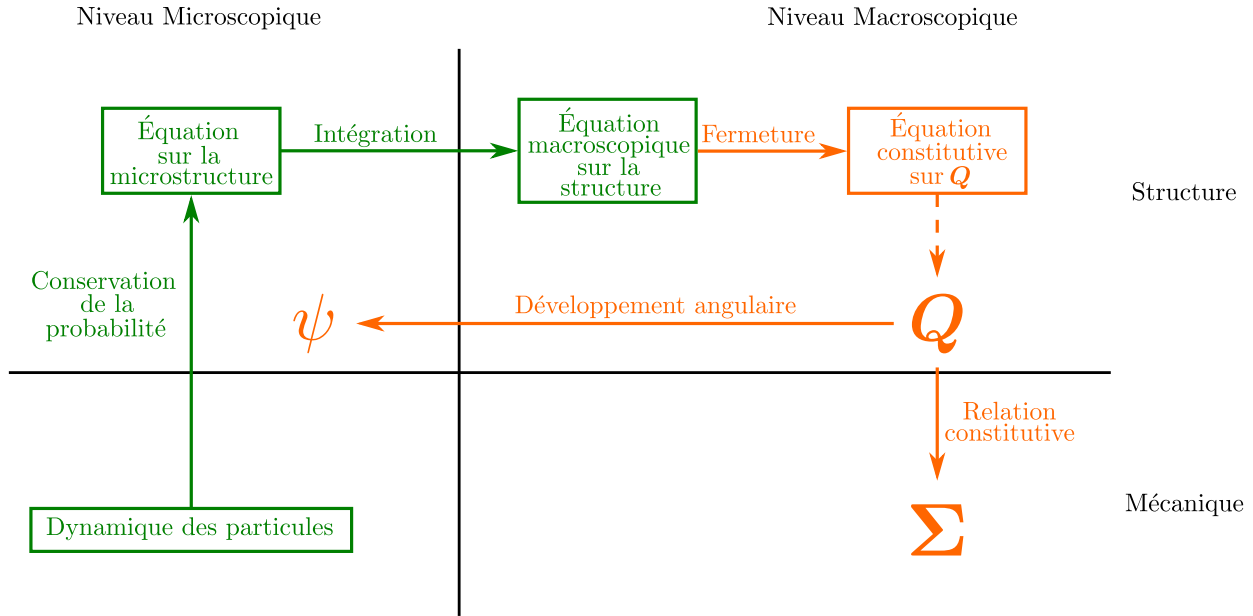


FIGURE 30 – **Représentation schématique des approches par passage de l’échelle microscopique à l’échelle macroscopique.** La dynamique des particules est simplifiée (généralement en considérant un régime dilué), ce qui permet d’obtenir une équation sur la microstructure ne prenant pas en compte des corrélations à plus de deux corps. L’équation macroscopique obtenu par intégration fait apparaître un ou plusieurs tenseurs d’ordre quatre qui doivent être exprimé en fonction de \mathbf{Q} en choisissant une relation de fermeture. Une fois que cela est fait, on se retrouve dans un schéma identique à celui des approches pseudomicroscopiques, à la différence que l’équation constitutive et la relation constitutive ont une origine microscopique claire.

être obtenues grâce à une équation de Fokker-Planck), il est possible d’obtenir une équation constitutive sur \mathbf{Q} . Toutefois, cela nécessite de simplifier grandement la description de la dynamique microscopique afin de ne pas faire apparaître de corrélations à plus de deux corps dans l’équation sur la microstructure et de pouvoir obtenir une équation fermée en \mathbf{Q} . Il est ainsi possible d’obtenir une version minimale de l’équation constitutive de \mathbf{Q} telle que formulée par Hand et dérivant d’un modèle microscopique précis. De même, en couplant la dynamique microscopique simplifiée du système à la relation du Viriel (Eq. (33)), il est possible d’obtenir une relation constitutive minimale et microscopiquement motivée entre Σ et \mathbf{Q} . Le système obtenu au niveau macroscopique est alors semblable à celui obtenu par une approche pseudomicroscopique mais ne fait plus apparaître de paramètres libres, il dépend uniquement de paramètres microscopiques (Fig. 25).

Si le passage du niveau microscopique au niveau macroscopique permet de garder une trace forte du premier dans l’équation constitutive macroscopique sur \mathbf{Q} , les simplifications à réaliser sur la dynamique pour pouvoir effectuer ce passage sont assez drastiques. En effet, pour ne pas voir apparaître de termes de corrélations à plus de deux corps, il est nécessaire de se placer dans un régime très dilué pour ne considérer que des interactions très simplifiées entre les entités constitutives. Prager est le premier, dès 1957, à développer une telle approche ⁶ [Prager, 1957]. Ce dernier considère une suspension d’haltères rigides, chacune décrite par un vecteur orientation \mathbf{p} , dans un régime suffisamment dilué pour que les interactions hydrodynamiques entre haltères soient négligeables. L’orientation d’une haltère évolue alors par mouvement brownien, avec un coefficient de diffusion rotationnelle D_r , et par convection sous l’effet du champ de vitesse au sein du fluide suspendant. En écrivant la dynamique correspondante sur le vecteur \mathbf{p} et l’équation de conservation vérifiée par $\psi(\mathbf{p})$, Prager obtient l’équation suivante pour le tenseur de structure $\mathbf{Q} = \langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle$:

$$\partial_t \mathbf{Q} = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{Q} + \mathbf{Q} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + 4D_r (\mathbb{1} - 3\mathbf{Q}) - 2\mathbf{E} : \langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle. \tag{55}$$

Pour fermer cette équation, Prager propose une relation de fermeture linéaire permettant de relier le tenseur

6. Le modèle de Prager est d’ailleurs repris par Hand dans son article de 1962 comme un cas particulier de sa théorie.

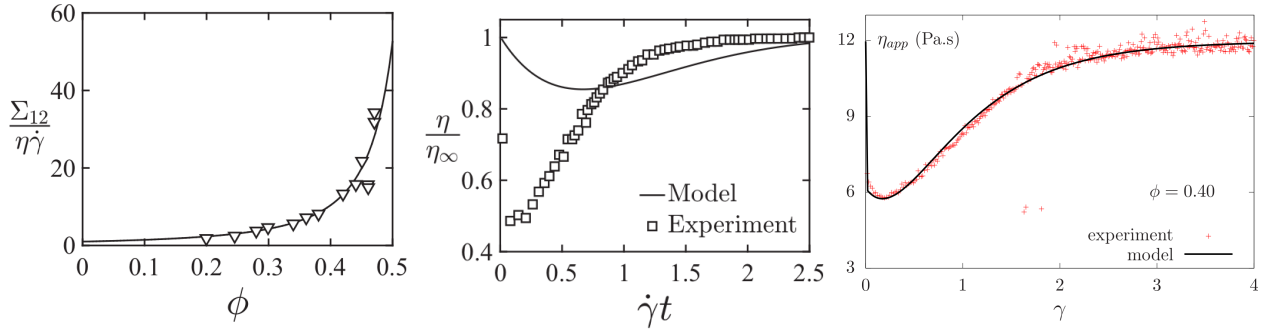


FIGURE 31 – **Rhéologie par approche pseudomicroscopique et passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique.** (*gauche*) Évolution de la viscosité apparente stationnaire en cisaillement en fonction de la fraction volumique obtenue avec le modèle de Gillissen-Wilson (trait plein) comparée avec celle obtenue expérimentalement pour une suspension de billes de polystyrène en suspension dans un mélange d'huile et d'eau (triangles), figure tirée de [Gillissen and Wilson, 2018]. (*milieu*) Évolution de la viscosité apparente en fonction de la déformation après une inversion de cisaillement à $\dot{\gamma} = 0$ dans le modèle de Gillissen-Wilson comparée avec celle obtenue expérimentalement avec une suspension de PPMA, figure tirée de [Gillissen and Wilson, 2018]. (*droite*) Évolution de la viscosité apparente en fonction de la déformation après une inversion de cisaillement à $\dot{\gamma} = 0$ dans le modèle d'Ozenda comparée avec celle obtenue expérimentalement avec une suspension de PPMA, figure tirée de [Ozenda et al., 2018].

d'ordre 4 $\langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle$ à \mathbf{Q} . Il considère que le fluide exerce une force visqueuse $\mathbf{f}_{visc} = -\zeta l (\dot{\mathbf{p}} - \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{p})$, avec l la longueur de l'haltère et ζ le coefficient de frottement visqueux du fluide sur l'haltère. Il considère que cette force génère une contribution $-\rho l \langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{f}_{visc} \rangle$ au tenseur des contraintes, avec ρ la densité en haltères. En remplaçant \mathbf{f}_{visc} par son expression et en utilisant la dynamique de \mathbf{p} , il montre que la phase formée par les haltères génère une contrainte

$$\Sigma = \frac{\rho \zeta l^2}{2} [D_r (3\mathbf{Q} - \mathbb{1}) + \mathbf{E} : \langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle], \quad (56)$$

en utilisant la même relation de fermeture que précédemment pour exprimer le tenseur d'ordre 4 en fonction de \mathbf{Q} , il obtient ainsi une relation constitutive entre Σ , \mathbf{Q} et \mathbf{E} . Hinch et Leal adaptent en 1976 une approche semblable pour une suspension d'ellipsoïdes rigides, encore dans le régime dilué où les particules n'interagissent pas entre elles [Hinch and Leal, 1976]. [Phan-Thien et al., 1999] et [Gillissen and Wilson, 2018] proposent également deux modèles constitutifs pour des suspensions de sphères dures dérivés eux aussi à partir d'une méthode par passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Ces deux approches sont développées pour des systèmes moins dilués prenant en compte les forces de lubrification entre sphères. Seule la dynamique sur une paire de particule (représentée par un vecteur centre-à-centre \mathbf{r}) est considérée et l'action des autres particules sur cette paire n'est pas considérée explicitement. Dans [Phan-Thien et al., 1999], \mathbf{r} est simplement advecté par le fluide suspendant et l'effet des particules voisines sur une paire de particules est modélisée par l'ajout d'un bruit sur la dynamique de \mathbf{r} . Dans [Gillissen and Wilson, 2018], la dynamique de \mathbf{r} est obtenue en écrivant l'équilibre entre la force de traînée exercée par le fluide sur une particule et la force de lubrification exercée par une seconde particule. Dans les deux cas, la contrainte générée par la phase particulaire découle des forces de lubrification. En remplaçant ces forces par leur expression dans la relation du Viriel, il est ainsi possible d'obtenir une relation constitutive pour Σ . Dans les deux cas, les approximations effectuées font apparaître des paramètres ne pouvant pas être reliés directement à des quantités microscopiques et qui sont laissés comme paramètres libres du modèle (trois pour le modèle de Phan-Thien, deux pour celui de Gillissen-Wilson).

Quel que soit le système considéré, la démarche pour passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique demeure la même et est représentée de façon schématique en Fig. 30. Il s'agit de simplifier suffisamment la dynamique au niveau macroscopique puis d'écrire l'équation de conservation associée à une fonction de probabilité pertinente (ψ ou g) et enfin d'intégrer celle-ci afin d'obtenir une équation sur \mathbf{Q} . Cette dernière fait apparaître un tenseur d'ordre 4 devant être relié à \mathbf{Q} grâce à une relation de fermeture

[Hinch and Leal, 1976, Advani and Tucker, 1990, Cintra and Tucker, 1995]. Ce genre d'approches, si elles possèdent un caractère plus physique que les approches pseudomicroscopiques, ne permettent pas une description aussi quantitative que ces dernières (Fig. 31). En effet, il est nécessaire de simplifier considérablement la dynamique au niveau microscopique tandis que les approches pseudomicroscopiques possèdent un grand nombre de paramètres libres leur permettant d'approcher au mieux le comportement macroscopique des matériaux considérés.

3 Motivations

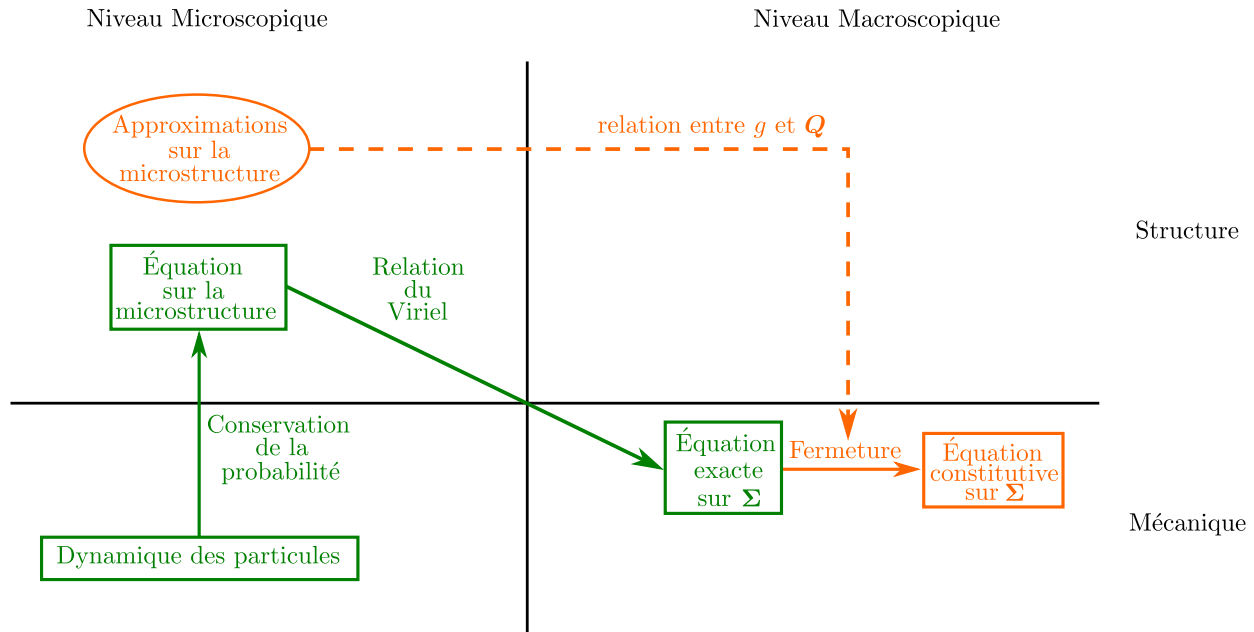


FIGURE 32 – Représentation schématique de l'approche développée dans cette thèse.

Le travail présenté dans cette thèse est un travail original et exploratoire combinant différents aspects de certaines approches et théories que nous avons présentées dans cette introduction et dont nous récapitulons les principales caractéristiques en Tab. 1. Il vise à obtenir un modèle macroscopique sur le tenseur des contraintes semblable aux modèles macroscopiques phénoménologiques présentés en Sec. 2.1 à partir de principes premiers communs aux approches microscopiques présentées en Sec. 2.3. Nous avons représenté de façon schématique notre approche en Fig. 32.

Notre dérivation commence ainsi au même niveau que les approches microstructurelles avec le choix d'une dynamique pour les entités constitutives et la dérivation de l'équation associée sur la fonction de corrélation de paire. Plutôt que de chercher à fermer cette équation au niveau macroscopique, nous préférons suivre une démarche de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique. Nous adaptons toutefois cette démarche en utilisant la relation du Viriel (Eq. (33)) pour opérer le passage d'échelle afin d'obtenir une équation sur le tenseur des contraintes plutôt que sur le tenseur de structure. Contrairement aux approches de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique antérieures, nous conservons une dynamique relativement riche pour nos entités constitutives même si celle-ci est beaucoup plus simple que celle utilisée pour les approches microstructurelles telles que celles de Nazockdast et Morris, par exemple. Nous obtenons ainsi une équation d'évolution exacte sur le tenseur des contraintes mais qui n'est pas fermée à cause de la présence de termes non reliables directement à la contrainte. La définition de la dynamique, l'obtention de l'équation sur la microstructure et de celle sur le tenseur des contraintes sont l'objet du Chap. 1.

Dans le Chap. 2, nous proposons une méthode de fermeture de l'équation exacte sur le tenseur des contraintes dans le cas de suspensions au-dessus du jamming grâce à certaines considérations sur la microstructure, ce qui










Échelle	Type de modèle	ϕ	MC	Système thermique ?
Macroscopique	Viscoélastique (VEM)		σ	Thermique/Athermique
	Viscoplastique (VPM)			
	Viscoelastoplastique (VEPM)			
Mésoscopique	Elastoplastique (EPM)		\emptyset	Athermique (adaptable au cas thermique)
Microscopique	Microstructurel		g	Thermique
	Mode-coupling (MCT)		Φ_q	Thermique
	Pseudomicroscopique		\mathcal{Q}	Athermique
	Passage du microscopique au macroscopique			Thermique/Athermique
	Approche présentée dans cette thèse		σ	Athermique

TABLE 1 – **Caractéristiques des différents types de modélisation de fluides complexes.** La colonne ϕ renseigne sur le régime de densité du modèle.  : densité inférieure à la densité de jamming (ou densité critique pour les systèmes thermiques),  : densité supérieure à la densité de jamming (ou densité critique pour les systèmes thermiques). La colonne MC (modèle constitutif) renseigne la grandeur sur laquelle porte le modèle constitutif. σ : tenseur des contraintes, \mathcal{Q} : tenseur de structure, g : fonction de corrélation de paire, Φ_q : corrélateur de densité, \emptyset : pas de modèle constitutif.

constitue une des principales originalités de ce travail. Pour effectuer cette fermeture à l'échelle macroscopique en utilisant des arguments microscopiques, nous avons besoin d'un outil permettant de faire le lien entre ces deux échelles. Nous introduisons donc un tenseur de structure et généralisons le développement de Ken-Ichi (Eq. (53)) pour obtenir une relation entre fonction de corrélation de paire et tenseur de structure faisant le lien entre ces deux échelles. Grâce à cette relation, il est possible de traduire une représentation schématique de la microstructure des suspensions denses molles au-dessus du jamming en une relation de fermeture entre les différents termes apparaissant dans l'équation macroscopique exacte obtenue au Chap. 1 et le tenseur des contraintes. Nous obtenons ainsi un modèle macroscopique dont la signification physique et l'origine microscopique de chacun des termes est comprise.

Le Chap. 3 est consacré à l'étude de la rhéologie prédite par ce modèle. Nous vérifions ainsi que malgré certains défauts inhérents au caractère exploratoire de ce travail, notre modèle constitutif capture qualitativement la plupart des caractéristiques rhéologiques des suspensions denses molles présentées en Sec. 1. Plus encore, en utilisant le lien entre échelle microscopique et macroscopique introduit au Chap.2 pour fermer notre système, nous montrons qu'il est possible de donner une origine microstructurale simple à certains phénomènes macroscopiques. La relation utilisée pour ce faire n'est pas propre à notre modèle et pourrait très bien être utilisée avec des modèles phénoménologiques afin d'explorer la physique des suspensions denses.

Dans le Chap. 4, enfin, nous proposons d'adapter la méthode de fermeture présentée au Chap.2 au cas de suspensions en-dessous du jamming. Il s'agit d'un travail préliminaire visant à illustrer l'adaptabilité de notre approche à d'autres systèmes que les suspensions denses au-dessus du jamming. Nous montrons ainsi qu'il est possible d'obtenir un modèle constitutif pour les suspensions denses molles en-dessous du jamming. Si la rhéologie de ce modèle reste encore à explorer plus en détails, nous avons pu vérifier que ce dernier permet de décrire un fluide rhéofluidifiant.

Chapitre 1

Dérivation d'un modèle constitutif exact non-fermé

Nous introduisons dans ce chapitre le cadre d'étude de notre travail. Après avoir défini notre système et introduit les outils de physique statistique et de mécanique des suspensions denses nécessaires au développement de notre modèle, nous présentons les calculs permettant d'obtenir une équation d'évolution exacte mais non-fermée d'abord sur la fonction de corrélation de paire associée au système, puis sur le tenseur des contraintes élastiques de ce dernier.

1.1 Modèle de suspension dense de particules molles

Nous considérons un système bidimensionnel de volume V composé de N particules circulaires, athermiques, suramorties et de même rayon a immergées dans un fluide newtonien. Les particules ne sont pas soumises à la gravité et interagissent les unes avec les autres uniquement par des forces de répulsion de contact radiales. Nous ne considérons donc pas de forces de friction entre les particules. Nous ne considérons donc pas les interactions hydrodynamiques des particules les unes avec les autres à travers le fluide qui sont des interactions à distance. Cette hypothèse est motivée par le fait que nous souhaitons travailler à des densités relativement élevées pour lesquelles l'écrantage des particules réduit considérablement l'influence des interactions hydrodynamiques.

Le fluide newtonien dans lequel les particules sont immergées agit sur elles en créant une traînée visqueuse, tandis que les particules sont supposées ne pas influencer l'écoulement du fluide. Le fluide est ainsi décrit par un champ de vitesse affine \mathbf{u}^∞ dépendant de la position \mathbf{r} dans le système. Ce champ n'est donc pas affecté par la dynamique des particules et est donc déterminé par la déformation imposée au système uniquement. Le gradient de ce champ de vitesse est supposé uniforme, c'est-à-dire $\mathbf{u}^\infty(\mathbf{r}) = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r}$, où nous avons choisi la convention suivante pour l'opérateur gradient appliqué à un champ de vecteur :

$$(\nabla \mathbf{a})_{ij} = \partial_j a_i, \quad (1.1)$$

avec \mathbf{a} un vecteur quelconque de coordonnées a_i et ∂_j la dérivée par rapport à r_j , la coordonnée j de \mathbf{r} . La densité en particules du système est elle aussi supposée uniforme et est notée $\rho = N/V$. Nous définissons également ϕ , la fraction surfacique en particules du système qui est dans notre cas reliée simplement à la densité par la relation $\phi = \pi a^2 \rho$.

La position de la particule μ est notée \mathbf{r}_μ , sa vitesse $\dot{\mathbf{r}}_\mu$. Nous notons $\mathbf{u}_\mu^\infty = \mathbf{u}^\infty(\mathbf{r}_\mu)$ le champ de vitesse du fluide à la position de la particule μ . La traînée visqueuse agissant sur la particule μ vaut alors $-\lambda_f(\dot{\mathbf{r}}_\mu - \mathbf{u}_\mu^\infty)$. Il est difficile d'exprimer λ_f en fonction des caractéristiques du fluide dans un espace de dimension deux (paradoxe de Stokes), une solution pouvant être de considérer que nos particules sont en fait des sphères tridimensionnelles, dont le centre est contraint de se déplacer dans un plan, auquel le coefficient de traînée vaut $6\pi\eta_f a$, η_f étant la viscosité du fluide.

Les particules interagissent par le biais de forces de contact répulsives. La force de répulsion appliquée sur la particule μ par la particule ν est notée $\mathbf{f}(\mathbf{r}_{\mu\nu}) = f(r_{\mu\nu})\mathbf{r}_{\mu\nu}/r_{\mu\nu}$, avec $\mathbf{r}_{\mu\nu} = \mathbf{r}_\nu - \mathbf{r}_\mu$ et $r_{\mu\nu} = |\mathbf{r}_{\mu\nu}|$. Nous considérons pour le moment un modèle de contact totalement général, vérifiant uniquement $f(r_{\mu\nu}) = 0$ pour

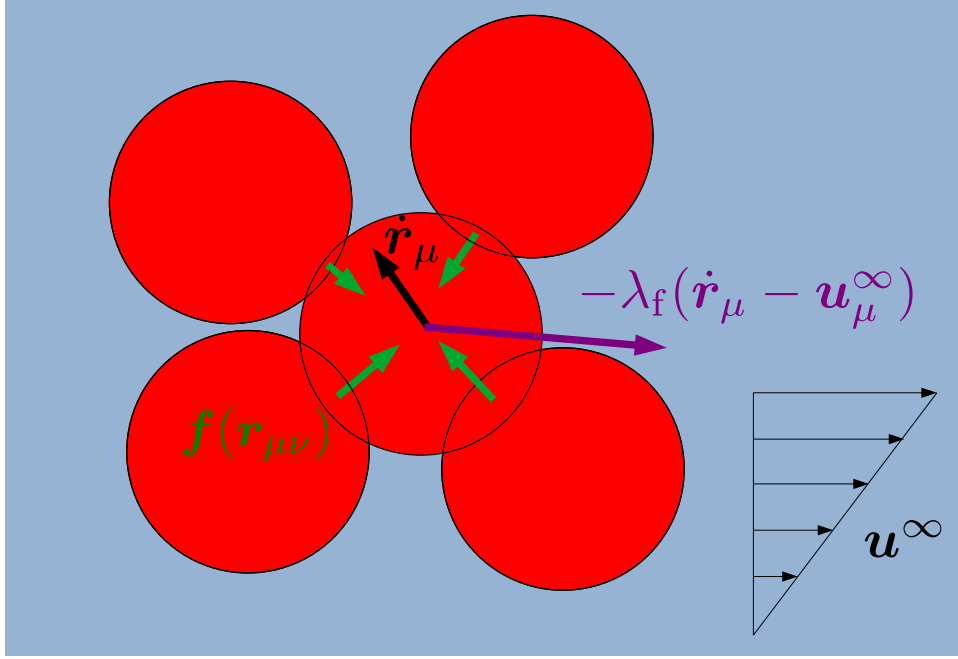


FIGURE 1.1 – **Illustration du modèle de suspensions denses 2D choisi.** Le vecteur \dot{r}_μ en noir est le vecteur vitesse de la particule μ , donnant naissance à une force visqueuse $-\lambda_f(\dot{r}_\mu - u_\mu^\infty)$ (en violet sur la figure). Les particules développent par ailleurs des forces de répulsions radiales lorsqu'elles sont en contact : $f(r_{\mu\nu})$ est la force de répulsion appliquée sur la particule μ par la particule ν (en vert sur la figure).

$r_{\mu\nu} > 2a$. Nous notons f_0 une valeur caractéristique de l'amplitude des forces de contact. Toutes les grandeurs considérées peuvent alors être adimensionnées en choisissant a comme unité de longueur, f_0 comme unité de force, et $\tau_0 = \lambda_f a / (2f_0)$ comme unité de temps. Dans la plupart des cas d'intérêt, f_0 peut être défini à partir du développement $f(r) \sim -f_0[(2a-r)/a]^{\alpha_f}$ au contact, $r \rightarrow 2a^-$ (avec $\alpha_f > 0$ un exposant dépendant du modèle). Notre modèle est représenté de façon schématique en Fig. 1.1 En introduisant brièvement la notation \hat{X} pour désigner la grandeur adimensionnée associée à la variable physique X , l'équation de mouvement adimensionnée de la particule μ s'écrit alors simplement comme l'équilibre des forces de contact s'appliquant sur cette particule avec sa traînée :

$$-2(\hat{r}_\mu - \hat{u}_\mu^\infty) + \hat{f}_\mu = \mathbf{0}, \quad (1.2)$$

avec $\hat{f}_\mu = \sum_{\nu \neq \mu} \hat{f}(r_{\mu\nu})$ la résultante des forces de contact sur la particule μ . Dans la suite, nous travaillerons uniquement avec des variables adimensionnées, et pour des raisons de lisibilité, nous abandonnerons la notation \hat{X} .

1.2 Distribution de probabilité, fonctions de corrélation et tenseur des contraintes

Nous introduisons dans cette section certains outils de physique statistique qui nous seront utiles pour la suite. Nous nous limiterons à la présentation des points essentiels à la compréhension des calculs à venir et du contenu physique de notre dérivation. Pour des connaissances plus pointues sur les objets et les notions introduites dans cette partie le lecteur intéressé pourra se reporter à [Hansen and McDonald, 2013] dont nous nous sommes servis comme référence pour les questions théoriques relative à la physique statistique de notre modèle. Nous présentons les définitions continues et discrètes des grandeurs introduites, les premières servant au développement analytique de notre modèle tandis que les secondes sont utilisées pour calculer ces grandeurs

dans les simulations de dynamique moléculaire dont certains résultats sont présentés dans cette thèse.

1.2.1 Fonctions de distribution de probabilité

Il est possible d'associer à tout système de N particules une fonction de distribution de probabilité P_N rendant compte de la probabilité de trouver le système dans une configuration donnée. Dans le cas le plus général, cette fonction a pour argument les N vecteurs positions et les N vecteurs vitesses associés aux particules constituant notre système. Cependant dans le cas d'un système suramorti, les vitesses des particules ne sont pas des variables indépendantes de leur position. Il suffit en effet dans notre cas de regarder l'équation (1.2) de la dynamique pour voir que la vitesse d'une particule μ est entièrement définie par la position des particules. Ainsi dans une dynamique suramortie P_N est fonction uniquement des positions des particules et $P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ représente la probabilité de trouver les N particules aux positions respectives $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ dans le système. Il s'agit par ailleurs d'une fonction normalisée par :

$$\int_{V^N} P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N = 1 \quad (1.3)$$

Cette fonction définit par ailleurs une moyenne $\langle \cdot \rangle_N$ sur l'ensemble des configurations des particules :

$$\langle A \rangle_N = \int_{V^N} A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (1.4)$$

Bien que P_N caractérise entièrement le système, elle est fonction d'un très grand nombre d'arguments –d'autant que N est amené à tendre vers l'infini– si bien qu'il est finalement difficile de traiter le problème avec cette fonction tant du point de vue analytique que numérique. Il est ainsi plus facile de traiter avec des moments de cette fonction, contenant certes moins d'information sur le système, mais ayant l'avantage d'avoir un nombre d'arguments plus réduit. Nous définissons ainsi à partir de cette fonction de distribution de probabilité la fonction distribution de probabilité réduite à k corps \mathcal{P}_k pour tout entier $k < N$:

$$\mathcal{P}_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) = \frac{N!}{(N-k)!} \int P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_{k+1} \dots d\mathbf{r}_N. \quad (1.5)$$

Cette fonction représente la probabilité de trouver k particules parmi les N particules de notre système aux positions $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k$, le facteur combinatoire $N!/(N-k)!$ tenant compte du fait que toutes les particules jouent un rôle équivalent (c'est-à-dire que l'ensemble des particules $\{1, \dots, k\}$ considérées peut être n'importe quel sous-ensemble de k particules prises parmi les N particules formant notre système). Il découle de cette définition la normalisation suivante pour les fonctions \mathcal{P}_k :

$$\int \mathcal{P}_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_k = \frac{N!}{(N-k)!} \quad (1.6)$$

La fonction \mathcal{P}_1 est la distribution de densité du système. Dans le cas particulier d'un système homogène, elle vaut :

$$\mathcal{P}_1(\mathbf{r}_1) = \frac{N}{V} = \rho, \quad (1.7)$$

Il est possible de donner une définition alternative des fonctions de distribution réduites en les écrivant comme la moyenne d'une somme de produits de fonctions de Dirac :

$$\mathcal{P}_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) = \left\langle \sum_{\langle i_1, \dots, i_k \rangle} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_{i_1}) \dots \delta(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}'_{i_k}) \right\rangle_N, \quad (1.8)$$

où $\langle i_1, \dots, i_k \rangle$ désigne l'ensemble des combinaisons d'indices pris entre 1 et N et distincts deux à deux et l'intégrale définit par $\langle \cdot \rangle_N$ porte sur les \mathbf{r}'_i . Cette définition est notamment celle qui permet de calculer ces fonctions de distribution et les fonctions de corrélation associées en simulation numérique.

1.2.2 Fonctions de corrélation

Il est possible de définir à partir de ces distributions de probabilité des fonctions de corrélations à k corps définies comme suit :

$$g^{(k)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) = \frac{\mathcal{P}_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k)}{\prod_{i=1}^k \mathcal{P}_1(\mathbf{r}_i)}. \quad (1.9)$$

La fonction $g^{(k)}$ rend compte des effets de corrélations à k corps puisqu'il s'agit du rapport entre la probabilité d'une configuration de k particules et la probabilité d'obtenir la même configuration si les positions des particules étaient totalement indépendantes. De plus, dans le cas d'un système homogène les fonctions de corrélations et de distributions de probabilité sont simplement proportionnelles, $g^{(k)} = \mathcal{P}_k/\rho^k$. Dans le cas d'un système homogène, les distributions de probabilité, et donc les fonctions de corrélations, sont invariantes lorsque toutes les particules sont translatées d'un même vecteur, si bien qu'il est toujours possible de se ramener à une configuration où la première particule est en $\mathbf{0}$:

$$g^{(k)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k) = g^{(k)}(\mathbf{0}, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_1), \quad (1.10)$$

si bien que les fonctions \mathcal{P}_k et $g^{(k)}$ ne dépendent finalement que de $k - 1$ vecteurs qui ne sont plus les positions absolues des k particules dans le système mais les $k - 1$ positions relatives des particules $2, \dots, k$ par rapport à la première particule. Il est alors possible, tout comme nous l'avons fait précédemment, de donner une définition alternative des fonctions de corrélations :

$$g^{(k)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{k-1}) = \frac{1}{\rho^{k-1}N} \left\langle \sum_{\langle i_1, \dots, i_k \rangle} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_{i_1 i_2}) \dots \delta(\mathbf{r}_{k-1} - \mathbf{r}'_{i_1 i_k}) \right\rangle_N, \quad (1.11)$$

où l'intégrale associée à la moyenne sur l'ensemble des configurations porte sur les coordonnées $\mathbf{r}'_{i_1 j}$, positions relatives des particules j par rapport à la particule 1. Là encore cette définition est utilisée en simulation numérique pour calculer les fonctions de corrélation.

Dans notre dérivation nous considérerons uniquement les fonctions de corrélation d'ordre 2 (aussi appelée fonction de corrélation de paire) et 3 que nous noterons g et g_3 pour plus de commodité. L'intégrale de la grandeur $\rho g(\mathbf{r})$ sur un volume \mathcal{V} représente le nombre moyen de particules dans le volume \mathcal{V} autour d'une particule quelconque. Ces deux fonctions sont par ailleurs liées par la relation suivante :

$$g(\mathbf{r}) = \frac{\rho}{N-2} \int g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (1.12)$$

La fonction de corrélation de paire contient l'information la plus élémentaire sur la microstructure du système considéré, la quantité $g(\mathbf{r})$ nous renseignant sur la probabilité de une particule en \mathbf{r} sachant qu'il y a une particule en $\mathbf{0}$. La partie isotrope de la fonction de corrélation de paire, $g_{\text{iso}}(r)$, est obtenue en moyennant celle-ci sur les angles :

$$g_{\text{iso}}(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(\mathbf{r}) d\theta. \quad (1.13)$$

Pour les systèmes amorphes monodisperses tels que les verres ou les suspensions, la partie isotrope de la fonction de corrélation de paire possède une forme caractéristique (Fig. 1.2). Elle est très faible jusqu'à une certaine distance interparticulaire, traduisant le fait que sous l'effet de leurs interactions répulsives les particules ne peuvent pas s'approcher infiniment. Elle présente au-delà des pics régulièrement espacés, traduisant la présence de couches de voisins. L'amplitude de ces pics décroît avec l'ordre de la couche, si bien que le pic de premiers voisins possède une amplitude bien plus importante que les pics secondaires. Pour les grandes distances interparticulaires, g_{iso} tend vers 1, traduisant la perte de corrélation du système à longues distances.

La fonction de corrélation de paire est par ailleurs invariante sous le changement $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, les deux particules d'une paire étant interchangeables. La fonction de corrélation à trois corps g_3 est également invariante sous les cinq transformations associées aux permutations de particules dans un triplet (Fig. 1.3) : $(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow (\mathbf{r}' - \mathbf{r}, -\mathbf{r})$,

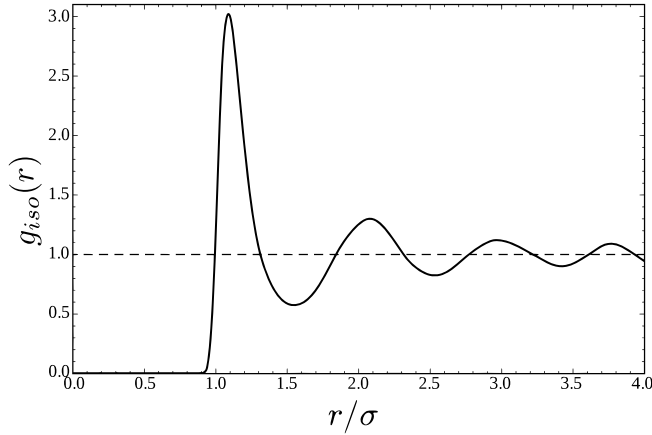


FIGURE 1.2 – **Forme caractéristique de g_{iso} pour des systèmes amorphes monodisperses.** Les données sont issues de simulations de type Monte-Carlo d'un liquide de Lennard-Jones, σ étant la distance caractéristique du potentiel utilisé. Source : [Wikipedia/Fonction_de_distribution_radiale](https://fr.wikipedia.org/wiki/Fonction_de_distribution_radiale)

$(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow (-\mathbf{r}', \mathbf{r} - \mathbf{r}')$, $(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow (-\mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r})$, $(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow (\mathbf{r} - \mathbf{r}', -\mathbf{r}')$ et $(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow (\mathbf{r}', \mathbf{r})$. Par ailleurs, dans le cas particulier de notre système, \mathbf{f} et \mathbf{u}^∞ étant des fonctions impaires en \mathbf{r} , la configuration $(-\mathbf{r}, -\mathbf{r}')$ dans le repère (x, y) est équivalente à la configuration $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ dans le repère $(-x, -y)$, si bien que g_3 vérifie également la symétrie $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_3(-\mathbf{r}, -\mathbf{r}')$ (Fig. 1.3).

1.2.3 Définition statistique du tenseur des contraintes

L'expression du tenseur des contraintes élastiques macroscopiques $\boldsymbol{\sigma}$ d'un système de N particules aux positions $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ est un résultat général de mécanique des suspensions particulaires, aussi connue sous le nom de relation du Viriel [Nicot et al., 2013, Jouanna and Brocas, 2001] et qui s'écrit dans sa forme la plus générale :

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2V} \left(\sum_{i \neq j} \mathbf{r}_{ij} \otimes \mathbf{f}_{ij} - \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{r}}_i \otimes \dot{\mathbf{r}}_i \right), \quad (1.14)$$

où \mathbf{f}_{ij} est la force appliquée par la particule i sur la particule j et m_i la masse de la particule i . Cette relation est en particulier utilisée pour calculer le tenseur des contraintes macroscopiques dans des simulations de dynamique moléculaire.

Dans le cas d'une dynamique suramortie les masses des particules sont considérées négligeables, de telle sorte que le terme cinétique de la relation du Viriel est négligeable. En suivant les notations de la Sec. 1.1 pour notre système $\mathbf{f}_{ij} = \mathbf{f}(\mathbf{r}_{ij})$, le tenseur des contraintes moyenné sur l'espace des configurations à N particules, $\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_N$, peut alors s'écrire :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma} &= \left\langle \frac{1}{2V} \sum_{i \neq j} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}) d\mathbf{r} \right\rangle_N \\ &= \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

où nous avons utilisé la définition discrète de g (cf. Eq. (1.11)). Si dans le cas général cette relation ne définit pas forcément un tenseur symétrique, dans le cas d'interactions interparticulaires purement radiales, ce tenseur est bien symétrique. L'intégrale sur \mathbf{r} se réduit dans notre cas à une intégrale sur le contact ($|\mathbf{r}| \leq 2$). Nous obtenons ainsi une définition continue de la contrainte macroscopique liant cette dernière à la fonction de corrélation de paire. Cette relation illustre en particulier le lien entre les contraintes macroscopiques et la microstructure du système.

À ces contraintes élastiques s'ajoutent la contribution visqueuse et la pression du fluide. Dans le cas de sphères 3D indéformables contraintes à se déplacer dans un plan la contribution visqueuse vaut simplement $2\mathbf{E}^\infty/3\pi$ [Batchelor, 1970], dans le système d'unités défini en Sec. 1.1, avec \mathbf{E}^∞ la partie symétrique du gradient

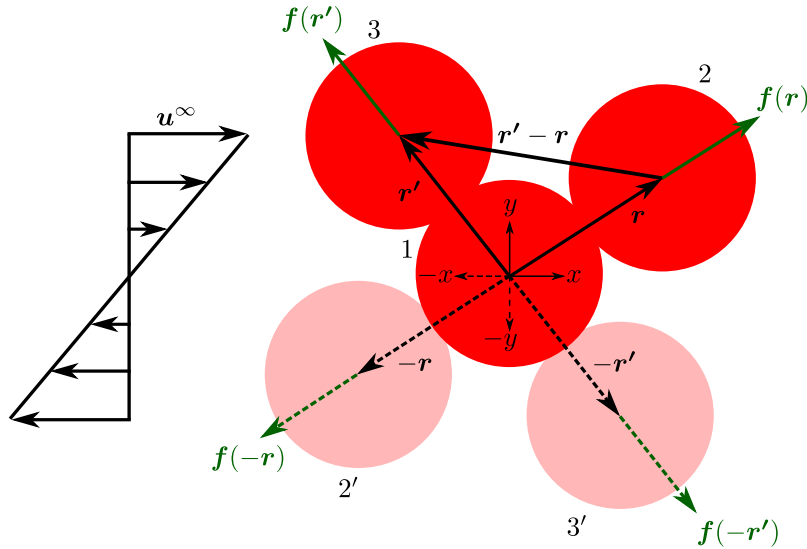


FIGURE 1.3 – **Illustration des symétries de g_3 .** Les trois particules (en rouge) formant d'un triplet de particules peuvent être indifféremment étiquetées particule 1, 2 ou 3, le premier argument vectoriel de g_3 étant le vecteur centre-à-centre reliant la particule 1 à la particule 2 et le deuxième argument vectoriel le vecteur centre-à-centre reliant la particule 1 à la particule 3. Ainsi à chaque permutation d'étiquettes des particules est associée une symétrie de g_3 . Par exemple, la permutation des particules 1 et 2 revient à transformer les vecteurs \mathbf{r} et \mathbf{r}' en $-\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}' - \mathbf{r}$, d'où la symétrie $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_3(-\mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r})$. Par ailleurs, la configuration (1, 2', 3'), symétrique de (1, 2, 3) par rapport à l'origine, est équivalente dans le repère $(-x, -y)$ à la configuration initiale dans le repère (x, y) , d'où la symétrie $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_3(-\mathbf{r}, -\mathbf{r}')$, compte-tenu de la symétrie du champ de vitesse.

du profil de vitesse. Dans le cas de sphères suffisamment rigides, nous pouvons considérer que cette expression approxime correctement la contribution visqueuse du système. La pression p_0 au sein du fluide induit, quant à elle, une contrainte $-p_0 \mathbb{1}$. Le tenseur complet des contraintes, qui est celui effectivement mesuré dans des expériences de rhéométrie, vaut donc :

$$\Sigma_{\text{tot}} = -p_0 \mathbb{1} + \frac{2}{3\pi} \mathbf{E}^\infty + \Sigma. \quad (1.16)$$

1.3 Dynamique de la microstructure

Dans cette section, nous dérivons une équation d'évolution exacte de la fonction de corrélation de paire associée à notre suspension. Cette étape de notre dérivation est des plus classiques en physique statistique et a déjà été présentée dans de nombreux travaux (voir par exemple [Nazockdast and Morris, 2012b]). Nous reproduisons ici ce raisonnement appliqué à notre système d'étude.

1.3.1 Conservation de la probabilité

Après les considérations générales de la section, nous nous plaçons désormais dans le cas spécifique du système défini en Sec. 1.1. La fonction de distribution de probabilité P_N associée à notre système vérifie une équation d'évolution traduisant la conservation de la probabilité totale du système (nous rappelons que P_N est normalisée suivant l'équation (1.3)) :

$$\partial_t P_N + \sum_{\mu=1}^N \nabla_\mu \cdot \mathbf{j}_\mu = 0, \quad (1.17)$$

où nous avons introduit le vecteur courant de probabilité associé à la particule μ , $\mathbf{j}_\mu = \dot{\mathbf{r}}_\mu P_N$. En isolant $\dot{\mathbf{r}}_\mu$ dans l'équation (1.2), nous obtenons l'expression suivante pour \mathbf{j}_μ :

$$\mathbf{j}_\mu = \left(\mathbf{u}_\mu^\infty + \frac{1}{2} \mathbf{f}_\mu \right) P_N. \quad (1.18)$$

Si nous utilisons ici une description probabiliste, la dynamique du système est bien purement déterministe en raison de l'absence de bruit thermique. La description probabiliste ne rends donc pas compte de la stochasticité, mais de l'évolution déterministe (dissipative) d'un ensemble de conditions initiales, dans le même esprit que, par exemple, l'équation de Liouville pour les systèmes hamiltoniens.

En intégrant l'Eq. (1.17), qui est une équation à $2N$ variables, sur $N - 2$ vecteurs positions nous la réduisons à l'équation à $2d$ variables suivante sur la fonction de distribution de probabilité réduite à deux corps (avec d la dimension du système) :

$$\frac{\partial_t \mathcal{P}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)}{N(N-1)} + \int \nabla_1 \cdot \mathbf{j}_1 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N + \int \nabla_2 \cdot \mathbf{j}_2 d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N + \sum_{\mu=3}^N \int \nabla_\mu \cdot \mathbf{j}_\mu d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N = 0. \quad (1.19)$$

Les intégrales présentes dans la somme peuvent être calculées en appliquant le théorème de Green-Ostrogradski, ce qui conduit à

$$\int \nabla_\mu \cdot \mathbf{j}_\mu d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N = \oint_{\partial V} \mathbf{j}_\mu \cdot d\mathbf{S}_\mu d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_{\mu-1} d\mathbf{r}_{\mu+1} \dots d\mathbf{r}_N = 0, \quad (1.20)$$

grâce aux conditions aux limites de flux nul. Les opérateurs ∇_1 et ∇_2 peuvent être sortis de leur intégrale respective puisque celles-ci ne portent pas sur les coordonnées des particules 1 et 2. Nous pouvons donc réécrire l'équation (1.19) sous la forme :

$$\partial_t \mathcal{P}_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + N(N-1) \nabla_1 \cdot \mathbf{J}_1 + N(N-1) \nabla_2 \cdot \mathbf{J}_2 = 0, \quad (1.21)$$

avec $\mathbf{J}_\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int \mathbf{j}_\mu d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N$. En supposant le matériau homogène, de telle sorte que \mathcal{P}_2 , \mathbf{J}_1 et \mathbf{J}_2 soient uniquement des fonctions de $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, nous réduisons à deux le nombre de variables (réelles). On remarque aussi que $\nabla_2 = -\nabla_1 \equiv \nabla$, avec ∇ l'opérateur gradient associé à \mathbf{r} . Nous aboutissons donc à l'équation d'évolution suivante pour \mathcal{P}_2 :

$$\partial_t \mathcal{P}_2(\mathbf{r}) + N(N-1) \nabla \cdot \mathbf{J}_{12} = 0, \quad (1.22)$$

le vecteur \mathbf{J}_{12} étant défini comme suit

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{12} &= \mathbf{J}_2 - \mathbf{J}_1 \\ &= \int \left(\mathbf{u}_{12}^\infty + \mathbf{f}^{(12)} \right) P_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_3 \dots d\mathbf{r}_N, \end{aligned} \quad (1.23)$$

où $\mathbf{u}_{12}^\infty = \mathbf{u}_2^\infty - \mathbf{u}_1^\infty$ et $\mathbf{f}^{(12)} = \frac{1}{2} (\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}_1)$.

1.3.2 Dynamique de la fonction de corrélation de paire

Nous introduisons pour la suite la notation $\langle \cdot \rangle_2$ désignant la valeur moyenne d'une observable sur l'espace des configurations des $(N - 2)$ particules,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_2(\mathbf{r}) &= \frac{\int A(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) P_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) d\mathbf{r}_{13} \dots d\mathbf{r}_{1N}}{\int P_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) d\mathbf{r}_{13} \dots d\mathbf{r}_{1N}} \\ &= \frac{N(N-1)}{\mathcal{P}_2(\mathbf{r})} \int A(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) P_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) d\mathbf{r}_{13} \dots d\mathbf{r}_{1N}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Nous pouvons également transformer l'équation (1.22) en une équation sur la fonction de corrélation de paire $g(\mathbf{r}) = \mathcal{P}_2(\mathbf{r})/\rho^2$. En utilisant la notation introduite précédemment cette équation s'écrit :

$$\partial_t g(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \left(\mathbf{u}_{12}^\infty(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) + \langle \mathbf{f}^{(12)} \rangle_2(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) \right), \quad (1.25)$$

où nous avons utilisé le fait que $\langle \mathbf{u}_{12}^\infty \rangle_2 = \mathbf{u}_{12}^\infty$.

En utilisant l'additivité de paire des forces de contact, nous pouvons montrer que :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{f}_1 \rangle_2 g(\mathbf{r}) &= \frac{N(N-1)}{\rho^2} \int \left(\mathbf{f}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu=3}^N \mathbf{f}(\mathbf{r}_{1\mu}) \right) P_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) d\mathbf{r}_{13} \dots d\mathbf{r}_{1N} \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) + \frac{N(N-1)}{\rho^2} \sum_{\mu=3}^N \int \mathbf{f}(\mathbf{r}_{1\mu}) P_N(\mathbf{r}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1N}) d\mathbf{r}_{13} \dots d\mathbf{r}_{1N} \end{aligned} \quad (1.26)$$

Toutes les intégrales dans la somme sont équivalentes puisque les particules 3 à N sont interchangeables. Toutes ces intégrales peuvent se ramener à l'intégrale définie par $\mu = 3$. En notant $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_{13}$ et en utilisant la définition de g_3 , la fonction de corrélation à trois corps (réduite à quatre variables en utilisant l'invariance par translation), nous pouvons donc nous ramener à

$$\langle \mathbf{f}_1 \rangle_2 g(\mathbf{r}) = \mathbf{f}(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) + \rho \int \mathbf{f}(\mathbf{r}')g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}'. \quad (1.27)$$

De la même façon, nous pouvons montrer que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{f}_2 \rangle_2 g(\mathbf{r}) &= \mathbf{f}(-\mathbf{r})g(\mathbf{r}) + \rho \int \mathbf{f}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}' \\ &= -\mathbf{f}(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) + \rho \int \mathbf{f}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}'. \end{aligned} \quad (1.28)$$

En utilisant les symétries $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_3(-\mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r})$ et $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_3(-\mathbf{r}, -\mathbf{r}')$ présentées en Sec. 1.2.2, nous montrons par ailleurs que

$$\begin{aligned} \int \mathbf{f}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}' &= \int \mathbf{f}(\mathbf{r}' - \mathbf{r})g_3(-\mathbf{r}, \mathbf{r}' - \mathbf{r})d\mathbf{r}' \\ &= \int \mathbf{f}(\mathbf{r}'')g_3(-\mathbf{r}, \mathbf{r}'')d\mathbf{r}'' \\ &= \int -\mathbf{f}(-\mathbf{r}'')g_3(\mathbf{r}, -\mathbf{r}'')d\mathbf{r}'' \\ &= - \int \mathbf{f}(\mathbf{r}')g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (1.29)$$

où nous avons fait le changement de variable $\mathbf{r}'' = \mathbf{r}' - \mathbf{r}$ puis $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}''$. En utilisant ce résultat dans (1.28), nous obtenons $\langle \mathbf{f}_2 \rangle_2 = -\langle \mathbf{f}_1 \rangle_2$, et donc $\langle \mathbf{f}^{(12)} \rangle_2 = \langle \mathbf{f}_2 \rangle_2$. En remplaçant \mathbf{u}_{12}^∞ et $\langle \mathbf{f}^{(12)} \rangle_2$ par leurs expressions respectives dans l'Eq. (1.25), nous obtenons finalement :

$$\partial_t g(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.30)$$

avec

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r} g(\mathbf{r}) - \mathbf{f}(\mathbf{r})g(\mathbf{r}) - \rho \int \mathbf{f}(\mathbf{r}')g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r}'. \quad (1.31)$$

Nous obtenons ainsi une équation dynamique exacte sur g , qui n'est toutefois pas fermée à cause de la présence de g_3 .

À ce stade deux approches différentes peuvent être développées. La première consiste à résoudre l'équation (1.30) (sous un éventuel jeu d'approximations) pour obtenir $g(\mathbf{r})$ et calculer a posteriori Σ grâce à la relation du Viriel (1.15). Durant cette thèse, nous avons essayé dans un premier temps de coupler décomposition

de Fourier angulaire et résolution numérique afin d'étudier le comportement de la microstructure de notre système. Cette approche s'est cependant avérée coûteuse en effort de développement et en temps de calcul sans nous permettre de progresser analytiquement dans la résolution de notre problème. Nous n'avons donc pas poussé au bout le développement de cette méthode que nous présentons une ébauche en Annexe E.

Une seconde approche consiste à utiliser la relation du Viriel (1.15) pour transformer l'équation (1.30) en une équation tensorielle sur Σ qui pourra être fermée par différents jeux d'approximations. Cette approche possède l'avantage de pousser plus avant le travail analytique. Il est ainsi plus intéressant d'obtenir une équation sur Σ qui pourra ensuite être étudiée analytiquement et résolue numériquement. L'équation obtenue n'ayant plus de dépendance spatiale elle est par ailleurs beaucoup plus aisée à résoudre numériquement qu'avec l'approche précédente. Nous développons donc dans la suite de ce manuscrit cette approche basée sur le tenseur des contraintes.

1.4 Équation d'évolution exacte du tenseur des contraintes

Nous souhaitons désormais obtenir une équation d'évolution sur Σ , le tenseur des contraintes élastiques du système. En utilisant la relation du Viriel (1.15), nous pouvons obtenir une telle équation en multipliant l'équation (1.30) par $\frac{1}{2}\rho^2 (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r}))$ et en intégrant sur \mathbf{r} . Ce faisant nous obtenons l'équation d'évolution temporelle suivante pour le tenseur des contraintes :

$$\dot{\Sigma} + \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \mathbf{0}. \quad (1.32)$$

Le terme intégral de cette équation peut être calculé par intégration par partie :

$$\begin{aligned} \left[\int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right]_{ij} &= \int r_i f_j \partial_k J_k d\mathbf{r} \\ &= \int_{\partial V} r_i f_j J_k dS_k - \int \delta_{ik} f_j J_k d\mathbf{r} - \int r_i \partial_k f_j J_k d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (1.33)$$

f s'annulant au contact, le terme de bord est nul et nous obtenons donc :

$$\int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = - \int \mathbf{J} \otimes \mathbf{f} d\mathbf{r} - \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{J}) \cdot \nabla \mathbf{f}^T d\mathbf{r}, \quad (1.34)$$

où nous avons également utilisé le fait que f s'annule au-delà du contact, conduisant à un terme de bord nul.

En remplaçant \mathbf{J} par son expression (1.31), nous obtenons :

$$\dot{\Sigma} = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \Sigma + \Lambda - \Xi - \Pi - \Gamma - \Upsilon, \quad (1.35)$$

avec

$$\Lambda = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) (\nabla \mathbf{f} \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty)^T g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.36)$$

$$\Xi = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{f}(\mathbf{r}) \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.37)$$

$$\Pi = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \cdot \nabla \mathbf{f}^T g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.38)$$

$$\Gamma = \frac{\rho^3}{2} \iint (\mathbf{f}(\mathbf{r}') \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (1.39)$$

$$\Upsilon = \frac{\rho^3}{2} \iint (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r}')) \cdot (\nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}))^T g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (1.40)$$

En utilisant le fait que \mathbf{f} est une force radiale, il est par ailleurs possible de montrer (voir détails en Annexe A) que

$$\mathbf{\Lambda} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{E}^{\infty} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \cdot \nabla f g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{E}^{\infty} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{r} \otimes f(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.41)$$

où nous avons introduit $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$, ainsi que le tenseur des taux de déformation \mathbf{E}^{∞} , défini comme la partie symétrique de $\nabla \mathbf{u}^{\infty}$:

$$\mathbf{E}^{\infty} = \frac{\nabla \mathbf{u}^{\infty} + \nabla \mathbf{u}^{\infty T}}{2}. \quad (1.42)$$

En insérant (1.41) dans l'équation (1.35), nous obtenons alors :

$$\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \nabla \mathbf{u}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + \boldsymbol{\Theta} - \boldsymbol{\Phi} - \boldsymbol{\Xi} - \boldsymbol{\Pi} - \boldsymbol{\Gamma} - \boldsymbol{\Upsilon}, \quad (1.43)$$

avec

$$\boldsymbol{\Theta} = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{E}^{\infty} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \cdot \nabla f g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.44)$$

$$\boldsymbol{\Phi} = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{E}^{\infty} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{r} \otimes f(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (1.45)$$

Les quatre premiers termes du membre de droite de cette équation ressemblent à ceux apparaissant dans les équations obtenues sur le tenseur de structure \mathbf{Q} grâce aux approches de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique pour des systèmes de sphères dures [Prager, 1957, Hinch and Leal, 1976, Phan-Thien et al., 1999, Gillissen and Wilson, 2018] que nous avons présentées en Sec. 2.3 de l'introduction de cette thèse. Le terme d'advection $\nabla \mathbf{u}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T}$ est identique à celui apparaissant dans ces modèles. Les tenseurs $\boldsymbol{\Theta}$ et $\boldsymbol{\Phi}$ peuvent quant à eux être écrits sous la forme d'une contraction entre \mathbf{E}^{∞} et un tenseur d'ordre 4, ce qui est là aussi un terme classique modélisant la résistance d'une paire de particules à l'advection par l'écoulement (cf. Eq. (55) de l'introduction de cette thèse, par exemple). Il est normal de voir apparaître \mathbf{f} dans la définition de $\boldsymbol{\Theta}$ et $\boldsymbol{\Phi}$, puisque dans notre cas c'est l'élasticité des particules qui contribue à s'opposer à l'advection des paires de particules par l'écoulement, tandis que dans le cas de sphères dures, ce sont les interactions hydrodynamiques qui jouent ce rôle. Nous obtenons en revanche des termes supplémentaires définis par des intégrales de g_3 qui ne sont pas présents dans ce type d'approches puisqu'elles ne prennent pas en compte les corrélations à plus de deux corps.

Nous pouvons décomposer cette équation tensorielle en une équation tensorielle de trace nulle couplée à une équation scalaire sur la trace du tenseur des contraintes. À partir de maintenant, nous désignons par \mathbf{A}' la partie déviatorique de tout tenseur \mathbf{A} , soit $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \frac{1}{2}(\text{tr } \mathbf{A}) \mathbb{I}$ (en deux dimensions). En particulier, pour $\nabla \mathbf{u}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T}$, il est possible de montrer les résultats suivants :

$$\text{tr} \left(\nabla \mathbf{u}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} \right) = 2 (\mathbf{E}^{\infty} : \boldsymbol{\Sigma}'), \quad (1.46)$$

$$\left(\nabla \mathbf{u}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} \right)' = \boldsymbol{\Omega}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma}' - \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \boldsymbol{\Omega}^{\infty} + (\text{tr } \boldsymbol{\Sigma}) \mathbf{E}^{\infty}, \quad (1.47)$$

avec $\boldsymbol{\Omega}^{\infty}$ la partie antisymétrique de $\nabla \mathbf{u}^{\infty}$,

$$\boldsymbol{\Omega}^{\infty} = \frac{\nabla \mathbf{u}^{\infty} - \nabla \mathbf{u}^{\infty T}}{2}, \quad (1.48)$$

également appelé tenseur de vorticité. Les détails de la dérivation peuvent être trouvés en Annexe A. Il est important de noter que le résultat (1.47) est spécifique aux systèmes bidimensionnels car $\mathbf{E}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma}' + \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \mathbf{E}^{\infty} = (\mathbf{E}^{\infty} : \boldsymbol{\Sigma}') \mathbb{I}$ n'est valable qu'en dimension deux.

