Rapport bibliographique

Température effective dans les milieux granulaires

Julien Deseigne

ESPCI, M2R SDSMC

Enseignant:
Leticia Cugliandolo

Pour le 08/06/07

Introduction

Les milieux granulaires sont des ensembles d'un grand nombre de grains dont la taille est supérieure à 100 μm de sorte que les fluctuations thermiques sont négligeables. De plus, ces systèmes sont dissipatifs du fait des forces de friction existant mutuellement entre les grains. Ces sytèmes peuvent être conduits dans un état stationnaire hors-équilibre grâce à une sollicitation externe du type cisaillement homogène ou vibration d'amplitude constante. Comme un système à l'équilibre peut être caractérisé par une température, est-il possible de définir une température effective caractéristique de milieux granulaires sollicités mécaniquement ?

Après avoir donné les principales caractéristiques des milieux granulaires, nous montrerons qu'il est possible de déterminer une température effective pour les systèmes décrits ci-dessus, ce qui permet de justifier une approche thermodynamique de ces systèmes-là.

Les milieux granulaires

Nous nous intéressons à des milieux granulaires denses (fraction volumique $\phi > 0.6$). Les grains interagissent entre eux par des forces normale $\vec{F_n}$ et tangentielle $\vec{F_t}$. La première est donnée par la loi de Hertz :

$$F_n = \left|\vec{F_n}\right| = k\delta^{\frac{3}{2}} \tag{1}$$

Avec δ représentant la longueur caractéristique d'écrasement du grain et k défini par :

$$k = \frac{\sqrt{2R}E}{3(1-\nu^2)} \tag{2}$$

R, E et ν désignant respectivement le rayon, le module d'Young et le coefficient de Poisson du grain. Malgré la caractéristique linéaire du matériau, la relation (1) est non-linéaire du fait que la surface de contact évolue au cours de l'écrasement.

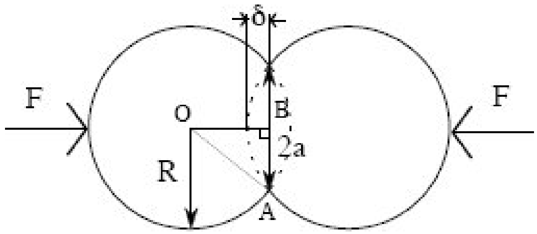

Fig. 1 – Déformations élastiques au contact entre deux sphères

La forces tangentielle $\vec{F_t}$ constitue la force de friction. Nous considérons que les contacts sont non-glissants, ce qui implique $F_t < \mu F_n$, μ étant le coefficient de friction statique. Evidemment, outre ces forces, il est possible de considérer la pesanteur.

Il existe deux autres aspects caractéristiques des milieux granulaires. Le premier concerne la répartition de ces forces au sein des grains. En effet, elle dépend fortement de l'histoire vécue au préalable par l'ensemble des grains. Il est intéressant de rapprocher ceci avec le phénomène de vieillissement des verres qui dépend beaucoup de la manière dont le verre a été refroidi. Le second aspect concerne la transition de jamming qui intervient lorsque l'on atteint une valeur critique de la fraction volumique ϕ_c. A $\phi = \phi_c \approx 0.64$, les grains sont alors bloqués dans un état métastable de moindre densité. De nouveau, on peut remarquer une analogie entre cette transition et la transition vitreuse dans les verres grâce au modèle IFLG (Ising Frustated Lattice Gas)[1]. Ce modèle représente les interactions entre grains à partir de l'hamiltonien du réseau sur gaz :

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2}(\epsilon_{ij} S_i S_j - 1) n_i n_j \tag{3}$$

où $n_i = 0, 1$ désignent l'occupation ou non du site par les grains, $S_i = \pm 1$ sont les variables de spin associés aux orientations des grains et $\epsilon_{ij} = \pm 1$ modélisent le fait que les grains doivent satisfaire les contraintes géométriques aux bords via des interactions de type aléatoire. Enfin, J est la constante de couplage et doit tendre vers l'infini pour considerer que les grains interagissent selon une répulsion de coeur.

