

Analyse numérique de la criticalité de la transition de jamming pour des particules sphéroïdales

Yann-Edwin Keta

Stage de recherche, printemps 2017

Stage encadré par :
Peter OLSSON

- Milieux granulaires
 - présents presque partout, 2e matériau le plus manipulé dans l'industrie après l'eau ;
 - système non-thermique ;
 - milieux relativement simples mais aux propriétés surprenantes (par exemple effet Janssen ou mémoire lors de la compaction).
- Transition de jamming a été très bien étudiée depuis un peu plus de 10 ans pour des particules parfaitement sphériques
 - moins pour des particules ellipsoïdales...

1 Quaternions

- Propriétés
- Intégration
- Intérêt

2 Ellipsoïdes

- Propriétés
- Intersections

3 Transition de jamming

- Jamming
- Exposants critiques
- Modèles et méthodes

4 Résultats

- Transition rhéologique
- Comportement critique
- Orientation des particules
- Temps de relaxation

Propriétés

Définition (Quaternions)

$$q = q_0 + \sum_{i=1}^3 q_i e_i, \text{ avec } \begin{cases} e_m^2 = -1 \\ e_m e_n = \varepsilon_{mnk} e_k \end{cases}, m \neq n$$

Théorème (Rotations dans l'espace)

Toute rotation dans l'espace d'un vecteur \vec{v} pour donner un vecteur \vec{v}' peut s'exprimer par l'action d'un quaternion unitaire q sur ce vecteur :

$$\vec{v}' = q \vec{v} q^*, \text{ avec } \vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \equiv \sum_{i=1}^3 v_i e_i$$

\Rightarrow l'orientation d'un vecteur en fonction du temps peut-être décrite par un quaternion dont les coordonnées sont des fonctions du temps

Conservation de l'unitarité

→ quaternions \equiv vecteurs unitaires de $\mathbb{R}^4 \Rightarrow$ intégration sur l'hypersphère

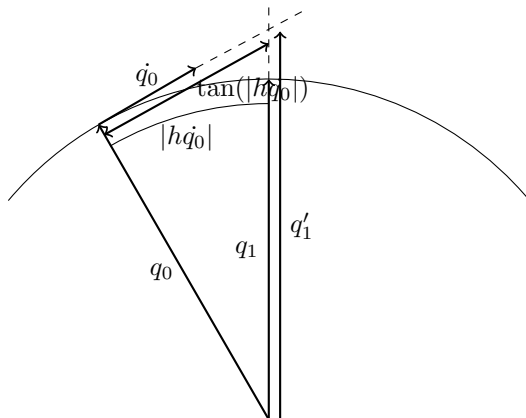


Figure – Schéma de l'intégration numérique (Euler)

Intégration

→ On peut montrer que l'évolution temporelle d'un quaternion décrivant l'orientation d'un vecteur fixe dans un solide est liée au vecteur vitesse angulaire par la relation

$$\vec{\omega}(t) = 2q^*(t)\dot{q}(t)$$

dans la base des axes principaux du solide, permettant ainsi l'intégration du quaternion.

→ Le vecteur rotation est intégré en utilisant l'équation d'Euler pour la rotation des corps non-déformables.

Intérêt

- Stockés plus facilement que des matrices de rotation et plus robustes aux erreurs d'arrondis.
- Très utilisés en aérospace mais aussi dans la conception des animations pour jeux-vidéo.

- 1 Quaternions
 - Propriétés
 - Intégration
 - Intérêt
- 2 Ellipsoïdes
 - Propriétés
 - Intersections
- 3 Transition de jamming
 - Jamming
 - Exposants critiques
 - Modèles et méthodes
- 4 Résultats
 - Transition rhéologique
 - Comportement critique
 - Orientation des particules
 - Temps de relaxation

Matrice caractéristique

Théorème (Matrice caractéristique)