En introduisant la pression $p = -\text{tr } \boldsymbol{\Sigma}/2$, nous obtenons la décomposition suivante pour la dynamique du tenseur des contraintes particulières, avec une évolution temporelle de la partie déviatorique de la contrainte

$$\dot{\boldsymbol{\Sigma}}' = \boldsymbol{\Omega}^{\infty} \cdot \boldsymbol{\Sigma}' - \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \boldsymbol{\Omega}^{\infty} - 2p \mathbf{E}^{\infty} + \boldsymbol{\Theta}' - \boldsymbol{\Phi}' - \boldsymbol{\Xi}' - \boldsymbol{\Pi}' - \boldsymbol{\Gamma}' - \boldsymbol{\Upsilon}', \quad (1.49)$$

ainsi qu'une équation sur la pression

$$\dot{p} = -(\boldsymbol{\Sigma}' : \mathbf{E}^\infty) - \frac{\text{tr} \boldsymbol{\Theta}}{2} + \frac{\text{tr} \boldsymbol{\Phi}}{2} + \frac{\text{tr} \boldsymbol{\Xi}}{2} + \frac{\text{tr} \boldsymbol{\Pi}}{2} + \frac{\text{tr} \boldsymbol{\Gamma}}{2} + \frac{\text{tr} \boldsymbol{\Upsilon}}{2}. \quad (1.50)$$

Nous obtenons ainsi des équations d'évolution macroscopiques exactes pour la contribution particulière de la contrainte déviatorique et la pression. Cependant, celles-ci ne sont pas encore fermées car les tenseurs apparaissant dans ces équations ne sont pas directement exprimés en terme de $\boldsymbol{\Sigma}'$ et p . La fermeture de ces équations d'évolution est l'objet du Chap. 2 pour le cas de suspensions denses molles au-dessus du jamming et du Chap. 4 pour le cas en-dessous du jamming.

Chapitre 2

Fermeture du modèle dans le cas de suspensions au-dessus du jamming

Tous les calculs du Chap. 1 sont exacts vis-à-vis du modèle microscopique choisi. Ceux-ci aboutissent à une paire d'équations sur la partie déviatorique du tenseur des contraintes particulières (1.49), et sur la pression particulière (1.50). Ces équations font apparaître des moments de g et g_3 qui ne sont directement reliés ni à la pression ni à la partie déviatorique du tenseur des contraintes, le système n'est donc pas fermé. La complexité de ces moments constitue un obstacle à une fermeture exacte des équations et il est désormais nécessaire de faire des approximations quant à la microstructure du système afin d'aller plus loin dans la dérivation de notre modèle constitutif. Dans ce chapitre, nous inspectons de façon numérique la microstructure des suspensions denses au-dessus du jamming afin d'en identifier les caractéristiques importantes et proposer un jeu d'approximations s'appuyant sur ces dernières afin de fermer le système et obtenir un modèle constitutif pour les suspensions denses molles au-dessus du jamming.

2.1 Simulations numériques et microstructure des suspensions denses molles au-dessus du jamming

Les six tenseurs Θ , Φ , Ξ , Π , Γ et Υ responsable de la non-fermeture du système ((1.49), (1.50)) sont définis comme des intégrales de g ou g_3 . Pour fermer ce système, deux problèmes se présentent à nous. Premièrement, dans le cas des tenseurs définis comme des intégrales de g , il est nécessaire de relier différents moments de g entre eux, ce qui s'avère très difficile avec des considérations exactes sur la fonction de corrélation de paire. Deuxièmement, il est nécessaire de relier des intégrales de g_3 à des intégrales de g afin d'exprimer les tenseurs Γ et Υ en fonction de p et Σ' . Dans les deux cas, il est très difficile d'effectuer des calculs exacts, il est donc nécessaire de faire certaines approximations sur ces deux fonctions g et g_3 afin de réussir à fermer notre jeu d'équations. Afin d'inspirer et de motiver nos approximations et leur offrir le caractère le plus physique possible, il est nécessaire d'avoir une bonne compréhension de ce qu'il se passe au niveau de la microstructure de notre système.

2.1.1 Simulations numériques

Pour ce faire, nous commençons donc par étudier numériquement le type de systèmes que nous ambitionnons de modéliser. Tout au long de cette thèse, nous avons utilisé des simulations numériques réalisées à partir de l'algorithme de dynamique moléculaire LAMMPS [Plimpton, 1995]. Nous avons ainsi simulé un système 2D de 1000 disques interagissant entre eux avec un potentiel harmonique, $\alpha_f = 1$ [Durian, 1995]. Pour étudier le comportement de notre système sous une déformation, nous avons choisi d'utiliser le protocole de déformation le plus classique, à savoir le cisaillement simple. La déformation agit sur les particules composant notre système en générant une force de traînée de façon identique à la modélisation que nous avons choisi en Sec. 1.1. Pour éviter l'apparition d'un ordre trop fort, nous avons utilisé un mélange bidisperse 50 : 50 avec un rapport de taille de 1/1,4 [Speedy, 1999]. Il est alors possible de calculer les fonctions de corrélation associées à une

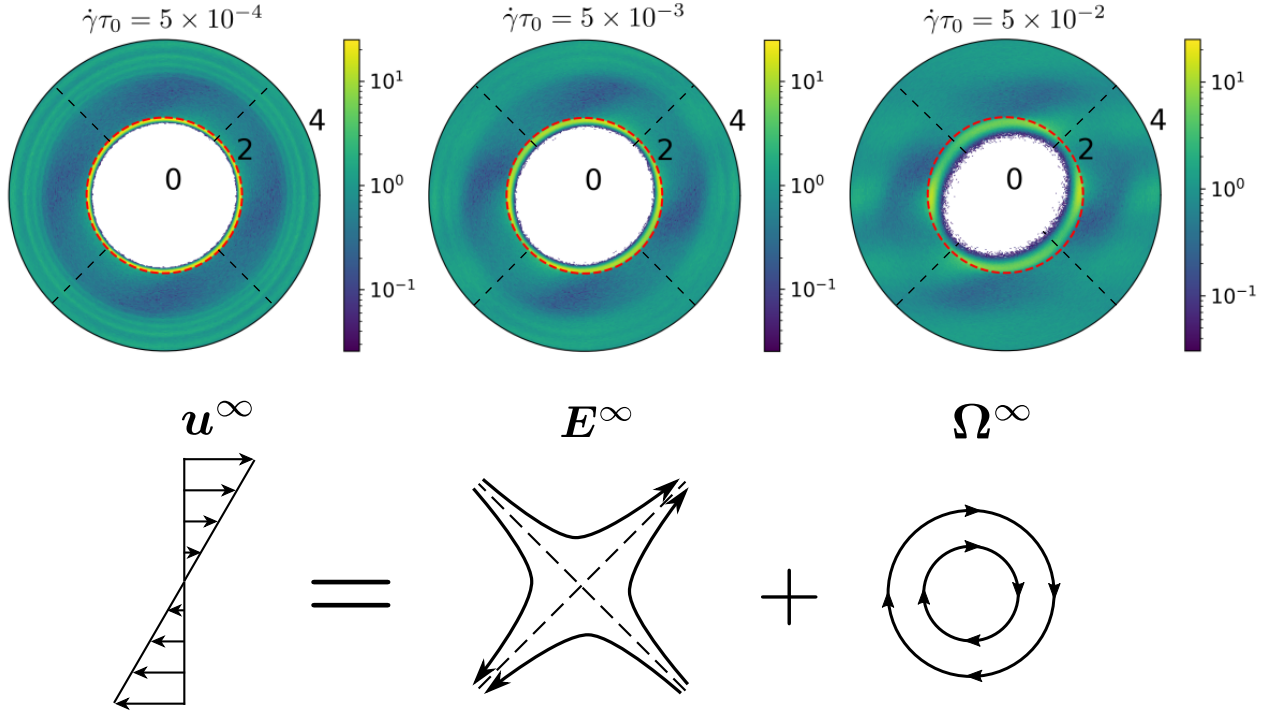


FIGURE 2.1 – **Fonction de corrélation de paire du système pour différentes valeurs de taux de cisaillement.** La fraction surfacique du système vaut 0.872, le cercle en traits pointillés rouge représente la limite de contact entre deux particules ($r = 2$), tandis que les traits pointillés noirs indiquent les axes principaux de E^∞ , respectivement à $\theta = \pi/4$ (axe élongationnel) et $\theta = 3\pi/4$ (axe compressionnel). Les zones blanches correspondent à $g(\mathbf{r}) = 0$. Le champ de vitesse $\mathbf{u}^\infty = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r}$ peut être décomposé en une contribution symétrique ($E^\infty \cdot \mathbf{r}$) et antisymétrique ($\Omega^\infty \cdot \mathbf{r}$).

configuration du système en utilisant la formulation en terme de fonctions de Dirac (1.11) de ces dernières. Cependant pour permettre la comparaison avec notre théorie monodisperse, nous devons considérer le rayon des particules et nous calculons donc de la sorte les fonctions de corrélation numériques d'ordre 2 et 3 :

$$g(\mathbf{r}) = \frac{1}{\rho N} \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}_{ij}), \quad (2.1)$$

$$g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\rho^2 N} \sum_{i \neq j \neq k} \delta(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}_{ij}) \delta(\mathbf{r}' - \tilde{\mathbf{r}}_{ik}), \quad (2.2)$$

avec $\tilde{\mathbf{r}}_{ij} = 2(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)/(a_i + a_j)$ et a_i le rayon de la particule i . De même, il est possible de calculer n'importe quel tenseur $\mathbf{A} = \int \mathbf{H}(\mathbf{r})g(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ défini comme un moment de g . En effet en remplaçant g par son expression (2.1), nous obtenons l'expression suivante pour \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \frac{1}{\rho N} \sum_{i \neq j} \mathbf{H}(\tilde{\mathbf{r}}_{ij}) \quad (2.3)$$

Afin d'obtenir une statistique satisfaisante nous moyennons toutes ces grandeurs sur 300 configurations statistiquement indépendantes du système dans l'état stationnaire. Nous avons procédé de la sorte pour différentes valeurs de la fraction surfacique du système ainsi que du taux de cisaillement. Dans ce chapitre, nous nous intéressons exclusivement au cas de suspensions dont la fraction surfacique est plus grande que la fraction de jamming (comprise entre 0.84 et 0.85 dans nos simulations). Nous avons représenté en Fig. 2.1 la fonction de corrélation de paire dans l'espace plan pour différents taux de cisaillement et à une fraction surfacique de 0.872. Pour des faibles taux de cisaillement, la fonction de corrélation de paire est très faiblement anisotrope et les

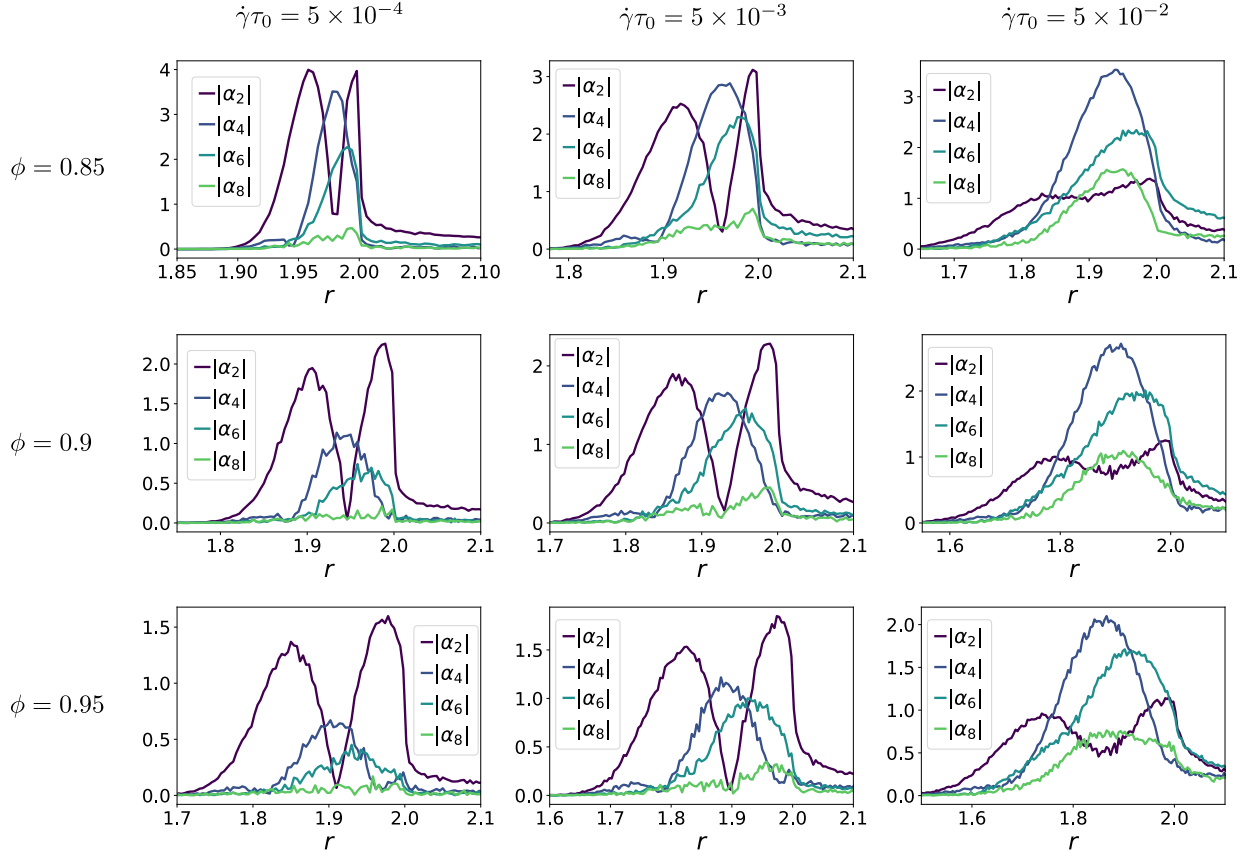


FIGURE 2.2 – Évolution des modules des premiers coefficients de Fourier de la fonction de corrélation de paire dans la zone de contact pour différentes fractions volumiques du système et différents taux de cisaillement. Les coefficients d'ordre impair ne sont pas représentés car nuls du fait de la symétrie de g .

premiers voisins sont tous très proches de $r = 2$. Lorsque l'on augmente le taux de cisaillement, g se déforme anisotropiquement et essentiellement suivant les axes principaux de la partie symétrique du gradient des vitesses et les premiers voisins pénètrent plus loin dans la zone de contact. En effet, la contribution du tenseur \mathbf{E}^∞ à l'écoulement tend à étirer les contacts selon l'axe $\theta = \pi/4$ et les compresser suivant l'axe orthogonal à ce dernier tandis que le tenseur $\mathbf{\Omega}^\infty$ ne fait qu'induire une légère rotation des contacts, empêchant les axes élongationnel et compressionnel de la microstructure d'être parfaitement alignés avec les axes principaux de \mathbf{E}^∞ . Pour des taux de cisaillement suffisamment forts, le système devient fortement anisotrope et sous l'effet de $\mathbf{\Omega}^\infty$ l'orientation de cette anisotropie se désaligne de plus en plus des axes principaux de \mathbf{E}^∞ .

2.1.2 Étude de l'anisotropie de la fonction de corrélation de paire

La géométrie naturelle de notre problème en 2D est la géométrie polaire associée aux coordonnées (r, θ) . Dans cette géométrie, la dépendance angulaire de g reflète l'anisotropie de la microstructure du système. La périodicité de cette dépendance angulaire nous incite à écrire le développement de Fourier angulaire de la fonction de corrélation de paire :

$$g(r, \theta) = \underbrace{g_{\text{iso}}(r)}_{\text{partie isotrope}} + \underbrace{\sum_{k \neq 0} \alpha_{2k}(r) e^{2ik\theta}}_{\text{partie anisotrope}}. \quad (2.4)$$

Dans cette écriture g est composée d'une partie isotrope $g_{\text{iso}}(r) = (1/2\pi) \int_{-\pi}^{\pi} g(r, \theta) d\theta$ à laquelle se superpose une partie anisotrope se décomposant en une somme de modes de Fourier. La fonction de corrélation de paire

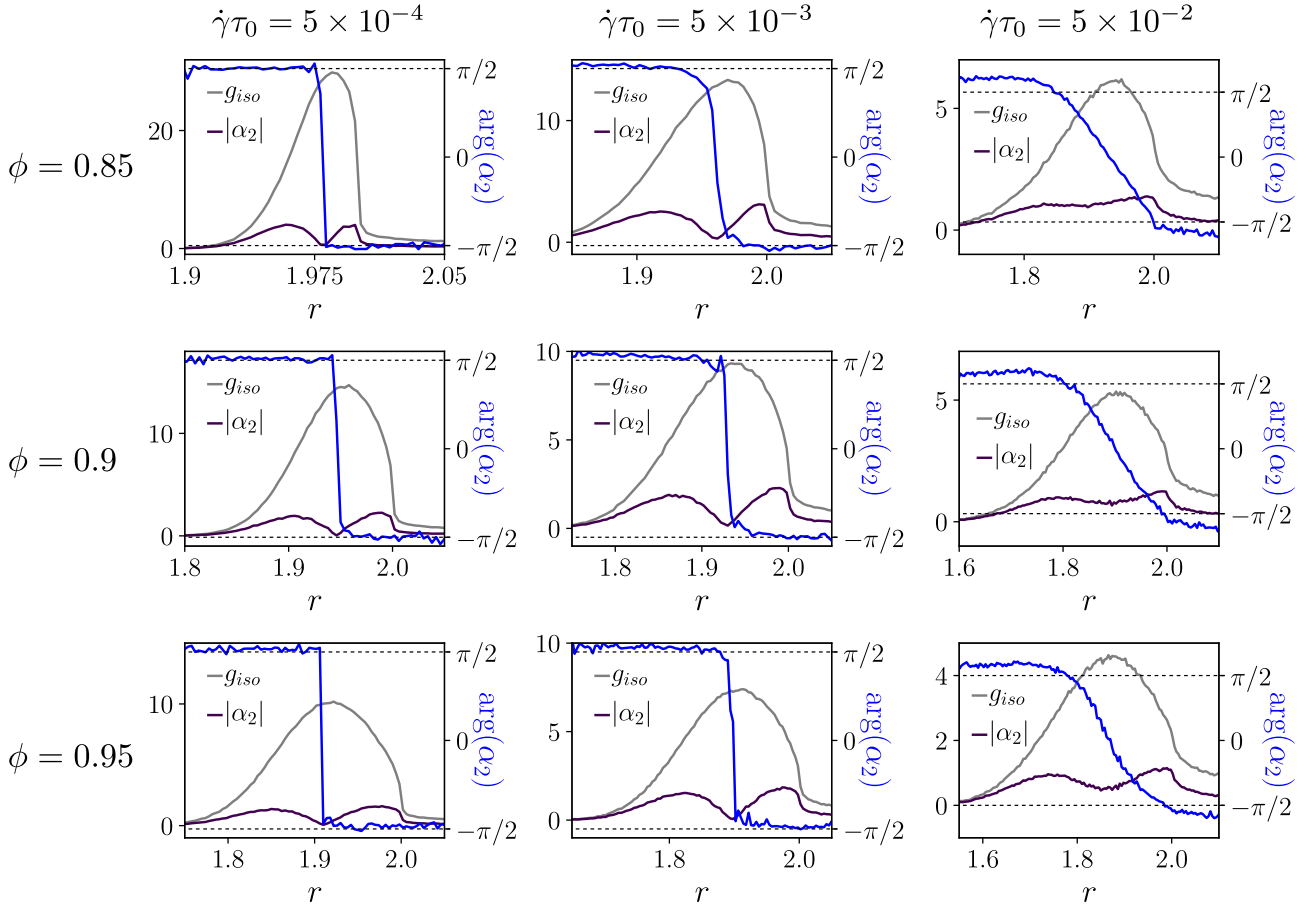


FIGURE 2.3 – Évolution de g_{iso} et α_2 dans la zone de contact pour différentes fractions volumiques du système et différents taux de cisaillement. À faibles taux de cisaillement $|\alpha_2|$ (courbe mauve) devient quasiment approximativement à la position du maximum de g_{iso} (courbe grise) tandis que l'argument de α_2 (courbe bleue, valeur sur l'axe vertical droit) passe de $\pi/2$ à $-\pi/2$. Pour de plus grandes valeurs de taux de cisaillement $|\alpha_2|$ ne s'annule plus mais possède toujours un minimum local proche de la position du maximum de g_{iso} . L'argument de α_2 ne change plus brutalement à cet endroit mais évolue progressivement d'une valeur plus grande que $\pi/2$ à une valeur plus petite que $-\pi/2$.

vérifiant la symétrie $g(r, \theta + \pi) = g(r, \theta)$, seuls les modes pairs ont une contribution non-nulle. Les coefficients de Fourier sont définis par $\alpha_k(r) = (1/2\pi) \int_{-\pi}^{\pi} g(r, \theta) e^{-ik\theta} d\theta$ et $\alpha_{-k} = \alpha_k^*$ car g est une fonction réelle. Le module de α_{2k} correspond ainsi à l'amplitude du mode $2k$ tandis que son argument correspond à $-2k$ fois l'orientation de ce dernier. Nous avons représenté en Fig. 3.15 les modules des premiers coefficients de Fourier pour différentes valeurs de fraction volumique et de taux de cisaillement. À faibles taux de cisaillement, seuls les modes d'ordre 2, 4 et 6 sont non-négligeables. Le mode d'ordre 2 domine la microstructure, sauf proche du maximum de g_{iso} où sa valeur s'approche de 0 et où les contributions d'ordre supérieur deviennent dominantes. Le minimum local du module de α_2 s'accompagne d'un changement de phase : avant le maximum de g_{iso} la phase de α_2 vaut $\pi/2$ et passe à $-\pi/2$ après ce maximum, ce qui correspond à un mode d'ordre 2 aligné avec l'axe $\theta = -\pi/4$ puis avec l'axe $\theta = \pi/4$ (Fig. 2.3). Par ailleurs, nous observons que plus le système est loin du jamming, plus la contribution des modes d'ordre 4 et 6 est faible par rapport à celle d'ordre 2. Comme attendu, le cisaillement a pour effet d'augmenter l'anisotropie du système. En effet, lorsque le taux de cisaillement augmente les modes d'ordre 4 et 6 deviennent dominants par rapport à l'ordre 2 sur l'ensemble de la zone de contact et les modes d'ordre supérieur à 6 deviennent non-négligeables. Nous observons par ailleurs que l'argument de α_2 augmente avec le taux de cisaillement pour prendre des valeurs plus grandes que $\pi/2$ en valeur absolue, ce qui traduit le fait que la microstructure se désaligne de \mathbf{E}^∞ sous l'effet de la vorticit .

Le cadre que nous avons pr sent  dans cette section s'av re tr s adapt    l' tude de la microstructure.

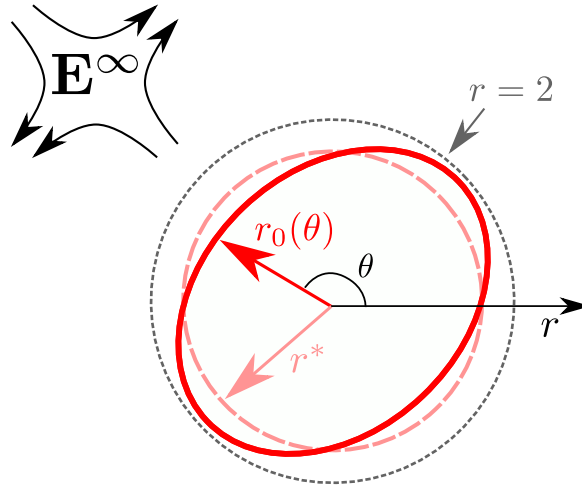


FIGURE 2.4 – **Illustration de l’hypothèse de déformation en harmonique d’ordre deux de $g_{\text{iso}}(r)$.** Nous supposons que la fonction de corrélation de paire $g(r)$, représentée ici uniquement par son pic de premier voisin en coordonnées polaires r, θ (ligne rouge pleine), est une déformation de la fonction isotrope $g_{\text{iso}}(r)$ (dont le pic de premier voisin est la ligne pointillée rose) sous l’action du tenseur des taux de déformation imposé E^∞ . Nous nous plaçons suffisamment loin du jamming et à des déformations suffisamment faibles pour que la couronne de premiers voisins soit entièrement au contact de la particule centrale.

Comme mentionné en Sec. 1.3.2, nous avons tenté de nous servir de la décomposition de Fourier angulaire de la fonction de corrélation de paire pour étudier l’équation (1.30) sur la microstructure. En effet, l’équation sur g peut se transformer en une hiérarchie d’équations aux dérivées partielles sur les coefficients de Fourier de g . En coupant cette hiérarchie à un ordre donné (nous avons vu que seuls les premiers ordres sont non-négligeables) et en utilisant une relation de fermeture pour exprimer g_3 en fonction de g , il est alors possible d’obtenir un système fermé pouvant être résolu numériquement. Nous avons dans l’idée de nous servir de cette approche afin d’étudier le comportement des différents α_k et leur influence sur la rhéologie du système mais la complexité des équations différentielles obtenues a soulevé de nombreux problèmes numériques. Préférant faire aboutir une démarche analytique, nous avons mis de côté cette approche numérique présentée en Annexe E. Celle-ci mériterait cependant d’être poursuivie afin d’obtenir une compréhension accrue de la dynamique de la microstructure qui pourrait nous aider à améliorer les approximations que nous allons présenter dans la suite de ce chapitre.

2.2 Paramétrisation de g par un tenseur de structure

2.2.1 Paramétrisation de l’anisotropie de g pour de faibles déformations

Les tenseurs Σ , Θ , Φ , Ξ et Π étant tous définis comme une intégrale de la fonction de corrélation de paire g , un moyen de relier ces tenseurs les uns entre les autres est de préciser la forme de g . Au vu de la définition (1.15) de la contrainte particulaire, il est clair que la partie déviatorique de la contrainte provient de l’anisotropie de la microstructure, une fonction g isotrope menant à Σ' nul selon cette définition. La décomposition en modes de Fourier angulaires de g (Eq.(2.4)) présentée dans la section précédente constitue le cadre naturel pour traiter de l’anisotropie de celle-ci. Dans cette écriture la partie isotrope de g_{iso} de la fonction de corrélation de paire contribue à la trace de Σ (donc à la pression) tandis que la partie anisotrope décrite par les coefficients de Fourier α_{2k} contribue à la partie déviatorique du tenseur des contraintes. C’est sur cette partie anisotrope que vont porter nos efforts dans cette section afin d’en offrir une paramétrisation permettant de relier les différents

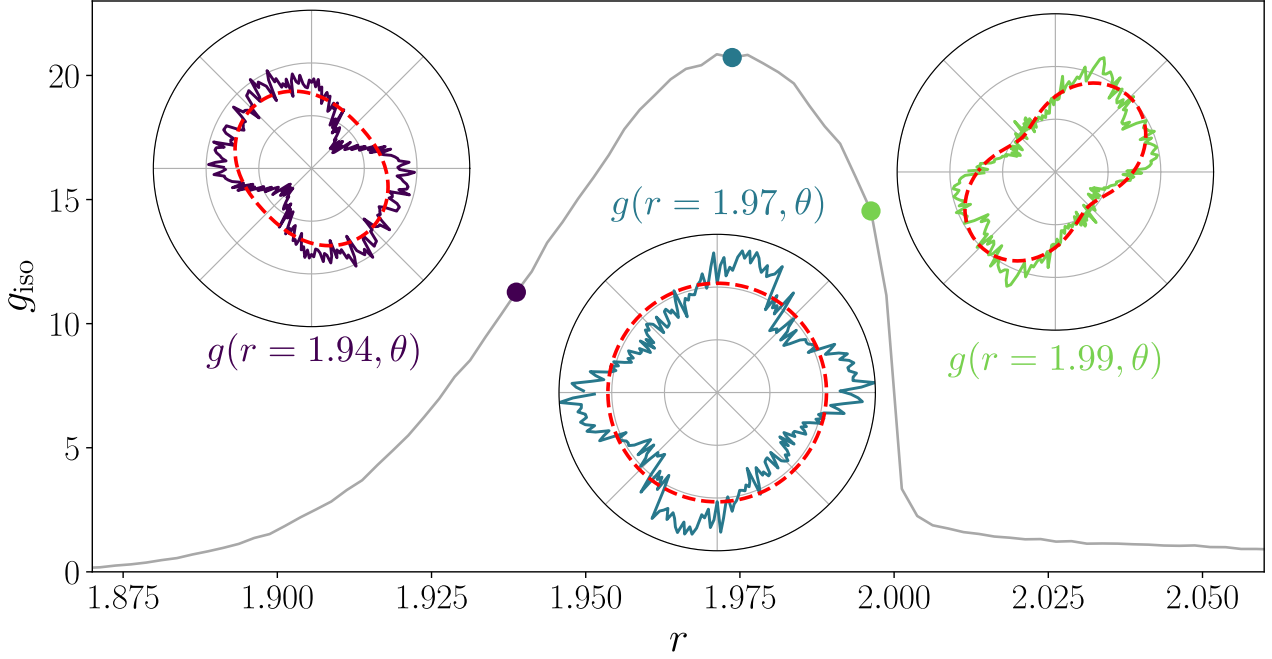


FIGURE 2.5 – **Comparaison numérique de g avec sa paramétrisation (2.9).** Nous comparons $g(r, \theta)$ (représentation polaire en trait plein) pour différentes valeurs de r dans le pic de premiers voisins de g_{iso} (courbe grise) à sa paramétrisation (2.9) (représentation polaire, courbe rouge en pointillés) à partir des données de simulation à $\phi = 0.872$ et $\dot{\gamma}\tau_0 = 5 \times 10^{-4}$.

tenseurs définis par g entre eux.

Nous avons mis en évidence dans la section précédente la prédominance de l'ordre 2 dans l'anisotropie de la microstructure à faibles taux de cisaillement. Nous considérerons donc ici le cas de déformations suffisamment faibles pour que l'on puisse identifier l'anisotropie de la fonction de corrélation de paire à une harmonique d'ordre 2. Les approches pseudomicroscopiques et par passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique que nous avons présentées en Sec. 2.3 de l'introduction de cette thèse utilisent également une paramétrisation de la fonction de distribution de l'orientation des contacts par une harmonique d'ordre 2. Il s'agit du développement en harmoniques sphériques de [Ken-Ichi, 1984], arrêté à l'ordre 2. Dans cette approche, l'anisotropie est paramétrée par un tenseur de structure \mathbf{Q} qui permet de relier la microstructure à une grandeur macroscopique. Ce développement peut être adapté au cas de la fonction de corrélation de paire, qui en plus de contenir une information sur l'orientation des contacts, comme la fonction de distribution dont il est question dans le développement de Ken-Ichi, contient une information sur la longueur des contacts. Nous souhaitons écrire g sous la forme

$$g(\mathbf{r}) \approx g_{\text{iso}}(r) + \psi(r) (\mathbf{Q} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r), \quad (2.5)$$

avec $r = |\mathbf{r}|$, $\mathbf{e}_r = \mathbf{r}/r$ et ψ une fonction décrivant la dépendance en r de l'anisotropie. Cette fonction n'est pas présente dans le développement originel de Ken-Ichi, puisque la fonction de distribution considérée ne dépendait pas de r . Elle est liée au coefficient α_2 du développement de Fourier angulaire de g par la relation $|\psi(r)| = 2|\alpha_2|/|\mathbf{Q}|$, avec $|\mathbf{Q}| = \sqrt{\mathbf{Q} : \mathbf{Q}}$. Afin de déterminer entièrement la paramétrisation de l'isotropie de g , il est donc nécessaire de se donner la forme de \mathbf{Q} et ψ . Le tenseur de structure \mathbf{Q} peut être défini par analogie avec le développement de Ken-Ichi :

$$\mathbf{Q} = \frac{\rho^2}{2} \int_{|\mathbf{r}| \leq 2} \left[\mathbf{r} \otimes \mathbf{r} - \frac{|\mathbf{r}|^2}{2} \mathbb{I} \right] g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.6)$$

qui est par définition un tenseur symétrique de trace nulle et constitue la mesure la plus simple de l'anisotropie du système.

Il est plus compliqué d'explicitier la forme de $\psi(r)$. Nous en donnons une forme approchée en considérant que la couronne de premiers voisins du système, sous l'effet d'une petite déformation, se déforme elle-même

selon une harmonique d'ordre 2, la position du premier voisin dans la direction θ étant donnée par

$$r_0(\theta) = r^*(1 - \alpha (\mathbf{Q} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r)), \quad (2.7)$$

où \mathbf{e}_r est le vecteur unitaire dans la direction de θ , r^* est la position moyenne du pic de premiers voisins et α un facteur de proportionnalité que nous déterminerons plus tard par autocohérence (Fig. 2.4). Nous supposons par ailleurs que la déformation totale de la fonction de corrélation de paire se déduit par une déformation homothétique à la déformation de la couronne de premiers voisins de sa partie isotrope :

$$g(\mathbf{r}) = g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{r_0(\theta)/r^*} \right). \quad (2.8)$$

En développant cette expression au premier ordre en \mathbf{Q} , nous obtenons alors

$$g(\mathbf{r}) \approx g_{\text{iso}}(r) + \alpha r g'_{\text{iso}}(r) (\mathbf{Q} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r), \quad (2.9)$$

d'où l'expression explicite $\psi(r) = \alpha r g'_{\text{iso}}(r)$ qui suit par comparaison avec l'équation (2.5). Cette forme de ψ permet en particulier d'expliquer l'observation de la section précédente selon laquelle que le module de α_2 s'annule proche du maximum de g_{iso} . Cette approximation conduit à un résultat fort puisque la partie isotrope de g_{iso} détermine désormais également la forme de la dépendance en r de l'anisotropie. En injectant l'expression (2.9) de $g(\mathbf{r})$ dans la définition (2.6) de \mathbf{Q} , nous obtenons par ailleurs une condition d'autocohérence fixant la valeur de α par la relation

$$\alpha \int_0^2 r^4 g'_{\text{iso}}(r) dr = \frac{4}{\pi \rho^2}. \quad (2.10)$$

Nous avons représenté en Fig. 2.5 les orbites $g(r, \theta)$ pour différentes valeurs de r et les avons comparées avec les orbites prédites par la paramétrisation (2.9) pour les données de simulations. Nous constatons que pour des valeurs de r suffisamment en amont ou en aval du sommet du pic de premiers voisins de g_{iso} , la paramétrisation de g par une harmonique d'ordre 2 capture assez bien le comportement observé dans les simulations. Pour des valeurs de r très proches du sommet du pic de premiers voisins, en revanche, comme observé dans la section précédente, la contribution d'ordre 2 devient très faible (ce qui est compatible avec une fonction ψ proportionnelle à la dérivée de g_{iso}) et les contributions d'ordres supérieurs dominant. Ce dernier cas de figure représente toutefois un intervalle très réduit de distances interparticulaires, comme nous le constatons déjà en Fig. 3.15, nous pouvons donc raisonnablement espérer que la paramétrisation (2.9) nous permette de capturer l'essentiel de la physique de notre système. En particulier, nous capturons bien l'inversion d'axes principaux de la microstructure correspondant au changement brutal de la phase de α_2 constaté en Fig. 2.3 (il s'agit ici d'un changement de signe de la fonction ψ). Cette approximation est valable pour des déformations suffisamment faibles et perd de sa pertinence à plus grandes déformations : dans le cas du cisaillement simple, à taux de cisaillement élevés, $|\alpha_2|$ ne s'annule plus au maximum de g_{iso} , ce qui est en contradiction avec la paramétrisation de l'anisotropie par la dérivée de g_{iso} . Par ailleurs, comme nous l'observons en Fig. 2.3, la phase de α_2 dans ce régime ne change plus aussi brutalement et commence à faire apparaître une dépendance en r incompatible avec une paramétrisation de l'anisotropie en $\mathbf{Q} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r$.

2.2.2 Expression des tenseurs définis comme une intégrale de g

En utilisant l'approximation (2.9), nous exprimons maintenant en fonction de Σ tous les tenseurs apparaissant dans le système d'équations (1.49),(1.50) et qui sont définis comme des intégrales de g . Nous supposons que nous sommes suffisamment loin du jamming et dans un régime de déformations suffisamment faibles pour que l'ensemble de la couronne de premiers voisins déformée soit au contact de la particule centrale (Fig. 2.4), de façon à ce que toutes les directions contribuent aux intégrales sur g au contact. Pour aller plus loin, nous aurons besoin des propriétés suivantes, dont la démonstration peut être trouvée en Annexe A, pour toute paire de tenseurs symétriques de trace nulle \mathbf{A} et \mathbf{B} :

$$\int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) d\theta = \mathbf{0}, \quad (2.11)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = 0, \quad (2.12)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \frac{\pi}{2} \mathbf{A}, \quad (2.13)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \frac{\pi}{2} (\mathbf{A} : \mathbf{B}), \quad (2.14)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \mathbf{0}. \quad (2.15)$$

En utilisant ces propriétés, nous obtenons une relation linéaire entre la partie déviatorique du tenseur des contraintes et le tenseur de structure, ainsi qu'une expression pour la pression :

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \left(\frac{\alpha\pi\rho^2}{4} \int_0^2 r^3 f(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \mathbf{Q} \equiv k\mathbf{Q}, \quad (2.16)$$

$$p = -\frac{\pi\rho^2}{2} \int_0^2 r^2 f(r) g_{\text{iso}}(r) dr. \quad (2.17)$$

Nous obtenons également les expressions suivantes pour les tenseurs $\boldsymbol{\Theta}$, $\boldsymbol{\Phi}$, $\boldsymbol{\Xi}$ et $\boldsymbol{\Pi}$ définis en Eqs. (1.44), (1.45), (1.37) et (1.38),

$$\boldsymbol{\Theta}' = \left(\frac{\pi\rho^2}{4} \int_0^2 r^3 f'(r) g_{\text{iso}}(r) dr \right) \mathbf{E}^\infty, \quad (2.18)$$

$$\text{tr } \boldsymbol{\Theta} = \left(\frac{\pi\alpha\rho^2}{4k} \int_0^2 r^4 f'(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) (\mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}'), \quad (2.19)$$

$$\boldsymbol{\Phi}' = \left(\frac{\pi\rho^2}{4} \int_0^2 r^2 f(r) g_{\text{iso}}(r) dr \right) \mathbf{E}^\infty = -\frac{p}{2} \mathbf{E}^\infty, \quad (2.20)$$

$$\text{tr } \boldsymbol{\Phi} = \left(\frac{\pi\alpha\rho^2}{4k} \int_0^2 r^3 f(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) (\mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}'), \quad (2.21)$$

$$\boldsymbol{\Xi}' = \left(\frac{\pi\alpha\rho^2}{4k} \int_0^2 r^2 f^2(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \boldsymbol{\Sigma}', \quad (2.22)$$

$$\text{tr } \boldsymbol{\Xi} = \pi\rho^2 \int_0^2 r f^2(r) g_{\text{iso}}(r) dr, \quad (2.23)$$

$$\boldsymbol{\Pi}' = \left(\frac{\pi\alpha\rho^2}{4k} \int_0^2 r^3 f(r) f'(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \boldsymbol{\Sigma}', \quad (2.24)$$

$$\text{tr } \boldsymbol{\Pi} = \pi\rho^2 \int_0^2 r^2 f(r) f'(r) g_{\text{iso}}(r) dr. \quad (2.25)$$

2.3 Fermeture de Kirkwood et expression des tenseurs définis par une intégrale de g_3

2.3.1 Fermeture de g_3

Pour fermer le système (1.49), (1.50) nous devons également relier les tenseurs $\boldsymbol{\Gamma}$ et $\boldsymbol{\Upsilon}$ à $\boldsymbol{\Sigma}$. Ces deux tenseurs étant définis comme une intégrale de g_3 , le moyen le plus simple de les relier est de se donner une relation de g_3 en fonction de g . La fermeture de g_3 par g est un problème qui a été largement étudié par la physique des liquides. La littérature sur le sujet fait apparaître essentiellement trois types de relation de fermeture couramment utilisés :

Approximation de Superposition de Kirkwood (ASK)

Cette approximation a été introduite par J.J.G. Kirkwood dans un célèbre article de 1935 [Kirkwood, 1935]. Dans cette fermeture, la fonction g_3 , qui décrit la probabilité de trouver trois particules dans une configuration

donnée, s'écrit simplement comme le produit des probabilités des configurations deux à deux des trois particules :

$$g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g(\mathbf{r})g(\mathbf{r}')g(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \quad (2.26)$$

Cette relation de fermeture s'obtient en considérant un potentiel d'interaction moyen additif par paire, $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$, tel que $g(\mathbf{r}) = e^{-\beta V_{\text{eff}}(\mathbf{r})}$ et en négligeant tous les termes d'interactions à plus de deux particules dans le développement de ce dernier. Cette approximation est généralement utilisée dans les liquides de sphères dures car elle permet de respecter la non-interpénétrabilité des sphères. Elle est particulièrement bonne pour les systèmes dilués mais viole la relation (1.12) entre g_3 et g (l'erreur commise sur cette relation varie cependant en $1/N$ et peut donc être considérée comme négligeable).

ASK modifiée

La relation de fermeture précédente peut être améliorée par l'ajout d'un terme exponentiel permettant de prendre en compte les interactions à plus de deux particules dans le développement du potentiel de force moyen à 3 corps :

$$g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g(\mathbf{r})g(\mathbf{r}')g(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \exp(h(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \rho)). \quad (2.27)$$

Pour des liquides à l'équilibre, il existe plusieurs choix pour la fonction h dans la littérature [Meeron, 1957, Salpeter, 1958, Abe, 1959, Rice and Lekner, 1965], la plupart reposant sur des développements en clusters de Mayer dans le développement du potentiel d'interaction moyen. Cette correction permet d'améliorer cette approximation pour de plus grandes densités. Pour les suspensions, ce genre de relation de fermeture a déjà été utilisé dans des travaux similaires au nôtre, notamment pour résoudre la dynamique de la fonction de corrélation de paire dans le cas de suspensions denses de sphères dures dans [Nazockdast and Morris, 2012b].

L'approximation de convolution (AC)

Cette approximation est généralement utilisée dans des fluides avec des interactions de longue portée, c'est-à-dire principalement dans les fluides avec des interactions coulombiennes [Jackson and Feenberg, 1962, O'Neil and Rostoker, 1965, Ichimaru, 1970]. Elle s'écrit simplement dans le domaine spectral :

$$S_3(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = S(\mathbf{k})S(\mathbf{k}')S(\mathbf{k} + \mathbf{k}'), \quad (2.28)$$

où S est le facteur de structure d'ordre deux (lié à la transformée de Fourier de g) et S_3 celui d'ordre 3 (lié à la transformée de Fourier de g_3). Cette relation de fermeture s'écrit de la sorte dans l'espace réel :

$$g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g(\mathbf{r})g(\mathbf{r}') + g(\mathbf{r})g(\mathbf{r} + \mathbf{r}') + g(\mathbf{r}')g(\mathbf{r} + \mathbf{r}') + \rho \int g(\mathbf{r}'')g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'')g(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')d\mathbf{r}'' \quad (2.29)$$

Les deux premières relations de fermeture sont plus adaptées à notre cas d'étude à la fois à cause du système considéré (notre système ne présente pas d'interactions à longue portée) et parce que leur expression dans l'espace réel où nous faisons nos calculs sont plus à même de nous permettre de mener des calculs. Le problème de ces fermetures issues de la physique des liquides repose dans le fait qu'elles aient été développées pour des systèmes dilués alors que nous travaillons dans notre cas avec des systèmes denses. Nous pourrions ainsi être tentés de nous orienter vers une relation de fermeture de type ASK modifiée mais le gain en précision pour les systèmes denses est bien plus faible que la perte en tractabilité des calculs, la fonction h apparaissant dans la fermeture (2.27) étant par ailleurs généralement une fonction tabulée. Le fait d'utiliser une fermeture pertinente uniquement pour des systèmes dilués n'est par ailleurs dans notre cas pas aussi pénalisant que nous pourrions le penser. En effet, nous avons besoin, en pratique, que la fermeture soit approximativement valable uniquement dans les situations où deux particules sont en contact avec une même troisième particule. Dans les autres cas, le terme de force est nul, de sorte que ces cas ne contribuent pas aux intégrales définissant Γ et Υ .

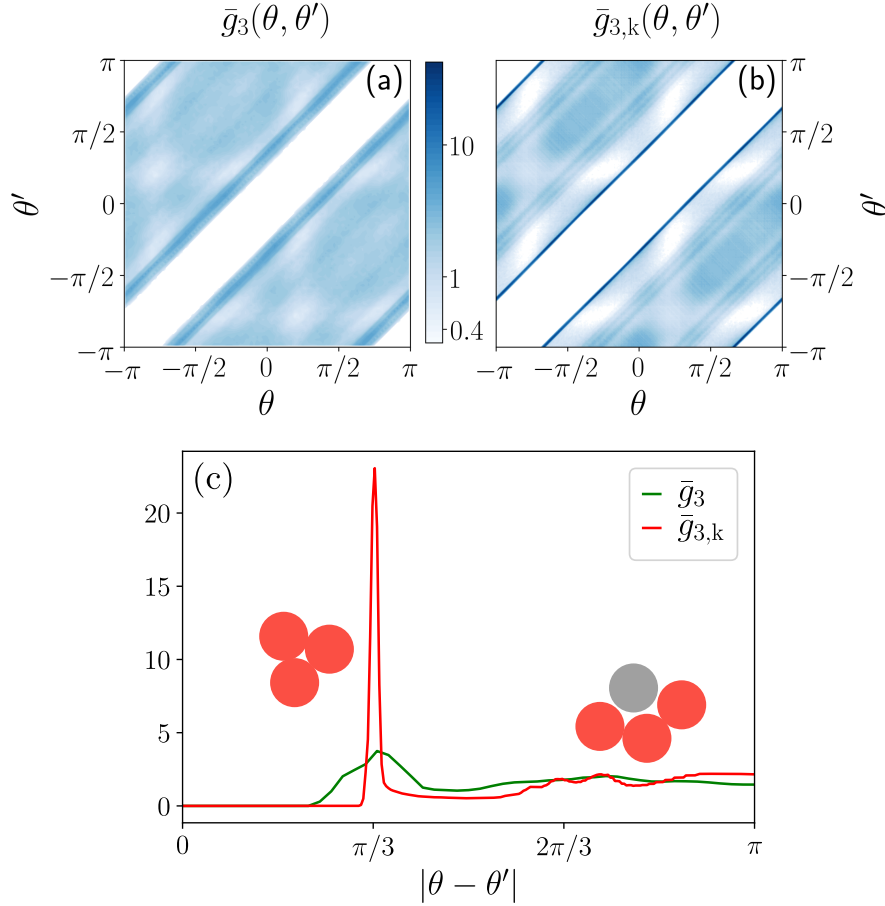


FIGURE 2.6 – **Test numérique de la fermeture de Kirkwood** dans des simulations numériques de suspensions de fraction surfacique $\phi = 0.872$ cisainées à $\dot{\gamma}\tau_0 = 5 \times 10^{-4}$ (voir le texte pour les détails numériques). (a) Carte de couleurs de $\bar{g}_3(\theta, \theta')$ (voir Eq. 2.30 pour la définition). Les zones blanches correspondent à $\bar{g}_3 = 0$. (b) Carte de couleurs de l’approximation de Kirkwood $\bar{g}_{3,K}(\theta, \theta')$ (voir Eq. 2.31 pour la définition). (c) Évolution de \bar{g}_3 et de son approximation de Kirkwood $\bar{g}_{3,K}$ en fonction de $|\theta - \theta'|$ en moyenne sur toutes les valeurs de θ .

Nous avons testé numériquement la fermeture de Kirkwood dans nos simulations. Pour cela nous définissons la moyenne sur les contacts de $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$,

$$\bar{g}_3(\theta, \theta') = \iint_{r < 2, r' < 2} r dr r' dr' g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (2.30)$$

avec $\theta = \arg(\mathbf{r})$ et $\theta' = \arg(\mathbf{r}')$, ainsi que celle de la fermeture de Kirkwood,

$$\bar{g}_{3,K}(\theta, \theta') = \iint_{r < 2, r' < 2} r dr r' dr' g(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}') g(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.31)$$

Nous montrons dans la Fig. 2.6 une comparaison entre la fonction de corrélation mesurée $\bar{g}_3(\theta, \theta')$ et son approximation de fermeture de Kirkwood $\bar{g}_{3,K}(\theta, \theta')$. La fermeture de Kirkwood capture assez bien les caractéristiques qualitatives de \bar{g}_3 , telles que les maxima et minima locaux, comme le montrent les Figs. 2.6a-b. Dans la Fig. 2.6c, en utilisant la quasi-symétrie autour de l’axe $\theta = \theta'$, nous faisons la moyenne de \bar{g}_3 et de $\bar{g}_{3,K}$ sur θ , fonctions de $|\theta - \theta'|$ uniquement. Nous observons que la fermeture de Kirkwood surestime à la fois la valeur du pic de \bar{g}_3 autour de $|\theta - \theta'| = \pi/3$ (qui correspond à trois particules en contact les unes avec les autres, comme représenté dans la Fig. 2.6c) et sous-estime sa largeur, de sorte que le poids de ce pic est raisonnablement bien rendu. Cette fermeture donne par ailleurs une bonne approximation de la probabilité d’avoir trois particules i, j et k telles que i soit en contact avec j et k , j et k étant séparées par au moins une autre particule l , ce qui correspond à $|\theta - \theta'| \gtrsim 2\pi/3$.

2.3.2 Expression des tenseurs définis par une intégrale de g_3

En remplaçant g par son expression (2.9) dans la relation de fermeture (2.26) et en utilisant l'équation (2.16) pour relier Σ' et Q , nous sommes maintenant capables de relier Γ et Υ à Σ' (les détails du calcul peuvent être trouvés en Annexe B) :

$$\Gamma' = \Gamma_1 \Sigma' + \frac{\Gamma_3}{2} (\Sigma' : \Sigma') \Sigma', \quad (2.32)$$

$$\text{tr } \Gamma = 2\Gamma_0 + \Gamma_2 (\Sigma' : \Sigma'), \quad (2.33)$$

$$\Upsilon' = \Upsilon_1 \Sigma' + \frac{\Upsilon_3}{2} (\Sigma' : \Sigma') \Sigma', \quad (2.34)$$

$$\text{tr } \Upsilon = 2\Upsilon_0 + \Upsilon_2 (\Sigma' : \Sigma'), \quad (2.35)$$

où Γ_i et Υ_i sont des coefficients dont les expressions sont données en Annexe B.

En remplaçant les tenseurs Θ , Φ , Ξ , Π , Γ et Υ par leurs expressions dans les équations d'évolution (1.49) pour Σ' et (1.50) pour p , nous obtenons :

$$\dot{\Sigma}' = \kappa \{g_{\text{iso}}\} \mathbf{E}^\infty + \Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty + [\beta \{g_{\text{iso}}\} - \xi \{g_{\text{iso}}\} (\Sigma' : \Sigma')] \Sigma', \quad (2.36)$$

$$\dot{p} = \zeta \{g_{\text{iso}}\} (\mathbf{E}^\infty : \Sigma') + \eta \{g_{\text{iso}}\} + \chi \{g_{\text{iso}}\} (\Sigma' : \Sigma'), \quad (2.37)$$

où les coefficients κ , β , ξ , ζ , η , et χ sont des fonctionnelles de g_{iso} (et peuvent donc présenter une dépendance implicite en temps) s'exprimant de la sorte :

$$\kappa \{g_{\text{iso}}\} = \frac{\pi \rho^2}{4} \int_0^2 r^3 f'(r) g_{\text{iso}}(r) dr - \frac{3p}{2}, \quad (2.38)$$

$$\beta \{g_{\text{iso}}\} = -\frac{\pi \alpha \rho^2}{4k} \int_0^2 r^2 (f^2(r) + r f(r) f'(r)) g'_{\text{iso}}(r) dr - \Gamma_1 - \Upsilon_1 \quad (2.39)$$

$$\xi \{g_{\text{iso}}\} = \frac{\Gamma_3}{2} + \frac{\Upsilon_3}{2}, \quad (2.40)$$

$$\zeta \{g_{\text{iso}}\} = \frac{\pi \alpha \rho^2}{8k} \int_0^2 r^3 (f(r) - r f'(r)) g'_{\text{iso}}(r) dr - 1, \quad (2.41)$$

$$\eta \{g_{\text{iso}}\} = \frac{\pi \rho^2}{2} \int_0^2 r (f^2(r) + r f(r) f'(r)) g_{\text{iso}}(r) dr + \Gamma_0 + \Upsilon_0, \quad (2.42)$$

$$\chi \{g_{\text{iso}}\} = \frac{\Gamma_2}{2} + \frac{\Upsilon_2}{2} \quad (2.43)$$

2.4 Paramétrisation de la partie isotrope de la fonction de corrélation de paire

Si tous les tenseurs s'expriment désormais en fonction de Σ , les préfacteurs intervenant sont définis comme des intégrales de g_{iso} qui possède sa dynamique propre. Notre système n'est donc toujours pas fermé. La dernière étape pour le fermer est d'évaluer les coefficients κ , β , \dots , χ définis en (2.38)–(2.43) en se donnant une forme pour la partie isotrope de la fonction de corrélation de paire $g_{\text{iso}}(r)$. Une possibilité serait de mesurer $g_{\text{iso}}(r)$ dans des simulations de dynamique moléculaire et d'évaluer les coefficients numériquement. Cependant, nous préférons adopter ici une solution analytique en utilisant une représentation schématique simple de $g_{\text{iso}}(r)$. En nous inspirant de la forme caractéristique de la fonction de corrélation de paire observée dans nos simulations de dynamique moléculaire, nous approximons $g_{\text{iso}}(r)$ par un pic de Dirac à la position $r^* \leq 2$ s'ajoutant à une fonction de Heaviside au-dessus de r^* :

$$g_{\text{iso}}(r) = \frac{A}{r^*} \delta(r - r^*) + H(r - r^*). \quad (2.44)$$

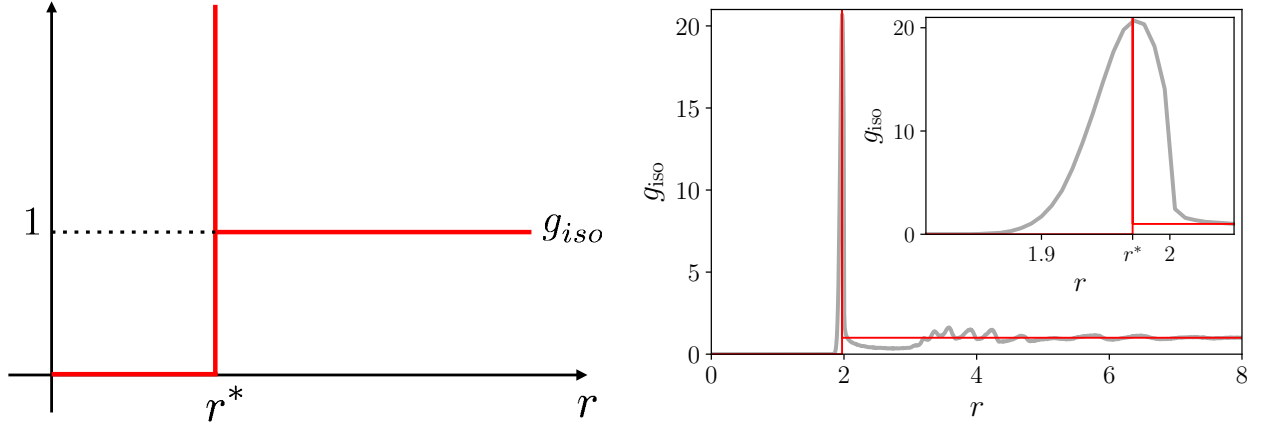


FIGURE 2.7 – **Paramétrisation de la partie isotrope de la fonction de corrélation de paire** : (gauche) Représentation schématique de la paramétrisation de $g_{iso}(r)$ donnée par (2.44). (droite) Comparaison de notre paramétrisation de $g_{iso}(r)$ (en rouge) avec la partie isotrope d'une fonction de corrélation de paire caractéristique issue des mêmes simulations numériques que dans la Fig. 2.6 (en gris). Encart : zoom sur le pic de $g_{iso}(r)$.

Le pic de Dirac modélise le pic de premiers voisins observé dans la fonction de corrélation de paire, tandis que la fonction de Heaviside modélise le fond de densité diffus au-delà de la première couche de voisin, supposée sans structure (c'est-à-dire que le pic de seconds voisins, dont l'amplitude est faible dans les simulations numériques, n'est pas pris en compte). Nous supposons qu'il n'y a pas de particule à une distance inférieure au pic du premier voisin, donc $g_{iso}(r) = 0$ pour $r < r^*$. Le préfacteur A/r^* devant la distribution de Dirac permet de rendre compte d'un nombre constant de particules dans le pic de premiers voisins, égal à $2\pi\rho A$. La position r^* du pic de premiers voisins est autorisée à varier avec le temps. En supposant que le nombre moyen de particules dans le pic est égal à 6 [Schreck et al., 2011], nous fixons la valeur de A à

$$A = \frac{3}{\pi\rho}. \quad (2.45)$$

Avec cette paramétrisation de $g_{iso}(r)$, la relation d'autocohérence (2.10) déterminant α devient :

$$\alpha = \frac{4}{\pi\rho^2 r^{*2} (r^{*2} - 4A)}. \quad (2.46)$$

Les équations (2.44) et (2.46) nous permettent d'exprimer les coefficients κ , β , ξ , ζ , η et χ en fonction de r^* , sous réserve de se donner une expression explicite de la force de répulsion $f(r)$. Nous choisissons une expression simple en supposant une force linéaire (sans dimension) $f(r) = r - 2$ (notre approche demeure cependant valable pour une force plus générale). Nous obtenons alors l'expression suivante pour la pression en fonction de r^* ,

$$p = \frac{\pi\rho^2}{24} (r^* - 2) \left(3r^{*3} - 2r^{*2} - 4(3A + 1)r^* - 8 \right). \quad (2.47)$$

Nous obtenons également des expressions explicites (mais longues) en termes de r^* pour les coefficients κ , β , \dots , χ apparaissant dans les équations d'évolution (2.36) et (2.37). Les expressions complètes de ces coefficients sont données en Annexe C.