Température effective

Définition

Pour un système isolé à l'équilibre d'énergie U dans l'ensemble microcanonique, on définit l'entropie $S(U) = \ln \Omega(U)$ où $\Omega(U)$ est l'ensemble des micro-états accessibles par le système. La température est alors définie comme suit :

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U} \tag{4}$$

Cette température correspond à l'idée physique que l'on s'en fait généralement et qui est explicité par la loi 0 de la thermodynamique. Cette loi indique que tous les systèmes en équilibre mutuel ont même température. Il existe une relation en physique statistique qui caractérise la dynamique d'un système conduit hors de l'équilibre tout en étant proche de celui-ci : le théorème de fluctuation-dissipation (TFD). Pour une observable donnée $O_1(t)$, un champ $h_2(t)$ couplé à une autre observable $O_2(t)$ telle que l'energie du système s'écrit $E = E_0 - h_2 O_2$ où E_0 est l'énergie à l'équilibre du système, on définit la fonction de réponse de O_1 au champ h_2 comme :

$$R_{12}(t,t') = \left.\frac{\delta 0_1(t)}{\delta h_2(t')}\right|_{h_2=0} \tag{5}$$

On définit ainsi la susceptibilité de O_1 à h_2 par :

$$\chi_{12}(t,t') = \int_{t'}^{t} dt'' R_{12}(t,t'') \tag{6}$$

$C_{12}(t,t') = \langle O_1(t) O_2(t') \rangle - \langle O_1(t) \rangle \langle O_2(t') \rangle$ définit la fonction de corrélation des deux observables t est reliée à la susceptibilité $\chi_{12}(t-t')$ via le TFD :

$$\chi_{12}(t-t') = \frac{1}{T}\left(C_{12}(0) - C_{12}(t-t')\right) \tag{7}$$

χ_{12} et C_{12} sont invariants par translation par rapport au temps car pour un système à l'équilibre, il n'existe pas d'effet mémoire qui ferait dépendre ces quantités de t et t' de manière indépendante.

Pour des systèmes hors-équilibre avec une dynamique lente de relaxation vers l'équilibre s'accompagnant de flux chaleurs faibles, il est tentant de vouloir étendre la notion de température à de tels systèmes [2]. Dans le cas des verres et des milieux granulaires, il est possible de définir une telle température grâce à l'extension du TFD sous certaines conditions. En notant t_w le temps d'attente, i.e le temps à partir duquel on commence la mesure après avoir préparé le système à $t = 0$, on a alors, après avoir pris la limite thermodynamique :

$$\lim_{t_w \longrightarrow \infty} \chi_{12}(t, t_w) = \chi(C_{12}) \tag{8}$$

On définit alors la température effective T_{eff} de la même façon que la témperature thermodynamique est définie par le TFD :

$$T_{eff}(C_{12}) = -\left(\frac{d\chi}{dC_{12}}\right)^{-1} \tag{9}$$

T_{eff} des milieux granulaires

Les milieux granulaires denses sollicités mécaniquement sont des systèmes qui évoluent de manière stationnaire et dont les flux de chaleur globaux sont faibles. Il est donc possible de définir une T_{eff}. Elle est définie à partir de la relation d'Einstein qui est la version statique du TFD où l'observable considéré est la position $x(t)$ d'un traceur introduit dans le milieu granulaire, soumis à une force f :

$$D = \mu T \tag{10}$$

Avec

$$\begin{cases} \lim\limits_{t \longrightarrow \infty} \left\langle (x(t) - x(t_w))^2 \right\rangle = 2Dt \\ \lim\limits_{t \longrightarrow \infty} \langle x(t) - x(t_w) \rangle = \overline{v}(t_w) t = \mu f t \end{cases} \tag{11}$$

Par conséquent, on peut définir T_{eff} comme suit [3, 4] :

$$\left\langle (x(t) - x(t_w))^2 \right\rangle = 2T_{eff} \frac{\langle x(t) - x(t_w) \rangle}{f} \tag{12}$$

Etant donné que cette relation n'est valable que pour les temps longs devant t_w, cela suggère que T_{eff} ne définit une température que pour des observables variant sur un temps caractéristique suffisamment élevé.