Une ellipsoïde \mathcal{A} de centre \vec{r}_0 peut être décrite par une matrice réelle définie positive $B \equiv Q \text{diag}(R_i^{-2})_{i=1:3} Q^T$ telle que

$$\forall \vec{r} \in \mathbb{R}^3, \begin{cases} (\vec{r} - \vec{r}_0)^T B (\vec{r} - \vec{r}_0) < 1 & \text{si } \vec{r} \in \mathcal{A} \setminus \bar{\mathcal{A}} \\ (\vec{r} - \vec{r}_0)^T B (\vec{r} - \vec{r}_0) = 1 & \text{si } \vec{r} \in \bar{\mathcal{A}} \\ (\vec{r} - \vec{r}_0)^T B (\vec{r} - \vec{r}_0) > 1 & \text{si } \vec{r} \notin \mathcal{A} \end{cases}$$

avec Q la matrice de rotation de \mathcal{A} et $(R_i)_{i=1:3}$ les longueurs de ses semi-axes.

Théorème (Facteur d'échelle)

On définit $\mu(\vec{r} \in \mathbb{R}^3)$ le facteur d'échelle à appliquer à \mathcal{A} pour que \vec{r} soit à sa surface. Alors :

$$\mu^2(\vec{r}) = (\vec{r} - \vec{r}_0)^T B (\vec{r} - \vec{r}_0)$$

Détermination de l'intersection de 2 ellipsoïdes

Pour pouvoir déterminer les interactions entre 2 particules ellipsoïdales, il est nécessaire de savoir si elles s'intersectent.

- Perram et Wertheim (1985) ont proposé une méthode efficace pour déterminer le facteur d'échelle μ à appliquer à 2 ellipsoïdes \mathcal{A} et \mathcal{B} afin qu'elles soient tangentes.
 - $\Rightarrow \mu > 1 \Leftrightarrow \mathcal{A} \cap \mathcal{B} = \emptyset$
- Implémentation numérique inspirée de Perram et Wertheim (1985) et la thèse de A. Donev (2007).

- 1 Quaternions
 - Propriétés
 - Intégration
 - Intérêt
- 2 Ellipsoïdes
 - Propriétés
 - Intersections
- 3 Transition de jamming
 - Jamming
 - Exposants critiques
 - Modèles et méthodes
- 4 Résultats
 - Transition rhéologique
 - Comportement critique
 - Orientation des particules
 - Temps de relaxation

Phénomène

- Pierre-Gilles de Gennes (1998) : "l'étude des milieux granulaires est au niveau de celle de la physique des solides en 1930" ; Leo Kadanoff (1999) : "nous pourrions réinventer la physique statistique par l'étude des milieux granulaires".

Définition (Transition de jamming)

Apparition d'une contrainte seuil dans un milieu granulaire désordonné.

- Cette transition peut apparaître sous l'effet de l'augmentation de la densité ϕ au dessus d'une valeur critique ϕ_J
 - bas ϕ : les particules peuvent bouger indépendamment ;
 - haut ϕ : les particules ne peuvent pas s'éviter \Rightarrow apparition d'un module de flexion.
- Ce phénomène de jamming apparaît partout, de manière volontaire (e.g., pour remplacer les bras mécaniques) ou involontaire (e.g., blocage de grains dans un silo).

Différentes observations

Le phénomène de jamming est rencontré dans de nombreux systèmes sous différentes conditions expérimentales

- mousses sous l'effet de cisaillement, transition vitreuse (transformation des liquides en solides désordonnés) ;
- origine commune ?

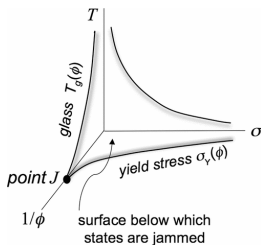


Figure – source : Vågberg, Olsson, Teitel (2011)

Transition étudiée

Nous étudions nous la transition de jamming pour des systèmes athermiques ($T = 0$), non soumis à une contrainte de cisaillement ($\sigma = 0$), dans la limite thermodynamique d'un système infini ($N \rightarrow +\infty$)

- survient à $\phi = \phi_J$;
- correspond à un point critique.