Différentes stratégies peuvent être mises en place à ce stade. La première consisterait à utiliser (2.47) pour transformer l'équation d'évolution (2.37) sur p en une équation d'évolution sur r^* , ce qui nous donnerait deux équations d'évolution couplées sur Σ' et r^* pouvant être intégrées numériquement. Nous préférons toutefois ici conserver la pression p comme variable dynamique pertinente, et développer l'équation (2.47) au premier ordre

en fonction du petit paramètre $2 - r^*$, qui est lui-même proportionnel à p au premier ordre. Cela revient à faire un développement au premier ordre en p de nos coefficients en supposant que la pression est faible (c'est-à-dire que le système est suffisamment proche du jamming). Les détails de ces développements et des expressions obtenues pour les coefficients en fonction de p sont donnés dans l'Annexe C. Les équations d'évolution couplées (2.36) et (2.37) sur Σ' et p sont désormais fermées et notre système peut s'écrire :

$$\dot{\Sigma}' = \kappa(p)E^\infty + \Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty + [\beta(p) - \xi(p) (\Sigma' : \Sigma')] \Sigma', \quad (2.48)$$

$$\dot{p} = \zeta(p) (E^\infty : \Sigma') + \eta(p) + \chi(p) (\Sigma' : \Sigma'). \quad (2.49)$$

Il est intéressant de remarquer que tous les tenseurs et les invariants scalaires permis en deux dimensions par l'invariance sous changement de référentiel [Hand, 1962] sont présents dans les équations d'évolution de Σ' et p , à l'exception de l'invariant $(E^\infty : E^\infty)$. Notons que les termes non-linéaires en Σ' et p proviennent exclusivement de la fermeture des termes de corrélation à 3 corps. Une première analyse des différents termes apparaissant dans le système d'équations obtenu nous permet de dégager quelques généralités sur la physique de notre système. Le terme $[\beta(p) - \xi(p) (\Sigma' : \Sigma')] \Sigma'$ apparaissant dans l'équation (2.36) représente la contribution des forces élastiques interparticulaires. Seules les interactions à 3 corps contribuent à la partie non-linéaire de ce terme qui joue un rôle crucial pour l'apparition d'une contrainte seuil comme nous le discuterons en détail dans le Chap. 3. Ce terme étant proportionnel à Σ' , il ne peut faire varier que l'amplitude $\sqrt{\Sigma' : \Sigma'}$ de ce tenseur et non son orientation.

Le terme d'advection $\Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty$ est quant à lui un terme classique de couplage avec l'écoulement apparaissant dans la plupart des modèles constitutifs cherchant à décrire l'évolution temporel du tenseur des contraintes. Il s'agit d'un terme purement rotationnel qui ne peut faire varier l'amplitude de Σ' . En effet, $\Sigma' : (\Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty) = \text{tr}(\Sigma' \cdot \Omega^\infty \cdot \Sigma') - \text{tr}(\Sigma' \cdot \Omega^\infty \cdot \Sigma') = 0$, si bien qu'en contractant l'équation (2.36) avec Σ' , il est possible de montrer que :

$$\partial_t (\Sigma' : \Sigma') = 2\kappa(p) (\Sigma' : E^\infty) + 2 [\beta(p) - \xi(p) (\Sigma' : \Sigma')] (\Sigma' : \Sigma'). \quad (2.50)$$

Nous constatons ainsi que le terme d'advection rotationnelle n'intervient pas dans la dynamique de $\Sigma' : \Sigma'$, contrairement au terme proportionnel à E^∞ , provenant lui aussi des interactions avec l'écoulement. Ce terme ne partageant *a priori* pas les mêmes axes que Σ' , il contribue aussi à la réorientation de Σ' . Le tenseur des taux de déformation E^∞ contribue également à faire varier la pression du système à travers le terme en $(\Sigma' : E^\infty)$ apparaissant dans l'équation (2.37).

2.5 Réduction à une équation tensorielle unique

La dynamique de Σ' laisse apparaître deux échelles de temps. En effet, la dynamique d'alignement de Σ' sur E^∞ est dirigée par des termes proportionnels au taux de déformation appliqué au système tandis que la dynamique de l'amplitude de Σ' (2.50) laisse apparaître des termes d'ordre 0 par rapport au taux de déformation. Pour de faibles taux de déformations, la dynamique de rotation de Σ' est donc lente par rapport à celle de l'amplitude. Il s'agit d'une conséquence directe de la relaxation rapide des forces élastiques déséquilibrées par rapport à l'échelle de temps de l'écoulement. La dynamique de la pression p reste elle aussi rapide pour de faibles taux de cisaillement par rapport à la dynamique d'orientation de Σ' puisqu'elle fait apparaître elle aussi des termes d'ordre 0 en la déformation. La dynamique de p est donc rapide par rapport à la dynamique globale de Σ' . Ce faisant, nous pouvons profiter de cette séparation d'échelles de temps pour réduire notre modèle constitutif à la seule équation tensorielle (2.36) en considérant que la pression atteint instantanément sa valeur stationnaire.

Il serait possible de prendre en compte les contributions du tenseur des taux de déformation (supposé petit) dans l'évaluation de la valeur stationnaire de la pression. Toutefois, cette prise en compte mène à une contrainte de cisaillement décroissante dans l'état stationnaire comme nous le discuterons plus en détail dans le Chap. 3. Nous négligeons donc l'influence de E^∞ sur p dans l'état stationnaire, en considérant qu'à faibles taux de déformation, la pression dépend essentiellement de la fraction surfacique du système. Nous cherchons donc à obtenir une équation d'état $p(\phi)$, où ϕ est la fraction surfacique du système. Sous cette hypothèse, l'évaluation de $\Sigma' : \Sigma'$ dans l'état stationnaire de l'équation (2.36) conduit à

$$\Sigma' : \Sigma' = \frac{\beta}{\xi}, \quad (2.51)$$

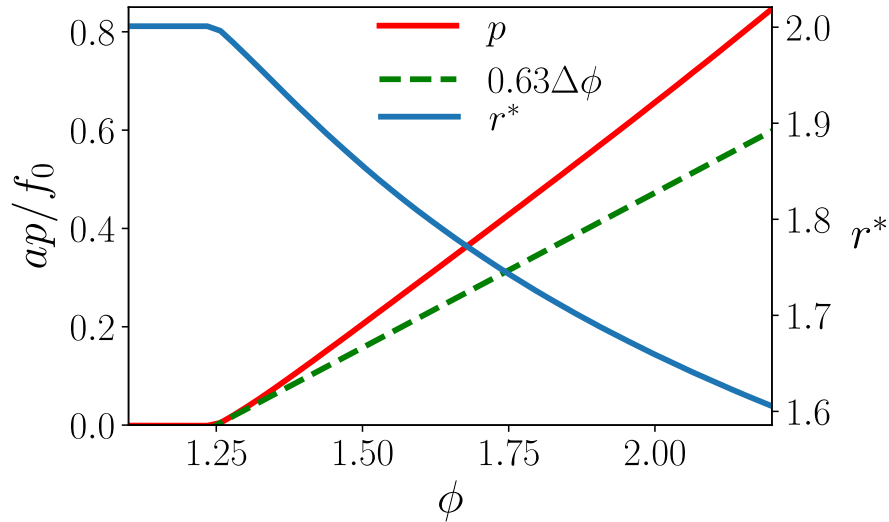


FIGURE 2.8 – **Équation d'état $p(\phi)$** . Nous représentons en trait plein rouge la loi $p(\phi)$ obtenue numériquement par l'intermédiaire de r^* (r^* est représenté en trait plein sur l'axe de droite) comparée à l'expression analytique (2.53) obtenue pour $p(\phi)$.

si $\beta, \xi > 0$ (sinon $\Sigma' : \Sigma' = 0$ dans l'état stationnaire). En injectant l'expression (2.51) dans l'équation stationnaire (2.49) pour la pression en absence de déformation, nous obtenons :

$$\eta + \frac{\beta\chi}{\xi} = 0. \quad (2.52)$$

À ce stade, différentes méthodes sont possibles pour obtenir une relation $p(\phi)$. Si nous souhaitons obtenir une relation exacte, nous pouvons utiliser les expressions de β , ξ , η et χ en fonction de r^* (ces expressions peuvent être consultées en Annexe C). Nous obtenons alors une équation sur r^* qui ne peut pas être résolue facilement de façon analytique mais qui peut l'être numériquement. Tous les calculs de coefficients ayant été effectués en supposant $r^* \leq 2$, les valeurs de $r^* > 2$ sont ramenées à 2. En effet, pour $r^* > 2$ toutes les intégrales apparaissant dans les coefficients deviennent nulles puisque r^* n'est pas dans l'intervalle d'intégration. Le système alors obtenu a pour solution dans l'état stationnaire en absence de déformation $p = 0$, ce qui correspond à $r^* = 2$. Nous obtenons ainsi une équation d'état $r^*(\phi)$ tabulée qui peut être transformée en une relation $p(\phi)$ en utilisant la relation (2.47). Il est également possible d'obtenir une approximation analytique de la valeur stationnaire de p proche du jamming, en développant à l'ordre 1 en p le terme de gauche dans l'équation (2.52) et ainsi linéariser cette dernière pour la résoudre pour p . Cela nous donne une expression relativement complexe pour p en fonction de ϕ dans l'état stationnaire qui peut être consultée dans l'Annexe C.

Dans les deux cas (résolution numérique ou analytique), p commence à être non-nulle pour $\phi > \phi_J = 5/4$, où ϕ_J est interprétée comme la fraction surfacique au jamming. En raison des approximations effectuées, la valeur résultante $\phi_J = 1.25$ est environ 50% plus grande que la valeur attendue à deux dimensions. Pour rester cohérent avec notre développement au premier ordre en p , nous développons la relation $p(\phi)$ obtenue au premier ordre en $\phi - \phi_J$:

$$p \approx 0.63 \times (\phi - \phi_J). \quad (2.53)$$

L'expression complète du préfacteur est donnée en Annexe C. Nous avons représenté en Fig. 2.8, l'évolution de p avec ϕ dans l'état stationnaire pour les deux méthodes. L'expression analytique obtenue demeure une bonne approximation de $p(\phi)$ sur une gamme de ϕ satisfaisante. Nous notons par ailleurs que p demeure relativement faible sur une large gamme de ϕ , ce qui nous conforte dans notre choix de développer les coefficients en p . Cette faible croissance de p avec ϕ est due à notre choix d'utiliser une force linéaire. Un potentiel d'interaction plus dur (avec une divergence en 0 par exemple) conduirait certainement à une croissance bien plus rapide de la pression au-dessus du jamming.

Dans cette configuration simplifiée, nous nous retrouvons avec une seule équation tensorielle, l'équation d'évolution (2.36) pour Σ' :

$$\dot{\Sigma}' = \bar{\kappa}(\phi)E^\infty + \Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty + [\bar{\beta}(\phi) - \bar{\xi}(\phi) (\Sigma' : \Sigma')] \Sigma', \tag{2.54}$$

où $\bar{\kappa}(\phi)$, $\bar{\beta}(\phi)$ et $\bar{\xi}(\phi)$ sont la valeur des coefficients κ , β et ξ évalués en $p(\phi)$ en utilisant la relation (2.53). En développant ces coefficients au premier ordre en $\phi - \phi_J$ (pour $\phi > \phi_J$), nous obtenons les expressions numériques explicites suivantes :

$$\bar{\kappa} \approx 1.19 - 0.099 \times (\phi - \phi_J), \tag{2.55}$$

$$\bar{\beta} \approx 0.16 + 0.76 \times (\phi - \phi_J), \tag{2.56}$$

$$\bar{\xi} \approx 0.62 + 0.0054 \times (\phi - \phi_J). \tag{2.57}$$

Là encore les expressions complètes des préfacteurs peuvent être consultées en Annexe C. Les différentes étapes de la dérivation sont résumées de façon schématique en Fig. 2.9.

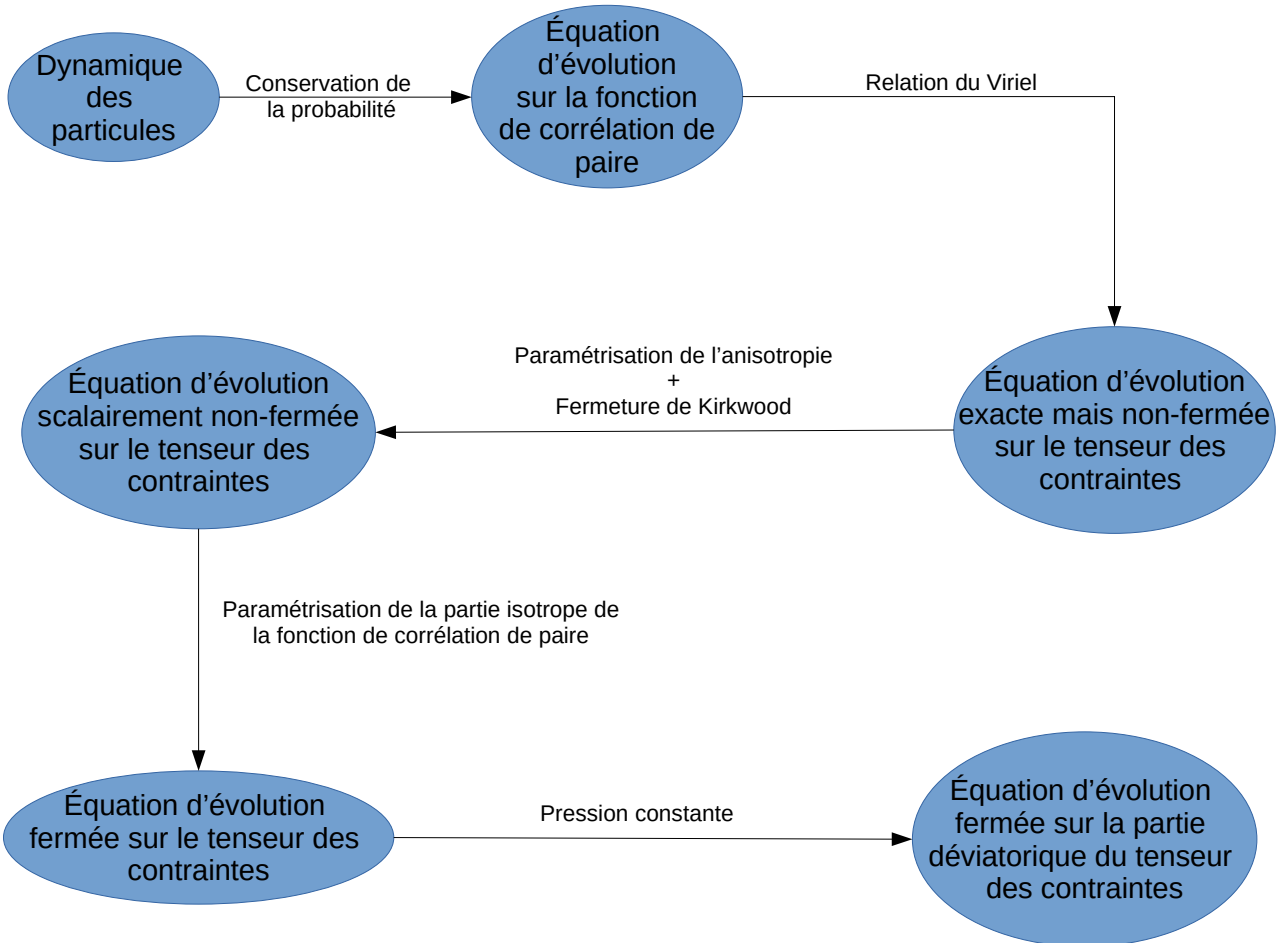


FIGURE 2.9 – Résumé schématique des différentes étapes de la dérivation présentée aux Chap. 1 et 2.

Chapitre 3

Rhéologie 2D au-dessus du jamming

Après avoir présenté la dérivation de notre modèle constitutif dans les chapitres 1 et 2, nous nous proposons d'étudier dans ce chapitre la rhéologie associée à ce modèle. Pour ce faire, nous commençons par introduire une description des écoulements 2D ainsi que l'écriture de notre modèle constitutif dans différents jeux de variables avant d'étudier le comportement de ce dernier pour différents protocoles rhéologiques.

3.1 Écriture du modèle constitutif dans différents jeux de variables en écoulement 2D

3.1.1 Description des écoulements 2D

Afin d'utiliser à plein le caractère tensoriel de notre modèle, nous souhaitons nous doter d'une paramétrisation la plus simple et la plus générale possible pour le tenseur $\nabla \mathbf{u}^\infty$ qui est une entrée de notre modèle apparaissant à travers ses parties symétrique \mathbf{E}^∞ et antisymétrique $\mathbf{\Omega}^\infty$ dans l'Eq. (2.54). L'écoulement étant incompressible ($\text{tr } \nabla \mathbf{u}^\infty = 0$), le tenseur $\nabla \mathbf{u}^\infty$ est en 2D une matrice 2×2 avec 3 coefficients indépendants. L'un des degrés de liberté du tenseur peut être associé à l'intensité de l'écoulement mesurée par $\dot{\Gamma} = \sqrt{\nabla \mathbf{u}^\infty : \nabla \mathbf{u}^\infty}$. Nous introduisons donc le tenseur de forme d'écoulement $\mathbf{K}^\infty = \nabla \mathbf{u}^\infty / \dot{\Gamma}$ qui ne possède plus que deux degrés de liberté (puisque $(\mathbf{K}^\infty : \mathbf{K}^\infty) = 1$) et rend compte de la forme de l'écoulement uniquement. Par ailleurs, il existe un degré de liberté de rotation pour les écoulements en 2D, une rotation de repère ne modifiant pas la forme de l'écoulement. Il est donc possible de décrire la forme d'un écoulement 2D par un seul paramètre. L'équivalence des écoulements par rotation nous autorise à choisir une base particulière pour écrire le tenseur \mathbf{K}^∞ . Dans la base des vecteurs propres de \mathbf{E}^∞ , ce dernier tenseur est diagonal et les coefficients hors diagonaux de $\mathbf{K}^\infty = (\mathbf{E}^\infty + \mathbf{\Omega}^\infty) / \dot{\Gamma}$ sont antisymétriques puisque seul $\mathbf{\Omega}^\infty$, lui-même antisymétrique, contribue aux coefficients hors-diagonaux. En utilisant le fait que $\text{tr } \mathbf{K}^\infty = 0$ et $\mathbf{K}^\infty : \mathbf{K}^\infty = 1$, il est donc possible de paramétriser en toute généralité \mathbf{K}^∞ par un angle φ :

$$\mathbf{K}^\infty = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & -\cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

La transformation $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ correspond à une rotation d'angle π tandis que la transformation $\varphi \rightarrow \pi - \varphi$ correspond à une rotation d'angle $-\pi/2$. L'intervalle $[0, \pi/2]$ est donc suffisant pour décrire l'ensemble des formes d'écoulement en 2D. Pour $\varphi = 0$, \mathbf{K}^∞ décrit un écoulement extensionnel planaire ($\mathbf{\Omega}^\infty = \mathbf{0}$), pour $\varphi = \pi/4$ un écoulement de cisaillement simple ($|\mathbf{E}^\infty| = |\mathbf{\Omega}^\infty|$) et pour $\varphi = \pi/2$ un écoulement rotationnel pur ($\mathbf{E}^\infty = \mathbf{0}$). Nous pourrions utiliser cette paramétrisation de \mathbf{K}^∞ mais dans celle-ci, l'axe élongationnel de \mathbf{E}^∞ est toujours confondu avec l'axe des abscisses de la base choisie, quelque soit la forme de la déformation (puisque nous nous sommes placés dans la base des vecteurs propres de \mathbf{E}^∞). Pour des raisons de convenance nous souhaiterions que l'axe extensionnel de \mathbf{E}^∞ dans le cas d'un écoulement extensionnel planaire soit confondu avec l'axe des abscisses mais que ce dernier fasse un angle de $\pi/4$ dans le cas du cisaillement simple, puisqu'il s'agit de la façon traditionnelle de représenter ces écoulements dans le plan $x - y$. Pour ce faire, nous appliquons

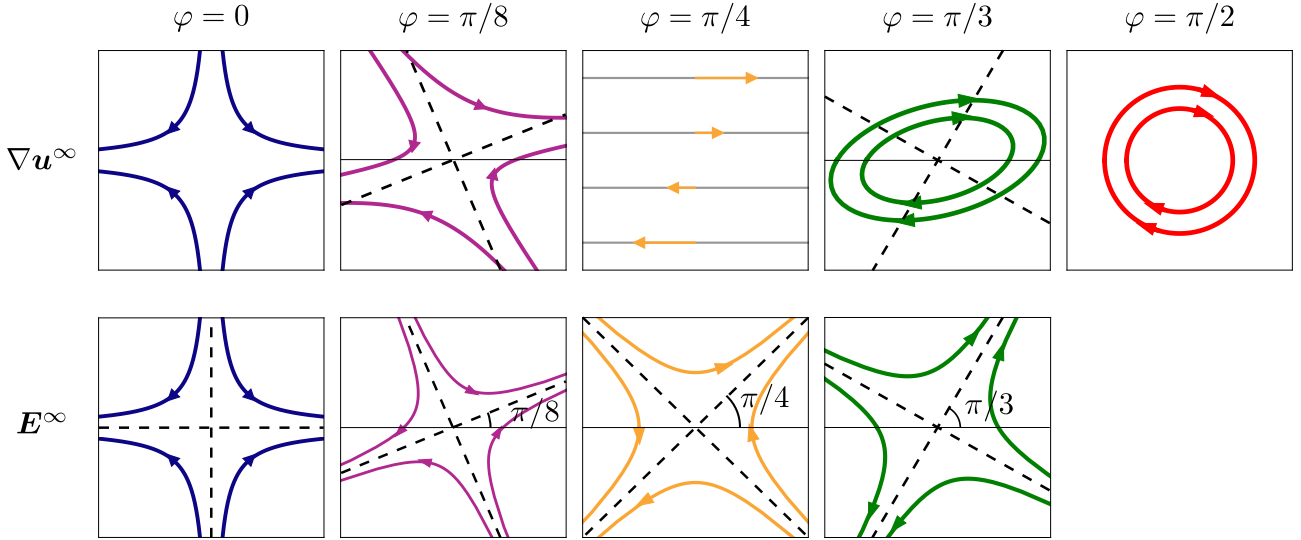


FIGURE 3.1 – **Formes d’écoulements incompressibles 2D pour différentes valeurs de φ .** Les lignes de courant de différents types d’écoulement sont représentées (*haut*) ainsi que celles de la contribution de E^∞ (*bas*). Les axes principaux de E^∞ sont représentés en traits pointillés.

une rotation d’angle φ , ce qui nous donne la paramétrisation suivante pour le tenseur de forme :

$$\mathbf{K}^\infty = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \varphi \cos 2\varphi & 2 \sin \varphi + \sin \varphi \cos 2\varphi \\ \sin \varphi \cos 2\varphi & -\cos \varphi \cos 2\varphi \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Dans cette paramétrisation, nous avons donc la forme suivante pour le tenseur des taux de déformations et le tenseur de vorticité :

$$\mathbf{E}^\infty = \frac{\dot{\Gamma} \cos \varphi}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

$$\mathbf{\Omega}^\infty = \frac{\dot{\Gamma} \sin \varphi}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Ainsi dans cette paramétrisation, l’angle φ contrôle la contribution relative de E^∞ et Ω^∞ à l’écoulement ainsi que l’orientation des axes principaux de E^∞ , ceux-ci faisant un angle φ avec les axes du repère (x, y) . Pour $\varphi < \pi/4$, la contribution de E^∞ est plus importante que celle de Ω^∞ et les lignes de courant sont des courbes ouvertes (il s’agit plus précisément d’hyperboles) et le système est étiré infiniment selon une direction et compressé infiniment selon une autre (Fig. 3.1). Ces directions ne sont pas alignés avec les axes principaux de E^∞ (sauf dans le cas $\varphi = 0$) à cause de l’effet de la vorticité. Dans le cas où $\varphi > \pi/4$, c’est désormais la vorticité qui domine et les lignes de courant sont fermées (il s’agit d’ellipses), E^∞ contribue toutefois à une élongation et une compression finies selon le grand axe et le petit axe de l’ellipse mais ces derniers sont fortement désalignés des axes principaux de E^∞ (Fig. 3.1).

3.1.2 Écriture cartésienne du modèle constitutif

La partie déviatorique du tenseur des contraintes particulières s’écrit dans le repère cartésien (x, y)

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \begin{pmatrix} N_1/2 & \sigma \\ \sigma & -N_1/2 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

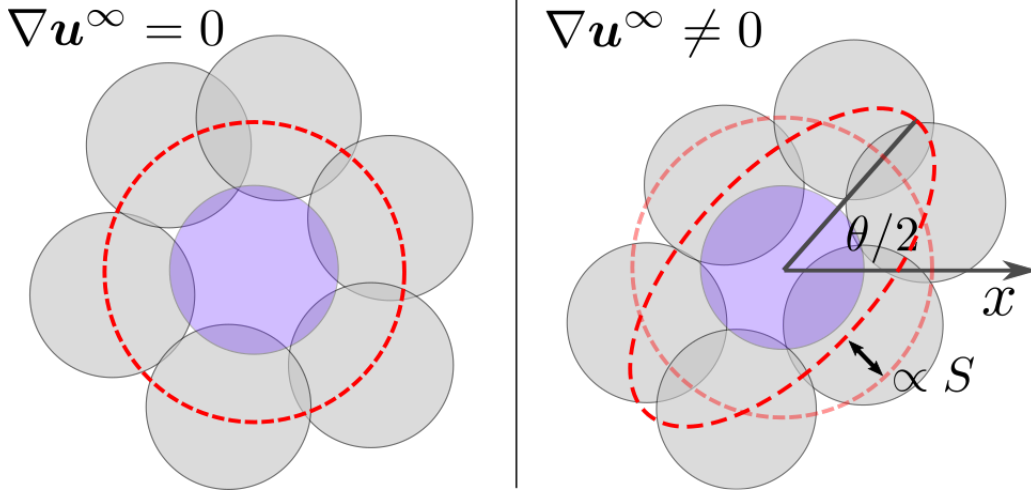


FIGURE 3.2 – **Illustration schématique du lien entre microstructure et coordonnées polaires avec la couronne de premiers voisins.** En l'absence de déformation externe la microstructure est isotrope, une particule centrale est entourée par une couronne de premiers voisins sphériques et $\Sigma' = \mathbf{0}$. Lorsqu'une faible déformation est appliquée la microstructure devient anisotrope : la couronne de premiers voisins se déforme selon une harmonique d'ordre 2 dont l'amplitude est proportionnelle à S et orientée selon la direction $\theta/2$.

avec $N_1 = \Sigma_{xx} - \Sigma_{yy}$ la différence de contraintes normales et $\sigma = \Sigma_{xy}$ la contrainte de cisaillement. En remplaçant \mathbf{E}^∞ et $\mathbf{\Omega}^\infty$ par leurs expressions (3.3) et (3.4) en fonction de φ dans l'Eq. (2.54), il est possible d'écrire un système de deux équations différentielles couplées sur les variables N_1 et σ . Plutôt qu'utiliser $\dot{\Gamma}$ comme paramètre de contrôle de l'intensité de l'écoulement, nous lui préférons le taux de cisaillement $\dot{\gamma} = \sqrt{2\mathbf{E}^\infty : \mathbf{E}^\infty} = \sqrt{2}\dot{\Gamma} \cos \varphi$. Le système s'écrit alors :

$$\begin{cases} \dot{N}_1 = \dot{\gamma} (\bar{\kappa} \cos 2\varphi + 2 \tan \varphi \sigma) + \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} \left(\sigma^2 + \frac{N_1^2}{4} \right) \right] N_1 & (3.6a) \\ \dot{\sigma} = \frac{\dot{\gamma}}{2} (\bar{\kappa} \sin 2\varphi - \tan \varphi N_1) + \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} \left(\sigma^2 + \frac{N_1^2}{4} \right) \right] \sigma & (3.6b) \end{cases}$$

3.1.3 Écriture polaire du modèle constitutif

Si l'écriture cartésienne est la plus naturelle puisqu'elle fait apparaître les grandeurs rhéologiques qui sont mesurées en expérience, il ne s'agit pas de l'écriture la plus simple du système. En effet, la géométrie du problème fait qu'encore une fois le problème s'étudie plus simplement dans une représentation polaire. Nous introduisons donc le système de coordonnées polaires (S, θ) associé au système cartésien $(N_1/2, \sigma)$, si bien que Σ' s'écrit dans ce jeu de variables

$$\Sigma' = S \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Dans cette écriture, S et θ ont une signification claire vis-à-vis de Σ : $S = \sqrt{(\Sigma' : \Sigma')/2}$ est la norme de ce tenseur tandis que les axes principaux de Σ' font un angle $\theta/2$ avec les axes horizontal et vertical. Par ailleurs, les grandeurs S et θ ont une signification physique très claire en terme de microstructure dans le jeu d'approximations que nous avons fait pour fermer notre système. En effet, nous avons montré dans le chapitre précédent que la paramétrisation de l'anisotropie de la fonction de corrélation de paire par le tenseur de structure \mathbf{Q} implique que Σ' est colinéaire à ce dernier, $\Sigma' = k\mathbf{Q}$ (Eq. (2.16)). En remplaçant \mathbf{Q} par Σ'/k dans la paramétrisation de

g (Eq. (2.9)), utilisant l'Eq. (3.7) et en notant $\mathbf{e}_r = \cos \theta' \mathbf{e}_x + \sin \theta' \mathbf{e}_y$, nous obtenons

$$g(r, \theta') = g_{\text{iso}}(r) + \frac{\text{arg}'_{\text{iso}}(r)S}{k} \cos(2\theta' - \theta). \quad (3.8)$$

S contrôle ainsi l'amplitude de l'anisotropie et θ son orientation (Fig. 3.2).

Dans ce système de variables, le système (2.54) s'écrit

$$\begin{cases} \dot{S} = \frac{\dot{\gamma}\bar{k}}{2} \cos(2\varphi - \theta) + (\bar{\beta} - 2\bar{\xi}S^2) S \\ \dot{\theta} = \dot{\gamma} \left(\frac{\bar{k}}{2S} \sin(2\varphi - \theta) - \tan \varphi \right) \end{cases} \quad (3.9a)$$

$$\quad (3.9b)$$

Cette écriture fait apparaître une séparation d'échelle entre la dynamique de S et celle de θ à faibles taux de déformation. En effet, nous constatons dans l'Eq. (3.9b) que la dérivée de θ est proportionnelle à $\dot{\gamma}$, tandis que la dérivée de S fait apparaître un terme d'ordre 0 en $\dot{\gamma}$, ce qui implique que pour des valeurs suffisamment faibles de taux de cisaillement, S est une variable rapide par rapport à θ . Cette écriture nous permet de mettre en évidence deux mécanismes associés à des échelles de temps différentes : la dynamique rapide de S correspond à la relaxation élastique des contacts, contrôlée principalement par les forces élastiques entre particules tandis que la dynamique lente de θ est associée à l'advection de l'orientation des contacts par l'écoulement. Ce constat est d'une très grande importance, nous verrons ainsi dans ce chapitre que la plupart des phénomènes macroscopiques observés en rhéologie s'expliquent dans notre modèle par cette séparation d'échelle entre une relaxation élastique rapide et une advection lente. Le temps caractéristique associé à l'advection varie comme $1/\dot{\gamma}$ tandis que celui associé à la relaxation élastique varie comme $1/\bar{\beta}$. Cette séparation d'échelle est donc observée pour $\dot{\gamma} \ll \bar{\beta} \approx 10^{-1}$, au vu de l'expression (2.56).

3.2 Rhéologie stationnaire

Nous commençons par nous intéresser à l'état stationnaire de notre modèle ($\dot{\Sigma}' = \mathbf{0}$) en discutant le caractère de fluide à seuil de notre système, la condition d'écoulement ou encore l'influence de la géométrie de l'écoulement.

3.2.1 Écoulement stationnaire à faibles taux de déformations, fluide à seuil

Nous nous intéressons dans un premier temps aux écoulements à faibles taux de déformation, dans la limite $\dot{\gamma} \rightarrow 0$. Comme discuté dans le chapitre précédent, l'Eq (2.54) dans la limite de taux de déformation nul ($\mathbf{E}^\infty = \mathbf{\Omega}^\infty = \mathbf{0}$) peut, à condition que $\bar{\beta}$ et $\bar{\xi}$ soient strictement positifs, ce qui est le cas dans un large intervalle autour de la fraction de jamming, présenter un point fixe stable non trivial puisqu'il vérifie

$$\Sigma' : \Sigma' = \frac{\bar{\beta}}{\bar{\xi}} > 0. \quad (3.10)$$

Notre système possède donc un comportement de fluide à seuil puisque la contrainte tend vers une valeur non nulle lorsque le taux de déformation tend vers 0. Le point fixe est cependant dégénéré puisque l'Eq. (3.10) décrit une sphère de rayon $\sqrt{\bar{\beta}/\bar{\xi}}$ dans l'espace des tenseurs symétriques de trace nulle en dimension deux. La dégénérescence est levée en prenant la limite $\dot{\gamma} \rightarrow 0^+$ de notre modèle. Pour ce faire, nous déterminons perturbativement l'état stationnaire de notre système dans le jeu de variables polaires (S, θ). Nous prenons pour cela un développement de ces deux variables à l'ordre 1 en $\dot{\gamma}$: $S = S_0 + S_1\dot{\gamma}$ et $\theta = \theta_0 + \theta_1\dot{\gamma}$. En remplaçant ces développements dans le système (3.9), le terme d'ordre 0 en $\dot{\gamma}$ nous redonne l'Eq. (3.10) qui s'écrit en coordonnées polaires

$$S_0 = \sqrt{\frac{\bar{\beta}}{2\bar{\xi}}}, \quad (3.11)$$

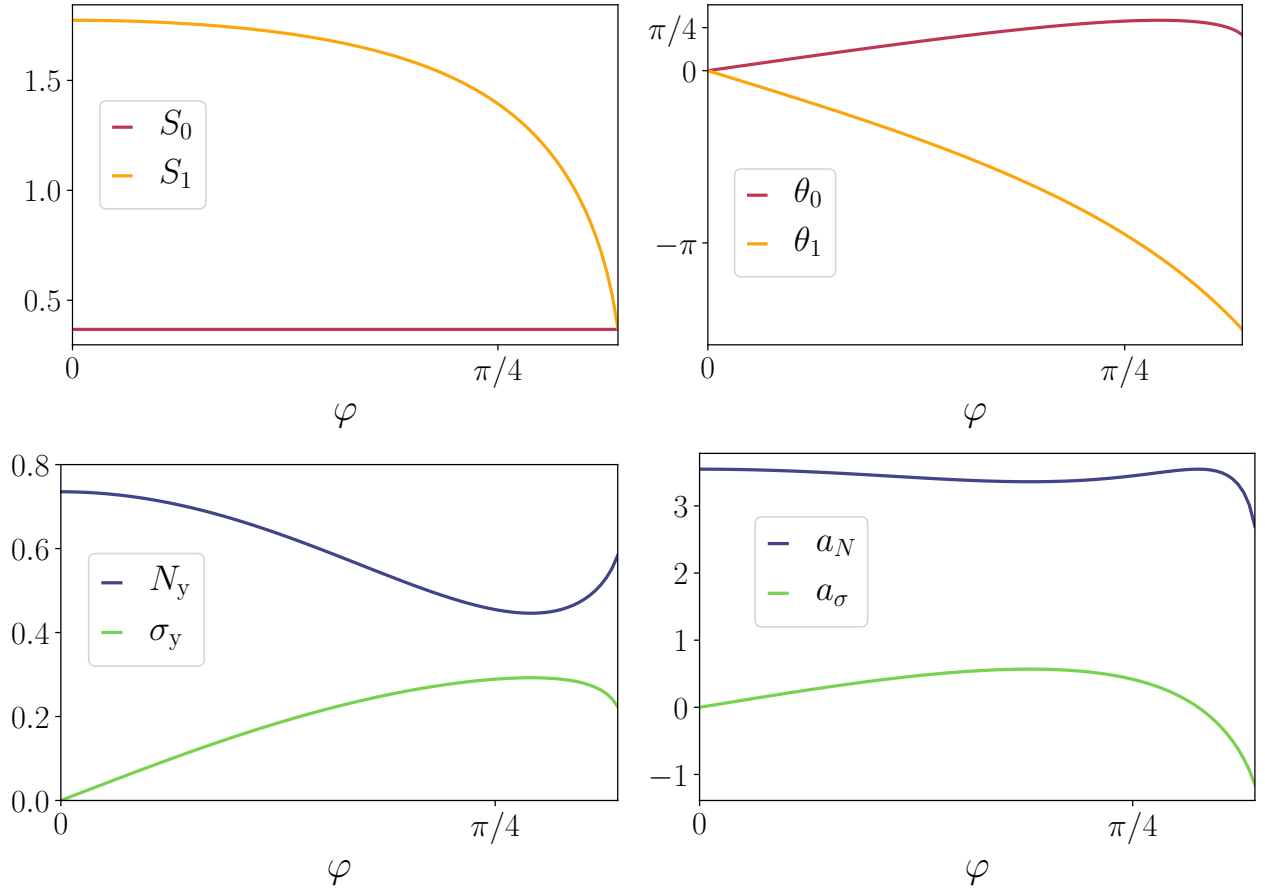


FIGURE 3.3 – **Évolution des premiers termes du développement en $\dot{\gamma}$ de S , θ , N_1 et σ .** Nous avons représenté l'évolution de (en haut à gauche) S_0 et S_1 , (en haut à droite) θ_0 et θ_1 , (en bas à gauche) N_y et σ_y ainsi que (en bas à droite) a_N et a_σ en fonction de φ pour un écart au jamming de $\Delta\phi = 0.01$.

tandis que l'ordre 1 en $\dot{\gamma}$ nous donne

$$\theta_0 = 2\varphi - \arcsin\left(\frac{2S_0 \tan \varphi}{\bar{\kappa}}\right), \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{\bar{\kappa}}{4\bar{\beta}} \cos(2\varphi - \theta_0) \\ &= \frac{\bar{\kappa}}{4\bar{\beta}} \sqrt{\left(1 - \frac{2\bar{\beta}}{\bar{\xi}\bar{\kappa}^2} \tan^2 \varphi\right)}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

θ_0 n'existe que lorsque $\varphi \in [0, \varphi_{\max} = \arctan(\bar{\kappa}/2S_0)]$. Pour des valeurs typiques de $\bar{\kappa}$, $\bar{\beta}$ et $\bar{\xi}$ (cf Eqs. (2.55), (2.56) et (2.57)), nous obtenons $\varphi_{\max} \approx 59^\circ$. Pour des valeurs plus grandes de φ , correspondant à des écoulements principalement (mais pas purement) rotationnels, notre équation constitutive n'admet aucune solution stable, au lieu de quoi le tenseur des contraintes est indéfiniment advecté par l'écoulement appliqué. L'ordre 2 en $\dot{\gamma}$ de l'Eq. (3.9b) (qui correspond à un ordre 1 dans notre développement en $\dot{\gamma}$ des variables polaires), nous donne quant à lui

$$\begin{aligned} \theta_1 &= -\frac{S_0}{S_1} \tan(2\varphi - \theta_0) \\ &= -\frac{\tan \varphi}{2\bar{\beta}}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

En développant alors $N_1 = 2S \cos \theta$ et $\sigma = S \sin \theta$ à l'ordre 1 en $\dot{\gamma}$, nous obtenons :

$$N_1 = N_y + a_N \dot{\gamma}, \quad (3.15)$$

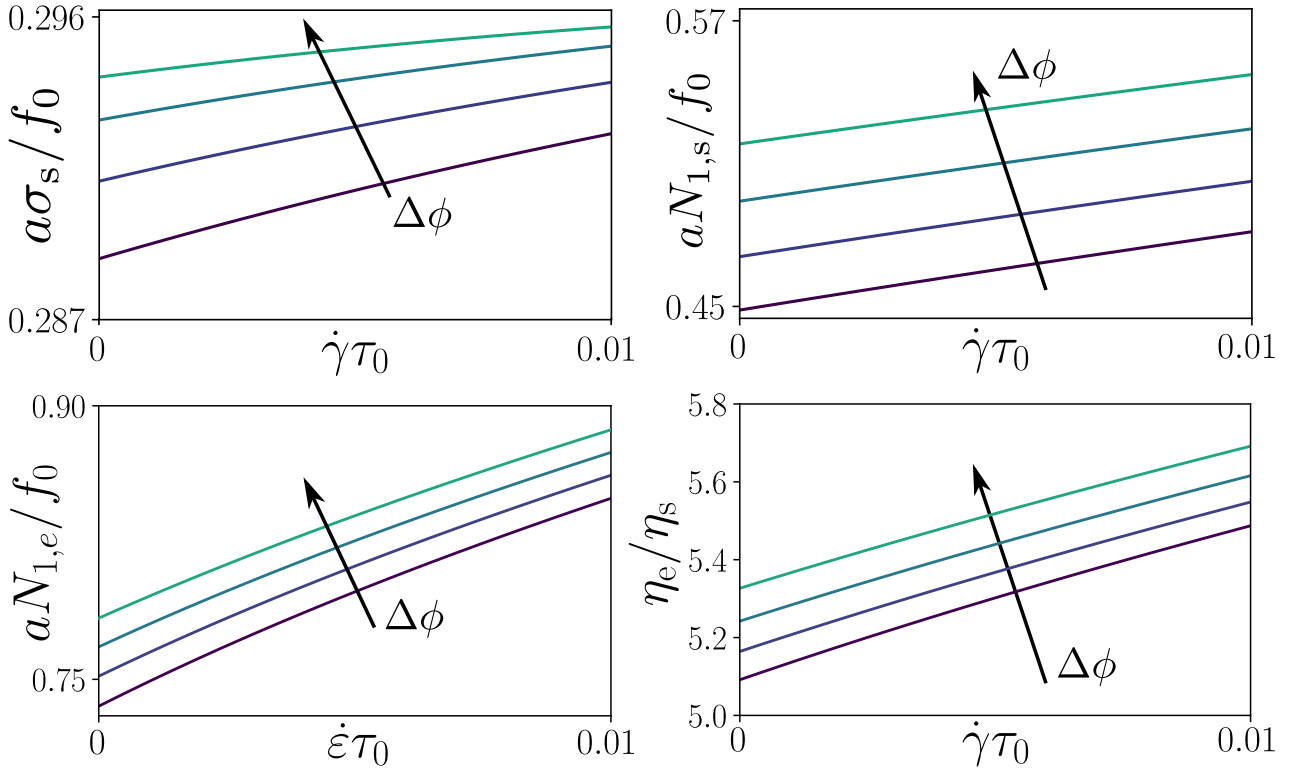


FIGURE 3.4 – **Écoulements stationnaires de cisaillement simple et d’extensionnel planaire.** (*haut,gauche*) Évolution de σ avec $\dot{\gamma}$ en cisaillement simple. (*haut,droite*) Évolution de N_1 avec $\dot{\gamma}$ en cisaillement simple. (*bas,gauche*) Évolution de N_1 avec $\dot{\varepsilon}$ en écoulement extensionnel planaire. (*bas,droite*) Évolution du rapport de Trouton (η_e/η_s pour $\dot{\gamma} = \dot{\varepsilon}$) en fonction du taux de déformation. Dans chaque cas, nous avons représenté l’évolution pour $\Delta\phi = \{1, 2, 3, 4\} \times 10^{-2}$.

$$\sigma = \sigma_y + a_\sigma \dot{\gamma}, \quad (3.16)$$

avec $N_y = 2S_0 \cos \theta_0$, $a_N = 2S_1 \cos \theta_0 - 2\theta_1 S_0 \sin \theta_0$, $\sigma_y = S_0 \sin \theta_0$ et $a_\sigma = S_1 \sin \theta_0 + \theta_1 S_0 \cos \theta_0$. Nous observons donc un seuil sur la contrainte de cisaillement et la différence de contraintes normales quelle que soit la géométrie d’écoulement. Par ailleurs, comme nous pouvions nous y attendre au vu de l’Eq (2.54), la dépendance des contraintes en $\dot{\gamma}$ à faibles taux de déformation est linéaire. Notre modèle ne nous permet pas de capturer la dépendance non-triviale de la contrainte avec le taux de déformation observée à la fois expérimentalement et numériquement en cisaillement simple par exemple, avec un exposant d’Herschel-Bulkley plus petit que 1 dans les systèmes que nous étudions ici.

Nous avons représenté l’évolution de S_0 , θ_0 , S_1 , θ_1 , N_y , σ_y , a_N et a_σ en fonction du paramètre de forme φ de l’écoulement pour un écart au jamming de $\Delta\phi = 0.01$ en Fig. 3.3. Comme il est possible de le voir à partir de leur expression, $S_1 > 0$ tandis que $\theta_1 < 0$, quelle que soit la forme de l’écoulement. Nous notons que θ_0 est toujours dans le cadran $[0, \pi/2]$ tandis que θ_1 , conformément à son expression (3.14) est toujours négatif, ce qui traduit le fait que plus l’écoulement est fort, plus il contribuera à désaligner Σ' (et donc \mathcal{Q}) de \mathbf{E}^∞ , avec une rotation de Σ' dans le sens horaire. Il découle de ces constatations que a_N est positif quelle que soit la géométrie de l’écoulement tandis que a_σ devient négatif pour des écoulements suffisamment rotationnels. Des valeurs positives de a_N et a_σ nous indiquent que N_1 et σ augmentent avec $\dot{\gamma}$ pour les déformations de faible amplitude.

Nous avons représenté en Fig. 3.4 les courbes d’écoulement obtenues pour deux géométries d’écoulements particulières : l’écoulement purement extensionnel ($\varphi = 0$) et le cisaillement simple ($\varphi = \pi/4$). Dans le cas de l’écoulement extensionnel, l’Eq. (3.9b) admet pour seul point fixe stable dans l’état stationnaire $\theta = 0$ ce qui implique une contrainte de cisaillement nulle dans l’état stationnaire, quel que soit le taux de déformation, nous n’avons donc pas reproduit la courbe d’écoulement de cette dernière en Fig. 3.4. Par ailleurs, il est d’usage

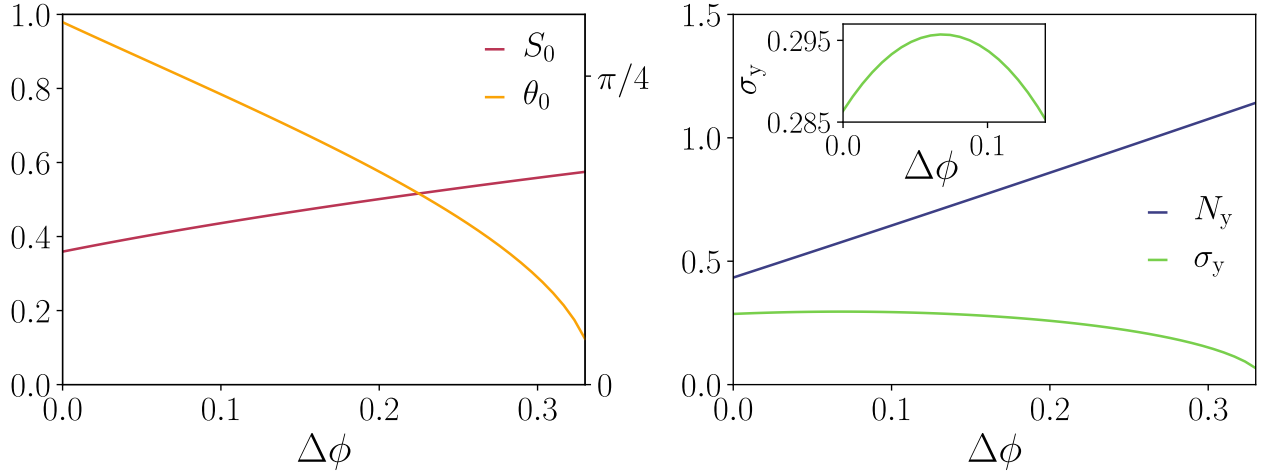


FIGURE 3.5 – **Influence de la fraction surfacique du système sur la rhéologie à déformation nulle.** (gauche) Évolution de S_0 et θ_0 en fonction de l'écart au jamming $\Delta\phi$. (droite) Évolution de N_y et σ_y en fonction de $\Delta\phi$. En encart : évolution de σ_y en fonction de $\Delta\phi$ sur une plage plus restreinte.

d'utiliser $\dot{\epsilon} = \dot{\gamma}/2$ comme paramètre de contrôle en écoulement extensionnel, de sorte que le gradient du champ de vitesse s'écrive

$$\nabla \mathbf{u}^\infty = \begin{pmatrix} \dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

raison pour laquelle nous avons représenté l'évolution de la différence de contraintes normales en fonction de $\dot{\epsilon}$. Il est possible de définir la viscosité de cisaillement $\eta_s(\dot{\gamma}) = \sigma_s(\dot{\gamma})/\dot{\gamma}$, avec $\sigma_s(\dot{\gamma})$ la contrainte de cisaillement dans l'état stationnaire lors d'un cisaillement simple à $\dot{\gamma}$, ainsi que la viscosité extensionnelle $\eta_e(\dot{\epsilon}) = N_{1,e}(\dot{\epsilon})/\dot{\epsilon}$, avec $N_{1,e}(\dot{\epsilon})$ la différence de contraintes normales dans l'état stationnaire dans un écoulement extensionnel à $\dot{\epsilon}$. Le rapport $\text{Tr}(\dot{\gamma}) = \eta_e(\dot{\gamma})/\eta_s(2\dot{\gamma})$ est appelé rapport de Trouton et vaut 4 dans le cas d'un fluide newtonien, quelle que soit la valeur de $\dot{\gamma}$. Dans notre cas ce rapport croît avec le taux de déformation et est bien plus élevé qu'il ne l'est dans le cas newtonien puisque nous obtenons des valeurs comprises entre 5 et 5.8. Des valeurs du rapport de Trouton comprises entre 2 et 2.5 ont été observées dans des simulations 3D d'écoulements planaires extensionnels de suspensions de sphères molles au-dessus du jamming [Cheal and Ness, 2018]. De même, la théorie MCT [Brader et al., 2008] ainsi que certains modèles phénoménologiques [Varchanis et al., 2020] prédisent des valeurs du rapport de Trouton bien plus faibles que 4. Par ailleurs des rapports de Trouton largement supérieurs à leur valeur dans le cas newtonien ont été observés expérimentalement dans des émulsions à hautes densités [Anklam et al., 1994, Róžańska et al., 2014].

Si les courbes d'écoulement en Fig. 3.4 sont en accord qualitatif avec le comportement des suspensions denses molles au-dessus du jamming observé expérimentalement, nous avons pu vérifier que ce n'est pas le cas lorsque nous résolvons le système ((2.48),(2.49)) faisant intervenir la dynamique de p . En effet, ce système conduit à une courbe d'écoulement de σ_s décroissante avec $\dot{\gamma}$ à faibles taux de cisaillement en contradiction avec toutes les observations expérimentales et numériques. S'il est dérangeant qu'une description *a priori* plus complète du système mène à une description plus erronée du système étudié, la dégradation de la qualité des résultats par l'ajout de termes dans la description continue d'un système de particules en interaction a déjà été observée dans le cas de gaz thermiques [García-Colín et al., 2008], ou de particules actives [Peshkov et al., 2014], par exemple. Nous avons réussi à trouver la source de ce comportement incohérent dans notre modèle. Il s'agit du coefficient $\zeta(p)$, qui contrôle la contribution de l'écoulement dans l'Eq. (2.49) sur p , qui pour de faibles valeurs de p est négatif, ce qui conduit à une décroissance de la pression avec le taux de cisaillement, là aussi en contradiction avec la physique du système. Nous n'avons cependant pas eu le temps d'analyser en profondeur ce qui dans nos hypothèses conduit à ce signe incohérent de ζ dans notre modèle.

Nous avons également représenté en Fig. 3.5 l'évolution de N_y et σ_y en fonction de $\Delta\phi = \phi - \phi_J$, l'écart au jamming du système. La première constatation est que, contre toute attente, N_y et σ_y ne s'annulent pas au

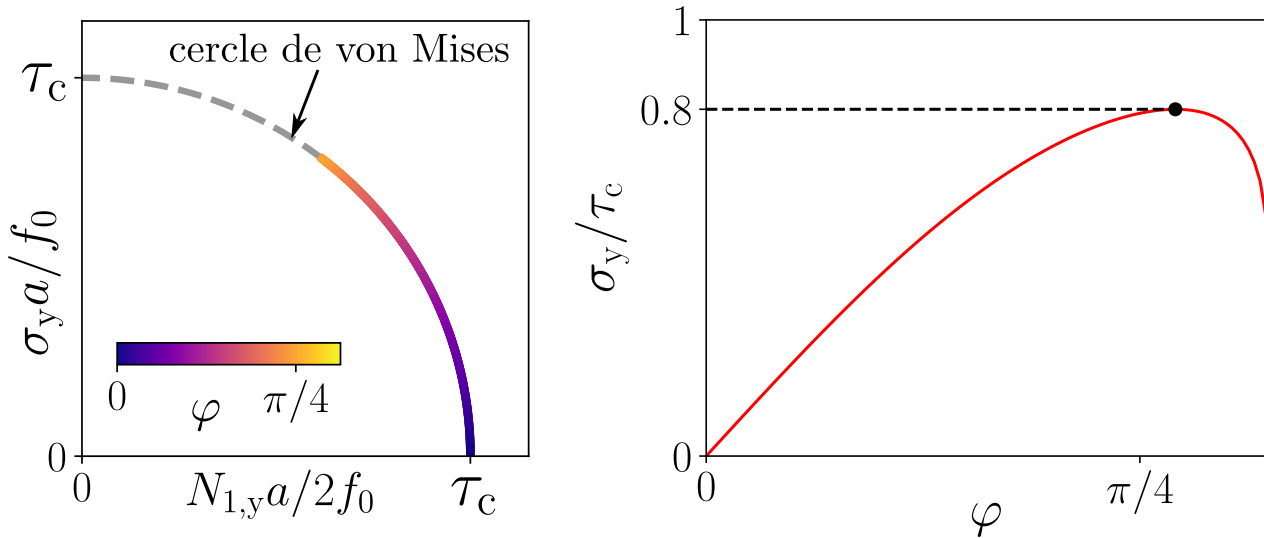


FIGURE 3.6 – **Critère de von Mises.** (*gauche*) Illustration du critère de von Mises dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ (ligne grise pointillée) dans notre modèle pour $\varphi = 1.26$. Pour les écoulements bidimensionnels (paramétrés par l'angle φ tel que défini dans l'Eq. (3.2)), la limite d'élasticité dynamique est unique pour chaque géométrie d'écoulement, comme le montre la ligne colorée. (*droite*) Évolution du rapport $2\sigma_y/N_{1,y}$ en fonction de φ . Le rapport est maximum pour $\varphi \approx 49^\circ$.

jamming. Ce phénomène est dû au choix de notre paramétrisation de g_{iso} (Eq. (2.44)). En effet, au jamming nous avons $r^* = 2$, or toutes les intégrales de g_{iso} définissant les coefficients de notre modèle se font sur l'intervalle $[0, 2]$ en r , ce qui conduit à intégrer un pic de Dirac positionné au bord de l'intervalle d'intégration, opération mal définie mathématiquement. Les termes faisant apparaître g_{iso} en intégrant ne posent pas de soucis particulier puisque le pic de Dirac fait systématiquement apparaître un terme $f(2)$ qui est nul. En revanche, les intégrales faisant apparaître g'_{iso} dans leur intégrande conduisent à intégrer la dérivée d'un pic de Dirac, qui fait apparaître un terme en $f'(2)$ qui lui n'est pas nul dans le cas d'interactions de la forme $f(r) = r - 2$ comme choisi pour nos calculs. Or, il apparaît de façon évidente à la vue de la définition des tenseurs apparaissant dans l'équation dynamique exacte de Σ (Eq. (1.35)) que le terme de droite de l'équation doit être entièrement nul en-dessous du jamming en l'absence de déformation puisque g et g_3 sont nulles dans les configurations de contact dans ce cas. Ce problème pourrait être évité en reprenant les calculs avec une force de contact de la forme $f(r) = (r - 2)^\alpha$ avec $\alpha > 1$ pour les interactions entre entités constitutives puisqu'alors $f'(2) = 0$.

Par ailleurs, si N_y est bien une fonction croissante de $\Delta\phi$ dans notre modèle, ce n'est pas le cas pour σ_y . Cette dernière croît avec la fraction surfacique jusqu'à $\Delta\phi \approx 0.06$ avant de décroître, ce qui là aussi est un comportement contraire aux observations expérimentales. Lorsque nous étudions cette fois l'évolution de (S_0, θ_0) en fonction de la fraction surfacique (cf. Fig. 3.5), nous notons que S_0 est une fonction croissante de $\Delta\phi$ tandis que θ_0 est décroissante. Ainsi l'amplitude du tenseur des contraintes croît bien avec la fraction surfacique mais l'orientation de ce tenseur allant progressivement à 0, le rapport entre N_y et σ_y augmente. Pour les faibles valeurs de $\Delta\phi$, la croissance de S_0 compense la baisse de θ_0 , si bien que σ_y demeure faiblement croissant mais pour de plus grandes valeurs de $\Delta\phi$ cela ne suffit plus. Cette décroissance de θ_0 trouve sa source dans le coefficient $\bar{\kappa}(\phi)$ qui contrôle la contribution de E^∞ à l'évolution de Σ' dans l'Eq. (2.54). En effet, ce coefficient décroît lui-même avec ϕ alors qu'il devrait croître de façon équivalente à S_0 pour conserver un angle θ_0 à peu près constant. Encore une fois, c'est la contribution de E^∞ qui engendre un comportement insatisfaisant. Une étude plus approfondie de la cause de cette contribution incohérente de E^∞ pourrait permettre d'améliorer notre modèle.

3.2.2 Condition d'écoulement : critère de von Mises

Dans notre modèle constitutif, le critère de von Mises, discuté en Sec. 1.1 de l'introduction de cette thèse, se vérifie naturellement avec une contrainte seuil $\tau_c = S_0$. Il partage cette propriété avec la plupart des VPM et VEPM présentés en Sec. 2.1 de l'introduction de cette thèse dans lesquels le critère de von Mises est introduit explicitement, tandis que dans les modèles MCT-ITT pour les verres mous, de faibles déviations par rapport au critère de von Mises sont observées, ce dernier n'étant pas intégré directement au modèle [Brader et al., 2009]. Notre modèle prédit par ailleurs une différence de contraintes normales plus importante en amplitude que la contrainte de cisaillement comme il est possible de constater en Fig. 3.4. La contribution des contraintes normales au critère d'élasticité ne peut donc pas être négligée, ce qui est cohérent avec certaines observations expérimentales [Zhang et al., 2018, Thompson and de Souza Mendes, 2020], mais pas toutes [de Cagny et al., 2019]. Toutefois, à la différence de la plupart des modèles phénoménologiques notre modèle ne possède pas de comportement élastique en dessous du seuil de plasticité, ce qui le rend peu adapté à la description de la rhéologie du matériau dans le domaine élastique.

En dimension 2, le seuil de plasticité est un cercle de rayon τ_c dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ (représenté en Fig. 3.6 pour $\phi = 1.26$). Dans notre modèle, la dégénérescence de ce seuil n'est levée qu'en prenant la limite $\dot{\gamma} \rightarrow 0$ pour une géométrie d'écoulement donnée. Le seuil de plasticité se situe alors sur le cercle précédent à l'angle θ_0 défini à l'Eq. (3.12). Nous avons représenté en Fig. 3.6 la position du seuil sur le cercle de von Mises en fonction de l'angle φ pour une fraction volumique de $\phi = 1.26$.