Dans ces conditions, on peut vérifier que cette température vérifie bien la loi 0 de la thermodynamique. Il s'agit de plonger plusieurs traceurs de taille différentes dans le milieu granulaire et de mesurer la T_{eff} pour chaque traceur utilisé. Les résultats de simulation numérique montrent que $T_{eff} = T_{dyn}$ est indépendant du traceur utilisé [3], ce qui confirme la loi 0 :

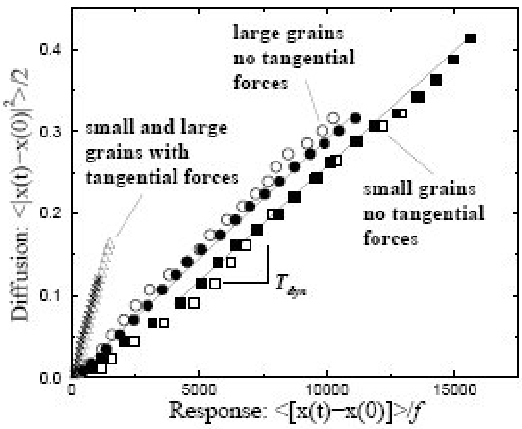

Fig. 2 – Graphe diffusion/fonction de réponse pour des grains petits et grands et pour des spheres interagissant avec ou sans friction

Potiguar et al. [4] montrent de plus que cette température est indépendante de l'observable considéré pour le TFD, ce qui en fait une variable intrinsèque au système.

Plus spécifiquement aux milieux granulaires soumis à une faible contrainte homogène, il est possible de caractériser un état bloqué grâce à la T_{eff}. En effet, pour $\phi > \phi_c$, le milieu est dans un état bloqué avec une T_{eff} qui ne dépend pas du taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ appliqué [4]. On vérifie bien que, dans le cas d'un milieu non bloqué, la T_{eff} dépend de $\dot{\gamma}$.

Finalement, à condition que l'on se place à des échelles de temps suffisamment longs, il est possible de définir une température effective intrinsèque au milieu granulaire sous faible cisaillement ou faible vibration. Cette température correspond à la notion de température thermodynamique et permet de caractériser les états bloqués du système. De ce fait, il semble possible de construire une thermodynamique du milieu granulaire dont une température peut-être extraite. S.F. Edwards a proposé un modèle thermodynamique que nous allons introduire. La question est de savoir si cette température extraite correspond bien à la température effective définie dans cette partie.

Modèle thermodynamique

Compactivité d'un milieu granulaire

Lorqu'on impose une force à un milieu granulaire dense, le volume V du milieu granulaire varie jusqu'à ce qu'il se fixe à une valeur minimale où le milieu est à l'état bloqué. Cet état est un état métastable et il est difficile de déterminer le volume minimal global pouvant être atteint. On retrouve cette même difficulté pour les verres de spin qui possèdent un paysage energétique très complexe faisant apparaître une quantité importante de minimums locaux correspondants aux états métastables du verre.

La principale hypothèse de S.F. Edwards [5] est de considérer qu'il existe un grand nombre de ces états bloqués de telle sorte que l'on puisse considérer que ces états sont équiprobables. Ceci permet de définir un ensemble microcanonique caractérisée par une entropie $S = \ln \Omega(V,N)$ avec $\Omega(V,N)$ le nombre d'états bloqués accessibles par le milieu granulaire de volume V contenant N grains.

On définit alors la compactivité X, de la même manière que la température pour un système isolé :

$$\frac{1}{X} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_N \tag{13}$$

Donc par analogie à la température, on a X=0 quand le milieu granulaire est à l'état bloqué (on atteint un minimum local de V). On peut finalement comprendre la compactivité comme la capacité du milieu granulaire à se densifier. On peut étendre cette description à un ensemble canonique en définissant la fonction volume effectif Y :

$$Y = -\lambda X \ln\left(\sum_{\mathcal{C}} e^{-\frac{W(\mathcal{C})}{\lambda X}}\right) \tag{14}$$

Avec λ l'analogue de la constante de Bolztmann et W une fonction des positions et des orientations des grains qui donnent le volume du système. W est donc l'analogue de l'hamiltonien d'un système dans l'ensemble canonique à la température T. On définit alors le volume effectif de la manière suivante :

$$Y = V + X\left(\frac{\partial Y}{\partial X}\right) \tag{15}$$

Ceci s'obtient d'après (13) et en définissant ainsi $Y = V - XS$, ce qui est analogue à $F = U - TS$.

L'intérêt principal d'une telle description statistique est de pouvoir considérer thermodynamiquement le mélange de poudres. Ainsi, deux poudres A et B de densité différentes avec des grains de différentes natures et de rayons différents, séparés par une feuille s'équilibreront vers un état où $X_A = X_B$.