Théorie du groupe de renormalisation

La théorie du groupe de renormalisation permet, par des arguments d'échelle affectant les constantes de couplage de l'hamiltonien, d'étudier les états d'un système, notamment proche de points critiques

- permet d'expliquer pourquoi et comment certaines quantités divergent proche d'un point critique ;
- donne une justification théorique à l'existence des exposants critiques.

Divergence des coefficients de transport newtoniens

Pour un ensemble de particules sphériques soumis à un taux de cisaillement $\dot{\gamma}$, les coefficients de transports newtoniens associés à la contrainte de cisaillement σ , $\eta \equiv \frac{\sigma}{\dot{\gamma}}$, et à la pression p , $\eta_p \equiv \frac{p}{\dot{\gamma}}$, divergent proche de la densité de jamming ϕ_J avec un exposant critique β (Olsson et al., 2007).

$$\eta, \eta_p \underset{\phi \rightarrow \phi_J}{\sim} (\phi_J - \phi)^{-\beta}$$

dans la limite $\dot{\gamma} \rightarrow 0$.

La pression décroît exponentiellement si le cisaillement est stoppé avec un temps caractéristique τ qui diverge aussi proche de la densité de jamming avec un exposant β (Olsson, 2015).

$$\tau \underset{\phi \rightarrow \phi_J}{\sim} (\phi_J - \phi)^{-\beta}$$

Comportement de la pression proche de la transition de jamming

Inspirés de la théorie du groupe de renormalisation, nous supposons que la pression se comporte selon l'équation

$$p(\delta\phi, \dot{\gamma}) \sim \dot{\gamma}^{h_p} g_p^{(\text{fit})}((\phi - \phi_J)\dot{\gamma}^{q_p})$$

proche de la transition de jamming, où h_p et q_p sont des inconnues vérifiant $\beta = (q_p - 1)/h_p$.

Numériquement, la fonction $g_p^{(\text{fit})}$ et les inconnues h_p et q_p sont déterminées par la méthode de Levenberg-Marquadt.

Modèles

- Potentiel élastique d'interaction entre 2 particules, inspiré par le modèle de Dorian pour des bulles sphériques, et appliqué à 2 ellipsoïdes \mathcal{A} et \mathcal{B} .

$$\mathcal{V}_{\mathcal{AB}}(\vec{r}_{\mathcal{A}}, \vec{r}_{\mathcal{B}}) = \begin{cases} \frac{1}{2}k_e(1 - \mu(\vec{r}_{\mathcal{A}}, \vec{r}_{\mathcal{B}}))^2 & \text{if } \mathcal{A} \cap \mathcal{B} \neq \emptyset \\ 0 & \text{if } \mathcal{A} \cap \mathcal{B} = \emptyset \end{cases}$$

- Modèle pour la force de dissipation identique à celui utilisé pour des particules sphériques par Olsson, en prenant en compte les rotations.

$$\vec{f}_{\mathcal{AB}}^{\text{dis}} = -k_d(\vec{v}_{\mathcal{A}}^{C_{\mathcal{B}}} - \vec{v}_{\mathcal{B}}^{C_{\mathcal{A}}})$$

- Nous calculerons la pressions uniquement avec la force élastique.

Méthodes

- Les simulations correspondent à des cisaillements d'ensembles de particules sphéroïdales athermiques et molles sans interactions coulombiques.
 - Les exposants critiques sont ensuite déterminés grâce à notre hypothèse de comportement de la pression proche de la densité de jamming ;
 - l'intérêt du cisaillement est qu'il casse les amas (clusters) de particules à l'origine d'une densité ϕ_J mal définie dans des simulations impliquant des compressions par exemple.
- Les mesures du temps de relaxation se font en 2 parties : cisaillement puis relaxation.