L'importance des contraintes normales au seuil de plasticité est mise en évidence par le rapport σ_y/τ_c . En effet, lorsque la différence de contraintes normales est nulle $\sigma_y = \tau_c$ et le rapport doit valoir 1. Toute déviation de cette valeur s'interprète donc comme l'effet des contraintes normales sur le critère de von Mises. Nous avons représenté en Fig. 3.6 l'évolution de ce rapport en fonction de φ pour une fraction surfacique de $\phi = 1.26$. Nous nous apercevons qu'il est maximum pour une valeur de φ proche de $\pi/4$, mais même alors il ne vaut que 0.8. La différence de contraintes normales joue donc toujours, dans notre modèle, un rôle important au seuil. Dans un système tridimensionnel, cette importance des contraintes normales pourrait être encore renforcée par la seconde différence de contraintes normales. Ces résultats soulignent l'importance de mesurer les contraintes normales au seuil, en cisaillement simple, pour les suspensions denses molles au-dessus du jamming [Thompson et al., 2018]. Expérimentalement, il est d'usage de tester le critère de von Mises en comparant $N_{1,y,e}$, la différence de contraintes normales au seuil en extensionnel planaire à $\sigma_{y,s}$, la contrainte de cisaillement au seuil en cisaillement simple. En supposant que seule la première différence de contraintes normales est non-nulle au seuil de plasticité en extensionnel planaire, en 3D le critère de von Mises implique que $N_{1,y,e} = \sqrt{3}\tau_c$ (en 2D, nous aurions $N_{1,y,e} = 2\tau_c$). De même en supposant que les différences de contraintes normales sont nulles au seuil en cisaillement simple, il implique que $\sigma_{y,s} = \tau_c$. Ainsi, sous ces hypothèses, si le critère de von Mises est vérifié les valeurs expérimentales de $N_{1,y,e}$ et $\sigma_{y,s}$ devraient vérifier

$$\frac{N_{1,y,e}}{\sigma_{y,s}} = \sqrt{3}, \quad (3.18)$$

tout écart significatif à cette valeur étant interprété comme une violation du critère de von Mises. Or, dans notre modèle, si la contrainte de cisaillement au seuil est bien nulle en écoulement extensionnel planaire, ce n'est pas le cas pour la différence de contraintes normales au seuil en cisaillement simple, si bien que $\sigma_{y,s} \neq \tau_c$. Comme nous le constatons en Fig. 3.6, pour $\phi = 1.26$, nous obtenons $\sigma_{y,s} \approx 0.8 \tau_c$, ce qui conduit à $N_{1,y,e}/\sigma_{y,s} \approx 2.5$ au lieu de la valeur de 2 attendu en 2D. Ainsi, en l'absence de mesure des différences de contraintes normales, une valeur inattendue de ce rapport ne peut pas être interprétée comme une violation du critère de von Mises.

Au niveau de la microstructure, les contraintes normales en cisaillement simple proviennent du désalignement des axes principaux du tenseur de structure \mathbf{Q} avec ceux du tenseur des taux de déformation \mathbf{E}^∞ sous l'effet de la vorticit e $\mathbf{\Omega}^\infty$. Les contacts les plus comprim es se trouvent alors entre l'axe compressionnel de \mathbf{E}^∞ (de direction $\theta = 3\pi/4$) et l'axe vertical. Par cons equent, les forces de contact les plus importantes ont une projection verticale plus importante que leur projection horizontale, ces deux composantes ayant une contribution n egative  a Σ_{yy} et Σ_{xx} respectivement cela conduit  a $N_1 > 0$. Cela remet en question l'hypoth ese commune d'une contrainte d eviatorique align ee avec \mathbf{E}^∞ [Coussot and Gaulard, 2005, Castro et al., 2010, Ovarlez et al., 2010, Saramito and Wachs, 2017, Zhang et al., 2018]. En effet, il est d'usage de consid erer que proche du seuil de

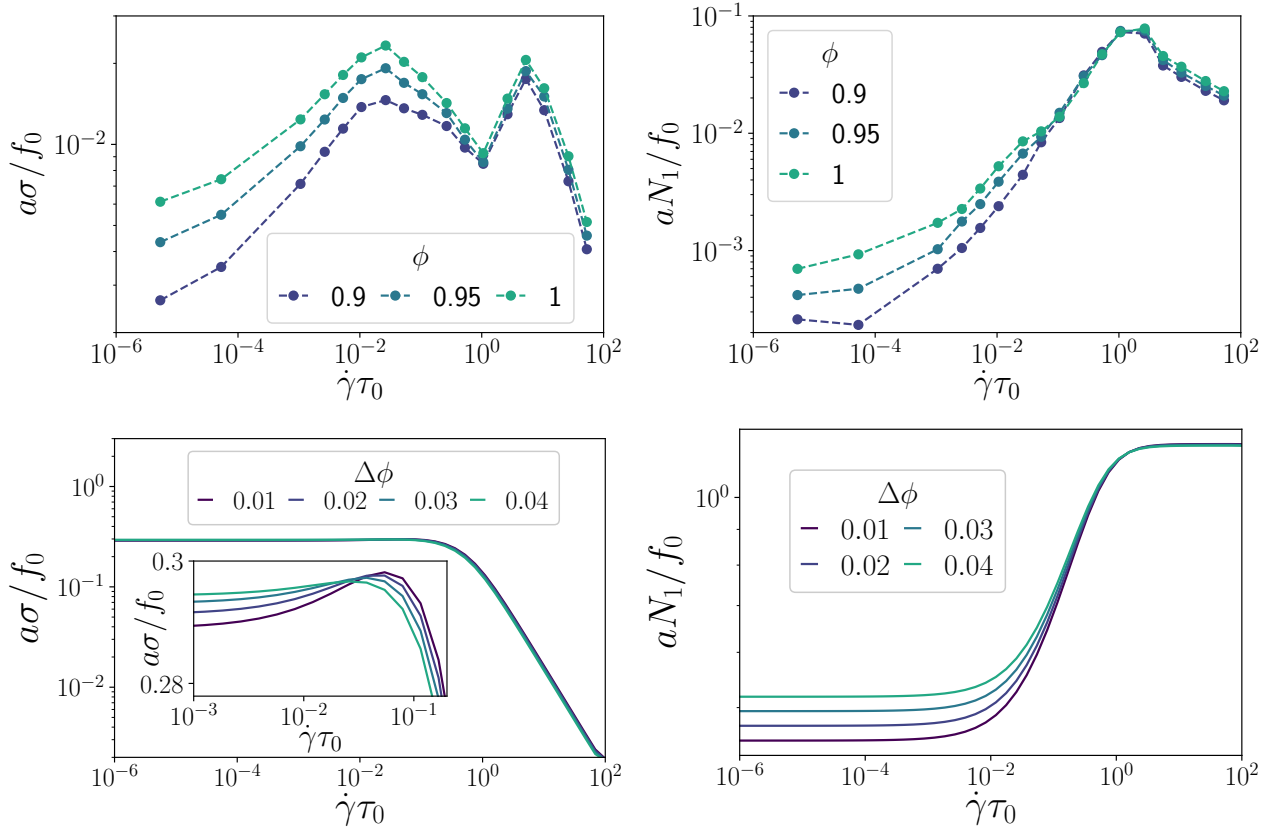


FIGURE 3.7 – **Écoulement stationnaire à fort taux de cisaillement en cisaillement simple.** (*haut*) Courbes d'écoulement obtenues par simulations LAMMPS (cf. Sec. 2.1) pour différentes fractions surfaciques au-dessus du jamming. (*bas*) Courbes d'écoulement obtenues par résolution numérique de l'Eq (2.54) à différentes fractions surfaciques.

plasticité

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \frac{2\tau_c}{\dot{\gamma}} \mathbf{E}^\infty. \quad (3.19)$$

Cette hypothèse implique que seule la projection de $\boldsymbol{\Sigma}'$ sur \mathbf{E}^∞ , c'est-à-dire $(\boldsymbol{\Sigma}' : \mathbf{E}^\infty) / \dot{\gamma}$ [Ovarlez et al., 2010], contribue au critère de von Mises, ou qu'à minima cette contribution est dominante [de Cagny et al., 2019]. Notre modèle constitutif montre que cette hypothèse n'est probablement pas vérifiée dans tous les écoulements, sauf les plus extensionnels (φ faible). Dès que la vorticit  fait tourner \mathbf{Q} (et donc $\boldsymbol{\Sigma}'$) d'un angle ν par rapport à \mathbf{E}^∞ , la composante de $\boldsymbol{\Sigma}'$ tensoriellement orthogonale à \mathbf{E}^∞ commence à contribuer à $\boldsymbol{\Sigma}' : \boldsymbol{\Sigma}'$. Pour les petits ν , cette contribution est quadratique en ν , mais pour $\nu \approx 9^\circ$ elle représente déjà 10% de $\boldsymbol{\Sigma}' : \boldsymbol{\Sigma}'$, et pour $\nu \approx 22^\circ$ elle atteint 50%.

Le rôle de la vorticit  dans un modèle constitutif tel que le n tre est contraint par l'invariance par rotation du r f rentiel comme discut  dans l'introduction de cette th se. Le terme de vorticit  $\boldsymbol{\Omega}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' - \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \boldsymbol{\Omega}^\infty$ apparaissant dans notre mod le est donc totalement g n ral et est contraint d'appara tre sous la m me forme dans n'importe quel mod le constitutif, pouvant ainsi g n rer des diff rences de contraintes non-n gligeables. Notre mod le ne fait pas appara tre de param tres libres, si bien que l'amplitude de la diff rence de contraintes normales est contrainte par les valeurs des coefficients obtenues dans notre d rivation. Les mod les ph nom nologiques de type VEPM, par exemple, font appara tre des param tres libres influant sur l'amplitude relative des diff rences de contraintes normales et de la contrainte de cisaillement.

3.2.3 Écoulements stationnaires à grands taux de déformation

Les hypothèses faites au Chap. 2 sont valables pour un régime de faibles taux de déformation. Cependant, il est difficile d'estimer une limite supérieure pour le régime de validité de notre modèle. Nous avons donc étudié numériquement notre modèle dans l'état stationnaire sur une large gamme de $\dot{\gamma}$ en cisaillement simple. Nous présentons en Fig. 3.7 les courbes d'écoulements prédites par notre modèle pour $\dot{\gamma} \in [10^{-6}, 10^2]$ que nous comparons à celles obtenues grâce aux simulations numériques présentées en Sec. 2.1. Nous observons dans les deux cas une chute de la contrainte de cisaillement pour des $\dot{\gamma}\tau_0$ de l'ordre de 10^{-2} tandis que la différence de contraintes normales croît jusqu'à atteindre un plateau pour $\dot{\gamma}\tau_0 \approx 1$. Dans notre modèle, le comportement dans l'état stationnaire de notre système est clair. En effet, dans la limite $\dot{\gamma}\tau_0 \gg 1$, en supposant que S demeure fini lorsque $\dot{\gamma} \rightarrow \infty$, le système (3.9) dans l'état stationnaire se réduit à :

$$\theta_\infty = 2\varphi - \frac{\pi}{2}, \quad (3.20)$$

$$S_\infty = \frac{\bar{\kappa}}{2 \tan \varphi}. \quad (3.21)$$

Nous constatons que dans le cas des écoulements extensionnels planaires ($\varphi = 0$), S_∞ n'est pas fini et les relations précédentes ne sont donc pas valables puisqu'il n'est pas possible de négliger le terme non-linéaire en S devant le terme en $\dot{\gamma}$ dans l'Eq. (3.9a). Dans le cas de ces écoulements, la vorticit   est nulle, il n'est pas possible de faire tourner les axes principaux de Σ' et θ demeure nul tandis que S cro  t constamment avec $\dot{\gamma}$.

Dans le cas d'écoulements non purement extensionnels ($\varphi \neq 0$), la vorticit   est non-nulle et contribue    d  saligner Σ' de E^∞ . L'effet de la vorticit   cro  t avec $\dot{\gamma}$, et le syst  me tend vers un   tat de d  salignement maximal    grands $\dot{\gamma}$,    savoir $\theta = 2\varphi - \pi/2$, les axes principaux de Σ' (d'orientation $\theta/2$ et $\theta/2 + \pi/2$)   tant alors bis  cants aux axes principaux de E^∞ (d'orientation φ et $\varphi + \pi/2$). Dans cet   tat d'alignement d  favorable E^∞ ne peut contribuer    amplifier l'anisotropie du syst  me que jusqu'   une valeur maximale $S = S_\infty$, S continuant    augmenter avec $\dot{\gamma}$. Dans le cas du cisaillement simple ($\varphi = \pi/4$), $\theta_\infty = 0$ et donc la contrainte de cisaillement tend vers $S_\infty \sin \theta_\infty = 0$    grand $\dot{\gamma}$ tandis que N_1 tend vers $2S_\infty \cos \theta_\infty = \bar{\kappa}$. Ainsi pour $\dot{\gamma}$ suffisamment grand, S ne cro  t plus suffisamment vite avec $\dot{\gamma}$ pour compenser la chute de θ et σ se met donc    diminuer tandis que N_1 cro  t d'autant plus vite que les deux variables polaires varient d'une fa  on favorisant sa croissance. Dans nos simulations, nous observons qu'apr  s cette premi  re phase de d  croissance σ redevient croissant avec $\dot{\gamma}$ aux alentours de $\dot{\gamma}\tau_0 \approx 1$ avant de chuter    nouveau    partir de $\dot{\gamma}\tau_0 \approx 10$. De m  me N_1 ne reste pas sur un plateau aux tr  s grandes valeurs de $\dot{\gamma}$ mais d  cro  t l  g  rement. Ces diff  rences qualitatives entre les pr  dictions de notre mod  le et les observations num  riques s'expliquent par le fait que dans l'effet des anisotropies d'ordre sup  rieur    deux qui deviennent non-n  gligeables dans le r  gime des grands taux de cisaillement. En particulier, la relation de lin  arit   entre Σ' et Q (Eq. (2.16)) n'est plus valable et il n'est plus possible d'assimiler simplement le comportement de la microstructure    celui de Σ' .

La litt  rature exp  rimentale ne fait pas,    notre connaissance, mention d'un tel comportement de la contrainte   lastique    fort taux de cisaillement. La raison en est qu'exp  rimentalement c'est la contrainte totale qui est mesur  e et non pas la seule contribution particulière    laquelle nous nous int  ressons ici. La contribution visqueuse du fluide suspendant    la contrainte du syst  me   tant proportionnelle    $\dot{\gamma}$, elle est n  gligeable    faible taux de cisaillement et la contrainte totale est essentiellement   gale    la contrainte particulière. Dans le r  gime des forts taux de cisaillement, au contraire, la contribution visqueuse domine, si bien qu'il est difficile d'  tudier exp  rimentalement le comportement de la contrainte particulière dans ce r  gime.

3.3 Rh  ologie transitoire

Nous nous int  ressons d  sormais aux effets transitoires dans notre mod  le. Les non-lin  arit  s pr  sentes dans ce mod  le ont pour cons  quence d'induire un comportement plastique m  me en-dessous du seuil de plasticit  . Ainsi, lorsque le syst  me se trouve en-dessous du seuil de plasticit  , il est amen      la surface du cercle de von Mises par les non-lin  arit  s, et ce m  me en l'absence de d  formation. Notre mod  le n'est donc pas capable de d  crire correctement le comportement   lastique des fluides    seuil en-dessous du seuil de plasticit  , raison pour laquelle nous nous concentrerons dans cette partie sur des protocoles n'explorant que le domaine plastique du mat  riau.

3.3.1 Incrément de taux de déformation, overshoot et undershoot

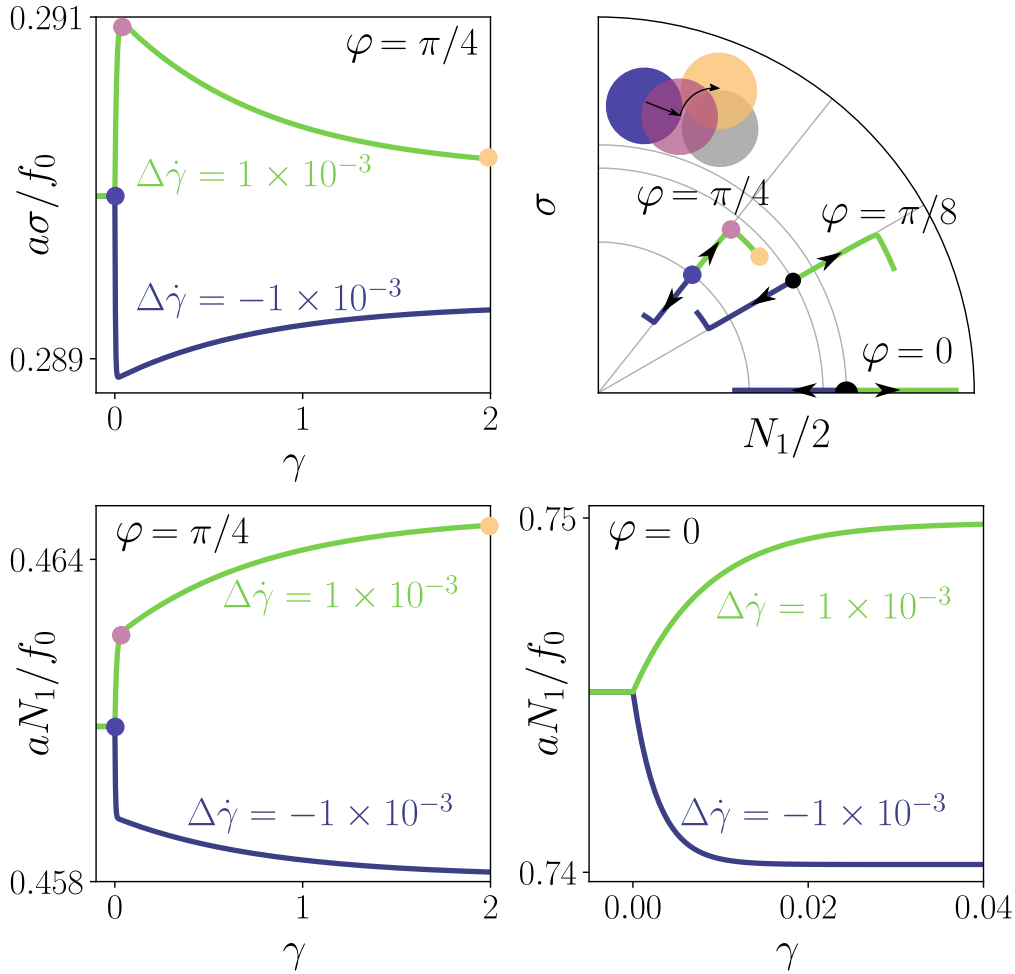


FIGURE 3.8 – Réponse du système à un incrément de taux de déformation en fonction de la géométrie de l'écoulement pour un écart au jamming de $\Delta\phi = 0.01$. (haut, gauche) Réponse de σ à un incrément de taux de déformation $\Delta\dot{\gamma} = \pm 1 \times 10^{-3}$ dans le cas du cisaillement simple ($\varphi = \pi/4$). (haut, droite) Représentation schématique de l'évolution du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ en réponse à un incrément négatif (courbes bleues) ou positif (courbes vertes) pour différentes géométries d'écoulement. Nous avons également représenté schématiquement l'évolution de deux particules en contact dans le quadrant compressionnel au début de l'incrément, à l'overshoot et dans l'état stationnaire. (bas, gauche) Réponse de N_1 à un incrément de taux de déformation $\Delta\dot{\gamma} = \pm 1 \times 10^{-3}$ dans le cas du cisaillement simple. (bas, droite) Réponse de N_1 à un incrément de taux de déformation $\Delta\dot{\gamma} = \pm 1 \times 10^{-3}$ dans le cas d'un écoulement extensionnel planaire ($\varphi = 0$).

Notre modèle ne présentant pas de branche élastique en-dessous du seuil de plasticité, il n'est pas sensé d'étudier le régime transitoire d'un protocole de charge à partir d'un état de contrainte nulle. Nous préférons donc étudier ce régime à partir d'un état stationnaire situé dans le domaine plastique. Nous nous intéressons donc ici au comportement de notre système après un incrément $\Delta\dot{\gamma}$ (négatif ou positif) du taux de déformation à partir de l'état stationnaire de ce dernier pour un taux de déformation $\dot{\gamma}_0$. Comme nous l'avons discuté en Sec. 3.1.3, pour de faibles taux de déformation, la variable polaire S a une dynamique beaucoup plus rapide que θ . Cette séparation d'échelle influence grandement la dynamique transitoire du système soumis à un incrément de taux de déformation. Si nous décomposons les deux variables S et θ en $S = S_{ps} + \delta S$ et $\theta = \theta_{ps} + \delta\theta$, avec S_{ps} et θ_{ps} les valeurs dans l'état initial pour un taux de déformation de $\dot{\gamma}_0$, le système (3.9) nous indique que juste après l'incrément de taux de déformation $\delta\dot{S} \sim \Delta\dot{\gamma}$, tandis que $\delta\dot{\theta}$ demeure nul. Un peu plus tard, nous avons encore $\delta\dot{\theta} \sim \dot{\gamma}\delta S/S_{ps}$ et la dynamique de θ est donc beaucoup plus lente que celle de S .

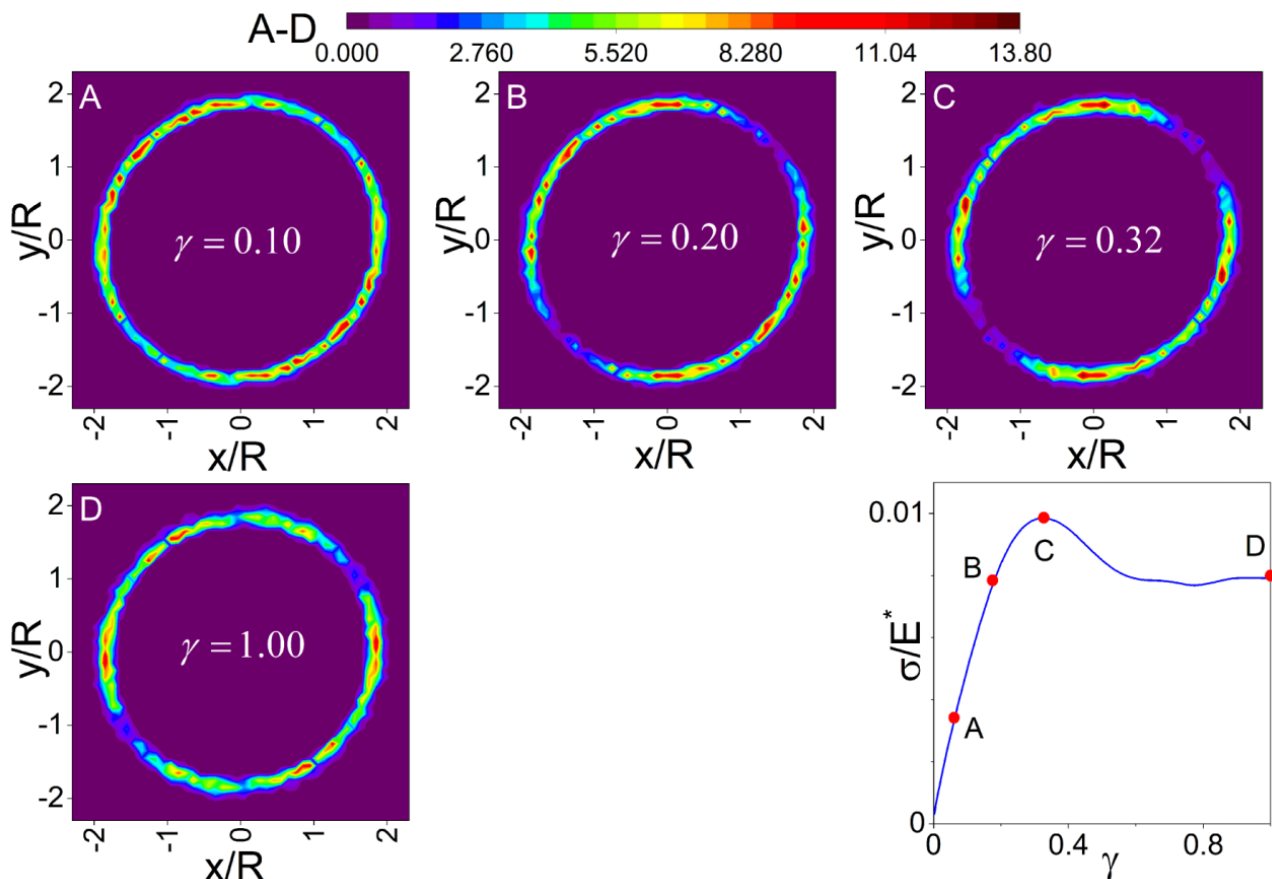


FIGURE 3.9 – Évolution de la fonction de corrélation de paire au cours du régime transitoire en cisaillement simple dans des simulations de dynamique moléculaire 3D. La fonction de corrélation de paire dans le plan de cisaillement est représentée pour différents points de la courbe de charge (en bas à droite) pour un taux de cisaillement $\eta_s \dot{\gamma} / E^* = 10^{-4}$, avec η_s la viscosité du fluide suspendant et E^* le module d'élasticité des sphères déformables. A,B : avant l'overshoot, C : à l'overshoot, D : dans l'état stationnaire. Figure adaptée de [Khabaz et al., 2021]

Nous avons représenté cette dynamique dans le plan polaire (S, θ) en Fig. 3.8, illustrant la relaxation radiale rapide et la relaxation orthoradiale comparativement lente. À partir de cette représentation, nous pouvons facilement prédire le comportement transitoire de $\sigma = S \sin \theta$ et $N_1 = 2S \cos \theta$. Une augmentation du taux de déformation ($\Delta \dot{\gamma} > 0$) engendre une augmentation rapide de S et une diminution plus lente de θ , conduisant à un maximum local avant une décroissance de σ et une augmentation monotone de N_1 . Inversement, une diminution du taux de déformation ($\Delta \dot{\gamma} < 0$) conduit à un minimum local avant une augmentation de σ et une diminution monotone en N_1 . L'intégration numérique du système (3.6) confirme ces prédictions (Fig. 3.8). Le cas de l'extension planaire ($\varphi = 0$) se distingue ici, car $\sigma = 0$ et la relaxation ne se déroule que sur N_1 , comme nous le voyons en Fig. 3.8.

Du point de vue microstructurel, les contacts suivent le processus suivant : ils sont tout d'abord comprimés radialement dans le quadrant compressionnel et étirés radialement dans le quadrant extensionnel. Encore une fois, les forces de contact les plus importantes se trouvent dans le quadrant compressionnel, la compression de ces contacts conduit à l'augmentation de ces forces de contact et à leur contribution à σ tandis que la contribution négative du quadrant extensionnel à σ diminue. Les contacts atteignent rapidement leur longueur stationnaire et commencent alors à tourner dans le sens horaire. L'amplitude des forces de contact demeure identique mais leur projection contribuant à σ diminue, ce qui entraîne la chute de σ tandis que N_1 continue à croître, mais plus lentement. Le processus inverse se produit lors d'un incrément négatif de $\dot{\gamma}$: élongation/compression

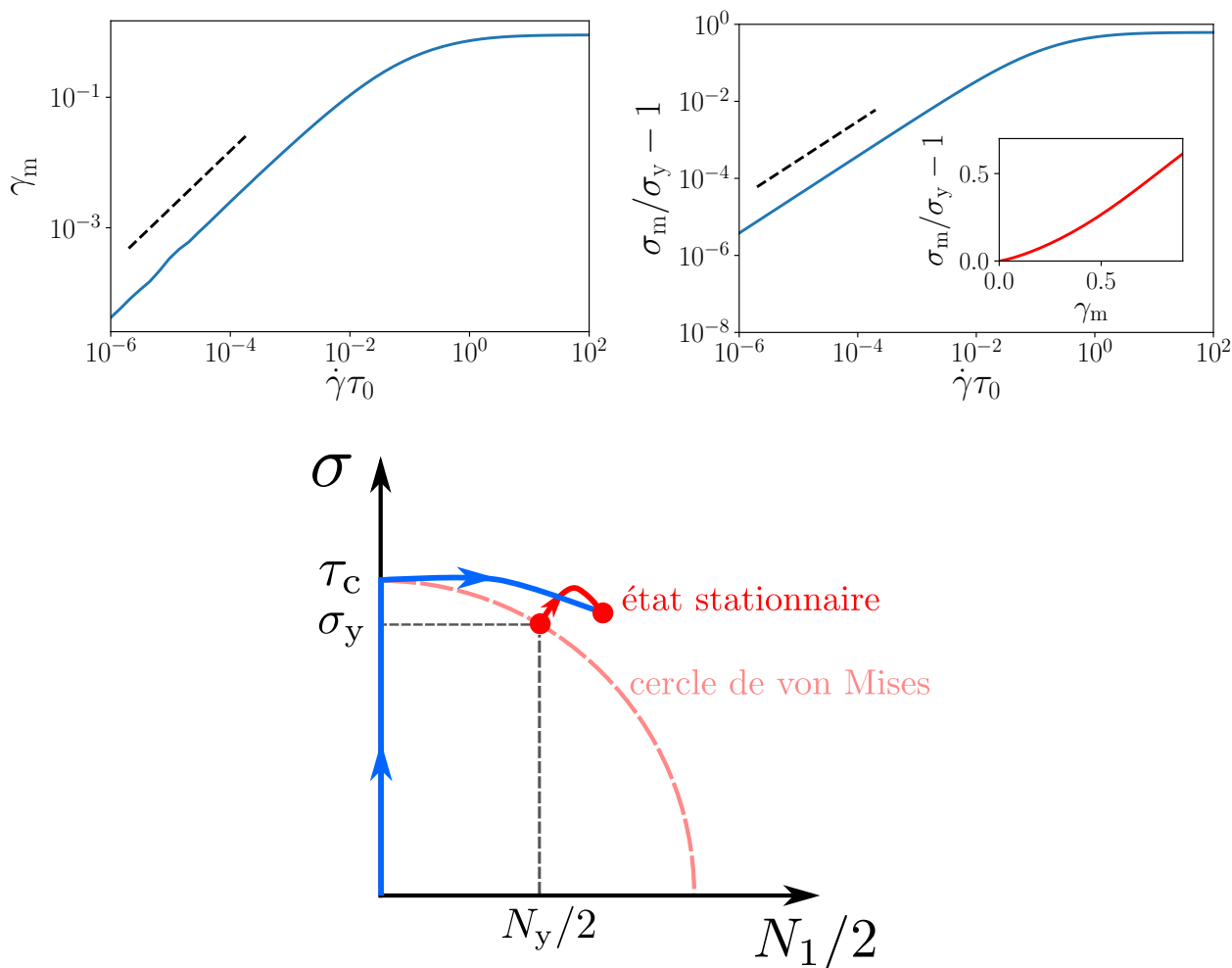


FIGURE 3.10 – **Évolution de la position et de l’amplitude du maximum local en σ dans le cas du cisaillement simple.** (*haut, gauche*) Évolution de γ_m , la position de l’overshoot en σ en fonction de $\dot{\gamma}$. La courbe en trait noir pointillé représente la loi de puissance $\gamma_m \sim \dot{\gamma}^{0.88}$. (*haut, droite*) Évolution de σ_m , l’amplitude de l’overshoot en σ en fonction de $\dot{\gamma}$. La courbe en trait noir pointillé représente une évolution linéaire $\sigma_m/\sigma_y - 1 \sim \dot{\gamma}$. Nous avons représenté en encart l’évolution de l’amplitude de l’overshoot avec sa position. Toutes les courbes sont obtenues pour un écart au jamming de $\Delta\phi = 1 \times 10^{-2}$. (*bas*) Représentation schématique de la trajectoire du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ dans notre modèle en partant du seuil de plasticité (trajectoire rouge) et dans un modèle VEPM en partant d’un état de contrainte nulle (trajectoire bleue).

rapide des contacts dans le quadrant compressionnel/extensionnel jusqu’à l’undershoot suivie d’une réorientation plus lente des contact dans le sens antihoraire. Certains travaux expérimentaux sur des verres de sphères dures [Koumakis et al., 2012] ou des gels colloïdaux [Mohraz and Solomon, 2005] ont permis d’associer l’overshoot en σ à un état d’anisotropie maximum. Une étude récente s’est également intéressée à la microstructure de suspensions denses athermiques dans des simulations de dynamique moléculaire [Khabaz et al., 2021]. Là encore, l’overshoot est associé à un maximum d’anisotropie. Nous avons reproduit en Fig. 3.9 l’évolution de la fonction de corrélation de paire en différents points de la courbe de charge. Khabaz *et al.* observent que l’anisotropie augmente progressivement jusqu’à l’overshoot, avec une accumulation de voisins dans le quadrant compressionnel associée à une diminution du nombre de voisin dans le quadrant élongationnel. Après l’overshoot l’anisotropie faiblit. Les données semblent indiquer une rotation de l’orientation de l’anisotropie après l’overshoot, mais en l’absence de mesure quantitative de cette orientation, il n’est pas possible de conclure avec certitude. Du point de vue de notre modèle, il serait intéressant d’étudier l’importance relative des anisotropies d’ordre 2 par rapport à celle d’ordre supérieur ainsi que d’étudier l’évolution de l’orientation de ces anisotropie

d'ordre 2 dans le régime transitoire. Nous n'avons cependant pas connaissance de tels travaux pour des systèmes athermiques qui pourraient rentrer dans le cadre d'étude de notre modèle. Celui-ci permet d'éclairer la rhéologie transitoire non-triviale des suspensions denses molles par un schéma microstructural simple qui pourrait être testé expérimentalement ou numériquement.

Nous avons également étudié l'évolution de la position et de l'amplitude de l'overshoot en fonction de $\dot{\gamma}$ dans le cas du cisaillement simple. À $\gamma = 0$ notre système de fraction surfacique $\phi = 1.26$ se trouve au seuil de plasticité de coordonnées $(N_y/2, \sigma_y)$ dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ et nous lui appliquons un cisaillement d'amplitude $\dot{\gamma}$. Nous notons γ_m la déformation à laquelle le système atteint son maximum local en σ et σ_m la valeur de ce maximum local. La résolution numérique du système (3.6) nous permet d'étudier l'évolution de ces deux grandeurs avec $\dot{\gamma}$, représentées en Fig. 3.10. Des travaux récents montrant que la variable pertinente pour quantifier l'amplitude de l'overshoot dans le cas de la charge d'un matériau à partir d'un état de contrainte nulle est $\sigma_m/\sigma_y - 1$ plutôt que σ_m [Benzi et al., 2021a, Benzi et al., 2021b], nous avons choisi de nous intéresser à l'évolution de cette variable. À faibles taux de cisaillement γ_m suit une loi de puissance d'exposant ≈ 0.9 tandis que $\sigma_m/\sigma_y - 1$ croît linéairement avec $\dot{\gamma}$. Ces deux valeurs atteignent un palier $\gamma_m \approx 0.9$ et $\sigma_m/\sigma_y - 1 \approx 0.6$ à $\dot{\gamma} \approx 1$. Une augmentation de σ_m/σ_y avec $\dot{\gamma}$ est également observée dans [Khabaz et al., 2021]. Dans cette dernière étude, il n'est toutefois pas clair si σ_m tend vers σ_y ou une valeur légèrement plus élevée lorsque $\dot{\gamma}$ tend vers 0. Nos résultats semblent appuyer la première option. Toutefois nous n'étudions pas une charge depuis un état de contrainte nulle ou le système explore son domaine élastique et il convient donc de nuancer nos résultats. Ainsi, dans notre étude nous choisissons comme état initial le point du cercle de von Mises vers lequel tend l'état stationnaire de notre système lorsque le taux de déformation tend vers 0. En pratique, rien n'indique que le régime élastique amène le système à ce point du cercle de von Mises. Ainsi, dans les modèles VEPM classiques, tels que le modèle de Saramito [Saramito, 2007], le matériau se comporte comme un solide élastique en-dessous du seuil de plasticité avec une relation du type $\dot{\Sigma} \propto E^\infty$, si bien que dans le cas du cisaillement simple le système se déplace uniquement le long de l'axe (σ) dans le domaine élastique comme représenté en Fig. 3.10. Ainsi lorsqu'il atteint le cercle de von Mises $N_1 = 0$ et $\sigma = \tau_c > \sigma_y$. Dans ce type de modèle σ_m tend donc vers τ_c lorsque le taux de cisaillement tend vers 0. Là encore, il serait intéressant d'avoir accès aux différences de contraintes normales dans le régime transitoire afin d'avoir une idée plus claire de la trajectoire du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ et du lien entre le critère de plasticité et l'overshoot dans la courbe de charge.

3.3.2 Relaxation des contraintes après arrêt de l'écoulement

Un cas particulier du protocole précédent est celui de l'arrêt de l'écoulement où l'incrément appliqué vaut $-\dot{\gamma}_0$. Nous avons représenté en Fig. 3.11 la relaxation des contraintes après l'arrêt de l'écoulement dans le cas d'un cisaillement simple ($\varphi = \pi/4$) pour différentes valeurs de $\dot{\gamma}_0$. Nous notons que notre modèle prédit une relaxation vers un état de contraintes non-nulles. La différence de contraintes normales relaxe vers une valeur supérieure à sa valeur N_y au seuil et d'autant plus élevée que $\dot{\gamma}_0$ est grand. La contrainte de cisaillement relaxe quant à elle en-dessous de sa valeur au seuil σ_y et nous observons une inversion des courbes : plus le pré-cisaillement $\dot{\gamma}_0$ est grand, plus la valeur de σ dans l'état initial est élevée et plus la valeur finale de σ est faible, les courbes de relaxation de σ pour différents $\dot{\gamma}_0$ se croisant toute approximativement au même temps t^* lorsque $\sigma = \sigma_y$. Ce phénomène non-trivial a déjà été observé expérimentalement et numériquement comme nous l'avons mentionné en introduction de cette thèse [Mohan et al., 2013a, Mohan et al., 2014, Lidon et al., 2017, Zakhari et al., 2018]. Cette inversion de la contrainte se comprend facilement dans la représentation polaire de notre modèle. En effet, l'arrêt de l'écoulement ($\dot{\gamma} = 0$) fait relaxer le système vers le cercle de von Mises en conservant θ constant, l'Eq. (3.9b) impliquant $\dot{\theta} = 0$ lorsque $\dot{\gamma} = 0$. La variable S , quant à elle, relaxe vers S_0 , sa valeur dans l'état stationnaire en absence de déformation. Comme nous l'avons constaté lors de l'analyse à faible $\dot{\gamma}$ de l'état stationnaire de notre système, l'angle initial θ_{ps} diminue avec $\dot{\gamma}$. Dans l'état final, N_1 vaut donc $N_f = 2S_0 \cos \theta_{ps}$ tandis que σ relaxe vers $\sigma_f = S_0 \sin \theta_{ps}$. L'angle θ_{ps} étant une fonction décroissante de $\dot{\gamma}_0$, N_f augmente avec $\dot{\gamma}_0$ tandis qu'à l'inverse σ_f décroît. À faible θ_0 , il est possible d'approximer l'angle θ_{ps} par $\theta_0 + \theta_1 \dot{\gamma}_0$. En remplaçant cette approximation dans l'expression de N_f et σ_f puis en développant au premier ordre ces expressions et en utilisant les expressions de N_y , σ_y et θ_1 , nous obtenons

$$N_f = N_y + \frac{\sigma_y \tan \varphi}{\bar{\beta}} \dot{\gamma}_0, \quad (3.22)$$

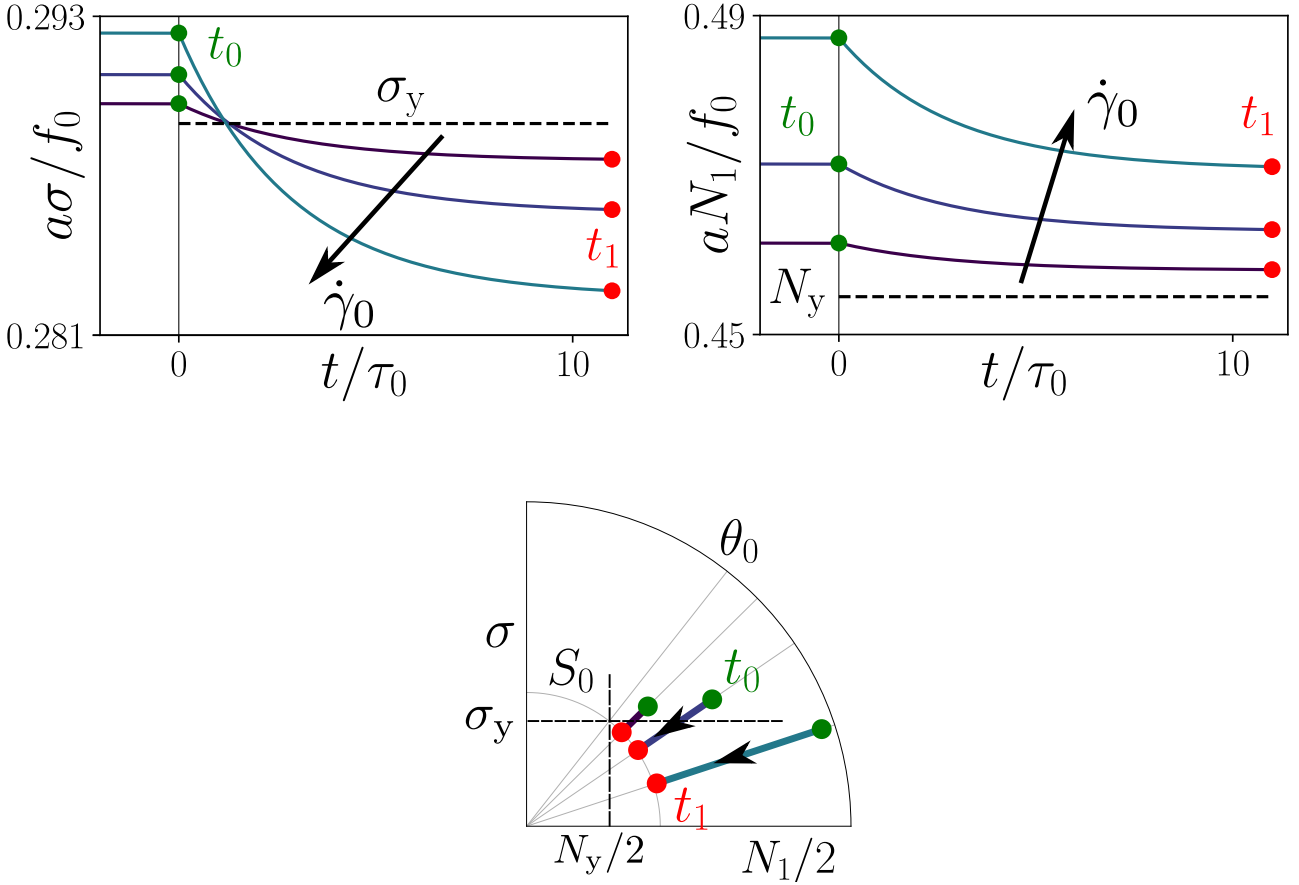


FIGURE 3.11 – **Relaxation de la contrainte après arrêt de l'écoulement en cisaillement simple pour un écart au jamming de $\Delta\phi = 0.01$.** (haut) Évolution temporelle de σ et N_1 après l'arrêt du cisaillement pour des valeurs de pré-cisaillement de $\dot{\gamma}_0 = 2 \times 10^{-3}, 5 \times 10^{-3}, 10^{-2}$. (bas) Trajectoire schématique du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ après arrêt du cisaillement pour les valeurs de pré-cisaillement précédentes.

$$\sigma_f = \sigma_y - \frac{N_y \tan \varphi}{2\bar{\beta}} \dot{\gamma}_0. \quad (3.23)$$

Ainsi N_f croît avec $\dot{\gamma}_0$ pour tout écoulement à $\varphi > 0$ tandis que σ_f décroît avec $\dot{\gamma}_0$. La décroissance de la contrainte de cisaillement résiduelle est linéaire avec le taux de pré-cisaillement. Des dépendances plus faibles sont observées expérimentalement : [Lidon et al., 2017] rapportent une décroissance en $\dot{\gamma}_0^{-0.2}$ tandis que [Mohan et al., 2014] observent une décroissance en $-\log \dot{\gamma}_0$.

Il est possible d'obtenir l'évolution temporelle approximative des variables pour de faibles valeurs de $\dot{\gamma}_0$ en linéarisant l'Eq. (3.9a) pour $\dot{\gamma} = 0$ en écrivant $S = S_0 + \delta S$, avec $\delta S \ll 1$. Nous obtenons ainsi la dynamique suivante pour δS :

$$\delta \dot{S} = -4\bar{\xi} S_0^2 \delta S = -2\bar{\beta} \delta S. \quad (3.24)$$

Pour de faibles valeurs de $\dot{\gamma}_0$, S relaxe donc quasi-exponentiellement selon

$$S(t) = S_0 + S_1 \dot{\gamma}_0 e^{-2\bar{\beta}t} \quad (3.25)$$

tandis que σ relaxe au premier ordre en $\dot{\gamma}_0$ selon

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= S(t) \sin \theta_{ps} \\ &= \left(S_0 + S_1 \dot{\gamma}_0 e^{-2\bar{\beta}t} \right) \sin (\theta_0 + \theta_1 \dot{\gamma}_0) \\ &= \sigma_y + \dot{\gamma}_0 \left(S_1 \sin \theta_0 e^{-2\bar{\beta}t} + S_0 \cos \theta_0 \theta_1 \right). \end{aligned} \quad (3.26)$$

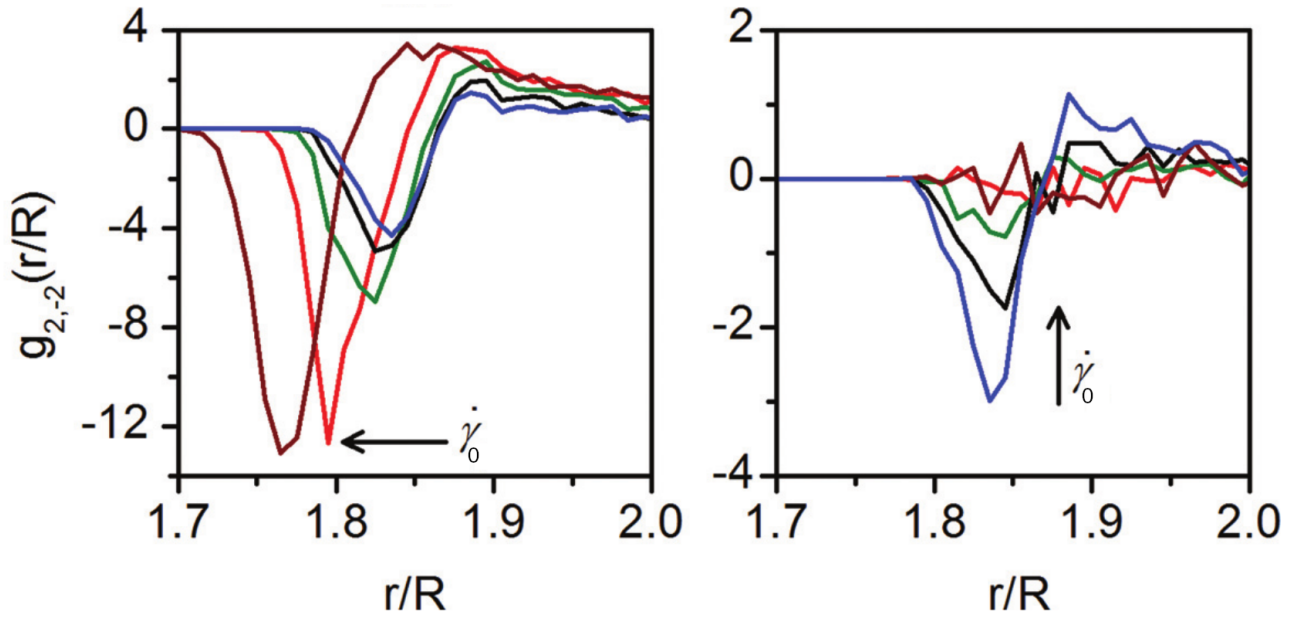


FIGURE 3.12 – Évolution de la microstructure après arrêt de la déformation dans [Mohan et al., 2014]. (gauche) Allure de $g_{2,-2}$ avant l'arrêt de la déformation pour différents précisaillements (R représente le rayon des particules). (droite) Allure de $g_{2,-2}$ dans l'état final pour différents précisaillements. Figures adaptées de [Mohan et al., 2014].

Nous voyons donc que $\sigma(t)$ atteint, en première approximation, sa valeur seuil à un temps t^* indépendant de $\dot{\gamma}_0$ et s'exprimant

$$t^* = -\frac{1}{2\beta} \ln \left(\frac{S_0}{2\beta S_1} \times \frac{\tan \varphi}{\tan \theta_0} \right). \quad (3.27)$$

Dans [Mohan et al., 2014] les auteurs s'intéressent également à l'évolution de la microstructure après l'arrêt de l'écoulement grâce à des simulations numériques. Ils étudient en particulier l'anisotropie du système à travers $g_{2,-2}(r)$, préfacteur de l'harmonique sphérique $Y_{2,-2}$ dans le développement angulaire de la fonction de corrélation de paire en 3D. Cette grandeur est particulièrement intéressante dans le cadre de notre modèle constitutif, puisqu'elle se compare à l'amplitude de l'harmonique d'ordre 2 en 2D, cette amplitude étant proportionnelle au produit $S \times g'_{\text{iso}}(r)$ dans le cadre de notre représentation de la microstructure du système. Nous donnons en Fig. 3.12 l'allure de la fonction $g_{2,-2}(r)$ avant l'arrêt de l'écoulement et dans l'état final pour différents précisaillements tel que présentée dans [Mohan et al., 2014]. Dans cette étude la décroissance de la contrainte est associée à une relaxation rapide des contacts caractérisée par une trajectoire ballistique des particules. La contrainte résiduelle s'explique par une anisotropie persistante dans l'état final. Si ces deux constatations peuvent s'accorder avec le scénario que suggère notre modèle constitutif, nous notons quelques différences. En effet, l'inversion de contrainte s'explique dans cette étude par une anisotropie résiduelle, caractérisée par l'amplitude de $g_{2,-2}$ d'autant plus forte que le précisaillement est faible. Dans notre cas, l'amplitude de l'anisotropie est la même quel que soit le précisaillement puisque $S = S_0$ dans l'état final pour tout $\dot{\gamma}_0$ et g_{iso} est une fonction n'ayant pas de dynamique propre. L'inversion de contrainte s'explique dans notre cas par l'orientation de l'anisotropie dans l'état final qui n'est pas étudiée dans [Mohan et al., 2014]. Par ailleurs, la relaxation rapide des contacts n'est pas caractérisée uniquement par la diminution de l'amplitude de l'anisotropie comme dans notre modèle mais s'accompagne également d'un déplacement du sommet du pic de premiers voisins (repéré par le changement de signe de $g_{2,-2}$ dans [Mohan et al., 2014]). Une telle dynamique n'est pas possible dans notre modèle puisque p (et donc r^* , position du pic de premiers voisins) est fixée par ϕ dans notre modèle.

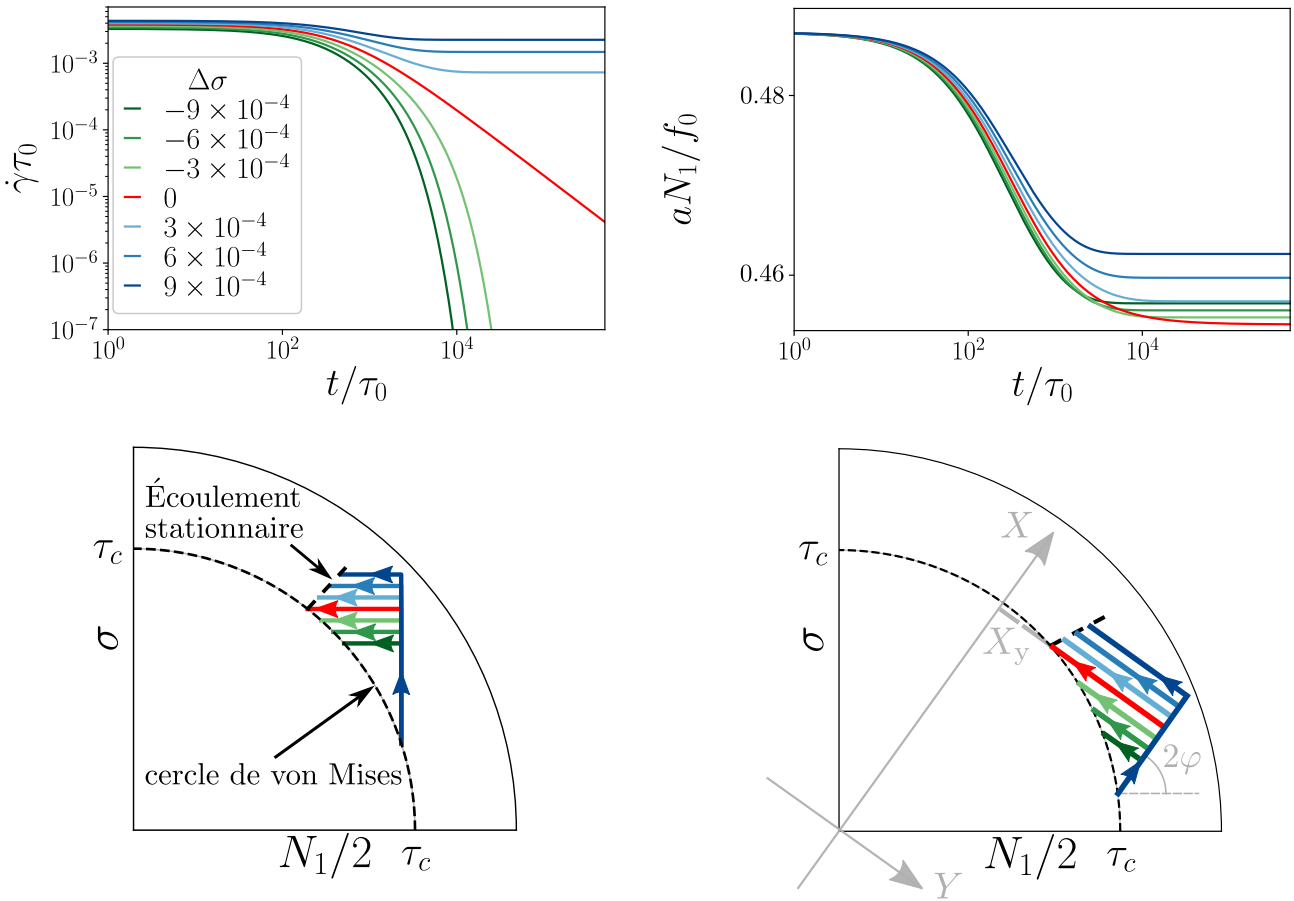


FIGURE 3.13 – **Protocole de fluage en cisaillement simple pour un système à $\Delta\phi = 0.01$ précisailé à $\tau_0 = 10^{-2}$.** (*haut, gauche*) Évolution temporelle de $\dot{\gamma}$ avec $\sigma_0 = \sigma_{y,s} + \Delta\sigma$ imposé pour différentes valeurs de $\Delta\sigma$. Pour $\Delta\sigma < 0$ (courbes vertes) $\dot{\gamma}$ tend vers 0 aux temps longs tandis qu’il tend vers une valeur non-nulle pour $\Delta\sigma > 0$ (courbes bleues). La courbe rouge représente la démarcation entre les deux cas ($\Delta\sigma = 0$) avec une loi de puissance $\dot{\gamma} \sim 1/t$ aux temps longs. (*haut, droite*) Évolution temporelle de N_1 pour les mêmes valeurs de σ_0 . La valeur finale de N_1 est minimale pour $\Delta\sigma = 0$ (courbe rouge). (*bas, gauche*) Représentation schématique de la trajectoire du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ pour les mêmes valeurs de σ_0 . Pour $\Delta\sigma < 0$, le système atteint le cercle de von Mises à l’état final. Pour $\Delta\sigma > 0$ le système suit le lieu des états stationnaires à $\dot{\gamma} > 0$. (*bas, droite*) Représentation schématique de la trajectoire du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ pour un écoulement quelconque avec $0 < \varphi < \pi/4$.

3.3.3 Fluage

Nous avons jusqu’à présent considéré des protocoles à déformation imposée. Nous nous intéressons dans cette section à des protocoles où le paramètre de contrôle n’est plus $\dot{\gamma}$ mais une contrainte. Dans le cas du cisaillement simple, la contrainte naturelle à imposer est σ tandis que dans le cas d’un écoulement extensionnel planaire, il s’agit de $N_1/2$. Nous souhaitons généraliser ce type de protocole à toute géométrie d’écoulement. Pour un écoulement quelconque, le paramètre de contrôle naturel est $X = (\boldsymbol{\Sigma}' : \mathbf{E}^\infty) / \dot{\gamma}$ puisqu’il s’agit de l’énergie que l’opérateur injecte au système par unité de déformation, qui correspond donc typiquement à un paramètre facilement contrôlable par l’opérateur. En utilisant les expressions (3.3) et (3.7) de \mathbf{E}^∞ et $\boldsymbol{\Sigma}'$ nous obtenons l’expression de X en fonction de S , θ et φ :

$$X = S \cos(2\varphi - \theta). \quad (3.28)$$

Il est facile de vérifier que $X = N_1/2$ pour $\varphi = 0$ et $X = \sigma$ pour $\varphi = \pi/4$. Notre modèle étant bidimensionnel, il faut associer à X une seconde variable. Au vu de l’expression de X , il est naturel de définir une seconde variable $Y = S \sin(2\varphi - \theta)$. Le changement de variables $(N_1/2, \sigma) \rightarrow (X, Y)$ correspond ainsi à une rotation de 2φ du repère. X et Y sont donc les coordonnées dans le repère formé par les axes principaux de \mathbf{E}^∞ . En utilisant

l'expression (3.4) de $\mathbf{\Omega}^\infty$, il est possible de montrer que $Y = - [(\mathbf{\Omega}^\infty \cdot \mathbf{\Sigma}' - \mathbf{\Sigma}' \cdot \mathbf{\Omega}^\infty) : \mathbf{E}^\infty] / (\dot{\gamma}^2 \tan \varphi)$. Il est possible d'obtenir une équation sur X en utilisant le fait que

$$\dot{X} = \frac{\dot{\gamma} (\dot{\mathbf{\Sigma}}' : \mathbf{E}^\infty) + \dot{\gamma} (\mathbf{\Sigma}' : \dot{\mathbf{E}}^\infty) - \ddot{\gamma} (\mathbf{\Sigma}' : \mathbf{E}^\infty)}{\dot{\gamma}^2} \quad (3.29)$$

En utilisant les expressions respectives de $\mathbf{\Sigma}'$ (Eq. (3.5)) et \mathbf{E}^∞ (Eq. (3.3)), il est possible de montrer que

$$\dot{\gamma} (\mathbf{\Sigma}' : \dot{\mathbf{E}}^\infty) - \ddot{\gamma} (\mathbf{\Sigma}' : \mathbf{E}^\infty) = 0. \quad (3.30)$$

De plus la projection de l'Eq. (2.54) sur le tenseur \mathbf{E}^∞ nous donne

$$\left(\dot{\mathbf{\Sigma}}' : \mathbf{E}^\infty \right) = \frac{\bar{\kappa} \dot{\gamma}^2}{2} + (\mathbf{\Omega}^\infty \cdot \mathbf{\Sigma}' - \mathbf{\Sigma}' \cdot \mathbf{\Omega}^\infty) : \mathbf{E}^\infty + (\bar{\beta} - 2\bar{\xi} S^2) (\mathbf{\Sigma}' : \mathbf{E}^\infty). \quad (3.31)$$

Nous en déduisons donc

$$\dot{X} = \dot{\gamma} \left(\frac{\bar{\kappa}}{2} - \tan \varphi Y \right) + \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} (X^2 + Y^2) \right] X. \quad (3.32)$$

En dérivant la relation $S^2 = X^2 + Y^2$, nous obtenons par ailleurs une équation d'évolution pour Y :

$$\dot{Y} = \dot{\gamma} \tan \varphi X + \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} (X^2 + Y^2) \right] Y \quad (3.33)$$

Nous pouvons désormais étudier le comportement du système ((3.32),(3.33)) suivant un protocole contrôlé en contrainte. Nous choisissons ici d'adapter à une géométrie quelconque le protocole de fluage en cisaillement simple de [Lidon et al., 2017]. Le système est ainsi tout d'abord soumis à une prédéformation selon un écoulement à φ quelconque et de grande amplitude $\dot{\gamma}$, puis nous laissons la contrainte se relaxer jusqu'à un tenseur de contrainte résiduelle $\mathbf{\Sigma}_r$ en arrêtant l'écoulement. D'après l'étude effectuée dans la section précédente, en suivant cette préparation, nous obtenons un système au seuil de plasticité avec une faible contrainte de cisaillement mais une forte différence de contraintes normales. Nous appliquons alors la même géométrie d'écoulement à $X = X_0$ constant. L'Eq. (3.32), nous permet donc d'exprimer $\dot{\gamma}$ en fonction du paramètre de contrôle X_0 et de la variable libre restante Y :

$$\dot{\gamma} = \frac{[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} (X_0^2 + Y^2)] X_0}{\tan \varphi Y - (\bar{\kappa}/2)}. \quad (3.34)$$

En remplaçant $\dot{\gamma}$ par son expression dans l'Eq. (3.33), nous obtenons la dynamique suivante pour Y :

$$\dot{Y} = \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} (X_0^2 + Y^2) \right] \left(Y + \frac{\tan \varphi X_0^2}{\tan \varphi Y - (\bar{\kappa}/2)} \right). \quad (3.35)$$

Pour $\varphi \neq 0$, nous avons donc potentiellement quatre solutions stables pour cette équation : $\pm \sqrt{S_0^2 - X_0^2}$ ou $(\bar{\kappa} \pm \sqrt{\bar{\kappa}^2 - 16 \tan^2 \varphi X_0^2}) / (4 \tan \varphi)$. Il est possible de montrer que pour $X_0 < X_y$ la solution stable est $\sqrt{S_0^2 - X_0^2}$ (où $X_y = S_0 \cos(2\varphi - \theta_0)$ est la valeur de X au seuil) tandis que pour $X_0 > X_y$ la valeur stable est $(\bar{\kappa} - \sqrt{\bar{\kappa}^2 - 16 \tan^2 \varphi X_0^2}) / (4 \tan \varphi)$. Autrement dit, pour un paramètre de contrôle inférieur à la valeur seuil dans l'état final $\dot{\gamma} = 0$ et le système se trouve au seuil de plasticité tandis que lorsque la contrainte imposée est supérieure à la valeur seuil nous obtenons $\dot{\gamma} \neq 0$ signifiant que le système s'écoule indéfiniment.