Température d'Edwards et température effective

En supposant toujours que les états bloqués ont une égale probabilité de se produire, il est possible de définir, de la même façon que la compactivité, une température T_{Edw} [3, 4] :

$$\frac{1}{T_{Edw}} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} \tag{16}$$

Pour comparer cette température à T_{eff}, des simulations numériques ont été réalisées [3, 4]. Ces simulations n'ont été faites que pour les milieux granulaires sans friction pour éviter de considérer le problème difficile de l'irreversibilité dû à l'effet de mémoire dans les milieux granulaires. Le principe repose sur la simulation d'une dynamique moléculaire à l'équilibre en échantillonnant chaque état bloqué $\mathcal{C}$ selon la probabilité :

$$P(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(\mathcal{C})}{T^*} - \frac{E_{bloc}(\mathcal{C})}{T_{aux}}} \tag{17}$$

où Z est la fonction de partition du milieu granulaire. L'energie de blocage E_{bloc} est définie de telle sorte qu'elle s'annule pour les états bloqués. Elle s'exprime en fonction de la force totale exercée par ses voisines. L'energie E correspond à l'energie de deformation des grains selon la loi de Hertz (cf (1)).

Le système est donc dans deux bains thermostatés, l'un à T_{aux}, l'autre à T^*. Le système est équilibré à hautes températures puis progressivement T_{aux} est diminuée jusqu'à 0 tout en réglant T^* de sorte que l'énergie E corresponde à celle observée pendant le cisaillement. Finalement, lorsque T_{aux}=0, on a $T^*(E) = T_{Edw}(E)$. On échantillonne de cette manière les états bloqués du système.

Finalement, $T^* = T_{eff}$ quand l'energie finale déterminée par la simulation est égale, aux barres d'erreur près, à l'energie moyenne du système sous contrainte comme le montre le graphe ci-contre :

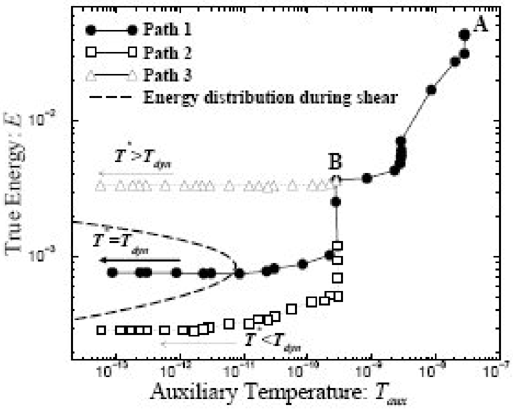

FIG. 3 – Procédure de recuit pour calculer $T_{eff} = T_{dyn}$ à différentes energies

Donc, Le modèle statistique d'Edwards permet de définir une température thermodynamique qui correspond à la température effective via l'extension du TFD aux temps longs. Mais cette égalité n'a été montré que dans le cas de milieux granulaires sans friction. Pour pouvoir étendre cette égalité aux systèmes avec friction, il faut pouvoir définir de manière correcte ce qu'est un état bloqué, ce qui implique de tenir compte du passé du matériau. Ceci rend difficile l'extension du modèle d'Edwards.

Conclusion

Les milieux granulaires sous faible cisaillement peuvent être caractérisés de manière intrinsèque par une température effective qui vérifie la loi 0 de la thermodynamique, indispensable pour définir une température thermodynamique. Cela est possible par la généralisation du TFD à ces milieux granulaires pour des échelles de temps suffisamment grandes pour pouvoir appliquer l'extension du TFD. D'autre part, nous avons montré l'égalité entre la température effective et une température thermodynamique définie grâce au modèle d'Edwards qui suppose l'ergodicité des états bloqués du milieu granulaire dans le cas d'un milieu sans friction. Il reste donc d'une part à caractériser le système aux échelles de temps plus petites et à étendre le modèle thermodynamique au cas des milieux granulaires avec friction.

Références

[1] A. Coniglio, M. Nicodemi, *cond-mat/0001362v1*, 2001

[2] L. F. Cugliandolo, J. Kurchan, L. Peliti, *Phys. Rev. E*, 1997, **55**, 4

[3] H. A. Makse, J. Kurchan, *cond-mat/0107163v2*, 2001

[4] F. Q. Potiguar, H. A. Makse, *cond-mat/0511254v1*, 2005

[5] S. F. Edwards, in *Granular matter : an interdisciplinary approach*, A. Mehta, Ed., (Springer-Verlag, New York, 1994), pp. 121-140.