- 1 Quaternions
 - Propriétés
 - Intégration
 - Intérêt
- 2 Ellipsoïdes
 - Propriétés
 - Intersections
- 3 Transition de jamming
 - Jamming
 - Exposants critiques
 - Modèles et méthodes
- 4 Résultats
 - Transition rhéologique
 - Comportement critique
 - Orientation des particules
 - Temps de relaxation

Augmentation du nombre de contact

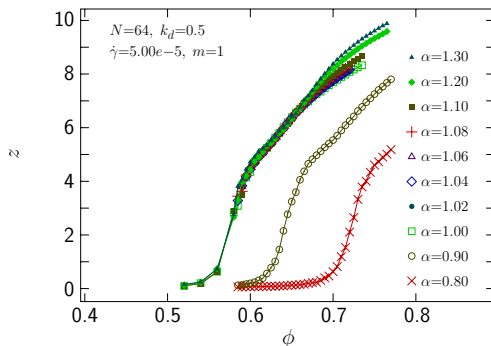
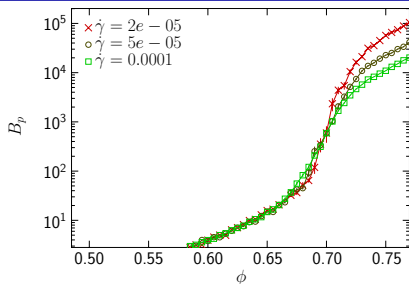


Figure – Nombre de contacts moyen par particule en fonction de la densité pour différents rapports d'aspect $0.8 \leq \alpha \leq 1.3$.

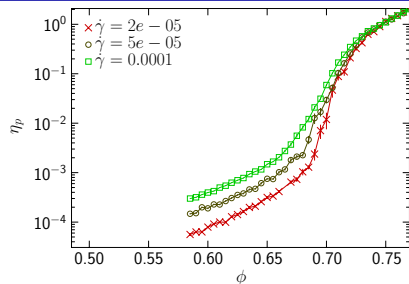
$N = 64$, $k_d = 0.5$, $\dot{\gamma} = 5e - 5$, $m = 1$.

Transition rhéologique caractérisée par une augmentation brusque du nombre de contacts par particules apparaissant à la même densité pour les rapports d'aspect considérés.

Coefficients de transport



(a) $\alpha = 0.8, \phi_C \sim 0.72. \left(B_p \equiv \frac{p}{\dot{\gamma}^2} \right)$



(b) $\alpha = 0.8, \phi_C \sim 0.72. \left(\eta_p \equiv \frac{p}{\dot{\gamma}} \right)$

Figure – Coefficient de transport newtonien associé à la pression en fonction de la densité pour $\alpha = 0.8$.

Transition d'un régime bagnoldien (régime inertiel où les forces de dissipation sont négligeables) à un régime newtonien (régime sur-amorti où le terme inertiel du PFD est négligeable).

Écart au modèle de particules dures

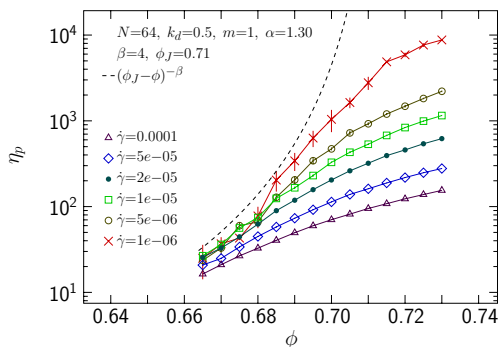


Figure – Coefficient de transport newtonien associé à la pression en fonction de la densité pour $\alpha = 1.3$.

Écart au modèle de particules dures proche de la densité de jamming.

→ L'écart est de moins en moins marqué pour des faibles taux de cisaillement.

Divergence du coefficient de transport newtonien

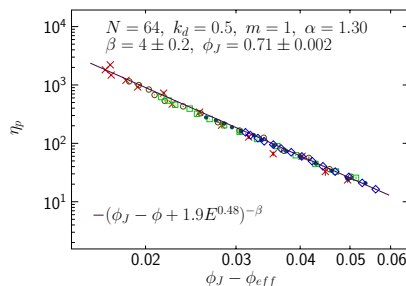
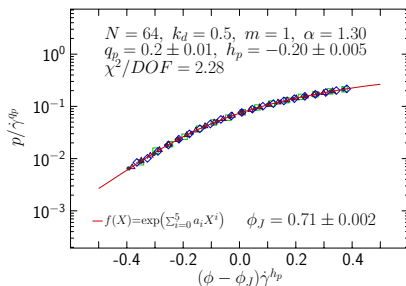


Figure – Graphes de la pression pour $\alpha = 1.3$.