En Fig. 3.13, nous montrons l'intégration numérique du système ((3.34),(3.35)) dans le cas du cisaillement simple ($\varphi = \pi/4$) pour plusieurs valeurs de $X_0 = \sigma_0$ ($X = \sigma$ dans ce cas), inférieures ou supérieures à $\sigma_{y,s}$ la valeur de la contrainte de cisaillement au seuil. Comme nous pouvions nous y attendre, pour $\sigma < \sigma_{y,s}$, l'écoulement s'arrête après un temps fini, tandis que pour $\sigma > \sigma_{y,s}$, le taux de cisaillement décroît vers une valeur stationnaire strictement positive. La différence de contraintes normales N_1 (qui est associée à la variable Y dans le cas du cisaillement simple), décroît, quant à elle toujours vers une valeur stationnaire non-nulle.

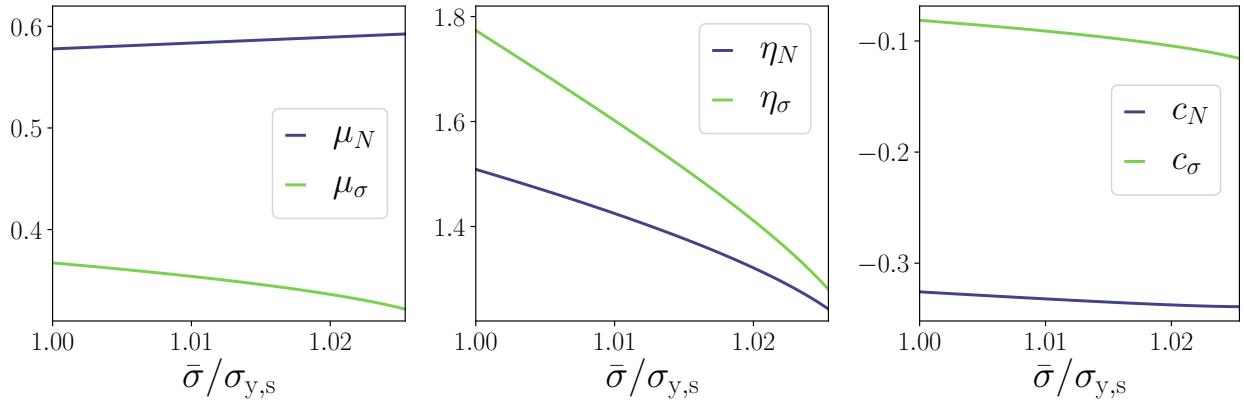


FIGURE 3.14 – **Évolution des paramètres des modèles de Maxwell couplés effectifs en fonction de $\bar{\sigma}$.** (gauche) Évolution des modules d'élasticité effectifs en fonction de $\bar{\sigma}$. (centre) Évolution des viscosité effectives en fonction de $\bar{\sigma}$. (droite) Évolution des constantes de couplages en fonction de $\bar{\sigma}$. Toutes les courbes sont tracées pour un système à $\Delta\phi = 0.01$. $\sigma_{y,s}$ est la valeur de σ au seuil de plasticité en cisaillement simple.

De plus, cette valeur stationnaire varie de façon non monotone avec σ_0 et est minimale lorsque $\sigma = \sigma_{y,s}$. Ceci se comprend d'autant mieux en traçant le lieu des points fixes du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$. Pour $\sigma_0 < \sigma_{y,s}$, les points fixes se trouvent tous sur le cercle de von Mises ($S = \tau_c$), avec un angle θ croissant (et donc $N_1 = 2S \cos \theta$ décroissant) lorsque σ_0 augmente. Pour $\sigma_0 > \sigma_{y,s}$, S augmente avec σ_0 assez rapidement pour contrebalancer l'augmentation continue de θ , de sorte que N_1 augmente maintenant avec σ_0 .

Pour $\sigma_0 = \sigma_{y,s}$, nous obtenons une décroissance en loi de puissance du taux de cisaillement. Il est possible d'expliquer analytiquement cette loi de puissance en s'intéressant aux Eqs. (3.34) et (3.35) lorsque $X_0 = X_y$. Pour cette valeur de X_0 la valeur stationnaire de Y est Y_y , la valeur de Y au seuil. Nous pouvons écrire $Y = Y_y + \delta Y$, avec $\delta Y \ll 1$ aux temps longs. En développant au plus faible ordre en δY l'Eq. (3.35), il est possible de montrer que $\delta \dot{Y} \propto -(\delta Y)^2$, ce qui implique $\delta Y \sim 1/t$ aux temps longs. En développant alors l'Eq. (3.34) en δY , nous montrons qu'aux temps long $\dot{\gamma} \sim \delta Y \sim t^{-1}$ qui est en effet l'exposant observé en Fig. 3.13 pour le cas du cisaillement simple. Une décroissance en loi de puissance $\dot{\gamma} \propto t^{-a}$ est également observée expérimentalement en cisaillement simple, mais avec $a \approx 2/3$ [Divoux et al., 2011a, Lidon et al., 2017]. Le récent modèle phénoménologique de Kamani montre également un bon accord avec des données expérimentales de microgels en cisaillement simple et prédit, quant à lui, $a = 1/n > 1$, avec $n < 1$, l'exposant de Herschel-Bulkley [Kamani et al., 2021].

3.4 Rhéologie oscillatoire

3.4.1 Superposition parallèle

La question de la viscoélasticité des écoulements de suspensions molles au-dessus du jamming a connu ces dernières années un certain intérêt [Benmouffok-Benbelkacem et al., 2010, N'Gouamba et al., 2019]. Se pose en particulier la question de la façon de quantifier l'élasticité de ces systèmes qui sont supposé ne pas être purement visqueux. Nous nous intéressons ici à cette question par le prisme de notre modèle constitutif. Nous suivons pour cela un protocole de superposition parallèle similaire à celui de [N'Gouamba et al., 2019] en imposant un cisaillement simple avec une contrainte oscillant faiblement autour d'une valeur moyenne, c'est-à-dire une contrainte de la forme $\sigma = \bar{\sigma} + \delta\sigma e^{i\omega t}$. En réponse à cette excitation, le système s'écoule avec une déformation de la forme $\gamma(t) = \bar{\gamma}t + \delta\gamma e^{i\omega t}$. Le taux de déformation du système s'écrit alors $\dot{\gamma} = \bar{\dot{\gamma}} + i\omega\delta\gamma e^{i\omega t}$. La différence de contraintes normales du système répond, quant à elle, à cette excitation en oscillant elle aussi autour d'une valeur moyenne $N_1 = \bar{N}_1 + \delta N_1 e^{i\omega t}$. L'état stationnaire du système (3.6) pour $\varphi = \pi/4$ nous fournit les relations suivantes entre les valeurs moyennes

$$\bar{N}_1 = \frac{\bar{k} - \sqrt{\bar{k}^2 - 16\bar{\sigma}^2}}{2}, \quad (3.36)$$

$$\bar{\gamma} = \frac{2\bar{\sigma}}{\bar{N}_1 - \bar{k}} \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} \left(\frac{\bar{N}_1^2}{4} + \bar{\sigma}^2 \right) \right], \quad (3.37)$$

tandis que la linéarisation du même système conduit à

$$\left\{ \left[i\omega + \bar{\xi} \left(\frac{3\bar{N}_1^2}{2} + 2\bar{\sigma}^2 \right) - \bar{\beta} \right] \delta N_1 = 2i\omega\bar{\sigma}\delta\gamma + (2\bar{\gamma} - 4\bar{\xi}\bar{\sigma}\bar{N}_1) \delta\sigma \right. \quad (3.38a)$$

$$\left. \left[\bar{\beta} - 2\bar{\xi} \left(\frac{\bar{N}_1^2}{4} + 3\bar{\sigma}^2 \right) - i\omega \right] \delta\sigma = i\omega \frac{\bar{N}_1 - \bar{k}}{2} \delta\gamma + \left(\frac{\bar{\gamma}}{2} + \bar{\xi}\bar{N}_1\bar{\sigma} \right) \delta N_1 \right. \quad (3.38b)$$

Ainsi notre modèle linéarisé peut être interprété comme deux modèles de Maxwell couplés sur la différence de contraintes normales et la contrainte de cisaillement

$$\left\{ \left(i\omega + \frac{\mu_N}{\eta_N} \right) \delta N_1 = i\omega\mu_N\delta\gamma + c_N\delta\sigma \right. \quad (3.39a)$$

$$\left. \left(i\omega + \frac{\mu_\sigma}{\eta_\sigma} \right) \delta\sigma = i\omega\mu_\sigma\delta\gamma + c_\sigma\delta N_1 \right. \quad (3.39b)$$

avec μ_N et μ_σ des modules élastiques effectifs, η_N et η_σ des viscosités effectives et c_N et c_σ des constantes de couplages fonctions de $\bar{\sigma}$

$$\mu_N = 2\bar{\sigma}, \quad (3.40)$$

$$\mu_\sigma = \frac{\bar{k} - \bar{N}_1}{2}, \quad (3.41)$$

$$\eta_N = \frac{2\bar{\sigma}}{\bar{\xi} (3\bar{N}_1^2/2 + 2\bar{\sigma}) - \bar{\beta}}, \quad (3.42)$$

$$\eta_\sigma = \frac{\bar{k} - \bar{N}_1}{4\bar{\xi} (\bar{N}_1^2/4 + 3\bar{\sigma}^2) - 2\bar{\beta}}, \quad (3.43)$$

$$c_N = 2\bar{\gamma} - 4\bar{\xi}\bar{\sigma}\bar{N}_1, \quad (3.44)$$

$$c_\sigma = -\frac{\bar{\gamma}}{2} - \bar{\xi}\bar{N}_1\bar{\sigma}. \quad (3.45)$$

Nous avons représenté en Fig. 3.14 l'évolution de ces coefficients avec $\bar{\sigma}$. Nous notons que μ_N croît avec la valeur moyenne de la contrainte imposée tandis que μ_σ décroît. Les deux viscosités effectives quant à elles décroissent. Par ailleurs, les constantes de couplage sont négatives et leur amplitude augmente avec $\bar{\sigma}$. Il est alors possible de définir des modules de conservation et de perte associés respectivement à N_1 et σ en cisaillement simple : $G'_{N,s} = \text{Re} \frac{\delta N_1}{\delta \gamma}$ et $G''_{N,s} = \text{Im} \frac{\delta N_1}{\delta \gamma}$ associés à N_1 et $G'_{\sigma,s} = \text{Re} \frac{\delta \sigma}{\delta \gamma}$ et $G''_{\sigma,s} = \text{Im} \frac{\delta \sigma}{\delta \gamma}$ associés à σ .

3.4.2 Modules de conservation et de perte au seuil de plasticité

Nous étudions tout d'abord le comportement au seuil de plasticité en prenant $\bar{\sigma} = \sigma_{y,s}$ avec $\sigma_{y,s}$ la contrainte de cisaillement au seuil de plasticité dans le cas du cisaillement simple. Nous avons alors $\bar{N}_1 = N_{y,s}$ et $\bar{\gamma} = 0$, avec $N_{y,s}$ la différence de contraintes normales au seuil dans le cas du cisaillement simple. En utilisant $N_{y,s}^2/4 + \sigma_{y,s}^2 = S_0^2 = \bar{\beta}/(2\bar{\xi})$, le système (3.38) se réduit à

$$\left\{ \left(i\omega + 2\bar{\xi}N_{y,s}^2 \right) \delta N_1 = 2i\omega\sigma_{y,s}\delta\gamma - 4\bar{\xi}N_{y,s}\sigma_{y,s}\delta\sigma \right. \quad (3.46a)$$

$$\left. - \left(i\omega + 4\bar{\xi}\sigma_{y,s}^2 \right) \delta\sigma = i\omega \frac{N_{y,s} - \bar{k}}{2} \delta\gamma + \bar{\xi}N_{y,s}\sigma_{y,s}\delta N_1 \right. \quad (3.46b)$$

En utilisant ce système, nous obtenons

$$G'_{N,s} = \frac{2\sigma_{y,s}\omega^2}{\omega^2 + 4\bar{\beta}^2}, \quad (3.47)$$

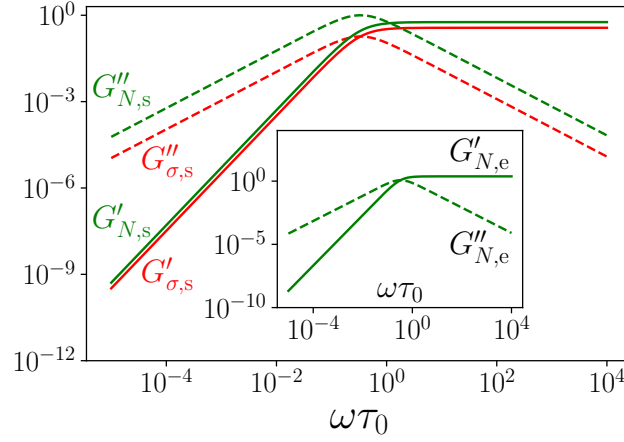


FIGURE 3.15 – Évolution des modules de conservation et de perte au seuil de plasticité en fonction de la pulsation dans le cas du cisaillement simple à $\Delta\phi = 0.01$. Nous avons représenté en encart l'évolution des modules associés à N_1 dans le cas d'un écoulement extensionnel planaire.

$$G''_{N,s} = \frac{4\bar{\beta}\omega}{\omega^2 + 4\bar{\beta}^2}, \quad (3.48)$$

$$G'_{\sigma,s} = \frac{(\bar{\kappa} - N_{y,s}) \omega^2}{2(\omega^2 + 4\bar{\beta}^2)}, \quad (3.49)$$

$$G''_{\sigma,s} = \frac{(\bar{\kappa} - N_{y,s}) \bar{\beta}\omega}{\omega^2 + 4\bar{\beta}^2}. \quad (3.50)$$

Nous avons représenté en Fig. 3.15 l'évolution de ces modules en fonction de la pulsation. Sans surprise, nous obtenons les mêmes dépendances en ω des modules que pour un modèle de Maxwell simple avec un comportement asymptotique $G' \sim \omega^2$ et $G'' \sim \omega$ dans la limite $\omega \rightarrow 0$, un palier en G' et une asymptote $G'' \sim \omega^{-1}$ dans la limite $\omega \rightarrow \infty$. La dépendance des modules de conservation et de perte est généralement étudiée autour d'un état de contrainte nulle dans la littérature expérimentale [Mohan et al., 2013b], protocole que notre modèle ne nous permet pas d'étudier. Les travaux récents de superposition parallèle dans des suspensions molles au-dessus du jamming n'étudient pas la dépendance en ω des modules, soit car cela n'est pas possible avec la technique utilisée [Benmouffok-Benbelkacem et al., 2010], soit car cette dépendance est supposée faible [N'Gouamba et al., 2019].

La même analyse peut être menée pour n'importe quelle géométrie d'écoulement. En particulier, pour un écoulement extensionnel planaire, il est possible de montrer que

$$G'_{N,e} = \frac{2\bar{\kappa}\omega^2}{\omega^2 + 4\bar{\beta}^2}, \quad (3.51)$$

$$G''_{N,e} = \frac{4\bar{\kappa}\bar{\beta}\omega}{\omega^2 + 4\bar{\beta}^2}. \quad (3.52)$$

La contrainte de cisaillement demeurant sans cesse nulle, les modules de conservation et de perte associés à σ sont triviaux. Nous avons représenté l'évolution de $G'_{N,e}$ et $G''_{N,e}$ en fonction de ω en encart de la Fig. 3.15.

3.4.3 Évolution des modules de conservation et de perte avec $\bar{\sigma}$

Nous revenons maintenant au cas général de la viscoélasticité en cisaillement simple en nous intéressant en particulier à l'influence de $\bar{\sigma}$ sur les modules de conservation et de perte. En utilisant le système (3.39) et la définition des modules de conservation et de pertes associés respectivement à N_1 et σ , nous obtenons les

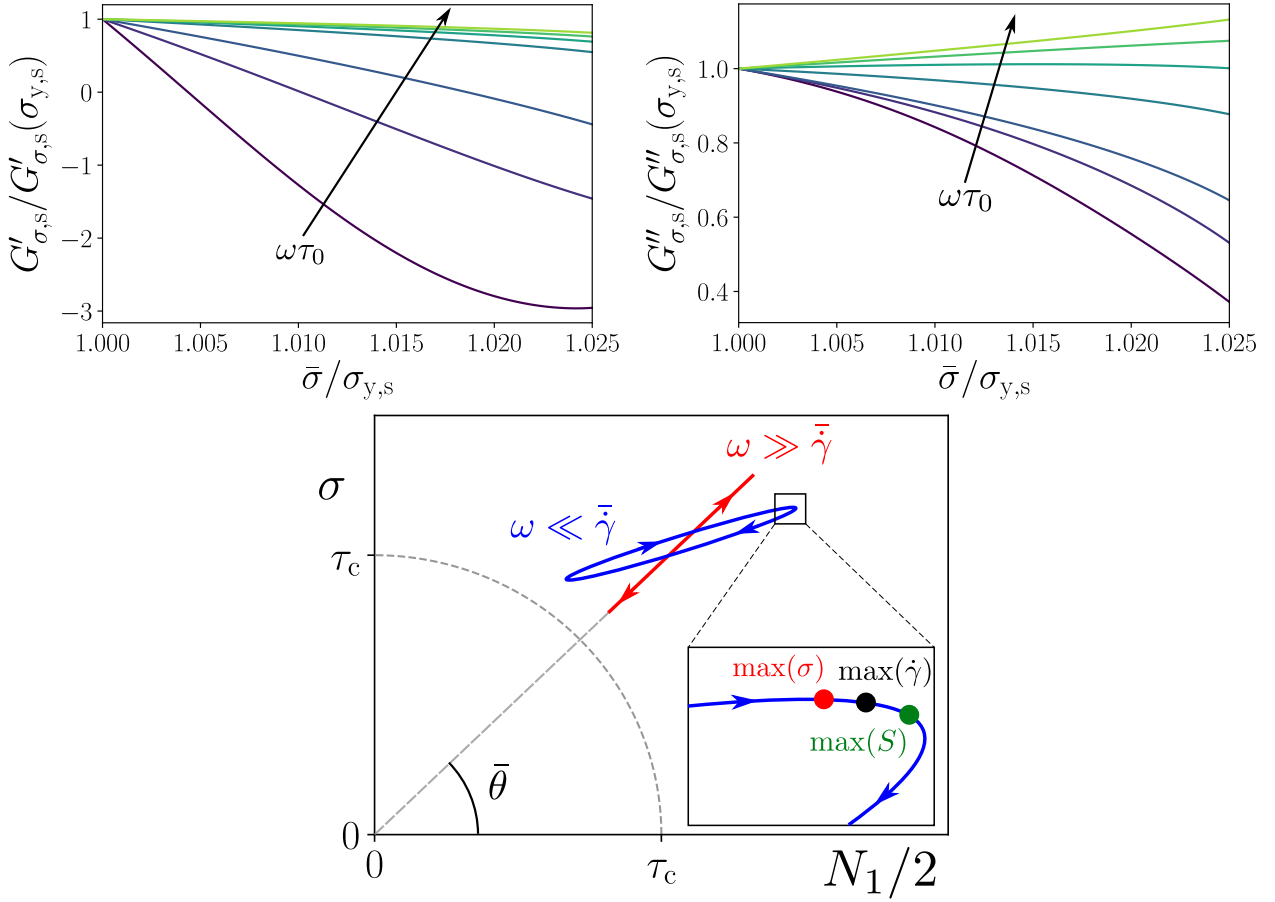


FIGURE 3.16 – **Évolution des modules de conservation et de perte avec $\bar{\sigma}$.** (haut) Évolution de $G'_{\sigma,s}$ et $G''_{\sigma,s}$ (normalisés par leur valeur au seuil) en fonction de $\bar{\sigma}$ pour différentes fréquences ($\omega\tau_0 = 3 \times 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}, 8 \times 10^{-2}, 3 \times 10^{-1}, 5 \times 10^{-1}, 7 \times 10^{-1}, 1$) à $\Delta\phi = 1 \times 10^{-2}$. (bas) Représentation schématique de la trajectoire du système dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ à basses et hautes fréquences.

expressions générales suivantes pour ces modules :

$$G'_{N,s} = \frac{\omega^2 [\mu_\sigma (c_N + \mu_N/\eta_\sigma) (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma) + \mu_N (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma))]}{\omega^2 (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma)^2 + (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma))^2}, \quad (3.53)$$

$$G''_{N,s} = -\frac{\omega [\mu_\sigma (\mu_N/\eta_\sigma + c_N) (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma)) + \omega^2 \mu_N (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma)]}{\omega^2 (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma)^2 + (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma))^2}, \quad (3.54)$$

$$G'_{\sigma,s} = \frac{\omega^2 [\mu_N (c_\sigma + \mu_\sigma/\eta_N) (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma) + \mu_\sigma (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma))]}{\omega^2 (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma)^2 + (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma))^2}, \quad (3.55)$$

$$G''_{\sigma,s} = -\frac{\omega [\mu_N (\mu_\sigma/\eta_N + c_\sigma) (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma)) + \omega^2 \mu_\sigma (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma)]}{\omega^2 (\mu_N/\eta_N + \mu_\sigma/\eta_\sigma)^2 + (\omega^2 + c_N c_\sigma - \mu_N \mu_\sigma / (\eta_N \eta_\sigma))^2}. \quad (3.56)$$

Nous avons représenté en Fig. 3.16 l'évolution de $G'_{\sigma,s}$ et $G''_{\sigma,s}$, qui sont les deux modules généralement mesurés dans les expériences de superposition parallèle, en fonction de $\bar{\sigma}$ pour différentes valeurs de ω . Nous notons que le module de conservation décroît rapidement avec $\bar{\sigma}$ à basse fréquence, en accord qualitatif avec les observations de la littérature expérimentale [Benmouffok-Benbelkacem et al., 2010, N'Gouamba et al., 2019]. Le module de perte, quant à lui, décroît avec $\bar{\sigma}$ à basse fréquence mais devient croissant à plus hautes fréquences ($\omega \gtrsim 5 \times 10^{-1}$ pour $\Delta\phi = 0.01$). Expérimentalement, [N'Gouamba et al., 2019] rapportent une décroissance du module de perte avec $\bar{\sigma}$, sans toutefois vérifier si ce résultat est robuste lorsque la fréquence de l'excitation varie.

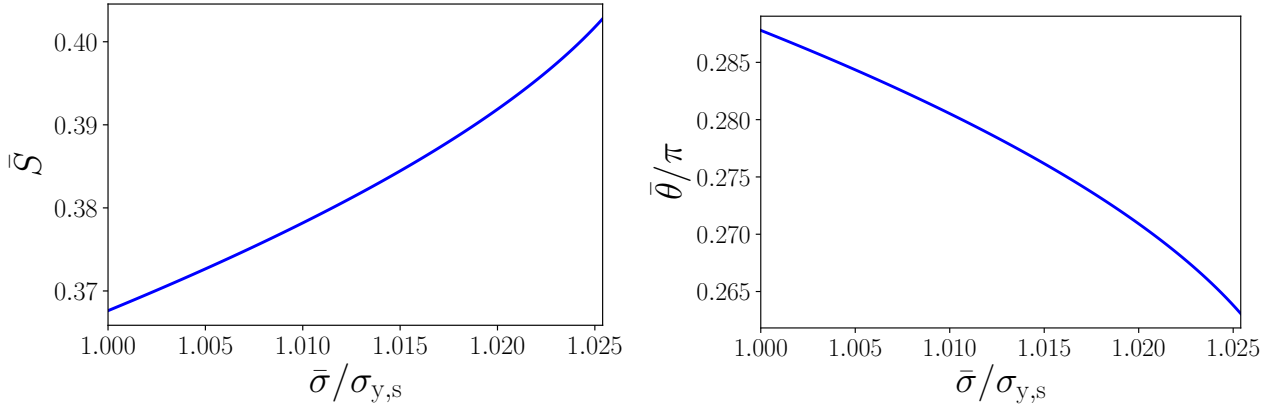


FIGURE 3.17 – **Évolution des valeurs moyennes des variables polaires.** (gauche) Évolution de \bar{S} en fonction de $\bar{\sigma}$. (droite) Évolution de $\bar{\theta}$ en fonction de $\bar{\sigma}$.

Nous obtenons par ailleurs un comportement qui peut sembler étonnant puisque $G'_{\sigma,s}$ peut, à basse fréquence, devenir négatif lorsque $\bar{\sigma}$ augmente. Notre système se comporte alors comme un fluide visco-élastique avec un module d'élasticité négatif. Pour comprendre ce phénomène, il est utile de l'analyser de nouveau en représentation polaire. En linéarisant le système (3.9) pris à $\varphi = \pi/4$, en écrivant la réponse des variables polaires à une excitation sous la forme $S = \bar{S} + \delta S e^{i\omega t}$ et $\theta = \bar{\theta} + \delta\theta e^{i\omega t}$, nous obtenons

$$\begin{cases} \left(i\omega - \bar{\beta} + 6\bar{\xi}\bar{S}^2 \right) \delta S = i\omega \frac{\bar{\kappa} \sin \bar{\theta}}{2} \delta\gamma + \frac{\bar{\gamma}\bar{\kappa} \cos \bar{\theta}}{2} \delta\theta & (3.57a) \\ \left(i\omega + \frac{\bar{\gamma}\bar{\kappa}}{2\bar{S}} \sin \bar{\theta} \right) \delta\theta = -\frac{\bar{\gamma}\bar{\kappa} \cos \bar{\theta}}{2\bar{S}^2} \delta S & (3.57b) \end{cases}$$

Les valeurs moyennes \bar{S} et $\bar{\theta}$ vérifient quant à elles

$$\bar{S}^2 = \frac{\bar{N}_1^2}{4} + \bar{\sigma}^2, \quad (3.58)$$

$$\cos \bar{\theta} = \frac{2\bar{S}}{\bar{\kappa}}. \quad (3.59)$$

Nous avons représenté en Fig. 3.17 l'évolution de ces grandeurs avec $\bar{\sigma}$. Nous constatons que l'augmentation de la valeur moyenne de la contrainte appliquée a pour effet d'augmenter l'anisotropie du système et de faire tourner dans le sens horaire l'orientation de cette anisotropie.

L'Eq. (3.57b) ne faisant pas apparaître $\delta\gamma$, elle contraint les oscillations sur la variable θ en fonction de celles sur S avec une relation directe entre $\delta\theta$ et δS :

$$\delta\theta = \frac{1}{\omega^2 + \frac{\bar{\gamma}^2 \bar{\kappa}^2}{4\bar{S}^2} \sin^2 \bar{\theta}} \times \left(-\frac{\bar{\gamma}^2 \bar{\kappa}^2 \sin \bar{\theta} \cos \bar{\theta}}{4\bar{S}^2} + i\omega \frac{\bar{\gamma}\bar{\kappa} \cos \bar{\theta}}{2\bar{S}^2} \right) \delta S \quad (3.60)$$

L'angle θ oscille donc toujours en avance de phase sur S avec un déphasage compris entre $\pi/2$ et π .

Dans le régime des hautes fréquences ($\omega \gg \bar{\gamma}$), $|\delta\theta| \sim (\bar{\gamma}/\omega)|\delta S|$ et les variations de θ sont donc négligeables par rapport à celles de δS . Cela s'explique encore une fois par la séparation d'échelle de temps entre ces deux variables. En effet, θ étant une variable lente, elle ne peut répondre à des oscillations rapides et les contacts oscillent essentiellement de façon radiale, tel que représenté en Fig. 3.16. L'Eq. (3.57a) conduit à un modèle de Maxwell classique sur S :

$$\left(i\omega - \bar{\beta} + 6\bar{\xi}\bar{S}^2 \right) \delta S = i\omega \frac{\bar{\kappa} \sin \bar{\theta}}{2} \delta\gamma. \quad (3.61)$$

Les modules associés à S valent alors

$$G'_{S,s} = \text{Re} \frac{\delta S}{\delta\gamma} = \frac{\omega^2 \bar{\kappa} \sin \bar{\theta}}{2 \left[\omega^2 + (-\bar{\beta} + 6\bar{\xi}\bar{S}^2)^2 \right]} > 0, \quad (3.62)$$

$$G''_{S,s} = \operatorname{Re} \frac{\delta S}{\delta \gamma} = \frac{\omega (6\bar{\xi}\bar{S}^2 - \bar{\beta}) \bar{\kappa} \sin \bar{\theta}}{2 [\omega^2 + (-\bar{\beta} + 6\bar{\xi}\bar{S}^2)^2]} > 0, \quad (3.63)$$

puisque l'angle $\bar{\theta}$ se situe dans le cadran $[0, \pi/2]$ et que $6\bar{\xi}\bar{S}^2 - \bar{\beta} > 6\bar{\xi}\bar{S}_0^2 - \bar{\beta} = 2\bar{\beta} > 0$. Les oscillations n'ayant lieu que radialement dans le plan $(N_1/2, \sigma)$, nous avons $\delta\sigma = \sin \bar{\theta} \delta S$, ce qui conduit à $G'_{\sigma,s} = \sin \bar{\theta} G'_{S,s}$ et $G''_{\sigma,s} = \sin \bar{\theta} G''_{S,s}$. La contrainte de cisaillement oscille donc en phase avec S et le module de conservation qui lui est associé est positif. La décroissance du module d'élasticité s'explique, quant à elle, de nouveau par l'orientation de l'anisotropie. En effet dans la limite des hautes fréquences, l'Eq. (3.62) conduit à $G'_{\sigma,s} \sim \bar{\kappa} \sin^2 \bar{\theta}/2$. L'angle $\bar{\theta}$, qui représente l'orientation moyenne de Σ' (et donc le double de l'orientation moyenne de l'anisotropie), étant une fonction décroissante de $\bar{\sigma}$, $G'_{\sigma,s}$ diminue avec $\bar{\sigma}$. La baisse de $G'_{\sigma,s}$ s'explique donc dans notre modèle par la rotation de l'anisotropie du système. Par ailleurs dans cette limite $G''_{\sigma,s} \sim \bar{\kappa} (6\bar{\xi}\bar{\sigma}^2 - \bar{\beta} \sin^2 \bar{\theta}) / (2\omega)$ et $G''_{\sigma,s}$ croît donc avec $\bar{\sigma}$.

Dans le régime des basses fréquences ($\omega \ll \bar{\gamma}$), au contraire, $|\delta\theta| \sim |\delta S|$ et la variable θ a le temps de répondre aux excitations, contribuant ainsi à la réponse linéaire du système. Les oscillations ne sont alors plus simplement radiales dans le plan $(N_1/2, \sigma)$. L'Eq. (3.60) devient dans cette limite

$$\delta\theta \approx \left(-\frac{1}{\bar{S} \tan \bar{\theta}} + i\omega \frac{2 \cos \bar{\theta}}{\bar{\gamma} \bar{\kappa} \sin^2 \bar{\theta}} \right) \delta S. \quad (3.64)$$

La partie imaginaire de $\delta\theta/\delta S$ étant d'ordre $\omega/\bar{\gamma}$, les variables polaires oscillent en quasi opposition de phase. En première approximation, le système suit donc une trajectoire rectiligne dans le plan $(N_1/2, \sigma)$. C'est cependant le fait que les deux variables ne sont pas en exacte opposition de phase et que la trajectoire du système n'est pas rectiligne mais plutôt une ellipse oblongue qui contribue à générer un module de conservation négatif pour la contrainte de cisaillement. En effet, en injectant l'expression précédente dans l'Eq. (3.57a), l'équation sur S peut encore une fois se réduire à un modèle de Maxwell

$$\left(i\omega + \frac{\mu_S}{\eta_S} \right) \delta S = i\omega \mu_S \delta \gamma, \quad (3.65)$$

avec le module et la viscosité effectifs suivants

$$\mu_S = \frac{\bar{\kappa} \sin \bar{\theta}}{2} \left(1 - \frac{1}{\tan^2 \bar{\theta}} \right)^{-1}, \quad (3.66)$$

$$\eta_S = \left(\frac{\bar{\gamma}}{\bar{S} \tan^2 \bar{\theta}} + \frac{12\bar{\xi}\bar{S}^2 - 2\bar{\beta}}{\bar{\kappa} \sin \bar{\theta}} \right)^{-1}. \quad (3.67)$$

Nous avons représenté l'évolution de ces coefficients en fonction de $\bar{\sigma}$ en Fig. 3.18. Comme $\bar{\theta} > \pi/4$ quel que soit $\bar{\sigma}$, le module d'élasticité effectif est bien une grandeur positive, de même pour la viscosité effective puisque $12\bar{\xi}\bar{S}^2 - 2\bar{\beta} > 0$. Les modules de conservation et de perte associés à S valent quant à eux :

$$G'_{S,s} = \frac{\mu_S \eta_S^2 \omega^2}{\mu_S^2 + \eta_S^2 \omega^2}, \quad (3.68)$$

$$G''_{S,s} = \frac{\eta_S \mu_S^2 \omega}{\mu_S^2 + \eta_S^2 \omega^2} \quad (3.69)$$

et sont bien des grandeurs positives. Par ailleurs, $\delta\sigma$ s'exprime désormais de la sorte en fonction de δS :

$$\begin{aligned} \delta\sigma &= \sin \bar{\theta} \delta S + \bar{S} \cos \bar{\theta} \delta\theta \\ &= \left(-\frac{\cos 2\bar{\theta}}{\cos \bar{\theta}} + \frac{2i\omega}{\bar{\gamma} \bar{\kappa} \tan \bar{\theta}} \right) \frac{\delta S}{\tan \bar{\theta}}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Encore une fois, comme $\bar{\theta} > \pi/4$, $-\cos 2\bar{\theta}/\cos \bar{\theta}$ est positif. La partie imaginaire de $\delta\sigma/\delta S$ étant là aussi d'ordre $\omega/\bar{\gamma}$, σ oscille pratiquement en phase avec S . S'il oscillait exactement en phase avec S ces modules seraient eux

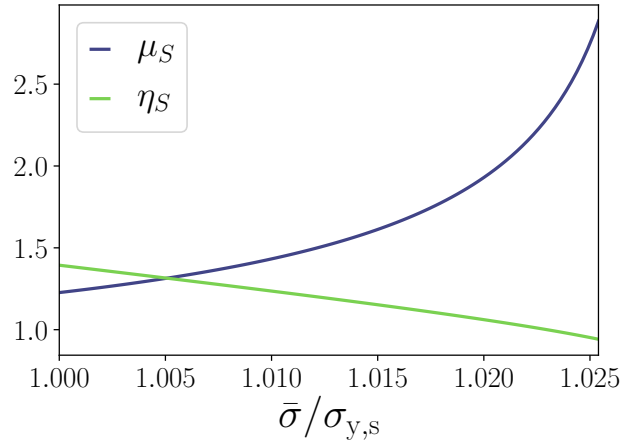


FIGURE 3.18 – Évolution de la viscosité et du module d'élasticité effectifs associés à S .

aussi positif, c'est donc le léger déphasage entre σ et S , induit par celui entre θ et S , qui explique que le module de conservation de σ puisse être négatif dans ce régime. En effet, le module de conservation de σ vaut ici

$$\begin{aligned} G'_{\sigma,s} &= \frac{1}{\tan \bar{\theta}} \left(-\frac{\cos 2\bar{\theta}}{\cos \bar{\theta}} G'_{S,s} - \frac{2\omega}{\bar{\gamma}\bar{\kappa} \tan \bar{\theta}} G''_{S,s} \right) \\ &= \frac{1}{\tan \bar{\theta}} \left(-\frac{\cos 2\bar{\theta}}{\cos \bar{\theta}} \eta_S - \frac{2}{\bar{\gamma}\bar{\kappa} \tan \bar{\theta}} \mu_S \right) \frac{\mu_S \eta_S \omega^2}{\mu_S^2 + \eta_S^2 \omega^2}. \end{aligned} \quad (3.71)$$

Nous avons pu vérifier que le terme $-2\mu_S/(\bar{\gamma}\bar{\kappa} \tan \bar{\theta})$ contribue à rendre la parenthèse de l'Eq. (3.71) et donc le module de conservation négatif.

Notre modèle nous permet donc d'aborder la question de la chute du module de conservation avec la valeur moyenne de la contrainte appliquée sous un autre angle. En effet, l'interprétation qui est faite dans [N'Gouamba et al., 2019] de cette baisse conséquente est de l'attribuer à une perte du réseau élastique du matériau, scénario qui semble peu réaliste pour des suspensions molles au-dessus du jamming. Dans notre modèle la structure élastique du système est conservée, la réponse radiale des contacts pouvant être décrite dans les deux régimes extrêmes ($\omega \ll \bar{\gamma}$ et $\omega \gg \bar{\gamma}$) par un modèle de Maxwell classique. Dans notre cas, la baisse du module de conservation de σ est liée à l'orientation de l'anisotropie. La possibilité d'un module de conservation négatif à basse fréquence s'explique en particulier par la corrélation subtile des oscillations radiales et orthoradiales. Ainsi, le fait que S et θ n'oscillent pas exactement en antiphase fait que le système suit une trajectoire elliptique dans le plan $(N_1/2, \sigma)$, trajectoire représentée en Fig. 3.16. S et θ oscillant presque en antiphase, cette ellipse est parcourue dans le sens horaire, ce qui implique que le maximum de σ est atteint avant celui de S et donc que σ est en avance de phase sur S . Cette avance de phase est de l'ordre de $\omega/\bar{\gamma}$. Par ailleurs, l'Eq. (3.65) implique que S est également en retard de phase sur $\dot{\gamma}$, là aussi avec un déphasage de l'ordre de $\omega/\bar{\gamma}$. Les valeurs de $\bar{\theta}$ et $\bar{\kappa}$ sont telles que le retard de phase de S sur σ est plus conséquent que celui sur $\dot{\gamma}$ et σ est donc en avance de phase sur $\dot{\gamma}$, ce qui implique qu'il est déphasé d'un angle plus grand que $\pi/2$ par rapport à $\dot{\gamma}$, d'où un module de conservation négatif. Notons que des modules de conservation négatifs à basses fréquences ont également été observés dans des solutions de polymères [Booij, 1966a, Kataoka and Ueda, 1969, Macdonald, 1973]. Là aussi, un simple modèle de Maxwell tensoriel intégrant la vorticit e invariante par changement de référentiel permet d'expliquer qualitativement ce comportement [Booij, 1966b].

3.5 Effet d'un faible bruit thermique

Si les effets thermiques ne sont pas dominants dans les suspensions denses molles (l'énergie thermique est de l'ordre de 10^3 à 10^6 fois plus faibles que l'énergie élastique dans les systèmes qui nous intéressent, cf Fig. 3 de l'introduction de cette thèse), ceux-ci peuvent tout de même influencer la rhéologie de ces dernières.

Ainsi, aux temps longs, ils peuvent contribuer à réorganiser la structure de suspensions bloquées dans un état anisotrope et ainsi causer une diminution de la contrainte résiduelle après arrêt de l'écoulement par exemple [Mohan et al., 2014]. Nous proposons dans cette section d'adapter notre modèle en introduisant un faible bruit thermique à la dynamique des entités constitutives. Reprenant la dérivation présentée aux Chap. 1 et 2, nous obtenons un modèle constitutif dépendant de la température nous permettant d'étudier l'influence de cette dernière sur la rhéologie de notre système.

3.5.1 Dynamique faiblement thermique de la fonction de corrélation de paire

Nous reprenons l'équation de la dynamique des entités constitutives (Eq. (1.2)) en ajoutant un bruit thermique de faible amplitude par rapport aux forces élastiques de façon à ce que le système demeure dans un régime quasi athermique. L'équation adimensionnée de la dynamique des entités constitutives s'écrit désormais

$$-2(\dot{\mathbf{r}}_\mu - \mathbf{u}_\mu^\infty) + \mathbf{f}_\mu + \boldsymbol{\eta}_\mu(t) = \mathbf{0}, \quad (3.72)$$

avec $\boldsymbol{\eta}_\mu(t)$ un bruit blanc gaussien vérifiant

$$\langle \eta_{\mu,i}(t) \eta_{\nu,j}(t') \rangle = 4T \delta_{ij} \delta_{\mu\nu} \delta(t - t'), \quad (3.73)$$

où la température T est exprimée en unité de température définie par $T_0 = af_0/k_B$. Pour les suspensions denses molles auxquelles nous nous intéressons, la température est typiquement de l'ordre de $10^{-6}T_0$ à $10^{-3}T_0$ [Vlassopoulos and Cloitre, 2014]. Le courant de probabilité \mathbf{j}_μ associé à l'entité μ intervenant dans l'Eq. (1.17) de conservation de la probabilité s'écrit alors

$$\mathbf{j}_\mu = \left(\mathbf{u}_\mu^\infty + \frac{1}{2} \mathbf{f}_\mu \right) P_N - \frac{T}{2} \nabla_\mu P_N. \quad (3.74)$$

En suivant les mêmes étapes de dérivation qu'en Sec. 1.3, nous montrons que la température a pour effet d'introduire un terme laplacien dans l'équation d'évolution de la fonction de corrélation de paire :

$$\partial_t g(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \left(\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r} g(\mathbf{r}) - \mathbf{f}(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}) - \rho \int \mathbf{f}(\mathbf{r}') g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) - T \nabla^2 g(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.75)$$

En multipliant de nouveau cette équation par $\rho^2 (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) / 2$ et en l'intégrant sur le contact en \mathbf{r} , nous obtenons l'équation tensorielle exacte suivante :

$$\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + \boldsymbol{\Theta} - \boldsymbol{\Phi} - \boldsymbol{\Xi} - \boldsymbol{\Pi} - \boldsymbol{\Gamma} - \boldsymbol{\Upsilon} + \boldsymbol{\Psi}, \quad (3.76)$$

la température contribuant à l'évolution de $\boldsymbol{\Sigma}$ grâce au terme

$$\boldsymbol{\Psi} = \frac{\rho^2 T}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \nabla^2 g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (3.77)$$

les autres tenseurs ayant déjà été définis en Sec. 1.4. Il est possible de montrer par des calculs similaires à ceux des Chaps. 1 et 2, reproduits en Annexe D, que

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Psi} &= \frac{\pi \rho^2 T}{2} \left(\int_0^2 \left(r^2 f''(r) + 3r f'(r) + f(r) \right) g_{\text{iso}}(r) dr - 4f'(2)g_{\text{iso}}(2) \right) \mathbb{1} \\ &+ \frac{\alpha \pi \rho^2 T}{4k} \left(\int_0^2 r \left(r^2 f''(r) + 3r f'(r) - 3f(r) \right) g'_{\text{iso}}(r) dr - 8f'(2)g'_{\text{iso}}(2) \right) \boldsymbol{\Sigma}' \end{aligned} \quad (3.78)$$

En choisissant $f(r) = r - 2$, $g_{\text{iso}}(2) = 1$ et $g'_{\text{iso}}(2) = 0$, cette expression devient

$$\boldsymbol{\Psi} = \pi \rho^2 T \left(\int_0^2 (2r - 1) g_{\text{iso}}(r) dr - 2 \right) \mathbb{1} + \frac{3\alpha \pi \rho^2 T}{2k} \left(\int_0^2 r g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \boldsymbol{\Sigma}' \quad (3.79)$$

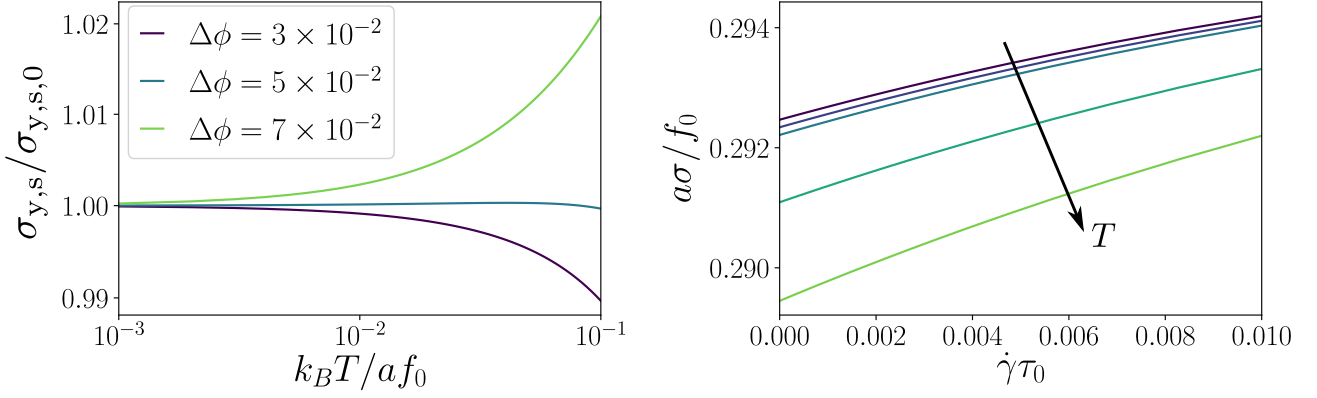


FIGURE 3.19 – **Influence de la température sur la rhéologie stationnaire en cisaillement simple.** (*gauche*) Évolution de la valeur de la contrainte de cisaillement au seuil de plasticité en fonction de la température pour différentes valeurs d'écart au jamming $\Delta\phi$. $\sigma_{y,s,0}$ est la valeur de la contrainte de cisaillement au seuil à température nulle. (*droite*) Courbes d'écoulement stationnaire pour la contrainte de cisaillement pour $\Delta\phi = 0.03$ et différentes températures ($T = 0, 5.10^{-3}, 10^{-2}, 5.10^{-2}, 10^{-1}$).

En remplaçant g_{iso} par sa paramétrisation $g_{\text{iso}}(r) = \frac{A}{r^*} \delta(r - r^*) + \Theta(r - r^*)$, nous obtenons l'expression suivante en fonction de r^* :

$$\Psi = -\pi\rho^2 T \frac{r^{*3} - r^{*2} - 2Ar^* + A}{r^*} \mathbb{1} + 6T \frac{r^{*2} - A}{r^{*2} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)} \Sigma' \quad (3.80)$$

En développant cette expression au premier ordre en p de la même façon qu'en Annexe C.2, le tenseur Ψ s'exprime de la façon suivante

$$\Psi = \pi\rho^2 T \left(\frac{3A - 4}{2} + \frac{12 - A}{4\pi A \rho^2} p \right) \mathbb{1} + 3T \left(\frac{A - 4}{4A} + \frac{(A - 2)(3A - 4)}{4\pi A^3 \rho^2} p \right) \Sigma' \quad (3.81)$$

Le tenseur Ψ contribue donc à introduire une dépendance en T des coefficients β et η du système ((2.48),(2.49)) qui valent désormais :

$$\beta(p, T) = \beta(p, 0) + 3T \left(\frac{A - 4}{4A} + \frac{(A - 2)(3A - 4)}{4\pi A^3 \rho^2} p \right), \quad (3.82)$$

$$\eta(p, T) = \eta(p, 0) - \pi\rho^2 T \left(\frac{3A - 4}{2} + \frac{12 - A}{4\pi A \rho^2} p \right). \quad (3.83)$$

Comme en Sec. 2.5, la pression p est une variable rapide dont il est possible de négliger la dynamique en considérant la valeur stationnaire $p(\phi, T)$ de la pression obtenue en résolvant

$$\eta(p, T) + \frac{\beta(p, T)\chi(p)}{\xi(p)} = 0. \quad (3.84)$$

Cependant, en procédant de la sorte nous obtenons une loi $p(\phi, T)$ décroissante avec T contre toute attente physique. Il serait intéressant d'étudier la cause de cette évolution incohérente de p avec T , ce qui pourrait certainement nous amener à améliorer notre modèle pour mieux modéliser la dynamique de p , qui comme nous l'avons mentionné en Sec. 3.2.1 est également incohérente lorsque nous prenons en compte l'influence de l'écoulement. Nous n'avons cependant pas eu le temps d'effectuer ce travail durant cette thèse. Si nous négligeons l'influence de T sur la valeur stationnaire de p , de la même manière que nous avons négligé l'influence de l'écoulement sur p en Sec. 3.2.1, nous pouvons de nouveau réduire notre modèle à la seule équation (2.54), la dépendance en T du modèle apparaissant dans le seul coefficient $\bar{\beta}$ qui dépend désormais de ϕ et T .

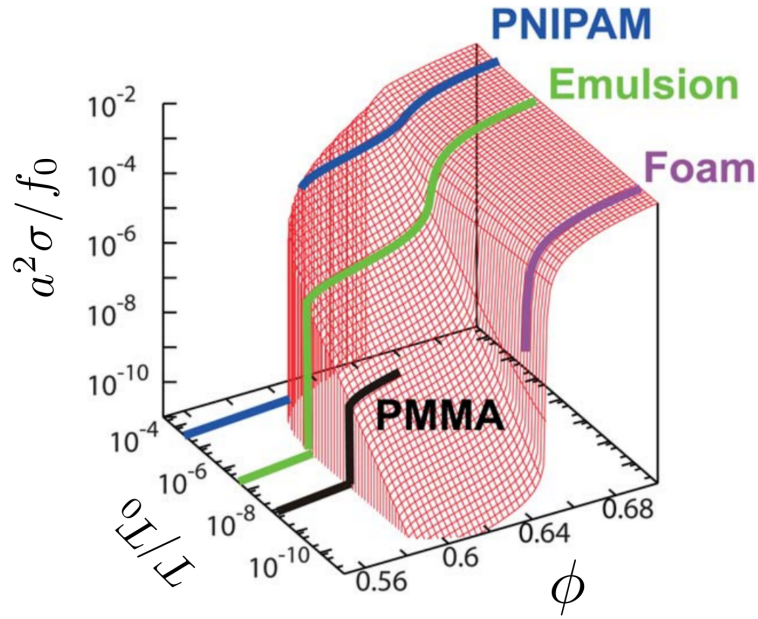


FIGURE 3.20 – Évolution de la contrainte seuil en fonction de la fraction volumique et de la température chez Ikeda *et al.* . La contrainte seuil est représentée par la surface rouge dans l’espace (ϕ, T, σ) . Les données sont issues de simulations numériques d’un système de sphères 3D déformables et browniennes dont la dynamique suramortie est similaire à celle choisie dans le cadre de notre modèle (Eq. (3.72)) avec là aussi des forces de contact linéaires. Figure adaptée de [Ikeda *et al.*, 2013].

3.5.2 Influence de la température sur la contrainte seuil

L’étude de ce modèle constitutif faiblement thermique en cisaillement simple fait apparaître une contrainte de cisaillement au seuil dépendante de T

$$\sigma_{y,s}(\phi, T) = S_0(\phi, T) \sin \theta_0(\phi, T), \quad (3.85)$$

avec $S_0(\phi, T) = \sqrt{\beta(\phi, T)/(2\xi(\phi))}$ et $\theta_0(\phi, T) = \arccos(2S_0(\phi, T)/\bar{\kappa}(\phi))$. Nous avons représenté l’évolution de cette contrainte de cisaillement au seuil en fonction de la température en Fig. 3.19 pour différentes fractions surfaciques ainsi que les courbes d’écoulement sur σ pour différentes températures pour une fraction surfacique $\phi = \phi_J + 0.03$. Comme attendu, nous constatons que pour des températures dans la gamme des températures caractéristiques des systèmes que nous considérons (de l’ordre de $10^{-3}T_0$ au maximum) l’influence de la température sur la valeur de la contrainte seuil est négligeable. Ce n’est que pour des températures de l’ordre de $10^{-1}T_0$ que les effets thermiques font varier la valeur de la contrainte seuil de l’ordre du pourcent. Pour des fractions surfaciques proches du jamming, la température semble fluidiser le système en abaissant légèrement $\sigma_{y,s}$. Pour des fractions surfaciques plus élevées ($\Delta\phi \gtrsim 0.06$), elle semble solidifier le système puisque $\sigma_{y,s}$ augmente alors avec la température. Il faut toutefois noter que ce régime de fractions surfaciques correspond au régime dans lequel $\sigma_{y,s}$ décroît avec ϕ (cf. Sec. 3.2.1) et nous pouvons nous interroger sur la validité de notre modèle dans ce régime. Toutefois, si l’intuition physique voudrait que les effets thermiques contribuent à fluidiser le système certains travaux numériques laissent penser qu’ils contribuent au contraire à solidifier le système. Nous présentons par exemple en Fig. 3.20 l’évolution de la contrainte seuil dans le plan (ϕ, T) obtenue par simulations de dynamique moléculaire 3D dans [Ikeda *et al.*, 2013]. À fraction volumique fixée au-dessus du jamming, la contrainte seuil semble augmenter avec la température, au moins pour des fractions volumiques proches du jamming. Ce phénomène peut s’expliquer par l’effet cumulatif de la transition de jamming et celle de transition vitreuse sur la valeur de la contrainte seuil.

Il serait intéressant de poursuivre cette étude afin d’étudier l’influence de la température sur la rhéologie dans les différents protocoles traités précédemment dans ce chapitre. Il apparaît toutefois clairement qu’en l’état actuel ce modèle n’est pas capable de reproduire la seconde relaxation de la contrainte à temps longs

observée dans [Mohan et al., 2014]. En effet, la dépendance en température n'apparaît que dans le coefficient $\bar{\beta}$ et contribuera uniquement à changer le temps de relaxation élastique du système et la valeur de la contrainte résiduelle sans changer la phénoménologie du système. Il est malgré tout possible qu'une version de notre modèle où la dynamique sur p serait conservée puisse introduire une phénoménologie nouvelle puisque la prise en compte de la température fait apparaître un terme d'ordre 0 en p dans le développement du coefficient η (Eq. (3.83)) qui n'existe pas dans le cas athermique.

Chapitre 4

Fermeture du modèle dans le cas de suspensions en-dessous du jamming

Dans le Chap. 1, nous avons dérivé un jeu d'équations exactes sur la pression p et la partie déviatorique du tenseur des contraintes Σ' (Eqs. (1.49) et (1.50)). Ces équations font apparaître six tenseurs Θ , Φ , Ξ , Π , Γ et Υ définis comme des intégrales de g ou g_3 (Eqs. (1.44), (1.45), (1.37), (1.38), (1.39) et (1.40)). Ces tenseurs n'étant pas reliés directement à p et Σ' ce jeu d'équations n'est pas fermé. Dans le Chap. 2, nous avons proposé un jeu d'approximations physiques adapté au cas d'une suspension molle au-dessus de sa densité de jamming qui nous a permis de fermer notre système d'équations et d'obtenir un modèle constitutif permettant de décrire ces fluides à seuil. Si certaines de ces approximations ne sont pas spécifiques au cas de suspensions au-dessus du jamming, la paramétrisation de la partie isotrope de la fonction de corrélation de paire (Eq. (2.44)) utilisée dans le Chap. 2 suppose bien que le système est au-dessus du jamming. En effet, en introduisant cette paramétrisation, nous avons fait l'hypothèse que toute la couronne de premiers voisins est en contact avec la particule centrale, même en l'absence de déformation. Ceci n'est bien évidemment pas le cas pour des suspensions en-dessous du jamming.

Ce chapitre est une première ébauche d'adaptation du jeu d'approximations du Chap. 2, et notamment de la paramétrisation de g_{iso} , au cas de suspensions denses molles légèrement en-dessous du jamming afin d'obtenir un modèle constitutif pour ces fluides rhéofluidifiants. Nous présentons également quelques applications de notre modèle à des protocoles rhéologiques simples. Nous rappelons ici le jeu d'équations exactes obtenues à la fin du Chap. 1 servant de point de départ aux calculs effectués dans ce chapitre :

$$\dot{\Sigma}' = \Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty - 2p E^\infty + \Theta' - \Phi' - \Xi' - \Pi' - \Gamma' - \Upsilon', \quad (4.1)$$

$$\dot{p} = -(\Sigma' : E^\infty) - \frac{\text{tr } \Theta}{2} + \frac{\text{tr } \Phi}{2} + \frac{\text{tr } \Xi}{2} + \frac{\text{tr } \Pi}{2} + \frac{\text{tr } \Gamma}{2} + \frac{\text{tr } \Upsilon}{2}. \quad (4.2)$$

avec

$$\Theta = \frac{\rho^2}{2} \int (E^\infty : e_r \otimes e_r) (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \cdot \nabla f g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4.3)$$

$$\Phi = \frac{\rho^2}{2} \int (E^\infty : e_r \otimes e_r) (\mathbf{r} \otimes f(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4.4)$$

$$\Xi = \frac{\rho^2}{2} \int (f(\mathbf{r}) \otimes f(\mathbf{r})) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4.5)$$

$$\Pi = \frac{\rho^2}{2} \int (\mathbf{r} \otimes f(\mathbf{r})) \cdot \nabla f^T g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4.6)$$

$$\Gamma = \frac{\rho^3}{2} \iint (f(\mathbf{r}') \otimes f(\mathbf{r})) g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \quad (4.7)$$

$$\Upsilon = \frac{\rho^3}{2} \iint (\mathbf{r} \otimes f(\mathbf{r}')) \cdot (\nabla f(\mathbf{r}))^T g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (4.8)$$

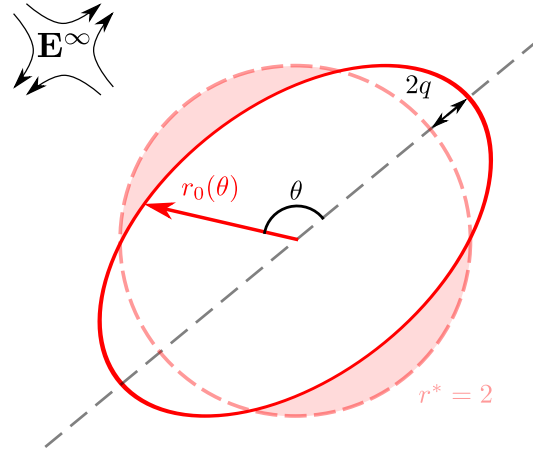


FIGURE 4.1 – **Déformation de la couronne de premiers voisins en-dessous de la densité de jamming.** En absence de déformation, les premiers voisins sont répartis de façon isotrope à une distance $r^* = 2$ de la particule centrale (trait pointillé rouge). Sous l'effet d'un gradient de vitesse dans le fluide la couronne de premiers voisins se déforme de façon approximativement ellipsoïdale (trait plein rouge) et est paramétrée par une fonction harmonique d'ordre 2, $r_0(\theta) = 2(1 + q \cos 2\theta)$, θ étant l'angle avec l'axe d'élongation (trait pointillé noir). La fonction de corrélation $g(\mathbf{r})$ est supposée se déformer de façon homothétique à la déformation de la couronne de premiers voisins. Les zones colorées en rouge sont celles où se trouvent des particules en contact avec la particule centrale, contribuant aux différentes intégrales.

4.1 Paramétrisation de g

La méthode appliquée dans le Chap. 2 pour fermer les équations constitutives est transposable au cas des suspensions en-dessous du jamming. La principale différence entre les deux cas réside dans la paramétrisation de g . En effet, dans le cas de suspensions en-dessous du jamming, la paramétrisation par le tenseur \mathbf{Q} défini à l'Eq. (2.6) n'est plus pertinente. En-dessous du jamming, en l'absence de déformation les particules s'organisent sans former de contacts, la distance moyenne entre particules est donc supérieure ou égale à $2a$. Lorsqu'une déformation est appliquée au système, les particules vont se rapprocher selon un axe dit compressionnel et s'éloigner selon un axe dit d'élongation. Selon ce dernier axe, la distance entre deux particules voisines est donc en moyenne plus grande que $2a$ et les particules ne sont pas en contact (Fig. 4.1). Le tenseur de structure \mathbf{Q} étant défini par une intégrale sur les contacts entre particules, les couples de particules dont l'orientation est proche de celle de l'axe d'élongation ont une contribution nulle au tenseur \mathbf{Q} et ce dernier ne permet pas de rendre compte de la structure du système. Plutôt que de changer la définition de \mathbf{Q} , nous préférons paramétriser la structure par des paramètres scalaires. Nous considérons que pour des densités suffisamment proches du jamming les particules voisines sont juste au contact. Sous l'effet d'une faible déformation, nous considérons que la couronne de premiers voisins se déforme là aussi en une harmonique d'ordre deux de façon analogue à l'équation (2.7). Plutôt que d'utiliser le tenseur \mathbf{Q} pour paramétriser cette déformation, nous introduisons deux paramètres scalaires : q l'amplitude de la déformation et φ l'orientation de l'axe extensionnel de la microstructure. En se plaçant en coordonnées polaires, en choisissant φ comme origine des angles (Fig. 4.1) et en utilisant le même système d'unités que dans les chapitres précédents (cf Sec. 1.1), nous paramétrisons la couronne de premiers voisins par

$$r_0(\theta) = 2(1 + q \cos 2\theta). \quad (4.9)$$

Comme dans le cas des suspensions au-dessus du jamming, nous supposons que la fonction de corrélation de paire est déformée de façon homothétique à la couronne de premiers voisins par rapport à g_{iso} , sa configuration isotrope en absence de déformation :

$$g(\mathbf{r}) = g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right), \quad (4.10)$$

avec $r = |\mathbf{r}|$. Là aussi, il est possible d'utiliser la même description schématique pour g_{iso} que dans le Chap. 2 (Eq. (2.44)). Dans le cas présent r^* ne varie plus avec le temps et reste égal à 2. Il est donc possible d'écrire

$$g_{\text{iso}}(r) = A' \delta(r - 2) + H(r - 2), \quad (4.11)$$

Les intégrales de g sur le domaine $C = \{\mathbf{r}, |\mathbf{r}| < 2\}$, se réduisent désormais à des intégrales sur un domaine angulaire réduit puisque toute direction θ telle que $r_0(\theta) > 2$ ne contribue pas à l'intégrale. Ainsi, avec la paramétrisation (4.9) du pic de premier voisin, seuls les quadrants $[-3\pi/4, -\pi/4]$ et $[\pi/4, 3\pi/4]$ ont une contribution non-nulle. La pression p vaut désormais

$$\begin{aligned} p &= -\frac{\rho^2}{4} \int r f(r) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\rho^2}{2} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} d\theta \int_0^2 r^2 f(r) g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) dr, \end{aligned} \quad (4.12)$$

où nous avons utilisé la symétrie de l'intégrande en θ pour réduire l'intervalle d'intégration en angle à $[\pi/4, 3\pi/4]$. Nous pourrions vouloir développer le terme en g_{iso} , d'une façon analogue à l'équation (2.9), cependant ce faisant nous aurions à intégrer un pic de Dirac sur le bord du domaine d'intégration en r , ce qui n'est pas bien défini mathématiquement. Nous calculerons plutôt cette intégrale en faisant le changement de variable $\tilde{r} = r/(1 + q \cos 2\theta)$ dans l'intégrale sur r . En prenant une force interparticulaire de la forme $f(r) = r - 2$, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} p &= -\frac{\rho^2}{2} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} (1 + q \cos 2\theta)^3 \int_0^{2/(1+q \cos 2\theta)} \tilde{r}^2 (\tilde{r} (1 + q \cos 2\theta) - 2) [A' \delta(\tilde{r} - 2) + H(\tilde{r} - 2)] d\tilde{r} d\theta \\ &= \frac{2\rho^2}{3} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \left(-6A'q \cos 2\theta (1 + q \cos 2\theta)^3 + 1 + 3(1 + q \cos 2\theta)^4 - 4(1 + q \cos 2\theta)^3 \right) d\theta \\ &= q\rho^2 \left(4A' - \pi(3A' - 1)q + \frac{8}{9}(9A' - 4)q^2 - \frac{3}{8}\pi(2A' - 1)q^3 \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

La pression p s'exprime ainsi comme un polynôme du paramètre q . Nous observons que pour de faibles déformations p croît linéairement avec l'amplitude de l'anisotropie.

4.2 Calcul des tenseurs définis par une intégrale de g en fonction de q

4.2.1 Expressions exactes en fonction de q

En utilisant la paramétrisation (4.10) de $g(\mathbf{r})$, il est possible d'écrire

$$\Sigma' = \frac{\rho^2}{4} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^2 r^2 f(r) \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix} g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) dr d\theta. \quad (4.14)$$

L'antisymétrie en θ des coefficients hors-diagonaux de l'intégrande nous assure que Σ' est diagonal dans la base utilisée pour les calculs. En réduisant de nouveau l'intervalle d'intégration angulaire à $[\pi/4, 3\pi/4]$ et en faisant le changement de variable $\tilde{r} = r/(1 + q \cos 2\theta)$, nous pouvons alors calculer de façon exacte Σ' :

$$\begin{aligned} \Sigma' &= \frac{\rho^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \int_{\pi/4}^{3\pi/4} \cos 2\theta (1 + q \cos 2\theta)^3 \int_0^{2/(1+q \cos 2\theta)} (\tilde{r} (1 + q \cos 2\theta) - 2) [A' \delta(\tilde{r} - 2) + \Theta(\tilde{r} - 2)] d\tilde{r} d\theta \\ &= q\rho^2 \left(\pi A' - \frac{8}{3}(3A' - 1)q + \frac{1}{4}\pi(9A' - 4)q^2 - \frac{16}{15}(2A' - 1)q^3 \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Si cette expression semble suggérer que les axes principaux du tenseur Σ' ne varient pas dans le temps, il faut garder à l'esprit qu'il s'agit de son expression dans la base dont l'axe élongationnel de la microstructure est l'origine des angles. En pratique, cette base peut elle-même varier avec le temps. L'expression de Σ' nous indique que ses axes principaux sont alignés avec les axes élongationnel et compressionnel de la microstructure. Il s'agit de l'équivalent de la relation (2.16) au-dessus du jamming qui impliquait l'alignement de Σ' sur \mathcal{Q} .

Il est possible de calculer la trace et la partie déviatorique de Ξ de la même façon, nous obtenons alors :

$$\Xi' = q^2 \rho^2 \left(-\frac{8}{3}A' + \frac{1}{2}\pi(3A' - 1) - \frac{16}{15}(2A' - 1)q^2 \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

$$\text{tr } \Xi = q^2 \rho^2 \left(2\pi A' - \frac{32}{9}q(3A' - 1) + \frac{3}{4}\pi(2A' - 1)q^2 \right). \quad (4.17)$$

$$(4.18)$$

Avec la forme de force interparticulaire choisie ici ($f(r) = r - 2$), ∇f^T s'écrit

$$\begin{aligned} \nabla f^T &= f'(r) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + \frac{f(r)}{r} (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta) \\ &= (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + \frac{r-2}{r} (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta), \end{aligned} \quad (4.19)$$

et donc

$$\begin{aligned} (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \cdot \nabla f^T &= r f(r) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + f(r)^2 (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta) \\ &= \mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.20)$$

si bien que $\mathbf{\Pi} = \Sigma$. Nous avons donc

$$\mathbf{\Pi}' = \Sigma', \quad (4.21)$$

$$\text{tr } \mathbf{\Pi} = -2p. \quad (4.22)$$

Les tenseurs Θ et Φ font tous deux apparaître le tenseur \mathbf{E}^∞ dans leur définition. Nous nous donnons donc l'expression la plus générale pour ce tenseur. Ce dernier étant un tenseur symétrique de trace nulle, il est possible de l'écrire $\mathbf{E}^\infty = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & -a_1 \end{pmatrix}$. Nous avons donc

$$\mathbf{E}^\infty : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r = a_1 \cos 2\theta + a_2 \sin 2\theta. \quad (4.23)$$

En remplaçant cette expression dans la définition de Θ et Φ et en appliquant les mêmes étapes de calculs que précédemment, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \Theta' &= \rho^2 \left(\pi A' - \frac{8}{3}(2A' - 1)q + \frac{3\pi}{4}(2A' - 1)q^2 - \frac{16}{15}(2A' - 1)q^3 + \frac{\pi}{16}(2A' - 1)q^4 \right) \mathbf{E}^\infty \\ &\quad + q a_1 (2A' - 1) \rho^2 \left(-\frac{8}{3} + \frac{3}{2}\pi q - \frac{16}{5}q^2 + \frac{1}{4}\pi q^3 \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.24)$$

$$\text{tr } \Theta = a_1 \rho^2 \left(-8A' + 4\pi(2A' - 1)q - 16(2A' - 1)q^2 \rho^2 + 3\pi(2A' - 1)q^3 - \frac{32}{15}(2A' - 1)q^4 \right) \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \Phi' &= q \rho^2 \left(-\frac{4}{3}A' + \frac{1}{4}\pi(3A' - 1)q - \frac{8}{45}(9A' - 4)q^2 + \frac{1}{16}\pi(2A' - 1)q^3 \right) \mathbf{E}^\infty \\ &\quad + q a_1 \rho^2 \left(-\frac{4}{3}A' + \frac{1}{2}\pi(3A' - 1)q - \frac{8}{15}(9A' - 4)q^2 + \frac{1}{4}\pi(2A' - 1)q^3 \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\text{tr } \Phi = q a_1 \rho^2 \left(2\pi A' + \frac{16}{3}(1 - 3A')q + \frac{1}{2}\pi(9A' - 4)q^2 + \frac{32}{15}(1 - 2A')q^3 \right) \quad (4.27)$$

4.2.2 Développement au premier ordre en q

Nous considérons de faibles déformations anisotropes, de façon à ce que $q \ll 1$. En ne gardant que les termes d'ordre 1 en q dans les expressions de p (Eq. (4.13)) et Σ' (Eq. (4.15)), nous obtenons :

$$p \approx 4A'\rho^2 q \quad (4.28)$$

$$\Sigma' \approx \pi A'\rho^2 q \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\pi p}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.29)$$

Nous avons donc

$$\Sigma' : \mathbf{E}^\infty = 2\pi A'\rho^2 q a_1. \quad (4.30)$$

Le tenseur Ξ étant proportionnel à q^2 (Eqs. (4.16) et (4.17)), nous négligeons sa contribution. En ne gardant que les termes d'ordre 0 et 1 en q dans les expressions (4.24), (4.25), (4.26) et (4.27) et en utilisant les relations (4.28), (4.29) et (4.30), nous obtenons les expressions suivantes pour les tenseurs Θ et Φ :

$$\Theta' \approx \left(\pi A'\rho^2 - \frac{2}{3} \left(2 - \frac{1}{A'} \right) p \right) \mathbf{E}^\infty - \frac{16}{3\pi^2 p} \left(2 - \frac{1}{A'} \right) (\Sigma' : \mathbf{E}^\infty) \Sigma', \quad (4.31)$$

$$\text{tr } \Theta \approx \left(-\frac{16A'\rho^2}{\pi p} + 2 \left(2 - \frac{1}{A'} \right) \right) (\Sigma' : \mathbf{E}^\infty), \quad (4.32)$$

$$\Phi' \approx -\frac{p}{3} \mathbf{E}^\infty - \frac{8}{3\pi^2 p} (\Sigma' : \mathbf{E}^\infty) \Sigma', \quad (4.33)$$

$$\text{tr } \Phi \approx \Sigma' : \mathbf{E}^\infty. \quad (4.34)$$

4.3 Calcul des tenseurs définis par une intégrale de g_3 en fonction de q

4.3.1 Calcul de Γ

Il nous reste désormais à calculer les tenseurs Γ et Υ définis comme des intégrales de g_3 . Pour ce faire, comme pour le cas au-dessus du jamming au Chap. 2, nous utilisons la relation de fermeture de Kirkwood (2.26) permettant d'approximer g_3 par une fonction de g . En remplaçant g par sa paramétrisation (4.10), g_3 s'exprime alors

$$g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) \times g_{\text{iso}} \left(\frac{r'}{1 + q \cos 2\theta'} \right) \times g_{\text{iso}} \left(\frac{u}{1 + q \cos 2\psi} \right), \quad (4.35)$$

avec $r = |\mathbf{r}|$, $\theta = \arg(\mathbf{r})$, $r' = |\mathbf{r}'|$, $\theta' = \arg(\mathbf{r}')$, $u = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ et $\psi = \arg(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Ces deux dernières variables peuvent s'exprimer de la sorte en fonction de r , r' , θ et θ' :

$$u = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta - \theta')}, \quad (4.36)$$

$$\cos 2\psi = \frac{r^2 \cos 2\theta + r'^2 \cos 2\theta' - 2rr' \cos(\theta + \theta')}{u^2}. \quad (4.37)$$

La démonstration détaillée de ces relations peut être consultée en Annexe B. En remplaçant g_3 par son expression (4.35) dans la définition de Γ , nous obtenons donc :

$$\Gamma = \frac{\rho^3}{2} \iiint r f(r) r' f(r') \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \theta' & \cos \theta \sin \theta' \\ \sin \theta \cos \theta' & \sin \theta \sin \theta' \end{pmatrix} g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) g_{\text{iso}} \left(\frac{r'}{1 + q \cos 2\theta'} \right) g_{\text{iso}} \left(\frac{u}{1 + q \cos 2\psi} \right) \times dr dr' d\theta d\theta'. \quad (4.38)$$

Là encore, l'antisymétrie des termes hors-diagonaux de l'intégrande sous la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (-\theta, -\theta')$ nous assure que Γ est diagonal dans la base où nous réalisons nos calculs. Pour simplifier le calcul des termes diagonaux, nous considérons que dans les expressions de u et ψ (Eqs. (4.36) et (4.37)), $r = r' \approx 2$.

En effet, pour de faibles valeurs de q , les deux premières fonctions g_{iso} intervenant dans l'expression de g_3 ne deviennent non-nulles qu'à partir d'une valeur de r (respectivement r') proche de 2. Nous avons donc

$$u \approx 2\sqrt{2(1 - \cos(\theta - \theta'))} \quad (4.39)$$

$$\cos 2\psi \approx \frac{\cos 2\theta + \cos 2\theta' - 2\cos(\theta + \theta')}{2(1 - \cos(\theta - \theta'))} = -\cos(\theta + \theta'). \quad (4.40)$$

Les intégrales sur r et r' peuvent désormais être calculées indépendamment. Nous montrons que pour tout $\theta \in [-3\pi/4, -\pi/4] \cup [\pi/4, 3\pi/4]$

$$\begin{aligned} \int_0^2 r f(r) g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) dr &= (1 + q \cos 2\theta)^2 \int_0^{2/(1+q \cos 2\theta)} \tilde{r} ((1 + q \cos 2\theta)\tilde{r} - 2) (A'\delta(\tilde{r} - 2) + H(\tilde{r} - 2)) d\tilde{r} \\ &= \frac{4q \cos 2\theta}{3} \left(3A' + 3(A' - 2)q \cos 2\theta + (3A' - 2)q^2 \cos^2 2\theta \right) \\ &\approx 4A'q \cos 2\theta, \end{aligned} \quad (4.41)$$

en ne gardant que les termes d'ordre 1 en q . Là encore, l'intervalle d'intégration sur θ et θ' se réduit à $[-3\pi/4, -\pi/4] \cup [\pi/4, 3\pi/4]$. La symmétrie des termes diagonaux sous la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (-\theta, -\theta')$ permet de réduire l'intervalle d'intégration de θ à $[\pi/4, 3\pi/4]$. En notant $\Gamma = \begin{pmatrix} \Gamma_+ & 0 \\ 0 & \Gamma_- \end{pmatrix}$ et en faisant le changement de variables $\theta_+ = \theta + \theta'$ et $\theta_- = \theta - \theta'$, nous avons donc

$$\begin{aligned} \Gamma_{\pm} &= 2A'^2 \rho^3 q^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta_+ \int_{-\pi}^{-\pi/2} d\theta_- (\cos 2\theta_+ + \cos 2\theta_-) (\cos \theta_- \pm \cos \theta_+) g_{\text{iso}} \left(\frac{2\sqrt{2(1 - \cos \theta_-)}}{1 - q \cos \theta_+} \right) \\ &\quad + 2A'^2 \rho^3 q^2 \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\theta_+ \int_0^{\pi/2} d\theta_- (\cos 2\theta_+ + \cos 2\theta_-) (\cos \theta_- \pm \cos \theta_+) g_{\text{iso}} \left(\frac{2\sqrt{2(1 - \cos \theta_-)}}{1 - q \cos \theta_+} \right). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Le calcul exact de l'intégrale demeure cependant assez complexe. Comme nous souhaitons uniquement un développement de Γ à l'ordre 1 en q , nous pouvons développer g_{iso} en q jusqu'à l'ordre nécessaire. Le développement de g_{iso} commençant à l'ordre 0, Γ est au minimum d'ordre 2 en q . Nous pouvons donc négliger sa contribution.

4.3.2 Calcul de Υ

Il est possible de montrer (cf Annexe B) que

$$(\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(r')) \cdot (\nabla \mathbf{f}(r))^T = r f(r') f'(r) \cos(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + f(r') f(r) \sin(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_\theta). \quad (4.43)$$

En utilisant $f'(r) = 1$ (puisque $f(r) = r - 2$), nous avons donc $\Upsilon = \Upsilon_r + \Upsilon_\theta$, avec

$$\begin{aligned} \Upsilon_r &= \frac{\rho^3}{2} \iiint r^2 r' f(r') \cos(\theta - \theta') \begin{pmatrix} \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta \\ \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta \end{pmatrix} \\ &\quad \times g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) g_{\text{iso}} \left(\frac{r'}{1 + q \cos 2\theta'} \right) g_{\text{iso}} \left(\frac{u}{1 + q \cos 2\psi} \right) dr dr' d\theta d\theta' \end{aligned} \quad (4.44)$$

et

$$\begin{aligned} \Upsilon_\theta &= \frac{\rho^3}{2} \iiint r f(r) r' f(r') \sin(\theta' - \theta) \begin{pmatrix} -\cos \theta \sin \theta & \cos^2 \theta \\ -\sin^2 \theta & \cos \theta \sin \theta \end{pmatrix} \\ &\quad \times g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) g_{\text{iso}} \left(\frac{r'}{1 + q \cos 2\theta'} \right) g_{\text{iso}} \left(\frac{u}{1 + q \cos 2\psi} \right) dr dr' d\theta d\theta'. \end{aligned} \quad (4.45)$$

Là encore des arguments d'antisymétrie sous la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (-\theta, -\theta')$ nous permettent de conclure à la nullité des termes hors-diagonaux de Υ_r et Υ_θ . Nous considérons également que $r = r' \approx 2$ dans

les expressions de u et ψ afin de simplifier les calculs. En utilisant l'Eq. (4.41) pour calculer les intégrales en r et r' dans l'expression (4.45), il est possible de montrer par un raisonnement semblable à celui utilisé pour évaluer Γ que Υ_θ est au minimum d'ordre 2 en q , il est donc possible de négliger la contribution de ce tenseur. Pour calculer Υ_r , nous montrons de façon analogue à (4.41) que pour $\theta \in [-3\pi/4, -\pi/4] \cup [\pi/4, 3\pi/4]$

$$\int_0^2 r^2 g_{\text{iso}} \left(\frac{r}{1 + q \cos 2\theta} \right) dr = 4A' + \left(4A' - \frac{8}{3} \right) q \cos 2\theta \left(3 + 3q \cos 2\theta + q^2 \cos^2 2\theta \right) \approx 4A'. \quad (4.46)$$

Pour calculer Υ_r à l'ordre le plus bas en q , nous prenons $g_{\text{iso}}(u/(1 + q \cos 2\psi)) \approx g_{\text{iso}}(u)$. En réduisant encore une fois l'intervalle d'intégration sur θ à $[\pi/4, 3\pi/4]$ et celui sur θ' à $[-3\pi/4, -\pi/4]$ et en faisant le changement de variables $\theta_+ = \theta + \theta'$ et $\theta_- = \theta - \theta'$, nous montrons que

$$\begin{aligned} \Upsilon' &\approx 2A' \rho^3 q \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta_+ \int_{-\pi}^{-\pi/2} d\theta_- \cos \theta_- (\cos 2\theta_- + \cos 2\theta_+) g_{\text{iso}} \left(2\sqrt{2(1 - \cos \theta_-)} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &+ 2A' \rho^3 q \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\theta_+ \int_0^{\pi/2} d\theta_- \cos \theta_- (\cos 2\theta_- + \cos 2\theta_+) g_{\text{iso}} \left(2\sqrt{2(1 - \cos \theta_-)} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &\approx -\frac{A'^2 \rho^3 (A' + 3) \pi q}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &\approx -\frac{A'(A' + 3) \rho}{2\sqrt{3}} \Sigma' \end{aligned} \quad (4.47)$$

et

$$\begin{aligned} \text{tr } \Upsilon &\approx 8A' \rho^3 q \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta_+ \int_{-\pi}^{-\pi/2} d\theta_- \cos \theta_- \cos(\theta_+ - \theta_-) g_{\text{iso}} \left(2\sqrt{2(1 - \cos \theta_-)} \right) \\ &+ 8A' \rho^3 q \int_{\pi/2}^{3\pi/2} d\theta_+ \int_0^{\pi/2} d\theta_- \cos \theta_- \cos(\theta_+ - \theta_-) g_{\text{iso}} \left(2\sqrt{2(1 - \cos \theta_-)} \right) \\ &\approx 4A'^2 \rho^3 q \left(\frac{2\pi}{3} + \frac{3 - 2A'}{2\sqrt{3}} \right) \\ &\approx A' \rho \left(\frac{2\pi}{3} + \frac{3 - 2A'}{2\sqrt{3}} \right) p \end{aligned} \quad (4.48)$$

4.4 Modèle constitutif

En combinant les résultats des sections précédentes, le système ((4.1),(4.2)) devient

$$\dot{\Sigma}' = (\kappa_0(\phi) + \kappa_1(\phi)p) \mathbf{E}^\infty + \mathbf{\Omega}^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \mathbf{\Omega}^\infty + \left[\beta(\phi) + \frac{\xi(\phi)}{p} (\Sigma' : \mathbf{E}^\infty) \right] \Sigma' \quad (4.49)$$

$$\dot{p} = \left(\zeta_0(\phi) + \frac{\zeta_1(\phi)}{p} \right) (\Sigma' : \mathbf{E}^\infty) + \chi(\phi)p \quad (4.50)$$

avec

$$\kappa_0(\phi) = \frac{A' \phi^2}{\pi}, \quad (4.51)$$

$$\kappa_1(\phi) = \frac{2}{3A'} - 3, \quad (4.52)$$

$$\beta(\phi) = \frac{A'(A' + 3)\phi}{2\pi\sqrt{3}} - 1, \quad (4.53)$$

$$\xi(\phi) = \frac{8}{3\pi^2} \left(\frac{2}{A'} - 3 \right), \quad (4.54)$$

$$\zeta_0(\phi) = -\left(\frac{5}{2} + \frac{1}{A'}\right), \quad (4.55)$$

$$\zeta_1(\phi) = \frac{8A'\phi^2}{\pi^3}, \quad (4.56)$$

$$\chi(\phi) = \frac{A'\phi}{2\pi} \left(\frac{2\pi}{3} + \frac{3-2A'}{2\sqrt{3}} \right) - 1, \quad (4.57)$$

le choix de A' devant être précisé plus tard. Le modèle obtenu est assez similaires aux modèles viscoélastiques classiques. En effet, dans le cas où $\xi = \zeta_1 = 0$, il s'apparente à un modèle d'Oldroyd classique en 2D. Les non-linéarités en $(\Sigma' : E^\infty) \Sigma' / p$ et $(\Sigma' : E^\infty) / p$ sont assez originales, même si le modèle de Larson présente une non-linéarité en $(\Sigma' : E^\infty) \Sigma'$ assez similaire [Larson, 1984].

4.5 Rhéologie stationnaire en-dessous du jamming en cisaillement simple

Nous étudions brièvement dans cette section le comportement du modèle constitutif formé par les Eqs. (4.49) et (4.50) en cisaillement simple. Nous nous intéressons en particulier aux prédictions de ce modèle en rhéologie stationnaire.

4.5.1 Comportement à déformation nulle

Nous commençons par nous intéresser à la limite de déformation nulle afin d'étudier si ce modèle peut prédire une transition de jamming entre un état fluide et un état de fluide à seuil lorsque la fraction surfacique augmente. En l'absence de déformation, le système ((4.49),(4.50)) devient

$$\dot{\Sigma}' = \beta(\phi)\Sigma', \quad (4.58)$$

$$\dot{p} = \chi(\phi)p. \quad (4.59)$$

Les solutions stables de ce système dépendent du signe de β et χ : pour une valeur de β (resp. χ) négative Σ' (resp. p) est nul dans l'état stationnaire tandis que pour une valeur positive Σ' (resp. p) diverge. β et χ étant des fonctions de ϕ , possiblement à travers A' , le choix de la définition de A' s'avère très important pour la rhéologie du système. Comme dans le Chap. 2, A' est directement relié à z , le nombre moyen de premiers voisins en absence de déformation par la relation

$$z = 2\pi\rho \int_0^{2^+} r g_{\text{iso}}(r) dr = 4\phi A'. \quad (4.60)$$

Au Chap. 2, en nous appuyant sur certaines études numériques, nous avons considéré $z = 6$ quelle que soit la valeur de la fraction surfacique au-dessous du jamming. Dans le cas en-dessous du jamming, le nombre de voisins dépend plus fortement de la fraction surfacique. Ainsi, pour les faibles fractions surfaciques z tend vers 0 tandis qu'il doit être exactement égal à 6 au jamming. Nous choisissons ici une relation linéaire simple faisant passer z de 0 en $\phi = 0$ à 6 au jamming :

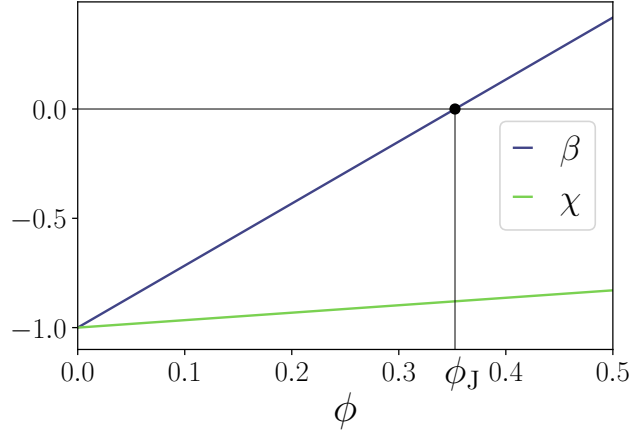
$$z(\phi) = 6 \left(\frac{\phi}{\phi_J} \right), \quad (4.61)$$

avec ϕ_J la fraction surfacique au jamming. Cette paramétrisation grossière doit nous permettre de mener à bien la dérivation de notre modèle dans une démarche exploratoire et pourrait être affinée dans des travaux futurs. Avec cette paramétrisation de z , nous avons

$$A' = \frac{3}{2\phi_J}. \quad (4.62)$$

Il nous reste désormais à déterminer ϕ_J . Dans notre modèle, la transition de jamming se caractérise par le passage d'un état $\Sigma' = \mathbf{0}$ à un état $\Sigma' \neq \mathbf{0}$ en l'absence de déformation. La seule condition pour cela est d'imposer que ϕ_J vérifie $\beta(\phi_J) = 0$. Cette condition associée à l'Eq. (4.62) nous permet de déterminer ϕ_J :

$$\phi_J = \frac{9}{8\pi\sqrt{3} - 18} \approx 0.35, \quad (4.63)$$

FIGURE 4.2 – Évolution des coefficients β et χ avec la fraction volumique.

ce qui correspond à une valeur environ 60% plus faible que la valeur attendue de en 2D. Comme au Chap. 2, cet écart est due aux fortes approximations que nous avons été obligés de faire pour mener à bien notre dérivation. Nous avons représenté l'évolution des coefficients β et χ en fonction de ϕ pour cette paramétrisation de A' avec cette valeur de ϕ en Fig. 4.2. Nous observons bien un changement de signe de β en ϕ_J avec un coefficient négatif avant le jamming (correspondant à $\Sigma' = \mathbf{0}$ en absence de déformation, état fluide) et positif après (Σ' diverge, état de fluide à seuil). Cependant, nous n'observons pas de changement de signe pour χ , ce dernier étant négatif sur une large gamme de ϕ s'étendant bien au-delà du jamming. La pression dans l'état stationnaire en absence de déformation est donc nulle même au-delà de ϕ_J , ce qui est cohérent avec la paramétrisation de g_{iso} choisie. En effet, en absence de déformation, la couronne de premier voisin est un cercle de rayon 2 si bien que la pression est nécessairement nulle.

4.5.2 Courbes d'écoulement, rhéofluidification

Dans le cas du cisaillement simple, le système ((4.49),(4.50)) s'écrit sous la forme du système de trois équations à trois inconnues suivant :

$$\begin{cases} \dot{N}_1 = 2\dot{\gamma}\sigma + \left(\beta + \frac{\dot{\gamma}\xi\sigma}{p}\right) N_1 & (4.64a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\sigma} = \dot{\gamma} \frac{\kappa_0 + \kappa_1 p - N_1}{2} + \left(\beta + \frac{\dot{\gamma}\xi\sigma}{p}\right) \sigma & (4.64b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{p} = \left(\zeta_0 + \frac{\zeta_1}{p}\right) \dot{\gamma}\sigma + \chi p & (4.64c) \end{cases}$$

Nous nous intéressons ici à l'état stationnaire de ce système à faibles taux de cisaillement. Nous avons vu dans la section précédente que pour $\phi < \phi_J$, les trois variables sont nulles dans l'état stationnaire. Le développement perturbatif en $\dot{\gamma}$ de celles-ci doit donc commencer à l'ordre 1 : $N_1 = \dot{\gamma}(a_0 + a_1\dot{\gamma})$, $\sigma = \dot{\gamma}(\eta_0 + \eta_1\dot{\gamma})$ et $p = \dot{\gamma}(b_0 + b_1\dot{\gamma})$. L'état stationnaire du système (4.64) à l'ordre 1 en $\dot{\gamma}$, nous donne les expressions suivantes

$$a_0 = 0, \quad (4.65)$$

$$\eta_0 = -\frac{\kappa_0}{2\beta} = \frac{\sqrt{3}A'\phi^2}{2\sqrt{3}\pi - A'(A'+3)\phi}, \quad (4.66)$$

$$b_0 = \text{sign}(\dot{\gamma}) \sqrt{-\frac{\zeta_1\eta_0}{\chi}}. \quad (4.67)$$

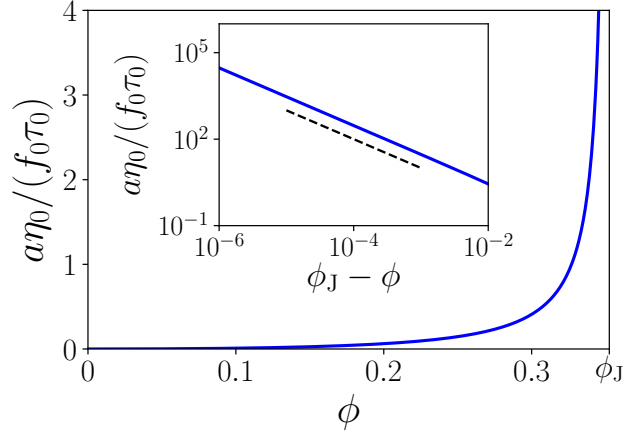


FIGURE 4.3 – **Évolution de la viscosité à taux de cisaillement nul en fonction de la fraction volumique.** Nous avons représenté en encart l'évolution de la même grandeur pour de faibles valeurs de $\Delta\phi = \phi_J - \phi$ en échelle logarithmique (en trait pointillé la loi de puissance $\eta_0 \sim \Delta\phi^{-1}$).

Nous constatons que le coefficient d'ordre $\dot{\gamma}$ en N_1 est nul, indiquant que cette grandeur croît au minimum en $\dot{\gamma}^2$, ce qui est une caractéristique commune de la plupart des modèles phénoménologiques viscoélastiques lorsqu'ils sont appliqués aux cas 2D (modèle d'Oldroyd-B ou de Phan-Thien-Tanner, par exemple). Nous avons représenté en Fig. 4.3, l'évolution du coefficient η_0 , qui correspond à la valeur de la viscosité $\eta = \sigma/\dot{\gamma}$ à taux de cisaillement nul. En adéquation avec une transition de jamming, cette viscosité diverge en ϕ_J . Cela est assuré par le fait que nous avons fixé ϕ_J de façon à ce que β soit nul à cette fraction surfacique. Au voisinage du jamming nous avons

$$\eta_0 \approx \frac{\sqrt{3}\phi_J^2}{(A' + 3)\Delta\phi}, \quad (4.68)$$

avec $\Delta\phi = \phi_J - \phi$. À l'approche de la transition de jamming la viscosité au repos varie en loi de puissance $\eta_0 \sim \Delta\phi^{-1}$, ce qui est une divergence plus faible que l'exposant proche de -2 observé expérimentalement dans des suspensions de PMMA et de PS [Boyer et al., 2011] et des émulsions [Paredes et al., 2013].

L'ordre 2 en $\dot{\gamma}$ de l'état stationnaire du système (4.64), nous donne, quant à lui,

$$a_1 = -\frac{2\eta_0}{\beta}, \quad (4.69)$$

$$\eta_1 = -\left(\frac{\kappa_1 b_0}{2\beta} + \frac{\xi\eta_0^2}{b_0\beta}\right), \quad (4.70)$$

$$b_1 = -\frac{\zeta_0\eta_0 + \zeta_1\eta_1/b_0}{\chi - \zeta_1\eta_0/b_0^2}. \quad (4.71)$$

Les coefficients κ_1 , β et ξ étant négatifs, η_1 est lui même négatif et notre modèle décrit un fluide rhéofluidifiant, au moins à faibles taux de cisaillement. De même, ζ_0 et χ étant négatifs tandis que ζ_1 est positif, b_1 est négatif et la pression croît de façon sous-linéaire avec le taux de déformation. Nous avons représenté en Fig. (4.4) l'évolution de la viscosité $\eta = \sigma/\dot{\gamma}$ en fonction du taux de cisaillement appliqué pour différentes fractions surfaciques ainsi que l'évolution de N_1 et de la pression. Nous observons une rhéofluidification d'autant plus forte que le système est proche du jamming. Les courbes de η en fonction de $\dot{\gamma}$ sont assez bien modélisées par des lois de Cross d'exposant 1.2. Notre modèle constitutif semble donc présenter une rhéologie stationnaire satisfaisante puisqu'il est possible de représenter nos courbes par une loi standard. Notons qu'un modèle d'Oldroyd avec un paramètre de glissement a^* tel que $|a^*| < 1$ prédit une loi de Cross d'exposant 2. Il serait intéressant de mener une étude complète de la rhéologie de ce modèle de façon similaire à celle menée au Chap. 3 pour notre modèle

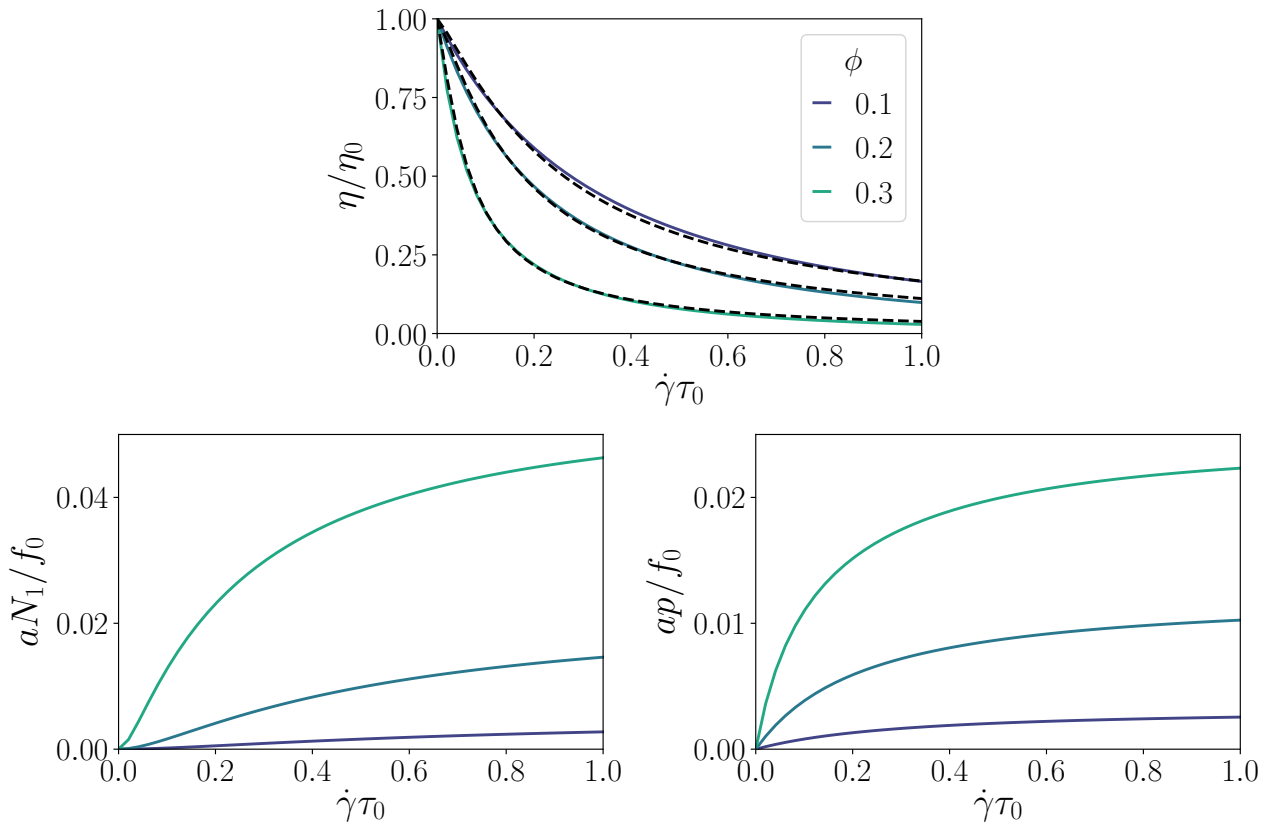


FIGURE 4.4 – **Écoulements stationnaires pour différentes fractions surfaciques en-dessous du jamming.** (*haut*) Évolution de la viscosité $\eta = \sigma/\dot{\gamma}$ avec le taux de cisaillement pour trois fractions surfaciques différentes. Les courbes pointillés sont des ajustements de nos courbes d'écoulement sous la forme d'une loi de Cross de la forme $\eta/\eta_0 = 1/(1 + K\dot{\gamma}^{1.2})$, avec $K = 5$ pour $\phi = 0.1$, $K = 8$ pour $\phi = 0.2$ et $K = 25$ pour $\phi = 0.3$. (*bas, gauche*) Évolution de la différence de contraintes normales avec le taux de cisaillement pour les mêmes fractions surfaciques. (*bas, droite*) Évolution de la pression avec le taux de cisaillement pour les mêmes fractions surfaciques.

au-dessus du jamming. Là encore, nous espérons grâce à notre modèle pouvoir expliquer certains phénomènes rhéologiques en terme d'amplitude et d'orientation de l'anisotropie de la microstructure.

Discussions et perspectives

Nous avons présenté dans cette thèse une dérivation originale permettant d'obtenir un modèle constitutif macroscopique sur le tenseur des contraintes des suspensions denses en partant de la dynamique des entités constitutives (particules, gouttes, bulles...). L'objectif étant de montrer la faisabilité d'une telle approche et d'en poser les bases, nous nous sommes placés dans un cadre simple réduisant la complexité de la tâche. Nous avons ainsi négligé les effets thermiques (dans un premier temps) et ceux d'inertie ainsi que les interactions hydrodynamiques entre entités constitutives. Nous nous sommes de plus placés dans le cadre d'écoulements uniformes (gradient du champ de vitesse uniforme), à faibles taux de déformation afin de ne considérer que de faibles anisotropies dans la microstructure du système. Ce cadre simplifié demeure un cadre pertinent pour l'étude des suspensions denses molles, ce qui laisse un champ d'application relativement large.

Dans le Chap. 1, nous avons présenté le cadre de notre étude ainsi que les outils conceptuels nécessaires à notre dérivation. En appliquant des raisonnements classiques de physique statistique au cadre que nous avons défini, nous avons ensuite pu dériver une équation exacte pour la microstructure puis le tenseur des contraintes à partir de la dynamique que nous avons définie pour les entités constitutives. L'équation tensorielle ainsi obtenue est exacte vis-à-vis de la dynamique choisie mais n'est pas fermée et n'est donc pas exploitable en l'état.

Le Chap. 2 constitue la véritable contribution analytique originale de ce travail. En considérant le cas de suspensions denses molles au-dessus du jamming soumises à de faibles taux de déformations, nous avons développé une description schématique simplifiée de la microstructure capturant les caractéristiques principales de cette dernière (anisotropie, pic de premiers voisins...). Le point essentiel de cette description simplifiée consiste dans la paramétrisation de l'anisotropie de la microstructure par un tenseur macroscopique, le tenseur de structure \mathcal{Q} . Nous avons par ailleurs montré que dans le cadre de la description simplifiée que nous avons retenue pour la microstructure la partie déviatorique du tenseur des contraintes Σ' est proportionnelle au tenseur de structure avec un facteur de proportionnalité dépendant de la pression du système (donc de la trace du tenseur des contraintes). Cette relation, associée à une relation de fermeture permettant de relier les corrélations à trois corps aux corrélations à deux corps, nous a permis de relier tous les termes tensoriels apparaissant dans l'équation exacte au tenseur de structure et, ce faisant, à la partie déviatorique du tenseur des contraintes, ce qui nous a permis de fermer notre équation. Nous avons ainsi obtenu un modèle semblable aux VEPM présentés en Sec. 2.1 de l'introduction de cette thèse dont l'origine microscopique de chacun des termes est claire. En particulier, les corrélations à trois corps contribuent à l'émergence d'un terme non-linéaire faisant apparaître une contrainte seuil dans l'équivalent d'un critère de von Mises et permettant ainsi à notre modèle de décrire un fluide à seuil.

Dans le Chap. 3, nous avons étudié en détail le modèle obtenu au chapitre précédent. Pour mettre à profit le caractère tensoriel de celui-ci, nous avons introduit une paramétrisation simple et générale des écoulements incompressibles en dimension deux afin d'étudier la rhéologie prédite sous une géométrie d'écoulement quelconque. Nous avons étudié ces écoulements sous différents protocoles et montré que malgré certains défauts notre modèle est capable de capturer qualitativement certaines caractéristiques non-triviales de la rhéologie des suspensions denses molles. Il prédit un comportement qualitativement semblable pour toutes les géométries d'écoulement avec un rôle important de la vorticit  de l'écoulement dans la rhéologie du syst me. La rhéologie des écoulements extensionnels planaires se distingue de celles des autres écoulements, ce qui s'explique par l'absence de vorticit  dans les écoulements planaires. Pour les écoulements fortement rotationnels, notre modèle ne présente en revanche pas d'état stationnaire.

Au cours de cette étude, nous avons montré que la paramétrisation polaire du tenseur des contraintes

molles [Thompson et al., 2018, Thompson and de Souza Mendes, 2020]. La plupart des caractéristiques rhéologiques non-triviales des suspensions molles s’expliquent dans notre modèle par le fait que le système se déplace dans le plan $(N_1/2, \sigma)$ et non pas simplement le long de l’axe des σ , le couplage entre les différentes composantes de la contrainte (assuré par la vorticit  de l’ coulement notamment) explique une partie de la richesse de la rh ologie des suspensions denses.

Il est important de noter que l’analyse faite au Chap. 3 n’est pas propre   notre mod le. Les VEPM d j  existants ont une structure semblable   notre mod le avec certains termes communs, comme nous le discutons en Sec. 2 de cette conclusion. En particulier, l’effet de la vorticit  appara t toujours sous la m me forme dans les mod les macroscopiques, cette derni re  tant fortement contrainte par l’invariance par changement de r f rentiel. La relation de lin arit  entre Σ' et \mathcal{Q} que nous avons d riv e formellement dans le cas de suspensions denses molles au-dessus du jamming dans un r gime de faible anisotropie pourrait  tre suppos e dans un cas plus g n ral et utilis e pour appliquer   d’autres mod les ph nom nologiques la m me analyse que celle pr sent e au Chap. 3. Nous nous attendons ainsi   ce qu’une grande partie des conclusions tir es de l’analyse de notre mod le soient encore valables avec la plupart des VEPM.

Dans le Chap. 4, nous avons adapt  notre approche au cas de suspensions molles en-dessous du jamming. Pour cela nous avons quelque peu modifi  la description sch matique de la microstructure utilis e au Chap. 2 pour prendre en compte la sp cificit  de ce r gime de densit . Si la d marche demeure la m me, la d finition du tenseur de structure utilis e au Chap. 2 n’est plus pertinente dans ce cas et nous utilisons une param trisation de l’anisotropie de la structure par un param tre d’amplitude q et une orientation θ . En effectuant un d veloppement   l’ordre 1 en q des diff rents termes tensoriels de l’ quation exacte sur le tenseur des contraintes, nous avons ferm  cette derni re et obtenu un mod le constitutif pour les suspensions denses molles en-dessous du jamming. La structure de ce dernier est proche de celle des VEM classiques avec quelques originalit s que nous discutons en Sec. 2 de cette conclusion. Nous avons pu v rifier que ce mod le capture de mani re qualitative la rh ofluidification de ces mat riaux.   faibles taux de cisaillement, la viscosit  de notre syst me est correctement approxim e par une loi de Cross, mod le souvent utilis  pour repr senter les courbes d’ coulement des suspensions en-dessous du jamming. La dur e de cette th se ne nous a pas permis d’explorer en d tail la rh ologie de ce mod le comme nous l’avons fait dans le Chap. 3 au-dessus du jamming. L  encore, il est possible de relier la partie d viatorique du tenseur des contraintes   la microstructure du syst me, ce qui permettrait d’explorer le lien entre rh ologie et microstructure dans les suspensions en-dessous du jamming. Nous nous attendons   ce que la param trisation polaire du tenseur des contraintes soit encore une fois un cadre particuli rement pertinent pour l’ tude de la rh ologie de ces syst mes. Nous nous attendons  galement   ce qu’  faibles taux de d formation, il existe de nouveau une s paration d’ chelles de temps entre les dynamiques radiales et orthoradiales jouant un r le important dans la rh ologie de ces mat riaux.

Dans le cas des suspensions denses en-dessous du jamming, la microstructure d pend de fa on assez importante de la densit  du syst me notamment   travers le nombre moyen de premiers voisins. Nous avons donc  t  oblig s dans ce cas de prendre en compte de fa on suffisamment fine l’influence de la densit  sur la microstructure. Dans le cas au-dessus du jamming, nous ne sommes pas rentr s dans le m me niveau de d tail et avons simplement consid r  que le nombre de premiers voisins demeurait  gal   six quelle que soit la fraction surfacique du syst me. Il est possible qu’une prise en compte plus pr cise de l’influence de la densit  sur la microstructure nous permette de mieux d crire la d pendance en fraction surfacique de la rh ologie macroscopique. De m me l’influence de l’ coulement sur la microstructure n’est pas prise en compte de fa on explicite dans notre approche. Khabaz *et al.* montrent ainsi que dans l’ tat stationnaire en cisaillement simple, le nombre moyen de contact par particule d pend du taux de d formation [Khabaz et al., 2021], ce qui n’est pas le cas dans la param trisation de la partie isotrope de la fonction de corr lation de paire que nous utilisons au Chap. 2. Il serait  galement int ressant de combiner les deux descriptions de la microstructure utilis es aux Chap. 2 et 4 afin d’obtenir un mod le unifi  en densit  permettant d’ tudier la transition de jamming. Pour cela, il serait n cessaire d’utiliser une param trisation de la partie isotrope de la fonction de corr lation de paire permettant au pic de premiers voisins de se d placer   l’int rieur du contact comme dans le Chap. 2 tout en laissant la possibilit    la couronne de premiers voisins de sortir du contact comme au Chap. 4. Si une telle approche est en principe possible, elle demeure techniquement compliqu e, la complexit  des calculs augmentant significativement dans ce cas.

Nous avons r sum  de fa on sch matique l’approche propos e dans cette th se en Fig. 1. Cette approche peut

être transposée à des systèmes plus complexes, moyennant des difficultés analytiques supplémentaires. Nous avons ainsi montré de façon succincte en Sec. 3.5 comment celle-ci peut être adaptée au cas de systèmes faiblement thermiques. Ainsi, il est possible d'envisager de généraliser dans des travaux futurs cette approche à des systèmes plus complexes. Une première étape consiste bien évidemment à généraliser la présente dérivation aux cas de systèmes tridimensionnels, la principale difficulté étant essentiellement une difficulté technique résidant dans la complexité des calculs et non une difficulté de principe. Un autre axe de développement consisterait à considérer des interactions plus complexes, soit en reprenant les calculs des Chaps. 2 et 4 avec des forces de contacts non-linéaires, soit en enrichissant les interactions entre entités constitutives (ajout de frottement, d'interactions attractives ou dépendantes du temps...etc). Enfin, un dernier axe consisterait à généraliser notre approche au cas d'écoulements inhomogènes afin de pouvoir capturer les effets de bandes de cisaillement ou de bords, par exemple.

Nous terminons ce chapitre de conclusion par quelques discussions spécifiques permettant de mettre en perspective notre dérivation et le modèle qui en résulte avec les différentes approches analytiques de la rhéologie des suspensions denses présentées en Sec. 2 de l'introduction de cette thèse ainsi que de présenter quelques axes pour d'éventuels travaux ultérieurs d'amélioration de notre démarche.

1 Originalité du passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique dans l'approche présentée

Notre approche se distingue des approches antérieures de passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique, présentées en Sec. 2.3, tout d'abord par le fait que nous dérivons une équation sur la partie déviatorique du tenseur des contraintes en multipliant l'équation sur la microstructure par $\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})$ plutôt que par $\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}$ (avec $\mathbf{p} = \mathbf{r}/r$) comme c'est le cas dans les systèmes rigides où il n'existe pas de forces de contact élastiques [Prager, 1957, Hinch and Leal, 1976, Phan-Thien et al., 1999, Gillissen and Wilson, 2018]. Cette étape de notre approche est toutefois identique à certaines dérivations pour des systèmes de polymères modélisés par des suspensions de ressorts [Marrucci, 1972, Larson, 1984]. La définition du tenseur de structure que nous utilisons est par ailleurs quelque peu différente de celle utilisée dans les systèmes rigides où seule l'orientation des contacts contribue au tenseur de structure tandis que dans notre cas l'allongement de ces derniers influe également sur le tenseur de structure. De plus, notre approche prend en compte les corrélations à trois corps, ce qui n'est pas le cas dans les travaux antérieurs où elles sont négligées en se plaçant en régime dilué.

La plus grande originalité de notre approche réside sûrement dans le fait que notre fermeture est motivée à l'échelle microscopique contrairement aux relations de fermeture des approches antérieures qui étaient motivées à l'échelle macroscopique. Ces dernières font généralement apparaître dans l'équation sur le tenseur de structure un terme $E^\infty : \langle \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \rangle$ contenant un tenseur d'ordre 4 qui implique que l'équation n'est pas fermée. Ce tenseur est l'équivalent du terme tensoriel $\Theta - \Phi$ apparaissant dans l'équation exacte sur Σ dans notre approche (Eq. (1.43)). Dans les deux cas il s'agit d'un terme décrivant la résistance d'une paire de particules à l'advection par l'écoulement. Dans notre cas, cette résistance est l'effet de l'élasticité des particules tandis que dans le cas de systèmes rigides elle est d'origine hydrodynamique, ce qui explique que nous n'ayons pas exactement la même expression pour ce terme dans notre cas que dans le cas de systèmes rigides. La démarche classique consiste à utiliser une relation de fermeture entre ce tenseur d'ordre 4 et le tenseur de structure, relation généralement obtenue en utilisant un développement macroscopique à faible anisotropie de ce tenseur [Hinch and Leal, 1976]. Dans notre cas, il est intéressant de noter que nous effectuons également un développement à faible anisotropie mais à l'échelle microscopique, ce qui nous permet là aussi d'exprimer ce terme en fonction du tenseur de structure et donc de la partie déviatorique du tenseur des contraintes. De plus, comme nous considérons l'élasticité des particules dans un régime dense, nous obtenons des termes supplémentaires nécessitant d'être fermés qui n'apparaissent pas dans les travaux antérieurs.

Enfin, notons que les approches classiques font, elles aussi, apparaître une relation constitutive entre le tenseur des contraintes et le tenseur de structure, permettant de remonter à la rhéologie du système à partir de la connaissance de sa structure. Dans ces relations constitutives Σ' n'est généralement pas exactement aligné avec \mathcal{Q} , une contribution en E^∞ désalignant ces deux tenseurs (cf Eq. (56), par exemple). Dans la limite

des faibles taux de déformations les axes de Σ' et Q sont donc presque confondus. Là encore, la relation constitutive est établie au niveau macroscopique dans les approches classiques, tandis que dans notre cas elle résulte d'approximations au niveau microscopique.

2 Comparaison des modèles constitutifs obtenus avec les modèles macroscopiques déjà existants

La dérivation présentée dans cette thèse nous a permis d'obtenir une équation macroscopique pour le tenseur des contraintes s'apparentant aux modèles macroscopiques déjà existants que nous avons présentés en Sec. 2.1 de l'introduction de cette thèse. Nos modèles constitutifs font apparaître tous les termes tensoriels permis par les règles de Hand en 2D que nous avons présentées en Sec. 2.1 de l'introduction de cette thèse, à savoir Σ' et E^∞ . Les règles de Hand prédisent qu'en 2D, tous les coefficients devant ces termes tensoriels peuvent se réécrire en fonction des 4 invariants suivants : p , $(\Sigma' : \Sigma')$, $(E^\infty : E^\infty)$ et $(\Sigma' : E^\infty)$. Dans nos modèles, les coefficients de chaque terme tensoriel s'expriment bien en fonction de ces invariants, à l'exception de $(E^\infty : E^\infty)$. Cela s'explique par le fait que les équations exactes sur les parties déviatorique et isotrope du tenseur des contraintes que nous obtenons dans le Chap. 1 sont linéaires en E^∞ si g et g_3 ne dépendent pas explicitement de ce tenseur (ce qui est le cas avec les fermetures développées aux Chaps. 2 et 4). L'invariant $(E^\infty : E^\infty)$ n'étant pas linéaire en E^∞ , il ne peut donc pas apparaître dans nos équations.