Notre hypothèse sur le comportement de la pression proche de la densité de jamming est correct comme l'indique ces graphes. Nous avons pris

$$\phi_{\text{eff}}(\phi, \dot{\gamma})_{\phi \rightarrow \phi_J} = \phi - cE(\phi, \dot{\gamma})^{1/\gamma_E}$$

permettant de faire la correspondance entre particules molles et dures proche de la transition de jamming.

Densité de jamming et exposant critique

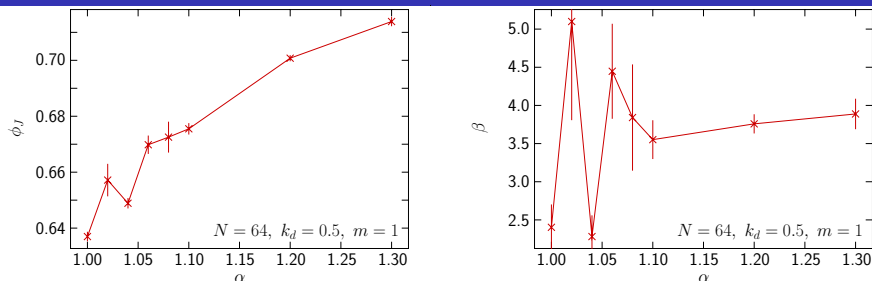


Figure – Densité de jamming ϕ_J et exposant critique β en fonction du rapport d'aspect pour des particules allongées.

La densité de jamming est une fonction croissante du rapport d'aspect pour des particules allongées.

- Nous avons aussi observé que pour les rapports d'aspect $\alpha = 0.9$ et $\alpha = 0.8$ nous avons $0.7 < \phi_J(\alpha = 0.9) < \phi_J(\alpha = 0.8)$.
- Résultats cohérents avec les premiers travaux de Donev et al. (Science, 2004).

Difficile de déterminer le comportement de β en fonction d' α , mais nous pouvons quand même affirmer qu'il devrait être proche de 4 pour des particules allongées.

- Il serait intéressant de savoir si toutes les particules allongées ont le même exposant β (même classe d'universalité) et si cet exposant est une fonction discontinue du rapport d'aspect.

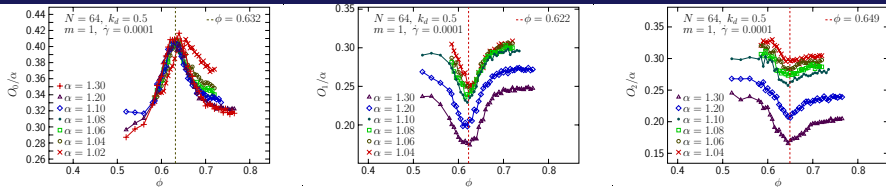


Figure – Moyenne du carré de la projection de l'axe de symétrie des particules selon différents axes en fonction de la densité.

Les moyennes du carré de la projection de l'axe de symétrie des particules sur la direction de cisaillement attend un maximum pour une densité bien définie pour l'ensemble des $\alpha > 1$ étudiés.

→ Ce maximum est $\propto \alpha$.

Les moyennes du carré de la projection de l'axe de symétrie des particules sur les 2 autres axes correspondant atteignent des minimums à des densités toutes aussi bien définies pour l'ensemble des rapports d'aspects considérés.

→ Les 3 densités correspondant à des extrema du carré de ces projections sont toutes différentes.

→ Les minima ne sont pas proportionnels au rapport d'aspect.