Le terme de vorticité $\Omega^\infty \cdot \Sigma' - \Sigma' \cdot \Omega^\infty$ (qui pourrait formellement être décomposé en une combinaison linéaire de Σ' et E^∞ avec des coefficients s'exprimant en fonction des invariants de Hand) apparaît dans la forme qui lui est imposée par l'invariance par changement de référentiel. Nous observons également une contribution de E^∞ à l'advection de Σ par l'écoulement sous la forme $\Sigma \cdot E^\infty + E^\infty \cdot \Sigma$, cependant en 2D cette contribution prend la forme particulière

$$E^\infty \cdot \Sigma + \Sigma \cdot E^{\infty T} = -2pE^\infty + (\Sigma' : E^\infty) \mathbb{1}, \quad (5.1)$$

si bien que cette contribution est incluse dans le terme en E^∞ de l'équation sur Σ' et celui en $(\Sigma' : E^\infty)$ de l'équation sur p . Ceci est une particularité du cas 2D, en dimension supérieure, le terme $\Sigma \cdot E^\infty + E^\infty \cdot \Sigma$ est un terme indépendant faisant partie des tenseurs permis par la théorie de Hand. En 2D la contribution advective déviatorique de E^∞ se réduit donc à un terme $-2pE^\infty$. Les termes de couplage entre l'élasticité des entités constitutives et l'écoulement (tenseurs Θ et Φ dans l'Eq. (1.43)) font eux aussi apparaître une contribution proportionnelle à E^∞ venant s'ajouter à la contribution d'advection pure de l'écoulement. Cette dernière apparaît dans l'Eq. (2.48) sous la forme $\kappa(p)E^\infty$. En utilisant le développement au premier ordre en p (Eq. (C.15)) calculé en Annexe C, nous pouvons réécrire ce terme sous la forme

$$\left(\frac{3\phi}{\pi} - \left(\frac{5}{2} - \frac{2\phi}{3} \right) p \right) E^\infty,$$

où nous avons utilisé $A = 3/\phi$ pour simplifier l'expression de $\kappa(p)$. Le premier terme du développement de κ donne ainsi une contribution similaire au terme $2\eta_s E^\infty$ apparaissant dans les modèles phénoménologiques pour modéliser la viscosité du fluide complexe. Le deuxième terme correspond quant à lui à la contribution de E^∞ à l'advection. Celle-ci n'est pas totale puisque le préfacteur n'est pas égal à $-2p$. L'effet est identique à celui du paramètre libre a^* dans la dérivée de Gordon-Schowalter utilisée dans les modèles macroscopiques. Dans ceux-ci $a^* \neq 1$ est permis par l'invariance par changement référentiel. Dans notre approche ce paramètre a^* a une origine microscopique et dépend de la fraction surfacique du système selon la relation $a^* = (15 - 4\phi)/12$. Pour des fractions surfaciques proches du jamming, nous avons $a^* \approx 0.83$, les interactions à deux corps entre entités constitutives contribuant à un « glissement » de ces dernières par rapport au fluide, qui est généralement l'interprétation du paramètre a^* dans les suspensions de polymères [Thien and Tanner, 1977, Vlassopoulos and Hatzikiriakos, 1995]. Nous observons le même phénomène dans le cas en-dessous du jamming avec $a^* = (27 - 4\phi_1)/18 \approx 1.4$. Cette valeur de a^* plus grande que 1 est assez surprenante, bien que permise en théorie, les interactions entre particules contribuant dans ce cas à augmenter l'advection par le fluide. Ce terme est toutefois suffisant pour obtenir un fluide rhéofluidifiant, ce qui est un phénomène courant dans les VEM. Ainsi un modèle d'Oldroyd général [Oldroyd and Wilson, 1950] ne prédit de rhéofluidification que dans le cas

où $|a^*| < 1$. Dans notre cas, le fait que les dynamiques des parties déviatorique et isotrope de la contrainte soient différentes permet d'expliquer que nous obtenons malgré tout de la rhéofluidification.

Quelques différences sont toutefois à noter avec les modèles macroscopiques classiques. Une première différence consiste dans le fait que nos modèles font apparaître une dynamique distincte des parties déviatorique et isotrope du tenseur des contraintes, contrairement aux modèles phénoménologiques usuels où la dynamique de ces deux parties est contenue dans une équation tensorielle unique sur le tenseur des contraintes. Une seconde différence réside dans le fait que les modèles macroscopiques phénoménologiques portent sur la contrainte locale σ et sont couplés à un champ de vitesse régi par des équations de mécanique des fluides [Oldroyd, 1947]. Dans notre cas, l'écoulement est uniforme et notre modèle ne fait donc pas apparaître de terme local $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \Sigma$ comme les modèles macroscopiques classiques. Il serait possible dans notre cas d'obtenir un modèle pour un écoulement non-uniforme en reprenant notre dérivation à partir d'une équation d'évolution pour une fonction de corrélation de paire non-uniforme. Nous nous attendons à ce que cette dérivation fasse apparaître dans nos modèles le terme $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \Sigma$ imposé par l'invariance par changement de référentiel ainsi que d'autres termes locaux éventuels. Une façon plus simple de modéliser un écoulement non-uniforme à partir de notre modèle serait de considérer une séparation d'échelle entre les variations de champ de vitesse et la taille des entités constitutives. Il serait alors possible de considérer que nos modèles suffisent à décrire la contrainte locale et les coupler à un champ de vitesse non-uniforme impliquant une dépendance en espace des tenseurs E^∞ et Ω^∞ apparaissant dans nos modèles.

Les non-linéarités en contraintes apparaissant dans notre modèle pour les suspensions au-dessus du jamming sont également assez originales. Ces dernières sont responsables de la plasticité de l'écoulement et de l'apparition d'une contrainte seuil. Dans les modèles phénoménologiques classiques, cette contribution est généralement implémentée par analogie avec un patin à frottement sec avec un terme de la forme

$$\max \left(0, 1 - \frac{\tau_c}{(\Sigma' : \Sigma')^{1/2}} \right) \Sigma'$$

faisant apparaître explicitement le critère de von Mises. Dans notre cas ce dernier apparaît aussi explicitement mais sous la forme d'un terme proportionnel à

$$\left(1 - \frac{(\Sigma' : \Sigma')}{\tau_c^2} \right) \Sigma'.$$

Nous obtenons ainsi une forme quelque peu différente pour l'implémentation du critère de von Mises. Il serait intéressant d'étudier les différences sur la dynamique pour ces deux formes d'implémentation du critère de von Mises dans un modèle phénoménologique classique même s'il est probable qu'aucune différence qualitative ne soit observée.

Par ailleurs dans les VEPM les termes non-linéaires n'apparaissent généralement qu'à l'extérieur du cercle de von Mises, à l'intérieur les non-linéarités sont nulles (grâce à l'utilisation de la fonction max) et le matériau se comporte comme un solide élastique. Notre modèle ne présente pas une telle singularité et le matériau présente un comportement plastique même à l'intérieur du cercle de von Mises. En effet, les termes non-linéaires ont pour effet d'amener le système à la surface du cercle de von Mises, même en l'absence de cisaillement. Ce comportement n'est pas physique et définit le domaine de validité de notre modèle qui n'est pertinent que pour décrire l'écoulement des suspensions denses molles au-dessus du jamming mais pas leur comportement élastique en-dessous du seuil de plasticité. Il n'est pas étonnant que notre modèle ne soit pas en mesure de décrire le comportement des suspensions dans leur domaine d'élasticité puisque la description de la microstructure choisie pour fermer le système permet de décrire la microstructure dans un écoulement établi. Il serait intéressant de s'interroger sur la façon d'adapter cette description dans le cas où l'écoulement n'est pas encore établi afin de capturer également le comportement élastique des suspensions en-dessous du seuil de plasticité. Notons que notre modèle partage cette particularité d'être plastique en-dessous du seuil de plasticité avec le récent modèle de Kamani [Kamani et al., 2021] dans lequel cette caractéristique est souhaitée afin de rendre compte du fait que des événements plastiques commencent à avoir lieu avant d'avoir atteint le seuil de plasticité [Petekidis et al., 2002, Karmakar et al., 2010].

Dans le cas des suspensions en-dessous du jamming nous avons négligé les non-linéarités en contrainte provenant des corrélations à trois corps. Notre modèle fait toutefois apparaître des non-linéarités en contraintes

issues des termes de résistance à l'advection par l'écoulement (tenseurs Θ et Φ dans l'Eq. (1.43)). Celles-ci apparaissent sous la forme d'un terme en $(\Sigma' : E^\infty) \Sigma' / p$ dans l'équation sur Σ' et d'un terme en $(\Sigma' : E^\infty) / p$ dans l'équation sur la pression. Une non-linéarité assez semblable apparaît dans le modèle de Larson [Larson, 1984], modèle viscoélastique développé à partir du niveau microscopique par une approche semblable à la nôtre pour des suspensions de polymères. Il serait intéressant d'étudier en détail la rhéologie de notre modèle pour comprendre ce que cette non-linéarité apporte à la rhéologie de notre système par rapport à un modèle linéaire en contrainte tel que celui d'Oldroyd [Oldroyd and Wilson, 1950] par exemple. Il serait également intéressant de calculer les non-linéarités associées aux termes de corrélation à trois corps en étendant à l'ordre supérieur le développement en q effectué au Chap. 4 et voir si celles-ci ont une influence particulière sur la rhéologie prédite par notre modèle.

Le modèle que nous obtenons pour les suspensions au-dessus du jamming prédit une dépendance linéaire de l'excès de contrainte de cisaillement $\sigma - \sigma_y$ pour de faibles taux de cisaillement et ne nous permet pas de reproduire la loi d'Herschel-Bulkley avec un exposant $n < 1$. Cette caractéristique est commune avec la plupart des VPM [Bingham, 1922, Oldroyd, 1947] et des VEPM [Schwedoff, 1900, Isayev and Fan, 1990, Saramito, 2007]. Les modèles faisant apparaître explicitement une loi d'Herschel-Bulkley, le font soit en imposant des non-linéarités en contraintes avec des exposants non-entiers [Herschel and Bulkley, 1926, Saramito, 2009], soit en imposant une non-linéarité en taux de déformation avec des exposants non-entiers [Kamani et al., 2021]. S'inspirant de ces modèles, il est possible d'envisager différentes pistes pour aboutir à un modèle prédisant un exposant non-trivial dans la courbe d'écoulement. Les non-linéarités en contraintes émergent dans notre approche des corrélations à 3 corps et sont déterminées par la forme de la fermeture entre g_3 et g . La fermeture de Kirkwood implique des non-linéarités en puissance entière. Il est envisageable qu'en utilisant une fermeture plus sophistiquée, il soit possible d'obtenir des non-linéarités avec des exposants non-triviaux. La fermeture des tenseurs définis par une intégrale de g_3 constitue cependant l'étape critique de notre dérivation en terme de complexité de calculs. Il est fort probable qu'utiliser une relation de fermeture pour g_3 plus complexe que celle de Kirkwood augmente considérablement la difficulté de cette étape et rende très difficile une dérivation purement analytique. Une autre piste, peut-être plus simple à traiter analytiquement, serait de choisir une description de la microstructure faisant apparaître explicitement l'influence de l'écoulement sur la microstructure. En effet, dans la description présentée au Chap. 2, la fonction de corrélation de paire ne dépend pas explicitement de l'écoulement, ce qui implique que notre modèle est linéaire en E^∞ . En intégrant l'écoulement à la description de la microstructure il serait ainsi possible d'introduire des non-linéarités en $\dot{\gamma}$ potentiellement suffisantes pour obtenir un exposant d'Herschel-Bulkley non-trivial. Enfin, il est possible que les anisotropies d'ordre supérieur jouent un rôle déterminant dans l'obtention d'une rhéologie stationnaire non-triviale à faible taux de déformations. Ainsi dans les modèles élastoplastiques sur réseaux (cf. Sec. 2.2 de l'introduction de cette thèse) le propagateur permettant de décrire la redistribution à longue portée de la contrainte après un évènement plastique possède une anisotropie d'ordre 4, ce qui peut laisser penser que dans notre cas il soit nécessaire de prendre en compte l'anisotropie d'ordre 4 de notre système.

3 Vers un modèle 3D ?

Un prolongement naturel de ce travail de thèse serait de reprendre notre démarche dans le cas d'un système tridimensionnel. Si nous avons choisi de nous restreindre ici au cas 2D pour limiter la complexité des calculs dans une approche exploratoire, le cas 3D ne comporte *a priori* pas de différences conceptuelles avec le cas 2D. Ainsi, l'ensemble de la dérivation exacte présentée au Chap. 1 est totalement général vis-à-vis de la dimension du système, à l'exception de la décomposition en parties déviatorique et isotrope du terme $\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T}$ qui est propre au cas 2D (Eqs. (1.46) et (1.47)). Les simplifications concernant la microstructure utilisées au Chap. 2 pour fermer le système (fermeture de Kirkwood Eq. (2.26), paramétrisation de l'anisotropie de g Eq. (2.9) et de sa partie isotrope Eq. (2.44)) demeurent elles aussi pertinentes en 3D. Ainsi, la principale différence par rapport au cas 2D consiste à reprendre les calculs d'intégrales avec la paramétrisation de g dans une géométrie tridimensionnelle. Ces calculs, dont le niveau de complexité était déjà relativement élevé en 2D, sont considérablement alourdis par le passage d'une géométrie 2D à une géométrie 3D. La durée limitée de cette thèse ne nous a pas permis de s'atteler à ces calculs mais nous proposons ici de discuter les différences qu'il est possible d'obtenir dans notre modèle constitutif en 3D.

En effet, les règles de Hand que nous avons présentées en Sec. 2.1 de l'introduction de cette thèse permettent l'apparition de termes tensoriels supplémentaires dans l'équation d'évolution fermée du tenseur des contraintes en 3D. De deux tenseurs et quatre invariants permis par les règles de Hand en 2D, nous passons à huit tenseurs et neufs invariants permis en 3D. Le tenseur $E^\infty \cdot \Sigma' + \Sigma' \cdot E^\infty$ devient ainsi un tenseur indépendant linéairement et ne se réduit pas à une simple contribution en E^∞ comme dans le cas 2D. Les nouveaux termes tensoriels font apparaître les tenseurs Σ'^2 et $E^{\infty 2}$ qui en 2D étaient linéairement liés à leurs puissances d'ordre inférieur par le théorème de Cayley-Hamilton (avec des coefficients dépendant des invariants de Hand). La contribution de l'écoulement dans l'équation exacte sur Σ (Eq. (1.43)) étant linéaire en E^∞ , l'équation fermée le sera aussi et il est donc possible d'éliminer tous les termes d'ordre supérieur à 1 en E^∞ . Finalement, nous pouvons nous attendre à voir apparaître seulement deux termes supplémentaires dans notre modèle constitutif en 3D : Σ'^2 et $E^\infty \cdot \Sigma'^2 + \Sigma'^2 \cdot E^\infty$. De même, seuls deux invariants supplémentaires sont possibles : $(\Sigma' : \Sigma'^2)$ et $(\Sigma'^2 : E^\infty)$.

La contribution de l'écoulement dans l'Eq. (1.43) correspond aux termes $\nabla u^\infty \cdot \Sigma + \Sigma \cdot \nabla u^{\infty T}$, Θ et Φ . Le premier de ceux-ci correspond à l'advection de l'écoulement (c'est notamment dans celui-ci qu'est contenu la contribution de la vorticit ) tandis que les deux autres mod lisent le couplage entre effets  lastiques et  coulement. Ces deux derniers  tant lin aires en g , nous nous attendons   ce qu'ils soient lin aires en Σ' . En effet, il para t raisonnable de s'attendre   ce qu'une relation lin aire entre Σ' et Q d coule encore de la param trisation de l'anisotropie de g , ce qui impliquerait que cette derni re soit elle aussi lin aire en Σ' . Il nous semble donc peu probable que la fermeture des tenseurs Θ et Φ fasse appara tre une contribution en Σ'^2 . Nous nous attendons donc   ce que la contribution de l' coulement puisse s' crire sous la forme

$$\Omega^\infty \cdot \Sigma - \Sigma \cdot \Omega^\infty + \lambda_1(p) (E^\infty \cdot \Sigma + \Sigma \cdot E^\infty) + \lambda_2(p) E^\infty.$$

La contribution de l' coulement est ainsi qualitativement la m me en 3D qu'en 2D. La vorticit  appara t toujours   travers le terme contraint par l'invariance sous changement de r f rentiel, tandis que l' lasticit  des entit s constitutives a pour effet de modifier l'advection des entit s par l' coulement avec $\lambda_1(p) \neq 1$. Le terme en E^∞ rend quant   lui compte de la viscosit  du fluide suspendant.

Si le passage d'une g om trie 2D   une g om trie 3D ne devrait *a priori* pas modifier la forme de la contribution de l' coulement, nous nous attendons   ce qu'elle ait possiblement plus d'effet sur la forme des non-lin arit s en Σ . Les tenseurs Ξ et Π qui sont lin aires en g devraient  galement l' tre en Σ' apr s fermeture comme dans le cas bidimensionnel. Encore une fois, il est tr s probable que les non-lin arit s proviennent des corr lations   3 corps   travers les tenseurs Γ et Υ . Il n'est pas  vident   premi re vue que ces contributions fassent appara tre de mani re explicite le crit re de von Mises comme c' tait le cas en 2D. En utilisant le th or me de Cayley-Hamilton, il est possible de montrer qu'en 3D

$$\Sigma'^3 = \frac{\Sigma' : \Sigma'}{2} \Sigma' - (\Sigma' : \Sigma'^2) \mathbb{1}, \quad (5.2)$$

o  nous avons utilis  le fait que $\text{tr } \Sigma' = 0$. En supposant que la partie d viatorique des tenseurs Γ et Υ puisse se d velopper en puissance de Σ' comme c' tait le cas en 2D (cf. Annexe B), ce qui n'est pas  vident   premi re vue en 3D, nous obtiendrions donc une non-lin arit  de la forme

$$[\beta(p) - \xi(p) (\Sigma' : \Sigma')] \Sigma' + \lambda(p) \left(\Sigma'^2 - \frac{\Sigma' : \Sigma'}{3} \mathbb{1} \right).$$

Le premier terme est analogue   ce que nous obtenons en 2D tandis que le second correspond   la contribution de Σ'^2 . Celle-ci  tait nulle en 2D car dans ce cas particulier Σ'^2  tait purement isotrope, ce qui n'est pas le cas en 3D. Aucun argument simple ne nous permet de dire que $\lambda(p)$ soit nul dans l' tat stationnaire en absence de d formation, auquel cas le crit re de plasticit  de notre mod le ne serait pas celui de von Mises. Il serait donc int ressant de faire les calculs en g om trie 3D afin de voir si la dimensionnalit  du syst me a une influence sur sa plasticit .

Annexes

Annexe A

Évaluation des termes tensoriels

Cet appendice contient les détails de certains calculs tensoriels des Chaps. 1 et 2.

A.1 Expression du tenseur Λ

Nous commençons par évaluer le tenseur Λ dont l'expression est donnée en Eq. (1.36). Nous exprimons tout d'abord l'opérateur gradient en coordonnées polaires (r, θ) . Dans la convention que nous avons choisi pour l'opérateur ∇ (Eq. (1.1)), celui-ci s'écrit :

$$\begin{aligned}\nabla f^T &= f'(r)(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + \frac{f(r)}{r}(\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta) \\ &= \left(f'(r) - \frac{f(r)}{r}\right)(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + \frac{f(r)}{r}\mathbb{1}.\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

Nous notons qu'il s'agit d'un tenseur symétrique, $\nabla f = \nabla f^T$. Nous obtenons donc :

$$\begin{aligned}(\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \cdot (\nabla f \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty)^T &= \frac{f(r)}{r}(\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + \left(f'(r) - \frac{f(r)}{r}\right)(\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \cdot ((\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty)^T \\ &= (\mathbf{r} \otimes f(r)) \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + r^2 f'(r)(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot ((\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty)^T - r f(r)(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot ((\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty)^T\end{aligned}\quad (\text{A.2})$$

Nous pouvons alors réécrire

$$\begin{aligned}(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot ((\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot \nabla \mathbf{u}^\infty)^T &= (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot \left(\mathbf{e}_r \otimes \left(\nabla \mathbf{u}^{\infty T} \cdot \mathbf{e}_r\right)\right)^T \\ &= (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) \cdot \left(\left(\nabla \mathbf{u}^{\infty T} \cdot \mathbf{e}_r\right) \otimes \mathbf{e}_r\right) \\ &= \left(\mathbf{e}_r \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} \cdot \mathbf{e}_r\right)(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r)\end{aligned}\quad (\text{A.3})$$

ainsi que

$$\begin{aligned}\mathbf{e}_r \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} \cdot \mathbf{e}_r &= \nabla \mathbf{u}^{\infty T} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r \\ &= \mathbf{E}^\infty : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \mathbf{\Omega}^\infty : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r \\ &= \mathbf{E}^\infty : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r,\end{aligned}\quad (\text{A.4})$$

le terme $\mathbf{\Omega}^\infty : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r$ s'annulant puisqu'il s'agit de la contraction d'un tenseur antisymétrique avec un tenseur symétrique. En utilisant ces résultats dans l'expression (1.36) de Λ , nous obtenons finalement l'expression (1.41).

A.2 Décomposition de $\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T}$

$\boldsymbol{\Sigma}$ étant un tenseur symétrique, la trace de $\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T}$ peut s'écrire comme :

$$\begin{aligned} \text{tr} \left(\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} \right) &= 2 \nabla \mathbf{u}^\infty : \boldsymbol{\Sigma} \\ &= 2 \mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma} + 2 \boldsymbol{\Omega}^\infty : \boldsymbol{\Sigma} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

$\boldsymbol{\Omega}^\infty$ étant antisymétrique et $\boldsymbol{\Sigma}$ symétrique, $\boldsymbol{\Omega}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}$ est nul. Nous avons également :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma} &= \mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}' + \frac{1}{2} (\text{tr} \boldsymbol{\Sigma}) (\text{tr} \mathbf{E}^\infty) \\ &= \mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}', \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

car $\text{tr} \mathbf{E}^\infty = \text{tr} \nabla \mathbf{u}^\infty = \nabla \cdot \mathbf{u}^\infty = 0$, le fluide étant incompressible.

Pour calculer la partie déviatorique du tenseur $\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T}$, nous le réécrivons de la sorte :

$$\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} = \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' + \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} + (\text{tr} \boldsymbol{\Sigma}) \mathbf{E}^\infty. \quad (\text{A.7})$$

Le fluide étant incompressible, la contribution en \mathbf{E}^∞ est de trace nulle. Nous calculons alors la partie déviatorique du reste de l'expression :

$$\begin{aligned} &\left(\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' + \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} \right)' \\ &= \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' + \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \nabla \mathbf{u}^{\infty T} - (\mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}') \mathbb{1} \\ &= \mathbf{E}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' + \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \mathbf{E}^\infty + \boldsymbol{\Omega}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' - \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \boldsymbol{\Omega}^\infty - (\mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}') \mathbb{1} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Le tenseur $\boldsymbol{\Sigma}'$ étant symétrique, il peut être diagonalisé dans une base orthonormale $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$. Par ailleurs étant de trace nulle, il s'écrit dans cette base

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \mu (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2). \quad (\text{A.9})$$

Dans cette même base le tenseur symétrique de trace nulle \mathbf{E}^∞ peut s'écrire

$$\mathbf{E}^\infty = \nu (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) + \tilde{\nu} (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1). \quad (\text{A.10})$$

La contraction de ces deux tenseurs s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' &= \mu \nu (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2) \\ &\quad + \mu \tilde{\nu} (-\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Dans cette notation, nous avons $\mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}' = 2\mu\nu$, ce qui conduit à la relation suivante :

$$\mathbf{E}^\infty \cdot \boldsymbol{\Sigma}' + \boldsymbol{\Sigma}' \cdot \mathbf{E}^{\infty T} = (\mathbf{E}^\infty : \boldsymbol{\Sigma}') \mathbb{1}. \quad (\text{A.12})$$

En injectant tous ces résultats dans l'équation (A.7), nous obtenons au final l'équation (1.47).

A.3 Démonstration des propriétés de calcul des tenseurs symétriques de trace nulle en dimension deux

Nous présentons ici la démonstration des propriétés de calcul utilisé en Sec. 2.2.2. Dans ce qui suit \mathbf{A} et \mathbf{B} désignent des tenseurs symétriques de trace nulle en dimension deux.

Propriété 1

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = 0$$

Démonstration

Nous écrivons le tenseur sous sa forme la plus générique : $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix}$. Nous avons alors :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r &= a (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + 2b \cos \theta \sin \theta \\ &= a \cos 2\theta + b \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

L'intégrale de cette quantité sur l'intervalle $[-\pi, \pi]$ est donc nulle.

Propriété 2

$$\int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \frac{\pi}{2} \mathbf{A}$$

Démonstration

En utilisant (A.13), nous montrons

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix} (a \cos 2\theta + b \sin 2\theta) d\theta \\ &= \frac{\pi}{2} \begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix} \\ &= \frac{\pi}{2} \mathbf{A} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Propriété 3

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \frac{\pi}{2} \mathbf{A}$$

Démonstration

Ce résultat s'obtient facilement en combinant les deux propriétés précédentes

Propriété 4

$$\int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \frac{\pi}{2} (\mathbf{A} : \mathbf{B})$$

Démonstration

En notant $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix}$ et $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a' & b' \\ b' & -a' \end{pmatrix}$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) &= (a \cos 2\theta + b \sin 2\theta)(a' \cos 2\theta + b' \sin 2\theta) \\ &= aa' \cos^2 2\theta + bb' \sin^2 2\theta + (ab' + ba') \cos 2\theta \sin 2\theta \\ &= \frac{aa' + bb'}{2} + \frac{aa' - bb'}{2} \cos 4\theta + \frac{ab' + ba'}{2} \sin 4\theta \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Nous avons donc :

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) &= \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{aa' + bb'}{2} + \frac{aa' - bb'}{2} \cos 4\theta + \frac{ab' + ba'}{2} \sin 4\theta \right) d\theta \\ &= \pi(aa' + bb') \\ &= \frac{\pi}{2} (\mathbf{A} : \mathbf{B}) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Propriété 5

$$\int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta = \mathbf{0}$$

Démonstration

En remplaçant $(\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r)$ par son expression (A.15), nous obtenons :

$$\begin{aligned} &\int_{-\pi}^{\pi} \left(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r - \frac{1}{2} \mathbb{1} \right) (\mathbf{A} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) (\mathbf{B} : \mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \begin{pmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{pmatrix} \left(\frac{aa' + bb'}{2} + \frac{aa' - bb'}{2} \cos 4\theta + \frac{ab' + ba'}{2} \sin 4\theta \right) d\theta \\ &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Annexe B

Évaluation des intégrales impliquant g_3

Dans cette appendice, nous calculons les intégrales impliquant g_3 en utilisant la fermeture de Kirkwood (2.26). Nous commençons par réécrire l'expression (2.9) de $g(\mathbf{r})$ d'une façon plus appropriée afin de simplifier les calculs à venir. Le tenseur \mathbf{Q} étant symétrique et de trace nulle, il peut être diagonalisé de la sorte dans une base orthonormale ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$) :

$$\mathbf{Q} = \lambda (\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2). \quad (\text{B.1})$$

En prenant la direction de \mathbf{e}_1 comme origine de la coordonnée polaire angulaire θ , \mathbf{e}_r s'écrit :

$$\mathbf{e}_r = \cos \theta \mathbf{e}_1 + \sin \theta \mathbf{e}_2. \quad (\text{B.2})$$

L'expression (2.9) devient alors :

$$g(\mathbf{r}) = g_{\text{iso}}(r) + \lambda \alpha r g'_{\text{iso}}(r) \cos 2\theta. \quad (\text{B.3})$$

En utilisant cette expression, la fermeture de Kirkwood (2.26) peut être réécrite comme une fonction polynomiale de λ :

$$g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \lambda g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \lambda^2 g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \lambda^3 g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (\text{B.4})$$

avec les fonctions suivantes :

$$g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_{\text{iso}}(r) g_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u), \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \alpha r g'_{\text{iso}}(r) g_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos 2\theta \\ &\quad + \alpha r' g_{\text{iso}}(r) g'_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos 2\theta' \\ &\quad + \alpha u g_{\text{iso}}(r) g_{\text{iso}}(r') g'_{\text{iso}}(u) \cos 2\psi, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \alpha^2 r r' g'_{\text{iso}}(r) g'_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos 2\theta \cos 2\theta' \\ &\quad + \alpha^2 r u g'_{\text{iso}}(r) g_{\text{iso}}(r') g'_{\text{iso}}(u) \cos 2\theta \cos 2\psi \\ &\quad + \alpha^2 r' u g_{\text{iso}}(r) g'_{\text{iso}}(r') g'_{\text{iso}}(u) \cos 2\theta' \cos 2\psi, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \alpha^3 r r' u g'_{\text{iso}}(r) g'_{\text{iso}}(r') g'_{\text{iso}}(u) \cos 2\theta \cos 2\theta' \cos 2\psi, \quad (\text{B.8})$$

où $r = |\mathbf{r}|$, $r' = |\mathbf{r}'|$, $u = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, $\theta = \arg(\mathbf{r})$, $\theta' = \arg(\mathbf{r}')$ et $\psi = \arg(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Il est par ailleurs possible d'obtenir une expression de u et de $\cos 2\psi$ faisant intervenir r , r' , θ et θ' . En effet, en appliquant la formule d'Al-Kashi au triangle formé par les trois vecteurs \mathbf{r} , \mathbf{r}' et $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ (cf. Fig. 1), il est possible de montrer que $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta - \theta')}$ et $\psi = \theta' + \pi - \theta''$, θ'' étant l'angle entre les vecteurs \mathbf{r}' et $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Le cosinus et le sinus de ce dernier angle sont obtenus en appliquant la formule des sinus :

$$\sin \theta'' = \frac{r \sin(\theta - \theta')}{u} \quad (\text{B.9})$$

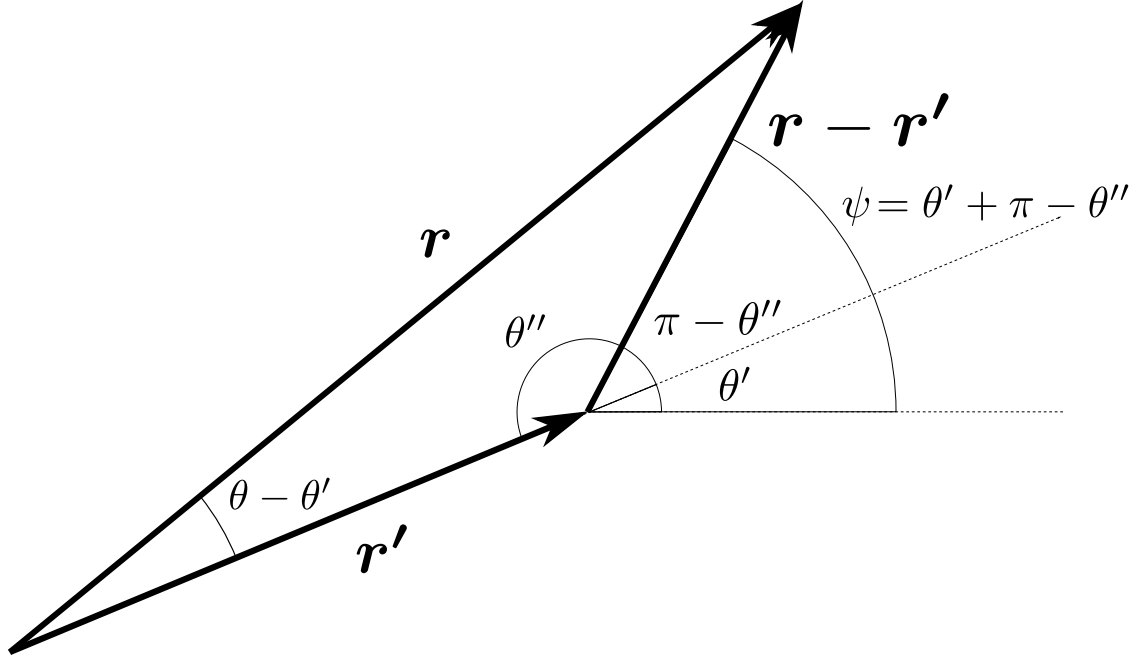


FIGURE 1 – Représentation des vecteurs centre à centre de trois particules et des différents angles en jeu.

$$\cos \theta'' = \sqrt{1 - \sin^2 \theta''} = \frac{\sqrt{u^2 - r^2 \sin^2 \theta''}}{u} = \frac{r' - r \cos(\theta - \theta')}{u} \quad (\text{B.10})$$

Nous obtenons ainsi une expression pour le cosinus de l'angle 2ψ , expression qui nous sera utile pour la suite :

$$\begin{aligned} u^2 \cos 2\psi &= u^2 \cos 2\theta' \cos 2\theta'' + u^2 \sin 2\theta' \sin 2\theta'' \\ &= u^2 \cos 2\theta' (\cos^2 \theta'' - \sin^2 \theta'') + 2u^2 \sin 2\theta' \cos \theta'' \sin \theta'' \\ &= \cos 2\theta' (r'^2 - 2rr' \cos(\theta - \theta') + r^2 \cos(2(\theta - \theta'))) + \sin 2\theta' (2rr' \sin(\theta - \theta') - r^2 \sin(2(\theta - \theta'))) \\ &= r^2 \cos 2\theta + r'^2 \cos 2\theta' - 2rr' \cos(\theta + \theta') \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

B.1 Calcul de Γ

Nous évaluons maintenant le terme tensoriel Γ défini en (1.39). Nous notons d'abord que son expression, définie par une intégrale sur $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, peut être simplifiée en considérant les symétries de l'intégrande. La partie tensorielle de l'intégrande s'écrit en effet

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}) \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r}') = f(r)f(r') \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \theta' & \cos \theta \sin \theta' \\ \sin \theta \cos \theta' & \sin \theta \sin \theta' \end{pmatrix}, \quad (\text{B.12})$$

de telle sorte que les termes diagonaux sont pairs et les termes hors diagonaux sont impairs selon la symétrie $(\theta, \theta') \rightarrow (-\theta, -\theta')$. Comme $g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est invariante sous cette transformation, les termes hors diagonaux de l'intégrande définissant Γ sont impairs sous la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (-\theta, -\theta')$, donc leur intégrale est nulle et Γ est un tenseur diagonal. De plus, en utilisant la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (\frac{\pi}{2} - \theta, \frac{\pi}{2} - \theta')$ et l'expression de la fonction $g_3^{(i)}$, il est possible de montrer que :

$$\iint \cos \theta \cos \theta' g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = \iint \sin \theta \sin \theta' g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta', \quad (\text{B.13})$$

$$\iint \cos \theta \cos \theta' g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = - \iint \sin \theta \sin \theta' g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta', \quad (\text{B.14})$$

$$\iint \cos \theta \cos \theta' g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = \iint \sin \theta \sin \theta' g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta', \quad (\text{B.15})$$

$$\iint \cos \theta \cos \theta' g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = - \iint \sin \theta \sin \theta' g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta'. \quad (\text{B.16})$$

Il s'ensuit que Γ peut s'écrire comme un polynôme en Σ'

$$\Gamma = \Gamma_0 \mathbb{1} + \Gamma_1 \Sigma' + \Gamma_2 \Sigma'^2 + \Gamma_3 \Sigma'^3, \quad (\text{B.17})$$

avec $\Sigma'^2 = \Sigma' \cdot \Sigma'$ et $\Sigma'^3 = \Sigma' \cdot \Sigma' \cdot \Sigma'$, et où les coefficients Γ_i sont définis de la sorte :

$$\Gamma_i = \frac{\rho^3}{2} \iint f(r) f(r') \cos \theta \cos \theta' g_3^{(i)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (\text{B.18})$$

La partie déviatorique de $\mathbb{1}$ et de Σ'^2 étant nulle et Σ' et Σ'^3 étant de trace nulle, nous pouvons décomposer Γ comme suit,

$$\Gamma' = \Gamma_1 \Sigma' + \Gamma_3 \Sigma'^3, \quad (\text{B.19})$$

$$\text{tr } \Gamma = 2\Gamma_0 + \Gamma_2 (\Sigma' : \Sigma'). \quad (\text{B.20})$$

En remplaçant les fonctions $g_3^{(i)}$ par leurs expressions, et en utilisant l'équation (B.11) pour exprimer $\cos 2\psi$ en fonction de r, r', θ et θ' , nous pouvons exprimer les coefficients α_i . Il est possible, en utilisant les identités trigonométriques, de réécrire tous les produits de fonctions cosinus apparaissant dans ces coefficients comme une somme de termes de la forme $\cos(n\theta + m\theta')$. Dans le cas où $n + m \neq 0$, $\cos(n\theta + m\theta')$ est antisymétrique sous la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (\theta + \pi/(n+m), \theta' + \pi/(n+m))$, tandis que $u(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est invariant sous cette transformation, si bien que ces intégrales angulaires sont nulles. Seuls les termes de types $\cos(n(\theta - \theta'))$ donnent des contributions non-nulles. La partie angulaire de toutes les intégrales est donc uniquement fonction de $\theta - \theta'$, ce qui nous permet de réduire à un le nombre de variables angulaires en faisant le changement de variables $(\theta, \theta') \rightarrow (\theta - \theta', \theta')$. En remarquant par ailleurs que $\Sigma'^3 = \frac{1}{2} (\Sigma' : \Sigma') \Sigma'$, nous obtenons les équations (2.32) et (2.33), avec les expressions suivantes pour les coefficients Γ_i ,

$$\Gamma_0 = \pi \rho^3 \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r f(r) g_{\text{iso}}(r) r' f(r') g_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta dr dr' d\theta, \quad (\text{B.21})$$

$$\Gamma_1 = \frac{\pi \alpha \rho^3}{2k} \left(2 \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f(r) g'_{\text{iso}}(r) r' f(r') g_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta dr dr' d\theta \right. \\ \left. + \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r f(r) g_{\text{iso}}(r) r' f(r') g_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} \left((r^2 + r'^2) \cos \theta - 2rr' \right) dr dr' d\theta \right), \quad (\text{B.22})$$

$$\Gamma_2 = \frac{\pi \alpha^2 \rho^3}{2k^2} \left(\int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f(r) g'_{\text{iso}}(r) r'^2 f(r') g'_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta \cos 2\theta dr dr' d\theta \right. \\ \left. + 2 \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r f(r) g_{\text{iso}}(r) r'^2 f(r') g'_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} \left(r^2 \cos 2\theta + r'^2 - 2rr' \cos \theta \right) dr dr' d\theta \right), \quad (\text{B.23})$$

$$\Gamma_3 = \frac{\pi \alpha^3 \rho^3}{8k^3} \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f(r) g'_{\text{iso}}(r) r'^2 f(r') g'_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} (1 + 2 \cos 2\theta) \left((r^2 + r'^2) \cos \theta - 2rr' \right) dr dr' d\theta, \quad (\text{B.24})$$

avec $u = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}$

B.2 Calcul de Υ

Nous calculons dans cette partie le tenseur Υ défini en (1.40). En utilisant l'expression (A.1) de $(\nabla f)^T$ en coordonnées polaires, nous obtenons :

$$(\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r}')) \cdot (\nabla \mathbf{f}(\mathbf{r}))^T = r f(r') f'(r) \cos(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + f(r') f(r) \sin(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_\theta). \quad (\text{B.25})$$

Ici encore, les symétries de l'intégrande tensorielle simplifient le calcul de l'intégrale. Les termes hors diagonaux des tenseurs $\sin(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_\theta) g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ et $\cos(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ étant impairs sous la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (-\theta, -\theta')$, Υ est donc un tenseur diagonal. De plus, en utilisant la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (\frac{\pi}{2} - \theta, \frac{\pi}{2} - \theta')$, il est possible de montrer :

$$\iint \sin(\theta' - \theta) \cos \theta \sin \theta g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = 0 \quad (\text{B.26})$$

$$\iint \sin(\theta' - \theta) \cos \theta \sin \theta g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = 0. \quad (\text{B.27})$$

En utilisant en outre la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (\frac{\pi}{2} + \theta, \frac{\pi}{2} + \theta')$, nous montrons de la même façon que :

$$\iint \sin(\theta' - \theta) \cos \theta \sin \theta g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = 0 \quad (\text{B.28})$$

$$\iint \sin(\theta' - \theta) \cos \theta \sin \theta g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = 0, \quad (\text{B.29})$$

de sorte que le terme $\sin(\theta' - \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_\theta)$ ne contribue pas à Υ .

En utilisant la transformation $(\theta, \theta') \rightarrow (\frac{\pi}{2} - \theta, \frac{\pi}{2} - \theta')$ ainsi que les expressions des fonctions $g_3^{(i)}$, il est possible de montrer que :

$$\iint \cos^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = \iint \sin^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta', \quad (\text{B.30})$$

$$\iint \cos^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = - \iint \sin^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta', \quad (\text{B.31})$$

$$\iint \cos^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = \iint \sin^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta', \quad (\text{B.32})$$

$$\iint \cos^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta' = - \iint \sin^2 \theta \cos(\theta' - \theta) g_3^{(3)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\theta d\theta'. \quad (\text{B.33})$$

En effectuant le même raisonnement que pour Γ , nous obtenons les équations (2.34) et (2.35), avec les expressions suivantes pour les coefficients Υ_i :

$$\Upsilon_0 = \pi \rho^3 \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f(r) g_{\text{iso}}(r) r' f'(r') g_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta dr dr' d\theta, \quad (\text{B.34})$$

$$\begin{aligned} \Upsilon_1 = \frac{\pi \alpha \rho^3}{2k} & \left(\int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^3 f'(r) g'_{\text{iso}}(r) r' f(r') g_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta dr dr' d\theta \right. \\ & + \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f'(r) g_{\text{iso}}(r) r'^2 f(r') g'_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta \cos 2\theta dr dr' d\theta \\ & \left. + \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f'(r) g_{\text{iso}}(r) r' f(r') g_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} \cos \theta \left(r^2 + r'^2 \cos 2\theta - 2rr' \cos \theta \right) dr dr' d\theta \right), \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

$$\begin{aligned}
\Upsilon_2 = & \frac{\pi\alpha^2\rho^3}{2k^2} \left(\int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^3 f(r) g'_{\text{iso}}(r) r'^2 f'(r') g'_{\text{iso}}(r') g_{\text{iso}}(u) \cos \theta \cos 2\theta dr dr' d\theta \right. \\
& + \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^3 f(r) g'_{\text{iso}}(r) r' f'(r') g_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} \left(r^2 + r'^2 \cos 2\theta - 2rr' \cos \theta \right) dr dr' d\theta \\
& \left. + \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^2 f(r) g_{\text{iso}}(r) r'^2 f'(r') g'_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} \left(r^2 \cos 2\theta + r'^2 - 2rr' \cos \theta \right) dr dr' d\theta \right),
\end{aligned} \tag{B.36}$$

$$\begin{aligned}
\Upsilon_3 = & \frac{\pi\alpha^3\rho^3}{8k^3} \int_0^2 \int_0^2 \int_0^\pi r^3 f'(r) g'_{\text{iso}}(r) r'^2 f(r') g'_{\text{iso}}(r') \frac{g'_{\text{iso}}(u)}{u} \cos \theta \\
& \times \left(3r^2 \cos 2\theta + r'^2(2 + \cos 4\theta) - 2rr'(2 \cos \theta + \cos 3\theta) \right) dr dr' d\theta,
\end{aligned} \tag{B.37}$$

avec $u = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta}$.

Annexe C

Expression des coefficients en fonction de r^* et développement en p

C.1 Expression des coefficients en fonction de r^*

En utilisant la paramétrisation (2.44) de g_{iso} , il est possible d'évaluer tous les coefficients Γ_i et Υ_i définis dans les équations (2.32)–(2.35), ainsi que les coefficients $\kappa, \beta, \dots, \chi$ introduits dans les équations (2.38)–(2.43). Pour simplifier les calculs et rendre les expressions résultantes plus simples, nous utilisons par ailleurs une approximation supplémentaire. Il s'avère en effet que le triple produit des fonctions g_{iso} et g'_{iso} dans les intégrales définissant ces coefficients rend leur calcul exact assez compliqué. Pour simplifier le calcul, nous séparons la partie angulaire des intégrales triples de celles sur r et r' en faisant l'approximation $r = r' = r^*$ dans la partie angulaire des intégrales. En procédant ainsi, nous obtenons l'expression suivante pour k , le coefficient de proportionnalité reliant Σ' à Q :

$$k = \frac{r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A}{r^* (r^{*2} - 4A)} \quad (\text{C.1})$$

nous obtenons par exemple $u \approx \sqrt{2}r^* \sqrt{1 - \cos \theta}$. Les coefficients s'expriment alors de la sorte en fonction de r^* :

$$\kappa = -\frac{\pi\rho^2}{4} r^* (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A), \quad (\text{C.2})$$

$$\beta = -\frac{2(r^{*4} - 3r^{*3} + r^{*2}(2 - 4A) + 9Ar^* - 4A)}{r^* (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)} - \Gamma_1 - \Upsilon_1, \quad (\text{C.3})$$

$$\zeta = -\frac{r^{*3} - r^{*2} - 4Ar^* + 3A}{r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A}, \quad (\text{C.4})$$

$$\eta = -\frac{\pi\rho^2}{4} (r^* - 2) (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 4A) + \Gamma_0 + \Upsilon_0, \quad (\text{C.5})$$

$$\Gamma_0 = -\frac{\pi\rho^3}{18\sqrt{3}r^{*2}} (r^* - 2)^2 (3r^{*2} - 2A) (r^{*2} - r^* - 3A - 2)^2, \quad (\text{C.6})$$

$$\Upsilon_0 = -\frac{\pi\rho^3}{48\sqrt{3}r^{*2}} (r^* - 2) (3r^{*2} - 2A) (r^{*2} - 2A - 4) (3r^{*3} - 2r^{*2} - r^* (12A + 4) - 8), \quad (\text{C.7})$$

$$\Gamma_1 = \frac{2\rho (r^* - 2) (r^{*2} - r^* - 3A - 2)}{27\sqrt{3}r^{*3} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)} (21r^{*5} - 36r^{*4} - 73Ar^{*3} + (84A - 24)r^{*2} + 30A^2r^* - 24A^2 + 32A), \quad (\text{C.8})$$

$$\Upsilon_1 = \frac{\rho}{54\sqrt{3}r^{*3} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)} \left[75r^{*8} - 198r^{*7} - 484Ar^{*6} + r^{*5} (1110A + 24) + r^{*4} (879A^2 + 288) \right. \\ \left. + r^{*3} (-1788A^2 - 296A) + r^{*2} (-306A^3 - 672A + 192) + r^* (720A^3 + 672A^2) + 192A^2 + 512A \right], \quad (\text{C.9})$$

$$\Gamma_2 = -\frac{4(3r^{*2} + 2A)(r^* + 4)(r^{*2} + 2r^* - 3A - 8)(r^{*3} - 2r^{*2} - 3Ar^* + 4A)}{9\sqrt{3}\pi\rho r^{*4} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)^2}, \quad (\text{C.10})$$

$$\Upsilon_2 = -\frac{8(3r^{*2} + 2A)(r^{*5} + 12r^{*4} - (5A + 24)r^{*3} - (48A + 8)r^{*2} + A(6A + 72)r^* + 16A)}{9\sqrt{3}\pi\rho r^{*4} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)^2}, \quad (\text{C.11})$$

$$\Gamma_3 = -\frac{128A(r^{*3} - 2r^{*2} - 3Ar^* + 4A)^2}{\sqrt{3}\pi^2\rho^3 r^{*5} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)^3}, \quad (\text{C.12})$$

$$\Upsilon_3 = -\frac{32A(r^{*2} - 3A)(r^{*3} - 2r^{*2} - 3Ar^* + 4A)}{\sqrt{3}\pi^2\rho^3 r^{*4} (r^{*3} - 2r^{*2} - 4Ar^* + 6A)^3}. \quad (\text{C.13})$$

Les coefficients ξ et χ étant uniquement fonction de Γ_i et Υ_i (Cf. Eqs. (2.40) and (2.43)) nous ne les avons pas exprimés explicitement ici.

C.2 Développement en p

La pression étant une grandeur macroscopique, il peut être souhaitable de conserver la variable p dans notre description plutôt que r^* . Cependant, la relation $p(r^*)$ donnée dans l'équation (2.47) ne peut pas être facilement inversée analytiquement, ce qui impliquerait de recourir à des méthodes numériques. Elle peut toutefois être inversée de manière perturbative pour de petites valeurs p , correspondant à $r^* \lesssim 2$. En développant l'équation (2.47) au premier ordre en $\varepsilon = 2 - r^*$, nous obtenons ainsi :

$$p = \pi A \rho^2 \varepsilon + o(\varepsilon). \quad (\text{C.14})$$

En utilisant les résultats de la section C.1, nous pouvons développer au premier ordre en ε les expressions des coefficients $\kappa, \beta, \dots, \chi$, et utiliser la relation (C.14) pour obtenir le développement au premier ordre en p de ces coefficients. Nous obtenons alors les expressions suivantes :

$$\kappa = \pi A \rho^2 - \frac{5A - 4}{2A} p + o(p), \quad (\text{C.15})$$

$$\beta = \frac{\rho A (A + 6)}{4\sqrt{3}} - 1 + \left(\frac{47\sqrt{3}A}{72} - \frac{9\sqrt{3}}{4} + \frac{3\sqrt{3}}{A} + \frac{1}{A\rho} \right) \frac{p}{\pi\rho} + o(p), \quad (\text{C.16})$$

$$\xi = \frac{7A - 4}{8\sqrt{3}\pi^2 A \rho^3} + \frac{83A^2 - 84A + 32}{16\sqrt{3}\pi^3 A^3 \rho^5} p + o(p), \quad (\text{C.17})$$

$$\zeta = \frac{1}{2A} (4 - 5A) - \frac{3A^2 - 5A + 4}{\pi A^3 \rho^2} p + o(p), \quad (\text{C.18})$$

$$\eta = -\left(\frac{\rho A (A - 6)}{2\sqrt{3}} + 1 \right) p + o(p), \quad (\text{C.19})$$

$$\chi = -\frac{(A + 6)(12 - 5A)}{24\sqrt{3}\pi A \rho} - \frac{6A^3 + 16A^2 - 51A + 36}{6\sqrt{3}\pi^2 A^3 \rho^3} p + o(p). \quad (\text{C.20})$$

En utilisant le développement au premier ordre en p de ces coefficients, nous pouvons résoudre l'équation (2.52) et obtenir l'expression suivante pour la valeur stationnaire de p proche du jamming :

$$p = \frac{3\pi A^2(A+6)(12-5A)(7A-4)\rho^2(\sqrt{3}A^2\rho + 6\sqrt{3}A\rho - 12)}{2 \left[289\sqrt{3}A^6\rho - 5389\sqrt{3}A^5\rho - 3A^4(3002\sqrt{3}\rho + 882\sqrt{3} - 3345) + 18A^3(4048\sqrt{3}\rho + 168\sqrt{3} + 827) - 72A^2(1200\sqrt{3}\rho + 12\sqrt{3} + 1469) + 864A(36\sqrt{3}\rho + 113) - 31104 \right]} \quad (\text{C.21})$$

En remplaçant A par $3/\phi$ et ρ par ϕ/π , nous pouvons alors faire un développement au premier ordre en $\phi - \phi_J$ de cette expression :

$$p = \frac{315}{2\pi} \times \frac{21\sqrt{3} - 10\pi}{753\sqrt{3} - 290\pi} (\phi - \phi_J) + o(\phi - \phi_J). \quad (\text{C.22})$$

En remplaçant p dans le développement des coefficients κ , β et ξ , nous obtenons les expressions suivantes :

$$\bar{\kappa} = \frac{15}{4\pi} + \frac{27(130\pi - 241\sqrt{3})}{2\pi(753\sqrt{3} - 290\pi)} (\phi - \phi_J) + o(\phi - \phi_J) \quad (\text{C.23})$$

$$\bar{\beta} = \frac{21\sqrt{3}}{10\pi} - 1 + \frac{3(-28449 - 2560\sqrt{3}\pi + 3500\pi^2)}{25\pi(-753\sqrt{3} + 290\pi)} (\phi - \phi_J) + o(\phi - \phi_J) \quad (\text{C.24})$$

$$\bar{\xi} = \frac{128\sqrt{3}\pi}{1125} + \frac{16\pi(-97317 + 17870\sqrt{3}\pi)}{1875(-753\sqrt{3} + 290\pi)} (\phi - \phi_J) + o(\phi - \phi_J) \quad (\text{C.25})$$

Annexe D

Calcul du tenseur Ψ

Nous présentons dans cette annexe le calcul du tenseur Ψ apparaissant en Sec. 3.5 après l'ajout d'un faible bruit thermique à notre modèle. L'effet de la température de la température dans l'équation exacte sur le tenseur des contraintes apparaît ainsi sous la forme

$$\Psi = \frac{\rho^2 T}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \mathbf{f}(\mathbf{r})) \nabla^2 g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{D.1})$$

que nous cherchons dans un premier temps à exprimer comme une intégrale de g . En utilisant une première fois la formule de Green-Ostrogradski, nous obtenons

$$\Psi = -\frac{\rho^2 T}{2} \int \nabla g \otimes \mathbf{f} d\mathbf{r} - \frac{\rho^2 T}{2} \int (\mathbf{r} \otimes \nabla g) \cdot \nabla f^T d\mathbf{r} \quad (\text{D.2})$$

En appliquant de nouveau la même formule, nous montrons que

$$\int \nabla g \otimes \mathbf{f} d\mathbf{r} = - \int \nabla f g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (\text{D.3})$$

et

$$\int (\mathbf{r} \otimes \nabla g) \cdot \nabla f^T = \int (\mathbf{r} \otimes \nabla f) \cdot \nabla g d\mathbf{r} = \int_S g(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \otimes \nabla f \cdot d\mathbf{S}) - \int \nabla f g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int (\mathbf{r} \otimes \nabla^2 f) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (\text{D.4})$$

Nous avons donc

$$\Psi = \frac{\rho^2 T}{2} \left(- \int_S g(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \otimes \nabla f \cdot d\mathbf{S}) + 2 \int \nabla f g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int (\mathbf{r} \otimes \nabla^2 f) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) \quad (\text{D.5})$$

avec

$$\nabla f = \nabla f^T = f'(r)(\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) + \frac{f(r)}{r}(\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta), \quad (\text{D.6})$$

puisque f est radiale et

$$\nabla^2 f = \left(f''(r) + \frac{f'(r)}{r} - \frac{f(r)}{r^2} \right) \mathbf{e}_r \quad (\text{D.7})$$

Nous évaluons tout d'abord $\int_S g(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \otimes \nabla f \cdot d\mathbf{S})$. en utilisant l'expression (D.6) de ∇f :

$$\int_S g(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \otimes \nabla f \cdot d\mathbf{S}) = 4f'(2) \int_{-\pi}^{\pi} g(2, \theta) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) d\theta \quad (\text{D.8})$$

En remplaçant g par sa paramétrisation (2.9) et en utilisant les propriétés énoncées en Eqs. (2.11–2.15), nous obtenons alors

$$\int_S g(\mathbf{r}) (\mathbf{r} \otimes \nabla \mathbf{f} \cdot d\mathbf{S}) = 4\pi f'(2) g_{\text{iso}}(2) \mathbb{1} + \frac{4\alpha\pi f'(2) g'_{\text{iso}}(2)}{k} \Sigma' \quad (\text{D.9})$$

Nous évaluons maintenant $\int \nabla \mathbf{f} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ en remplaçant $\nabla \mathbf{f}$ par son expression (D.6) :

$$\int \nabla \mathbf{f} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int f'(r) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \int \frac{f(r)}{r} (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{D.10})$$

En utilisant de nouveau la paramétrisation (2.9) de g avec les Eqs. (2.11–2.15), nous obtenons

$$\int f'(r) (\mathbf{e}_r \otimes \mathbf{e}_r) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \pi \left(\int_0^2 r f'(r) g_{\text{iso}}(r) dr \right) \mathbb{1} + \frac{\pi\alpha}{2k} \left(\int_0^2 r^2 f'(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \Sigma' \quad (\text{D.11})$$

et

$$\int \frac{f(r)}{r} (\mathbf{e}_\theta \otimes \mathbf{e}_\theta) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \pi \left(\int_0^2 f(r) g_{\text{iso}}(r) dr \right) \mathbb{1} - \frac{\pi\alpha}{2k} \left(\int_0^2 r f(r) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \Sigma' \quad (\text{D.12})$$

Nous évaluons enfin l'intégrale $\int (\mathbf{r} \otimes \nabla^2 \mathbf{f}) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ en remplaçant $\nabla^2 \mathbf{f}$ par son expression (D.7), et g par sa paramétrisation (2.9). En utilisant une nouvelle fois les Eqs. (2.11–2.15), nous obtenons

$$\int (\mathbf{r} \otimes \nabla^2 \mathbf{f}) g(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \pi \left(\int_0^2 (r^2 f''(r) + r f'(r) - f(r)) g_{\text{iso}}(r) dr \right) \mathbb{1} \quad (\text{D.13})$$

$$+ \frac{\alpha\pi}{2k} \left(\int_0^2 r (r^2 f''(r) + r f'(r) - f(r)) g'_{\text{iso}}(r) dr \right) \Sigma' \quad (\text{D.14})$$

Ce qui nous permet finalement d'exprimer Ψ en fonction de Σ

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{\pi\rho^2 T}{2} \left(\int_0^2 (r^2 f''(r) + 3r f'(r) + f(r)) g_{\text{iso}}(r) dr - 4f'(2) g_{\text{iso}}(2) \right) \mathbb{1} \\ &+ \frac{\alpha\pi\rho^2 T}{4k} \left(\int_0^2 r (r^2 f''(r) + 3r f'(r) - 3f(r)) g'_{\text{iso}}(r) dr - 8f'(2) g'_{\text{iso}}(2) \right) \Sigma'. \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Annexe E

Dynamique des coefficients de Fourier

Cette annexe présente une approche différente de celle développée dans cette thèse. Elle consiste à résoudre l'équation (1.30) pour obtenir $g(r)$ et calculer ensuite Σ grâce à la relation du Viriel (1.15). S'étant avérée très complexe à développer à cause de certains problèmes numériques liés à la complexité des équations obtenues, nous avons préféré privilégier le développement analytique présenté dans cette thèse. Nous présentons toutefois le développement analytique de cette approche qui ne demeure pas sans intérêts puisqu'elle permettrait d'étudier la dynamique de la microstructure afin, par exemple, d'améliorer les approximations faites dans les chapitres 2 et 4.

E.1 Développement de Fourier angulaire

L'équation (1.30) est une équation portant sur l'ensemble de l'espace à deux dimensions. La géométrie naturelle pour le problème considéré est la géométrie polaire (r, θ) . Afin de simplifier la résolution de l'équation constitutive, nous séparons la variable d'espace de la variable angulaire en effectuant un développement de Fourier des fonctions g et g_3 :

$$g(r, \theta) = \sum_k \alpha_{2k}(r) e^{2ik\theta} \quad (\text{E.1})$$

$$g_3(r, \theta, r', \theta') = \sum_{k, k'} \beta_{k, k'}(r, r') e^{ik\theta} e^{ik'\theta'}, \quad (\text{E.2})$$

avec

$$\alpha_k(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(r, \theta) e^{-ik\theta} d\theta, \quad (\text{E.3})$$

$$\beta_{k, k'}(r, r') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g_3(r, \theta, r', \theta') e^{-ik\theta} e^{-ik'\theta'} d\theta d\theta'. \quad (\text{E.4})$$

La fonction g étant paire, seuls les coefficients de Fourier pairs de cette fonction sont non-nuls. La fonction étant réelle, ils vérifient par ailleurs $\alpha_{-k} = \alpha_k^*$. Les symétries de la fonction g_3 sont, quant à elles, plus complexes et ne donnent pas de relations simples autres que $\beta_{k, k'} = \beta_{k', k}$. Là aussi, g_3 est réelle et ses coefficients de Fourier vérifient donc $\beta_{-k, -k'} = \beta_{k', k}^*$.

En multipliant l'équation (1.30) par $\frac{1}{2\pi} e^{-ik\theta}$ et en l'intégrant sur θ on peut obtenir un système d'équations reliant les coefficients α_k aux coefficients $\beta_{k, k'}$. En agissant de la sorte l'équation devient en effet :

$$\partial_t \alpha_k + A - B - C = 0, \quad (\text{E.5})$$

avec

$$A = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ik\theta} \nabla \cdot (\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r} g) d\theta, \quad (\text{E.6})$$

$$B = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ik\theta} \nabla \cdot (\mathbf{f}(\mathbf{r})g) d\theta, \quad (\text{E.7})$$

$$C = \frac{\rho}{2\pi} \int \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ik\theta} \nabla \cdot (g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{f}(\mathbf{r}')) d\theta d\mathbf{r}'. \quad (\text{E.8})$$

Calcul de A

Il est toujours possible de se placer dans une base où la matrice $\nabla \mathbf{u}^\infty$ peut s'écrire sous la forme $\begin{pmatrix} 0 & b \\ c & 0 \end{pmatrix}$.

Nous avons alors :

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r} &= r \begin{pmatrix} b \sin \theta \\ c \cos \theta \end{pmatrix} = r(b+c) \cos \theta \sin \theta \mathbf{e}_r + r(c \cos^2 \theta - b \sin^2 \theta) \mathbf{e}_\theta \\ &= r e^\infty \sin 2\theta \mathbf{e}_r + r(e^\infty \cos 2\theta - \omega^\infty) \mathbf{e}_\theta, \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

où $e^\infty = \frac{b+c}{2}$ et $\omega^\infty = \frac{b-c}{2}$

La divergence en coordonnées polaires s'écrit

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r} \partial_r (r A_r) + \frac{1}{r} \partial_\theta (A_\theta), \quad (\text{E.10})$$

ce qui nous donne :

$$\nabla \cdot (\nabla \mathbf{u}^\infty \cdot \mathbf{r} g) = e^\infty \sin 2\theta \frac{\partial_r (r^2 g)}{r} + \partial_\theta ((e^\infty \cos 2\theta - \omega^\infty) g). \quad (\text{E.11})$$

Nous obtenons donc :

$$\begin{aligned} A &= \frac{e^\infty}{4\pi i r} \partial_r \left(r^2 \int_{-\pi}^{\pi} (e^{-i(k-2)\theta} - e^{-i(k+2)\theta}) g d\theta \right) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ik\theta} \partial_\theta ((e^\infty \cos 2\theta - \omega^\infty) g) d\theta \\ &= -\frac{i e^\infty}{2r} \partial_r (r^2 (\alpha_{k-2} - \alpha_{k+2})) + \frac{[e^{-ik\theta} (e^\infty \cos 2\theta - \omega^\infty) g]_{-\pi}^{\pi}}{2\pi} + \frac{ik}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ik\theta} (e^\infty \cos 2\theta - \omega^\infty) g d\theta \\ &= -\frac{i e^\infty}{2r} \partial_r (r^2 (\alpha_{k-2} - \alpha_{k+2})) + \frac{i k e^\infty}{2} (\alpha_{k-2} + \alpha_{k+2}) - i k \omega^\infty \alpha_k \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Calcul de B

Les interactions interparticulaires étant radiales et ne dépendant que de la distance, nous pouvons écrire :

$$\nabla \cdot (\mathbf{f}(\mathbf{r})g) = \frac{\partial_r (r f(r)g)}{r}, \quad (\text{E.13})$$

Ce qui conduit à

$$B = \frac{\partial_r (r f(r) \alpha_k)}{r}. \quad (\text{E.14})$$

Calcul de C

La divergence dans la définition de C peut s'écrire

$$\nabla \cdot (g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{f}(\mathbf{r}')) = \frac{f(r')}{r} \cos(\theta' - \theta) \partial_r (r g_3) + \frac{f(r')}{r} \partial_\theta (g_3 \sin(\theta' - \theta)) \quad (\text{E.15})$$

Nous avons donc :

$$C = \frac{\rho}{4\pi r} \int r' f(r') \partial_r \left(r \iint g_3 (e^{-i(k+1)\theta} e^{ik\theta'} + e^{-i(k-1)\theta} e^{-ik\theta'}) d\theta d\theta' \right) d\mathbf{r}'$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\rho}{2\pi} \int \frac{r' f(r')}{r} \left[e^{-ik\theta} \sin(\theta' - \theta) g_3 \right]_{-\pi}^{\pi} d\theta' dr' \\
& - \frac{\rho}{4i\pi r} \int r' f(r') \left(\iint \left[-ik e^{-i(k+1)\theta} e^{i\theta'} + ik e^{-i(k-1)\theta} e^{-i\theta'} \right] g_3 d\theta d\theta' \right) dr' \\
& = \frac{\pi\rho}{r} \int r' f(r') \partial_r \left(r(\beta_{k+1,-1} + \beta_{k-1,1}) \right) dr' + \frac{k\pi\rho}{r} \int r' f(r') \left(\beta_{k+1,-1} - \beta_{k-1,1} \right) dr' \quad (E.16)
\end{aligned}$$

Nous obtenons donc l'équation suivante :

$$\begin{aligned}
& \partial_t \alpha_k - \frac{ie^\infty}{2r} \partial_r \left(r^2 (\alpha_{k-2} - \alpha_{k+2}) \right) + \frac{ike^\infty}{2} (\alpha_{k-2} + \alpha_{k+2}) - ik\omega^\infty \alpha_k - \frac{\partial_r (r f(r) \alpha_k)}{r} \\
& - \frac{\pi\rho}{r} \int r' f(r') \partial_r \left(r(\beta_{k+1,-1} + \beta_{k-1,1}) \right) dr' - \frac{k\pi\rho}{r} \int r' f(r') \left(\beta_{k+1,-1} - \beta_{k-1,1} \right) dr' = 0 \quad (E.17)
\end{aligned}$$

Ce qui nous donne en particulier à l'ordre 0 :

$$\partial_t \alpha_0 - \frac{e^\infty}{r} \partial_r \left(r^2 \Im(\alpha_2) \right) - \frac{\partial_r (r f(r) \alpha_0)}{r} - \frac{2\pi\rho}{r} \int r' f(r') \partial_r \left(r \Re(\beta_{1,-1}) \right) dr' = 0 \quad (E.18)$$

avec \Re et \Im les fonctions parties réelles et imaginaires.

E.2 Fermeture des équations

Pour fermer nos équations et pouvoir les résoudre, il nous faut supposer une relation entre g_3 et g . Au vu des relations de fermeture généralement utilisée dans la littérature et dans le soucis de préserver une géométrie cylindrique permettant une formulation en développement de Fourier angulaire, la fermeture la plus générale que nous puissions écrire prend la forme :

$$g_3(r, \theta, r', \theta') = g(r, \theta) g(r', \theta') h(r, r', \theta' - \theta) \quad (E.19)$$

où h est une fonction à préciser ne dépendant que de r , r' et $\theta' - \theta$. Le développement de Fourier de cette fonction s'écrit donc : $h(r, r', \theta' - \theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} c_k(r, r') e^{ik(\theta' - \theta)}$, avec $c_k(r, r') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} h(r, r', \theta) e^{-ik\theta} d\theta$. En prenant une fonction $h(r, r', \theta)$ paire en θ , on a de plus $c_{-k} = c_k$ et les coefficients c_k sont réels. Si l'on considère les $N + 1$ premiers modes du développement de Fourier angulaire de la fonction de corrélation de paire, on a donc :

$$\begin{aligned}
\sum_{k_1, k_2 \in \mathbb{Z}} \beta_{k_1, k_2}(r, r') e^{ik_1\theta} e^{ik_2\theta'} &= \sum_{k=-N}^N \alpha_{2k}(r) e^{2ik\theta} \sum_{k'=-N}^N \alpha_{2k'}(r') e^{2ik'\theta'} \sum_{k'' \in \mathbb{Z}} c_{k''}(r, r') e^{ik''(\theta' - \theta)} \\
&= \sum_{\substack{k, k'=-N \\ k'' \in \mathbb{Z}}}^N \alpha_{2k}(r) \alpha_{2k'}(r') c_{k''}(r, r') e^{i(2k-k'')\theta} e^{i(2k'+k'')\theta'} \quad (E.20)
\end{aligned}$$

Par identification, on a donc :

$$\begin{aligned}
\beta_{2k+1,-1}(r, r') &= \sum_{k'=-N}^N \alpha_{2(k-k')}(r) \alpha_{2k'}(r') c_{-(1+2k')}(r, r') \\
\beta_{2k-1,1}(r, r') &= \sum_{k'=-N}^N \alpha_{2(k-k')}(r) \alpha_{2k'}(r') c_{1-2k'}(r, r') \quad (E.21)
\end{aligned}$$

Le système d'équation sur les modes pairs de la fonction de corrélation de paire devient donc :

$$\begin{aligned}
\partial_t \tilde{\alpha}_{2k} = & -ike^\infty (\tilde{\alpha}_{2(k-1)} + \tilde{\alpha}_{2(k+1)}) + 2ik\omega^\infty \tilde{\alpha}_{2k} + \partial_r \left(\frac{ire^\infty}{2} (\tilde{\alpha}_{2(k-1)} - \tilde{\alpha}_{2(k+1)}) + f(r) \tilde{\alpha}_{2k} \right) \\
& + \pi\rho \partial_r \left(\sum_{k'=-N}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')} (r) \int f(r') \tilde{\alpha}_{2k'}(r') [c_{2k'+1}(r, r') + c_{2k'-1}(r, r')] dr' \right) \\
& + \frac{2k\pi\rho}{r} \sum_{k'=-N}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')} (r) \int f(r') \tilde{\alpha}_{2k'}(r') (c_{2k'+1}(r, r') - c_{2k'-1}(r, r')) dr',
\end{aligned} \tag{E.22}$$

où $\tilde{\alpha}_{2k}(r) = r\alpha_{2k}(r)$.

On peut donc écrire l'équation sous la forme :

$$\partial_t \tilde{\alpha}_{2k}(r) = A_{2k}(r) + \partial_r J_{2k}(r), \tag{E.23}$$

avec :

$$A_{2k}(r) = 2ik\omega^\infty \tilde{\alpha}_{2k} - ik e^\infty (\tilde{\alpha}_{2(k-1)} + \tilde{\alpha}_{2(k+1)}) + \frac{2k\pi\rho}{r} \sum_{k'=-N}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')} (r) (m_{2k', 2k'+1}(r) - m_{2k', 2k'-1}(r)) \tag{E.24}$$

$$J_{2k}(r) = f(r) \tilde{\alpha}_{2k} + \frac{ire^\infty}{2} (\tilde{\alpha}_{2(k-1)} - \tilde{\alpha}_{2(k+1)}) + \pi\rho \sum_{k'=-N}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')} (r) (m_{2k', 2k'+1}(r) + m_{2k', 2k'-1}(r)), \tag{E.25}$$

avec $m_{i,j}(r) = \int f(r') \tilde{\alpha}_i(r') c_j(r, r') dr'$

Par la suite, nous désignons la partie réelle et imaginaire de chacune des grandeurs grâce aux exposants R et I . Nous obtenons ainsi pour chaque valeur de k une équation sur la partie réelle et une équation sur la partie imaginaire du coefficient $\tilde{\alpha}_{2k}$ (sauf pour $k = 0$, $\tilde{\alpha}_0$ étant réel). En notant N le nombre de modes considérés, nous obtenons alors un système de $2N - 1$ équations du type $\partial_t \alpha(r) = A(r) + \partial_r J(r)$ (pour $2N - 1$ inconnues), avec :

$$\left\{ \begin{array}{l}
A_0(r) = 0 \\
J_0(r) = f(r) \tilde{\alpha}_0(r) + re^\infty \tilde{\alpha}_2^I(r) + 2\pi\rho \left[\tilde{\alpha}_0(r) m_{0,1}(r) + \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) (m_{2k', 2k'+1}^A(r) + m_{2k', 2k'-1}^A(r)) \right] \\
A_{2k}^R(r) = -2k\omega^\infty \tilde{\alpha}_{2k}^I(r) + ke^\infty (\tilde{\alpha}_{2(k-1)}^I(r) + \tilde{\alpha}_{2(k+1)}^I(r)) + \frac{2k\pi\rho}{r} \sum_{\substack{k'=-N \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')}^A(r) (m_{-2k', 2k'+1}^A(r) - m_{-2k', 2k'-1}^A(r)) \\
J_{2k}^R(r) = f(r) \tilde{\alpha}_{2k}^R(r) - \frac{re^\infty}{2} (\tilde{\alpha}_{2(k-1)}^I(r) - \tilde{\alpha}_{2(k+1)}^I(r)) + \pi\rho \sum_{\substack{k'=-N \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')}^A(r) (m_{-2k', 2k'+1}^A(r) + m_{-2k', 2k'-1}^A(r)) \\
A_{2k}^I(r) = 2k\omega^\infty \tilde{\alpha}_{2k}^R(r) - ke^\infty (\tilde{\alpha}_{2(k-1)}^R(r) + \tilde{\alpha}_{2(k+1)}^R(r)) + \frac{2k\pi\rho}{r} \sum_{k'=-N}^N \Im \left(\tilde{\alpha}_{2(k-k')} (r) (m_{2k', 2k'+1}(r) - m_{2k', 2k'-1}(r)) \right) \\
J_{2k}^I(r) = f(r) \tilde{\alpha}_{2k}^I(r) + \frac{re^\infty}{2} (\tilde{\alpha}_{2(k-1)}^R(r) - \tilde{\alpha}_{2(k+1)}^R(r)) + \pi\rho \sum_{k'=-N}^N \Im \left(\tilde{\alpha}_{2(k-k')} (r) (m_{2k', 2k'+1}(r) + m_{2k', 2k'-1}(r)) \right)
\end{array} \right. \tag{E.26}$$

Les sommes présentes dans ces équations peuvent par ailleurs être décomposées de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
\pi \rho \sum_{\substack{k'=-N \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')}^A(r) \left(m_{-2k',2k'+1}^A(r) - m_{-2k',2k'-1}^A(r) \right) &= \tilde{\alpha}_0(r) \left(M_{+,2k}^R(r) - M_{-,2k}^R(r) \right) \\
&- \sum_{\substack{k'=k+1 \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k'-k)}^A(r) - M_{-,2(k'-k)}^A(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{k-1} (-1)^A \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k-k')}^A(r) - M_{-,2(k-k')}^A(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{N-k} \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k+k')}^A(r) - M_{-,2(k+k')}^A(r) \right)
\end{aligned} \tag{E.27}$$

$$\begin{aligned}
\pi \rho \sum_{\substack{k'=-N \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2(k-k')}^A(r) \left(m_{-2k',2k'+1}^A(r) + m_{-2k',2k'-1}^A(r) \right) &= \tilde{\alpha}_0(r) \left(M_{+,2k}^R(r) + M_{-,2k}^R(r) \right) + 2\tilde{\alpha}_{2k}^R M_0 \\
&+ \sum_{\substack{k'=k+1 \\ A=R,I}}^N \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k'-k)}^A(r) + M_{-,2(k'-k)}^A(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{k-1} (-1)^A \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k-k')}^A(r) + M_{-,2(k-k')}^A(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{N-k} \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k+k')}^A(r) + M_{-,2(k+k')}^A(r) \right)
\end{aligned} \tag{E.28}$$

$$\begin{aligned}
\pi \rho \sum_{k'=-N}^N \mathfrak{I} \left(\tilde{\alpha}_{2(k-k')}^A(r) \left(m_{2k',2k'+1}(r) - m_{2k',2k'-1}(r) \right) \right) &= \tilde{\alpha}_0(r) \left(M_{+,2k}^I(r) - M_{-,2k}^I(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=k+1 \\ A=R,I}}^N (-1)^A \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k'-k)}^{\bar{A}}(r) - M_{-,2(k'-k)}^{\bar{A}}(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{k-1} \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k-k')}^{\bar{A}}(r) - M_{-,2(k-k')}^{\bar{A}}(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{N-k} (-1)^A \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k+k')}^{\bar{A}}(r) - M_{-,2(k+k')}^{\bar{A}}(r) \right)
\end{aligned} \tag{E.29}$$

$$\begin{aligned}
\pi\rho \sum_{k'=-N}^N \mathfrak{J} \left(\tilde{\alpha}_{2(k-k')}(r) \left(m_{2k',2k'+1}(r) + m_{2k',2k'-1}(r) \right) \right) &= \tilde{\alpha}_0(r) \left(M_{+,2k}^I(r) + M_{-,2k}^I(r) \right) + 2\tilde{\alpha}_{2k}^I M_0 \\
&+ \sum_{\substack{k'=k+1 \\ A=R,I}}^N (-1)^{\bar{A}} \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k'-k)}^{\bar{A}}(r) + M_{-,2(k'-k)}^{\bar{A}}(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{k-1} \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k-k')}^{\bar{A}}(r) + M_{-,2(k-k')}^{\bar{A}}(r) \right) \\
&+ \sum_{\substack{k'=1 \\ A=R,I}}^{N-k} (-1)^A \tilde{\alpha}_{2k'}^A(r) \left(M_{+,2(k+k')}^{\bar{A}}(r) + M_{-,2(k+k')}^{\bar{A}}(r) \right),
\end{aligned} \tag{E.30}$$

où $(-1)^A = 1$ si $A = R$ et -1 si $A = I$ et $\bar{A} = I$ si $A = R$ et R si $A = I$. Nous avons par ailleurs introduit les moments $M_{+,2k}$ et $M_{-,2k}$ définis de la sorte :

$$M_{\pm,2k}(r) = \pi\rho m_{2k,2k\pm 1}(r) = \frac{\rho}{2} \iint f(r') \tilde{\alpha}_{2k}(r') h(r, r', \theta) e^{-(2k\pm 1)i\theta} dr' d\theta \tag{E.31}$$

À titre d'exemple, si l'on ne considère que les deux premiers modes de Fourier, notre système devient :

$$\begin{cases} \partial_t \tilde{\alpha}_0(r) = \partial_r \left(f(r) \tilde{\alpha}_0(r) + r e^\infty \tilde{\alpha}_2^I(r) \right. \\ \quad \left. + 2\pi\rho \left[\tilde{\alpha}_0(r) m_{0,1}(r) + \tilde{\alpha}_2^R(r) m_{2,1}^R(r) - \tilde{\alpha}_2^I(r) m_{2,1}^I(r) + \tilde{\alpha}_2^R(r) m_{2,3}^R(r) - \tilde{\alpha}_2^I(r) m_{2,3}^I(r) \right] \right) \\ \partial_t \tilde{\alpha}_2^R(r) = -2\omega^\infty \tilde{\alpha}_2^I(r) + \frac{2\pi\rho}{r} \tilde{\alpha}_0(r) \left(m_{2,3}^R(r) - m_{2,1}^R(r) \right) + \partial_r \left(f(r) \tilde{\alpha}_2^R(r) + \pi\rho \left[2\tilde{\alpha}_2^R m_{0,1} + \tilde{\alpha}_0 \left(m_{2,3}^R + m_{2,1}^R \right) \right] \right) \\ \partial_t \tilde{\alpha}_2^I(r) = 2\omega^\infty \tilde{\alpha}_2^R - e^\infty \tilde{\alpha}_0 + \frac{2\pi\rho}{r} \tilde{\alpha}_0 \left(m_{2,3}^I - m_{2,1}^I \right) + \partial_r \left(f(r) \tilde{\alpha}_2^I + \frac{r e^\infty}{2} \tilde{\alpha}_0 + \pi\rho \left[2\tilde{\alpha}_2^I m_{0,1} + \tilde{\alpha}_0 \left(m_{2,3}^I + m_{2,1}^I \right) \right] \right) \end{cases} \tag{E.32}$$

E.3 Résolution numérique

Pour résoudre le système précédent, nous le discrétisons en temps et en espace. Nous notons $\tilde{\alpha}^{i,n} = \tilde{\alpha}(r_i, t_n)$, avec $r_i = r_0 + idr$ et $t_n = ndt$ et discrétisons de la sorte les dérivées spatiales :

$$\partial_r \tilde{\alpha}^{i,n} = \frac{\tilde{\alpha}^{i+1,n} - \tilde{\alpha}^{i-1,n}}{2dr} \tag{E.33}$$

La discrétisation de la dérivée temporelle est moins évidente car elle soulève de nombreux problèmes d'instabilités numériques. Nous avons dans notre cas choisi un schéma de Lax-Friedrich modifié, introduisant un coefficient de diffusion D afin de stabiliser la solution (notamment dans le cas où cette dernière présente des pics très marqués). Ce coefficient doit être choisi le plus petit possible afin de perturber le moins possible la solution aux temps longs. En procédant de la sorte, l'opérateur ∂_t est remplacé par un opérateur $\partial_t - D\Delta_r$ et la discrétisation de la dérivée temporelle s'écrit :

$$\partial_t \tilde{\alpha}^{i,n} = \frac{\tilde{\alpha}^{i,n+1} - \tilde{\alpha}^{i,n}}{dt} - D \frac{\tilde{\alpha}^{i+1,n} + \tilde{\alpha}^{i-1,n} - 2\tilde{\alpha}^{i,n}}{(dr)^2} \tag{E.34}$$

Ce faisant, nous obtenons la relation de récurrence temporelle suivante permettant de résoudre numériquement une équation de type $\partial_t \tilde{\alpha} = A + \partial_r J$:

$$\tilde{\alpha}^{i,n+1} = \tilde{\alpha}^{i,n} + \frac{Ds}{dr} \left(\tilde{\alpha}^{i+1,n} + \tilde{\alpha}^{i-1,n} - 2\tilde{\alpha}^{i,n} \right) + dt \times A^{i,n} + \frac{s}{2} \left(J^{i+1,n} - J^{i-1,n} \right), \tag{E.35}$$

avec $s = dt/dr$

Nous fixons les conditions initiales en temps en choisissant la forme des $\tilde{\alpha}_{2k}(r)$ au temps $t = 0$ ($\tilde{\alpha}_{2k}(r) = 1, \forall r$ par exemple). Nous imposons par ailleurs $\tilde{\alpha}_{2k}^{0,n} = \tilde{\alpha}_{2k}^{N,n} = 0$ (où N est le nombre de bins de la discrétisation en espace) pour tout k non-nul. Pour $\tilde{\alpha}_0$, nous souhaitons que la grandeur $\int \tilde{\alpha}_0(r)dr$, qui représente le nombre de particules entre r_0 et r_N soit conservée, ce qui nous donne les relations suivantes :

$$\begin{cases} \tilde{\alpha}_0^{0,n+1} = \tilde{\alpha}_0^{0,n} + \frac{Ds}{dr} (\tilde{\alpha}_0^{1,n} - \tilde{\alpha}_0^{0,n}) + \frac{s}{2} (J_0^{0,n} + J_0^{1,n}) \\ \tilde{\alpha}_0^{N,n+1} = \tilde{\alpha}_0^{N,n} + \frac{Ds}{dr} (\tilde{\alpha}_0^{N-1,n} - \tilde{\alpha}_0^{N,n}) - \frac{s}{2} (J_0^{N-1,n} + J_0^{N,n}) \end{cases} \quad (\text{E.36})$$

Afin de simplifier des calculs déjà suffisamment coûteux, nous avons choisi une forme plus simple que la fermeture de Kirkwood utilisée en Chap. 2 en choisissant

$$h(r, r', \theta) = \alpha_0 \left(\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \theta} \right). \quad (\text{E.37})$$

La résolution de ce système, même pour un nombre réduit de mode, s'avère très coûteuse en temps de calcul (plusieurs jours avec un code de calcul parallélisé utilisant une trentaine de coeurs de calculs). Par ailleurs, nous avons rencontré de nombreuses difficultés liées à des instabilités numériques. L'effort de développement s'avérant très important par rapport au gain apporté par une telle approche, nous avons renoncé à pousser plus loin cette approche afin de nous concentrer sur l'approche plus analytique présentée dans le corps de ce manuscript.

Bibliographie

- [Abe, 1959] Abe, R. (1959). On the Kirkwood Superposition Approximation. *Progress of Theoretical Physics*, 21(3) :421–430.
- [Advani and Tucker, 1990] Advani, S. G. and Tucker, C. L. (1990). Closure approximations for three-dimensional structure tensors. *Journal of Rheology*, 34(3) :367–386. Publisher : The Society of Rheology.
- [Agoritsas et al., 2015] Agoritsas, E., Bertin, E., Martens, K., and Barrat, J.-L. (2015). On the relevance of disorder in athermal amorphous materials under shear. *The European Physical Journal E*, 38(7) :71.
- [Amann et al., 2013] Amann, C. P., Siebenbürger, M., Krüger, M., Weysser, F., Ballauff, M., and Fuchs, M. (2013). Overshoots in stress-strain curves : Colloid experiments and schematic mode coupling theory. *Journal of Rheology*, 57(1) :149–175. Publisher : The Society of Rheology.
- [Anklam et al., 1994] Anklam, M. R., Warr, G. G., and Prud'homme, R. K. (1994). The use of opposed nozzles configuration in the measurements of the extensional rheological properties of emulsions. *Journal of Rheology*, 38(4) :797–810.
- [Argon, 1979] Argon, A. S. (1979). Plastic deformation in metallic glasses. *Acta Metallurgica*, 27(1) :47–58.
- [Argon and Kuo, 1979] Argon, A. S. and Kuo, H. Y. (1979). Plastic flow in a disordered bubble raft (an analog of a metallic glass). *Materials Science and Engineering*, 39(1) :101–109.
- [Banetta and Zaccone, 2019] Banetta, L. and Zaccone, A. (2019). Radial distribution function of Lennard-Jones fluids in shear flows from intermediate asymptotics. *Physical Review E*, 99(5) :052606. Publisher : American Physical Society.
- [Banetta and Zaccone, 2020] Banetta, L. and Zaccone, A. (2020). Pair correlation function of charge-stabilized colloidal systems under sheared conditions. *Colloid and Polymer Science*, 298(7) :761–771.
- [Banfill, 2003] Banfill, P. F. G. (2003). The rheology of fresh cement and concrete - a review, in. In *Owens (Eds.), Proceedings of the 11th International Congress on the Chemistry of Cement, Durban, South Africa*, pages 50–62.
- [Baret et al., 2002] Baret, J.-C., Vandembroucq, D., and Roux, S. (2002). Extremal Model for Amorphous Media Plasticity. *Physical Review Letters*, 89(19) :195506. Publisher : American Physical Society.
- [Batchelor, 1970] Batchelor, G. K. (1970). The stress system in a suspension of force-free particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 41(3) :545–570. Publisher : Cambridge University Press.
- [Batchelor, 1977] Batchelor, G. K. (1977). The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 83(1) :97–117. Publisher : Cambridge University Press.
- [Bengtzelius et al., 1984] Bengtzelius, U., Gotze, W., and Sjolander, A. (1984). Dynamics of supercooled liquids and the glass transition. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 17(33) :5915–5934. Publisher : IOP Publishing.
- [Benmouffok-Benbelkacem et al., 2010] Benmouffok-Benbelkacem, G., Caton, F., Baravian, C., and Skali-Lami, S. (2010). Non-linear viscoelasticity and temporal behavior of typical yield stress fluids : Carbopol, Xanthan and Ketchup. *Rheologica Acta*, 49(3) :305–314.
- [Benzi et al., 2021a] Benzi, R., Divoux, T., Barentin, C., Manneville, S., Sbragaglia, M., and Toschi, F. (2021a). Continuum modelling of shear start-up in soft glassy materials. *arXiv :2103.17071 [cond-mat, physics :physics]*. arXiv : 2103.17071.

- [Benzi et al., 2021b] Benzi, R., Divoux, T., Barentin, C., Manneville, S., Sbragaglia, M., and Toschi, F. (2021b). Stress Overshoots in Soft Glassy Materials. *arXiv :2103.17051 [cond-mat, physics :physics]*. arXiv : 2103.17051 version : 2.
- [Bingham, 1922] Bingham, E. (1922). Fluidity and Plasticity, McGraw-Hill.
- [Bocquet et al., 2009] Bocquet, L., Colin, A., and Ajdari, A. (2009). Kinetic Theory of Plastic Flow in Soft Glassy Materials. *Physical Review Letters*, 103(3) :036001. Publisher : American Physical Society.
- [Bonn et al., 2017] Bonn, D., Denn, M. M., Berthier, L., Divoux, T., and Manneville, S. (2017). Yield stress materials in soft condensed matter. *Reviews of Modern Physics*, 89(3) :035005.
- [Booij, 1966a] Booij, H. C. (1966a). Influence of superimposed steady shear flow on the dynamic properties of non-Newtonian fluids. *Rheologica Acta*, 5(3) :215–221.
- [Booij, 1966b] Booij, H. C. (1966b). Influence of superimposed steady shear flow on the dynamic properties of non-Newtonian fluids. *Rheologica Acta*, 5(3) :222–227.
- [Bouchaud, 1992] Bouchaud, J. P. (1992). Weak ergodicity breaking and aging in disordered systems. *Journal de Physique I*, 2(9) :1705–1713. Publisher : EDP Sciences.
- [Boyer et al., 2011] Boyer, F., Guazzelli, E., and Pouliquen, O. (2011). Unifying Suspension and Granular Rheology. *Physical Review Letters*, 107(18) :188301. Publisher : American Physical Society.
- [Brader et al., 2008] Brader, J. M., Cates, M. E., and Fuchs, M. (2008). First-Principles Constitutive Equation for Suspension Rheology. *Physical Review Letters*, 101(13) :138301.
- [Brader et al., 2012] Brader, J. M., Cates, M. E., and Fuchs, M. (2012). First-principles constitutive equation for suspension rheology. *Physical Review E*, 86(2) :021403. Publisher : American Physical Society.
- [Brader et al., 2009] Brader, J. M., Voigtmann, T., Fuchs, M., Larson, R. G., and Cates, M. E. (2009). Glass rheology : From mode-coupling theory to a dynamical yield criterion. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(36) :15186–15191. Publisher : National Academy of Sciences Section : Research Articles.
- [Budrikis et al., 2017] Budrikis, Z., Castellanos, D. F., Sandfeld, S., Zaiser, M., and Zapperi, S. (2017). Universal features of amorphous plasticity. *Nature Communications*, 8(1) :15928.
- [Carreau, 1972] Carreau, P. J. (1972). Rheological Equations from Molecular Network Theories. *Transactions of the Society of Rheology*, 16(1) :99–127. Publisher : The Society of Rheology.
- [Casanova and Santos, 2016] Casanova, F. and Santos, L. (2016). Encapsulation of cosmetic active ingredients for topical application – a review. *Journal of Microencapsulation*, 33(1) :1–17. Publisher : Taylor & Francis _eprint : <https://doi.org/10.3109/02652048.2015.1115900>.
- [Castro et al., 2010] Castro, M., Giles, D. W., Macosko, C. W., and Moaddel, T. (2010). Comparison of methods to measure yield stress of soft solids. *Journal of Rheology*, 54(1) :81–94.
- [Cates et al., 2003] Cates, M. E., Holmes, C. B., Fuchs, M., and Henrich, O. (2003). Schematic mode coupling theories for shear thinning, shear thickening, and jamming. *arXiv :cond-mat/0310579*. arXiv : cond-mat/0310579.
- [Cates and Sollich, 2003] Cates, M. E. and Sollich, P. (2003). Tensorial constitutive models for disordered foams, dense emulsions, and other soft nonergodic materials. *Journal of Rheology*, 48(1) :193–207.
- [Chacko et al., 2018] Chacko, R. N., Mari, R., Fielding, S. M., and Cates, M. E. (2018). Shear reversal in dense suspensions : the challenge to fabric evolution models from simulation data. *Journal of Fluid Mechanics*, 847 :700–734. Publisher : Cambridge University Press.
- [Chaudhuri et al., 2012] Chaudhuri, P., Berthier, L., and Bocquet, L. (2012). Inhomogeneous shear flows in soft jammed materials with tunable attractive forces. *Physical Review E*, 85(2) :021503. Publisher : American Physical Society.
- [Cheal and Ness, 2018] Cheal, O. and Ness, C. (2018). Rheology of dense granular suspensions under extensional flow. *Journal of Rheology*, 62(2) :501–512. Publisher : The Society of Rheology.
- [Cintra and Tucker, 1995] Cintra, J. S. and Tucker, C. L. (1995). Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. *Journal of Rheology*, 39(6) :1095–1122. Publisher : The Society of Rheology.

- [Coussot, 2005] Coussot, P. (2005). *Rheometry of Pastes, Suspensions, and Granular Materials : Applications in Industry and Environment*. John Wiley & Sons.
- [Coussot and Gaulard, 2005] Coussot, P. and Gaulard, F. (2005). Gravity flow instability of viscoplastic materials : The ketchup drip. *Physical Review E*, 72(3) :031409.
- [Cross, 1965] Cross, M. M. (1965). Rheology of non-Newtonian fluids : A new flow equation for pseudoplastic systems. *Journal of Colloid Science*, 20(5) :417–437.
- [de Cagny et al., 2019] de Cagny, H., Fazilati, M., Habibi, M., Denn, M. M., and Bonn, D. (2019). The yield normal stress. *Journal of Rheology*, 63(2) :285–290.
- [Denn and Morris, 2014] Denn, M. M. and Morris, J. F. (2014). Rheology of Non-Brownian Suspensions. *Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering*, 5(1) :203–228.
- [Dinkgreve et al., 2015] Dinkgreve, M., Paredes, J., Michels, M. A. J., and Bonn, D. (2015). Universal rescaling of flow curves for yield-stress fluids close to jamming. *Physical Review E*, 92(1) :012305. Publisher : American Physical Society.
- [Divoux et al., 2011a] Divoux, T., Barentin, C., and Manneville, S. (2011a). From stress-induced fluidization processes to Herschel-Bulkley behaviour in simple yield stress fluids. *Soft Matter*, 7(18) :8409–8418.
- [Divoux et al., 2011b] Divoux, T., Barentin, C., and Manneville, S. (2011b). Stress overshoot in a simple yield stress fluid : An extensive study combining rheology and velocimetry. *Soft Matter*, 7(19) :9335–9349. Publisher : The Royal Society of Chemistry.
- [Durian, 1995] Durian, D. J. (1995). Foam Mechanics at the Bubble Scale. *Physical Review Letters*, 75(26) :4780–4783.
- [Einstein, 1906] Einstein, A. (1906). Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, 324(2) :289–306.
- [Eshelby and Peierls, 1957] Eshelby, J. D. and Peierls, R. E. (1957). The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 241(1226) :376–396. Publisher : Royal Society.
- [Ferrás et al., 2019] Ferrás, L. L., Morgado, M. L., Rebelo, M., McKinley, G. H., and Afonso, A. M. (2019). A generalised Phan-Thien-Tanner model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 269 :88–99.
- [Fischer and Windhab, 2011] Fischer, P. and Windhab, E. J. (2011). Rheology of food materials. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 16(1) :36–40.
- [Fuchs and Cates, 2002] Fuchs, M. and Cates, M. E. (2002). Theory of Nonlinear Rheology and Yielding of Dense Colloidal Suspensions. *Physical Review Letters*, 89(24) :248304. Publisher : American Physical Society.
- [Fuchs and Cates, 2009] Fuchs, M. and Cates, M. E. (2009). A mode coupling theory for Brownian particles in homogeneous steady shear flow. *Journal of Rheology*, 53(4) :957–1000. Publisher : The Society of Rheology.
- [García-Colín et al., 2008] García-Colín, L. S., Velasco, R. M., and Uribe, F. J. (2008). Beyond the Navier-Stokes equations : Burnett hydrodynamics. *Physics Reports*, 465(4) :149–189.
- [Gillissen and Wilson, 2018] Gillissen, J. J. J. and Wilson, H. J. (2018). Modeling sphere suspension microstructure and stress. *Physical Review E*, 98(3) :033119. Publisher : American Physical Society.
- [Goddard, 2006] Goddard, J. D. (2006). A dissipative anisotropic fluid model for non-colloidal particle dispersions. *Journal of Fluid Mechanics*, 568 :1–17. Publisher : Cambridge University Press.
- [Gordon and Schowalter, 1972] Gordon, R. J. and Schowalter, W. R. (1972). Anisotropic Fluid Theory : A Different Approach to the Dumbbell Theory of Dilute Polymer Solutions. *Transactions of the Society of Rheology*, 16(1) :79–97. Publisher : The Society of Rheology.
- [Grillet et al., 2002] Grillet, A. M., Bogaerds, A. C. B., Peters, G. W. M., Baaijens, F. P. T., and Bulters, M. (2002). Numerical analysis of flow mark surface defects in injection molding flow. *Journal of Rheology*, 46(3) :651–669. Publisher : The Society of Rheology.

- [Guazzelli and Pouliquen, 2018] Guazzelli, E. and Pouliquen, O. (2018). Rheology of dense granular suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 852. Publisher : Cambridge University Press.
- [Hand, 1962] Hand, G. L. (1962). A theory of anisotropic fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 13(1) :33–46. Publisher : Cambridge University Press.
- [Hansen and McDonald, 2013] Hansen, J.-P. and McDonald, I. R. (2013). *Theory of Simple Liquids*. Academic Press, Oxford, fourth edition.
- [Haynes, 1961] Haynes, R. H. (1961). The Rheology of Blood. *Transactions of the Society of Rheology*, 5(1) :85–101. Publisher : The Society of Rheology.
- [Hébraud and Lequeux, 1998] Hébraud, P. and Lequeux, F. (1998). Mode-Coupling Theory for the Pasty Rheology of Soft Glassy Materials. *Physical Review Letters*, 81(14) :2934–2937.
- [Herschel and Bulkley, 1926] Herschel, W. H. and Bulkley, R. (1926). Konsistenzmessungen von Gummi-Benzollösungen. *Kolloid-Zeitschrift*, 39(4) :291–300.
- [Hester and Squire, 1997] Hester, R. D. and Squire, D. R. (1997). Rheology of waterborne coatings. *Journal of Coatings Technology*, 69(864) :109–114.
- [Hinch and Leal, 1976] Hinch, E. J. and Leal, L. G. (1976). Constitutive equations in suspension mechanics. Part 2. Approximate forms for a suspension of rigid particles affected by Brownian rotations. *Journal of Fluid Mechanics*, 76(1) :187–208. Publisher : Cambridge University Press.
- [Hohenemser and Prager, 1932] Hohenemser, K. and Prager, W. (1932). Über die Ansätze der Mechanik isotroper Kontinua. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 12(4) :216–226. _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/zamm.19320120403>.
- [Ichimaru, 1970] Ichimaru, S. (1970). Dielectric Response Function of Electron Liquids. *Physical Review A*, 2(2) :494–497.
- [Ikeda et al., 2013] Ikeda, A., Berthier, L., and Sollich, P. (2013). Disentangling glass and jamming physics in the rheology of soft materials. *Soft Matter*, 9(32) :7669–7683. Publisher : The Royal Society of Chemistry.
- [Isayev and Fan, 1990] Isayev, A. I. and Fan, X. (1990). Viscoelastic plastic constitutive equation for flow of particle filled polymers. *Journal of Rheology*, 34(1) :35–54. Publisher : The Society of Rheology.
- [Jackson and Feenberg, 1962] Jackson, H. W. and Feenberg, E. (1962). Energy Spectrum of Elementary Excitations in Helium II. *Reviews of Modern Physics*, 34(4) :686–693.
- [Jagla, 2007] Jagla, E. A. (2007). Strain localization driven by structural relaxation in sheared amorphous solids. *Physical Review E*, 76(4) :046119. Publisher : American Physical Society.
- [Jouanna and Brocas, 2001] Jouanna, P. and Brocas, S. (2001). Approche statistique du tenseur des contraintes par le viriel généralisé. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series IIB - Mechanics*, 329(11) :775–782.
- [Kamani et al., 2021] Kamani, K., Donley, G. J., and Rogers, S. A. (2021). Unification of the Rheological Physics of Yield Stress Fluids. *Physical Review Letters*, 126(21) :218002. Publisher : American Physical Society.
- [Karmakar et al., 2010] Karmakar, S., Lemaître, A., Lerner, E., and Procaccia, I. (2010). Predicting Plastic Flow Events in Athermal Shear-Strained Amorphous Solids. *Physical Review Letters*, 104(21) :215502. Publisher : American Physical Society.
- [Kataoka and Ueda, 1969] Kataoka, T. and Ueda, S. (1969). Influence of superimposed steady shear flow on the dynamic properties of polyethylene melts. *Journal of Polymer Science Part A-2 : Polymer Physics*, 7(3) :475–481.
- [Keentok, 1982] Keentok, M. (1982). The measurement of the yield stress of liquids. *Rheologica Acta*, 21(3) :325–332.
- [Ken-Ichi, 1984] Ken-Ichi, K. (1984). Distribution of directional data and fabric tensors. *International Journal of Engineering Science*, 22(2) :149–164.

- [Khabaz et al., 2021] Khabaz, F., Di Dio, B. F., Cloitre, M., and Bonnecaze, R. T. (2021). Transient dynamics of soft particle glasses in startup shear flow. Part I : Microstructure and time scales. *Journal of Rheology*, 65(2) :241–255. Publisher : The Society of Rheology.
- [Kirkwood, 1935] Kirkwood, J. G. (1935). Statistical Mechanics of Fluid Mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 3(5) :300–313.
- [Koumakis et al., 2012] Koumakis, N., Laurati, M., Egelhaaf, S. U., Brady, J. F., and Petekidis, G. (2012). Yielding of Hard-Sphere Glasses during Start-Up Shear. *Physical Review Letters*, 108(9) :098303. Publisher : American Physical Society.
- [Krieger and Dougherty, 1959] Krieger, I. M. and Dougherty, T. J. (1959). A Mechanism for Non-Newtonian Flow in Suspensions of Rigid Spheres. *Transactions of the Society of Rheology*, 3(1) :137–152. Publisher : The Society of Rheology.
- [Larson, 1984] Larson, R. G. (1984). A Constitutive Equation for Polymer Melts Based on Partially Extending Strand Convection. *Journal of Rheology*, 28(5) :545–571. Publisher : The Society of Rheology.
- [Larson, 1999] Larson, R. G. (1999). *The Structure and Rheology of Complex Fluids*. Oxford University Press, New-York.
- [Lauridsen et al., 2002] Lauridsen, J., Twardos, M., and Dennin, M. (2002). Shear-Induced Stress Relaxation in a Two-Dimensional Wet Foam. *Physical Review Letters*, 89(9) :098303. Publisher : American Physical Society.
- [Le Goff, 2021] Le Goff, M. (2021). *Flow and dynamics of driven and active amorphous materials : a multi-scale modeling approach*. Thèse, Université Grenoble Alpes.
- [Lidon et al., 2017] Lidon, P., Villa, L., and Manneville, S. (2017). Power-law creep and residual stresses in a carbopol gel. *Rheologica Acta*, 56(3) :307–323.
- [Lin and Wyart, 2016] Lin, J. and Wyart, M. (2016). Mean-Field Description of Plastic Flow in Amorphous Solids. *Physical Review X*, 6(1) :011005. Publisher : American Physical Society.
- [Liu and Nagel, 1998] Liu, A. J. and Nagel, S. R. (1998). Jamming is not just cool any more. *Nature*, 396(6706) :21–22. Number : 6706 Publisher : Nature Publishing Group.
- [Liu et al., 2011] Liu, A. J., Nagel, S. R., van Saarloos, W., and Wyart, M. (2011). The jamming scenario - an introduction and outlook. *arXiv :1006.2365 [cond-mat]*. arXiv : 1006.2365.
- [Liu et al., 2016] Liu, C., Ferrero, E. E., Puosi, F., Barrat, J.-L., and Martens, K. (2016). Driving Rate Dependence of Avalanche Statistics and Shapes at the Yielding Transition. *Physical Review Letters*, 116(6) :065501. Publisher : American Physical Society.
- [Macdonald, 1973] Macdonald, I. F. (1973). Parallel Superposition of Simple Shearing and Small Amplitude Oscillatory Motions. *Transactions of the Society of Rheology*, 17(3) :537–555.
- [Marrucci, 1972] Marrucci, G. (1972). The Free Energy Constitutive Equation for Polymer Solutions from the Dumbbell Model. *Transactions of the Society of Rheology*, 16(2) :321–330. Publisher : The Society of Rheology.
- [Martens et al., 2012] Martens, K., Bocquet, L., and Barrat, J.-L. (2012). Spontaneous formation of permanent shear bands in a mesoscopic model of flowing disordered matter. *Soft Matter*, 8(15) :4197–4205. Publisher : The Royal Society of Chemistry.
- [Maxwell, 1867] Maxwell, J. C. (1867). IV. On the dynamical theory of gases. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 157 :49–88. Publisher : Royal Society.
- [Meeron, 1957] Meeron, E. (1957). Series Expansion of Distribution Functions in Multicomponent Fluid Systems. *The Journal of Chemical Physics*, 27(6) :1238–1246.
- [Miyazaki et al., 2004] Miyazaki, K., Bagchi, B., and Yethiraj, A. (2004). Self-consistent mode-coupling theory for the viscosity of rodlike polyelectrolyte solutions. *The Journal of Chemical Physics*, 121(16) :8120–8127. Publisher : American Institute of Physics.

- [Mohan et al., 2013a] Mohan, L., Bonnecaze, R. T., and Cloitre, M. (2013a). Microscopic Origin of Internal Stresses in Jammed Soft Particle Suspensions. *Physical Review Letters*, 111(26) :268301. Publisher : American Physical Society.
- [Mohan et al., 2014] Mohan, L., Cloitre, M., and Bonnecaze, R. T. (2014). Build-up and two-step relaxation of internal stress in jammed suspensions. *Journal of Rheology*, 59(1) :63–84.
- [Mohan et al., 2013b] Mohan, L., Pellet, C., Cloitre, M., and Bonnecaze, R. (2013b). Local mobility and microstructure in periodically sheared soft particle glasses and their connection to macroscopic rheology. *Journal of Rheology*, 57(3) :1023–1046. Publisher : The Society of Rheology.
- [Mohraz and Solomon, 2005] Mohraz, A. and Solomon, M. J. (2005). Orientation and rupture of fractal colloidal gels during start-up of steady shear flow. *Journal of Rheology*, 49(3) :657–681. Publisher : The Society of Rheology.
- [Nazockdast and Morris, 2012a] Nazockdast, E. and Morris, J. F. (2012a). Effect of repulsive interactions on structure and rheology of sheared colloidal dispersions. *Soft Matter*, 8(15) :4223–4234.
- [Nazockdast and Morris, 2012b] Nazockdast, E. and Morris, J. F. (2012b). Microstructural theory and the rheology of concentrated colloidal suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 713 :420–452.
- [Nazockdast and Morris, 2013] Nazockdast, E. and Morris, J. F. (2013). Pair-particle dynamics and microstructure in sheared colloidal suspensions : Simulation and Smoluchowski theory. *Physics of Fluids*, 25(7) :070601.
- [N’Gouamba et al., 2019] N’Gouamba, E., Goyon, J., and Coussot, P. (2019). Elastoplastic behavior of yield stress fluids. *Physical Review Fluids*, 4(12) :123301.
- [Nicolas, 2014] Nicolas, A. (2014). *The Flow of Amorphous Solids : Elastoplastic Models and Mode-Coupling Approach*. Thèse, Université de Grenoble.
- [Nicolas et al., 2018] Nicolas, A., Ferrero, E. E., Martens, K., and Barrat, J.-L. (2018). Deformation and flow of amorphous solids : Insights from elastoplastic models. *Reviews of Modern Physics*, 90(4) :045006.
- [Nicolas et al., 2014] Nicolas, A., Martens, K., and Barrat, J.-L. (2014). Rheology of athermal amorphous solids : Revisiting simplified scenarios and the concept of mechanical noise temperature. *EPL (Europhysics Letters)*, 107(4) :44003.
- [Nicolas et al., 2015] Nicolas, A., Puosi, F., Mizuno, H., and Barrat, J.-L. (2015). Elastic consequences of a single plastic event : Towards a realistic account of structural disorder and shear wave propagation in models of flowing amorphous solids. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 78 :333–351.
- [Nicot et al., 2013] Nicot, F., Hadda, N., Guessasma, M., Fortin, J., and Millet, O. (2013). On the definition of the stress tensor in granular media. *International Journal of Solids and Structures*, 50(14) :2508–2517.
- [Oldroyd, 1947] Oldroyd, J. G. (1947). A rational formulation of the equations of plastic flow for a Bingham solid. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 43(1) :100–105.
- [Oldroyd and Wilson, 1950] Oldroyd, J. G. and Wilson, A. H. (1950). On the formulation of rheological equations of state. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 200(1063) :523–541. Publisher : Royal Society.
- [O’Neil and Rostoker, 1965] O’Neil, T. and Rostoker, N. (1965). Triplet Correlation for a Plasma. *The Physics of Fluids*, 8(6) :1109–1114.
- [Ovarlez et al., 2010] Ovarlez, G., Barral, Q., and Coussot, P. (2010). Three-dimensional jamming and flows of soft glassy materials. *Nature Materials*, 9(2) :115–119.
- [Ozenda et al., 2018] Ozenda, O., Saramito, P., and Chambon, G. (2018). A new rate-independent tensorial model for suspensions of noncolloidal rigid particles in Newtonian fluids. *Journal of Rheology*, 62(4) :889–903. Publisher : The Society of Rheology.
- [Ozenda et al., 2020] Ozenda, O., Saramito, P., and Chambon, G. (2020). Tensorial rheological model for concentrated non-colloidal suspensions : normal stress differences. *Journal of Fluid Mechanics*, 898. Publisher : Cambridge University Press.

- [Paredes et al., 2013] Paredes, J., Michels, M. A. J., and Bonn, D. (2013). Rheology across the Zero-Temperature Jamming Transition. *Physical Review Letters*, 111(1) :015701. Publisher : American Physical Society.
- [Peshkov et al., 2014] Peshkov, A., Bertin, E., Ginelli, F., and Chaté, H. (2014). Boltzmann-ginzburg-landau approach for continuous descriptions of generic viscek-like models. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, 223 :1315.
- [Petekidis et al., 2002] Petekidis, G., Moussaïd, A., and Pusey, P. N. (2002). Rearrangements in hard-sphere glasses under oscillatory shear strain. *Physical Review E*, 66(5) :051402. Publisher : American Physical Society.
- [Phan-Thien, 1978] Phan-Thien, N. (1978). A Nonlinear Network Viscoelastic Model. *Journal of Rheology*, 22(3) :259–283. Publisher : The Society of Rheology.
- [Phan-Thien, 1995] Phan-Thien, N. (1995). Constitutive equation for concentrated suspensions in Newtonian liquids. *Journal of Rheology*, 39(4) :679–695. Publisher : The Society of Rheology.
- [Phan-Thien et al., 1999] Phan-Thien, N., Fan, X.-J., and Khoo, B. C. (1999). A new constitutive model for monodispersed suspensions of spheres at high concentrations. *Rheologica Acta*, 38(4) :297–304.
- [Picard et al., 2004] Picard, G., Ajdari, A., Lequeux, F., and Bocquet, L. (2004). Elastic consequences of a single plastic event : A step towards the microscopic modeling of the flow of yield stress fluids. *The European Physical Journal E*, 15(4) :371–381.
- [Plimpton, 1995] Plimpton, S. (1995). Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1) :1–19.
- [Pottier, 2007] Pottier, N. (2007). *Physique statistique hors d'équilibre - Processus irréversibles linéaires*. EDP Sciences.
- [Prager, 1957] Prager, S. (1957). Stress-Strain Relations in a Suspension of Dumbbells. *Transactions of the Society of Rheology*, 1(1) :53–62. Publisher : The Society of Rheology.
- [Puosi et al., 2014] Puosi, F., Rottler, J., and Barrat, J.-L. (2014). Time-dependent elastic response to a local shear transformation in amorphous solids. *Physical Review E*, 89(4) :042302. Publisher : American Physical Society.
- [Puzrin and Houlsby, 2001] Puzrin, A. and Houlsby, G. (2001). A thermomechanical framework for rate-independent dissipative materials with internal functions. *Int. J. Plast.*, 17 (8) :1147–1165.
- [Rice and Lekner, 1965] Rice, S. A. and Lekner, J. (1965). On the Equation of State of the Rigid-Sphere Fluid. *The Journal of Chemical Physics*, 42(10) :3559–3565.
- [Róžańska et al., 2014] Róžańska, S., Róžański, J., Ochowiak, M., and Mitkowski, P. T. (2014). Extensional viscosity measurements of concentrated emulsions with the use of the opposed nozzles device. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 31 :47–55.
- [Salpeter, 1958] Salpeter, E. E. (1958). On Mayer's theory of cluster expansions. *Annals of Physics*, 5(3) :183–223.
- [Sandfeld et al., 2015] Sandfeld, S., Budrikis, Z., Zapperi, S., and Castellanos, D. F. (2015). Avalanches, loading and finite size effects in 2D amorphous plasticity : results from a finite element model. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2015(2) :P02011. Publisher : IOP Publishing.
- [Saramito, 2007] Saramito, P. (2007). A new constitutive equation for elastoviscoplastic fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 145(1) :1–14.
- [Saramito, 2009] Saramito, P. (2009). A new elastoviscoplastic model based on the Herschel–Bulkley viscoplastic model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 158(1) :154–161.
- [Saramito, 2021] Saramito, P. (2021). A new brittle-elastoviscoplastic fluid based on the Drucker–Prager plasticity. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 294 :104584.
- [Saramito and Wachs, 2017] Saramito, P. and Wachs, A. (2017). Progress in numerical simulation of yield stress fluid flows. *Rheologica Acta*, 56(3) :211–230.

- [Schreck et al., 2011] Schreck, C. F., O'Hern, C. S., and Silbert, L. E. (2011). Tuning jammed frictionless disk packings from isostatic to hyperstatic. *Physical Review E*, 84(1) :011305.
- [Schwedoff, 1900] Schwedoff, T. (1900). La rigidité des fluides. *Rapports du Congrès Intern. de Physique*, vol. 1 :478–486.
- [Shaukat et al., 2012] Shaukat, A., Kaushal, M., Sharma, A., and Joshi, Y. M. (2012). Shear mediated elongational flow and yielding in soft glassy materials. *Soft Matter*, 8(39) :10107–10114.
- [Sjögren, 1980] Sjögren, L. (1980). Kinetic theory of current fluctuations in simple classical liquids. *Physical Review A*, 22(6) :2866–2882. Publisher : American Physical Society.
- [Sollich et al., 1997] Sollich, P., Lequeux, F., Hébraud, P., and Cates, M. E. (1997). Rheology of Soft Glassy Materials. *Physical Review Letters*, 78(10) :2020–2023. Publisher : American Physical Society.
- [Speedy, 1999] Speedy, R. J. (1999). Glass transition in hard disc mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 110(9) :4559–4565.
- [Stickel et al., 2006] Stickel, J. J., Phillips, R. J., and Powell, R. L. (2006). A constitutive model for microstructure and total stress in particulate suspensions. *Journal of Rheology*, 50(4) :379–413. Publisher : The Society of Rheology.
- [Thien and Tanner, 1977] Thien, N. P. and Tanner, R. I. (1977). A new constitutive equation derived from network theory. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2(4) :353–365.
- [Thompson and de Souza Mendes, 2020] Thompson, R. L. and de Souza Mendes, P. R. (2020). Rheological material functions at yielding. *Journal of Rheology*, 64(3) :615–624.
- [Thompson et al., 2018] Thompson, R. L., Sica, L. U. R., and de Souza Mendes, P. R. (2018). The yield stress tensor. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 261 :211–219.
- [Thomson, 1890] Thomson, W. (1890). *Math. And Phys. Papers*, 3.
- [Varchanis et al., 2020] Varchanis, S., Haward, S. J., Hopkins, C. C., Syrakos, A., Shen, A. Q., Dimakopoulos, Y., and Tsamopoulos, J. (2020). Transition between solid and liquid state of yield-stress fluids under purely extensional deformations. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 117(23) :12611–12617. Publisher : National Academy of Sciences Section : Physical Sciences.
- [Vlassopoulos and Cloitre, 2014] Vlassopoulos, D. and Cloitre, M. (2014). Tunable rheology of dense soft deformable colloids. *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 19(6) :561–574.
- [Vlassopoulos and Hatzikiriakos, 1995] Vlassopoulos, D. and Hatzikiriakos, S. G. (1995). A generalized Giesekus constitutive model with retardation time and its association to the spurt effect. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 57(2) :119–136.
- [Voigt, 1890] Voigt, W. (1890). Über die innere Reibung der festen Körper, insbesondere der Krystalle - Erster Teil. *Abhandlungen der Königlichen Gesellschaft von Wissenschaften zu Göttingen*, 36 :3–47.
- [von Mises, 1913] von Mises, R. (1913). Mechanik der festen Körper im plastisch-deformablen Zustand. *Nachrichten Ges. Wiss. Göttingen*, pages 582–592.
- [Zakhari et al., 2018] Zakhari, M. E. A., Hütter, M., and Anderson, P. D. (2018). Stress relaxation of dense spongy-particle systems. *Journal of Rheology*, 62(4) :831–843.
- [Zhang et al., 2018] Zhang, X., Fadoul, O., Lorceau, E., and Coussot, P. (2018). Yielding and Flow of Soft-Jammed Systems in Elongation. *Physical Review Letters*, 120(4) :048001.

Les suspensions denses molles, telles que les suspensions de microgel par exemple, couvrent un large spectre de matériaux composés d'un grand nombre d'entités molles et élastiques en suspension dans un fluide newtonien. Bien que la nature des entités constituant ces suspensions puisse être très diverse (particules, gouttes, bulles...etc), ces dernières partagent toutes des propriétés rhéologiques communes. Par exemple, alors que pour des densités légèrement plus faibles que la densité de jamming, elles présentent toutes en cisaillement simple un comportement de fluide rhéofluidifiant, leur viscosité décroissant avec le taux de cisaillement imposé, au-dessus de cette densité, elles se comportent comme des fluides à seuil, demeurant solides tant que la contrainte ne dépasse pas un certain seuil et s'écoulant selon une loi d'Herschel-Bulkley une fois que le seuil est dépassé.

L'obtention d'un modèle constitutif permettant d'exprimer la dynamique du tenseur des contraintes en fonction de la déformation du matériau revêt une importance cruciale afin de décrire ces phénomènes et les comprendre. La plupart des modèles constitutifs existant à l'heure actuelle, s'ils permettent une bonne description de ces matériaux, demeurent des modèles phénoménologiques basés sur des considérations d'invariance et de symétrie et qui, s'ils sont généralement motivés par une image microscopique du système, ne font pas apparaître dans les paramètres dont ils dépendent de relation directe avec l'échelle microscopique (c'est-à-dire l'échelle des entités constitutives).

Durant cette thèse, nous avons développé une approche permettant de dériver un modèle constitutif 2D directement à partir de la dynamique microscopique de ces entités constitutives. Le passage de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique se fait à l'aide d'outils de physique statistique. Il est alors nécessaire de fermer les équations obtenues en faisant certaines approximations physiquement motivées quant à la microstructure du système. Nous avons appliqué cette méthode dans un premier temps au cas de suspensions au-dessus du jamming, obtenant un modèle constitutif tensoriel au fort contenu physique et permettant de décrire un fluide à seuil de Bingham. Nous avons appliqué ce modèle à différents protocoles rhéologiques et vérifié qu'il capturait qualitativement certains comportements non-triviaux observés expérimentalement ou numériquement. Utilisant le lien entre échelle microscopique et macroscopique sur lequel est bâti ce modèle, nous avons également pu fournir une image physique simple des phénomènes microscopiques expliquant l'émergence de certains de ces comportements à l'échelle macroscopique. Nous avons dans un second temps repris notre dérivation dans le cas de suspensions en-dessous du jamming et obtenu un nouveau modèle constitutif que nous avons testé sur quelques protocoles simples