Corrélation de l'orientation

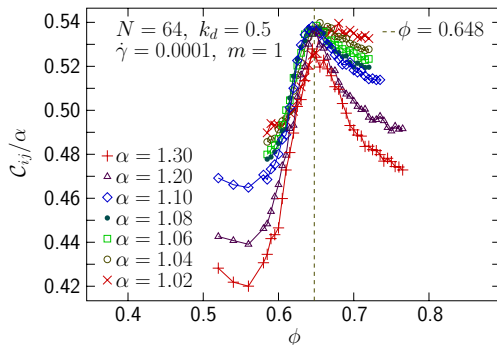


Figure – Corrélation de l'orientation des particules en fonction de la densité.

La fonction de corrélation de l'orientation attend aussi un maximum à une densité bien définie pour les rapports d'aspect considérés, proche de la densité pour laquelle le minima de la projection sur l'axe 2 apparaissait.

→ Ce maximum est proportionnel au rapport d'aspect.

Décroissance exponentielle de la pression

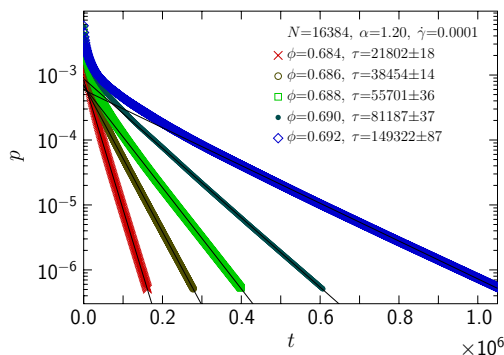


Figure – Pression en fonction du temps pendant la phase de relaxation.

Nous observons bien une décroissance exponentielle de la pression pendant la période de relaxation et que le temps de relaxation est une fonction décroissante de l'écart à la densité de jamming.

Densité de jamming et exposant critique

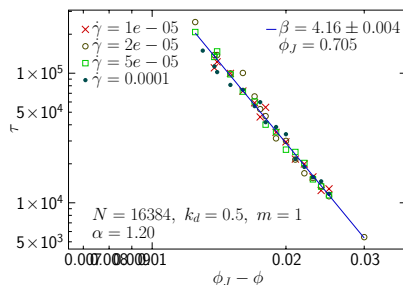
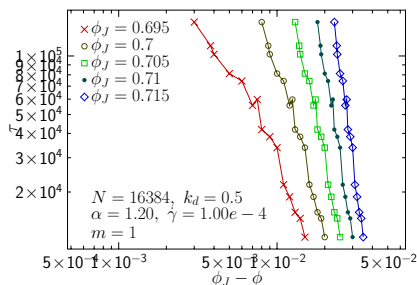


Figure – Détermination graphique de l'exposant critique β et de la densité de jamming ϕ_J .

Nous déterminons la densité de jamming de manière graphique et le coefficient beta par régression linéaire.

→ La méthode est efficace.

Conclusion

- Nos premiers résultats sont en accord avec la littérature existante : accord quantitatif avec les papiers de Olsson et al. pour les particules sphériques, accord qualitatif avec Donev et al. (Science, 2004) pour les particules sphéroïdales.
- Nous avons observé que la densité de transition rhéologique était indépendante du rapport d'aspect.
- Pour les systèmes de particules sphéroïdales étudiés, ϕ_J est très élevée (proche de la densité de la CFC pour des sphères).
 - Il serait intéressant de savoir quel est la densité de l'ensemble le plus ordonné de telles particules pour savoir si nous pouvons observer une cristallisation.
- L'observation des projections des axes de symétries des particules a montré que ces fonctions atteignaient des extrema à des densités bien définies ne correspondant ni à la transition rhéologique, ni à la transition de jamming.
 - Ce phénomène doit être plus étudié.

- Il serait intéressant d'étudier le nombre de contacts à la transition de jamming pour confirmer les hypothèses d'hypostaticité de Donev (PRE, 2007), pour des ensembles de particules ellipsoïdales.
- Il serait aussi intéressant de déterminer si l'exposant critique β est dépendant du rapport d'aspect et si les ensembles de particules ellipsoïdales pourraient ainsi être décrits par une même classe d'universalité.