

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ ABOU BEKR BELKAÏD -- TLEMCEEN

THÈSE

Présentée à:

FACULTÉ DES SCIENCES / DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour obtenir le diplôme de:

DOCTORAT ÈS SCIENCES

Spécialité: Physique Théorique

Par:

Sidi Mohammed KHEFIF

Sur le thème

Dynamique d'étalement d'un empilement granulaire sous vibrations horizontales

Soutenue publiquement en septembre 2018 à Tlemcen devant le jury composé de:

Smaïne Bekhchi	Professeur	Université Abou Bekr Belkaïd, Tlemcen	Président
Fouzia Ould-Kaddour	Professeure	Université Abou Bekr Belkaïd, Tlemcen	Directrice de thèse
Rachid Bouamrane	Professeur	Université STO Mohammed Boudiaf, Oran	Examineur
Ahmed Houari	Professeur	Centre universitaire, Maghnia	Examineur
Abdelkarim Elhasnaïne Merad	Professeur	Université Abou Bekr Belkaïd, Tlemcen	Examineur
Alexandre Valance	DDR CNRS	Université de Rennes 1, France	Invité

Laboratoire de Physique Théorique (LPT)
Département de Physique / Faculté des Sciences
Université Abou Bekr Belkaïd, B.P. 119 Tlemcen, 13000, Algérie



مُلخَص

بِاسْتِعْمَالِ مُحَاكَاتٍ رَقْمِيَّةٍ ثَلَاثِيَّةِ الأَبْعَادِ مِنْ فِئَةِ العُنَاصِرِ المُتَفَكِّكَةِ (DEM)، دَرَسْنَا تَمَرُّحَ قُطْبِيَّةٍ رَمَلِيَّةٍ مَوْضُوعَةً عَلَى قَاعِدَةٍ خَاصَّةٍ لِإِهْتِرَازَاتٍ أَفْقِيَّةٍ. بِاسْتِثْنَاءِ مَرَحَلَةٍ غَابِرَةٍ وَسَرِيعَةٍ أَيْنَ يَكُونُ المَظْهَرُ الخَارِجِيُّ لِلقُطْبِيَّةِ عَلَى شَكْلِ قِطْعٍ مُكَافِئٍ، يَبْقَى هَذَا الأَخِيرُ مُثَلَّثِيًّا طَوَالَ عَمَلِيَّةِ التَمَرُّحِ الَّتِي مِنْ خُصُوصِيَّةٍ دِيْنَامِيكِيَّتِهَا أَنَّهَا تَمُرُّ بِمَرَحَلَتَيْنِ مُتَبَايِنَتَيْنِ، نِظَامٍ مَا فَوْقَ إِنْتِشَارِي فِي بَادِيءِ الأَمْرِ وَهُوَ نَاجِمٌ عَنِ تَدَفُّقِ سَطْحِي، أَمَّا النِظَامُ الثَّانِي فَهُوَ مَا تَحْتَ إِنْتِشَارِي نَاجِمٌ عَنِ تَدَفُّقِ حَجْمِي. تَمَرُّحُ القَاعِدَةِ الإِهْتِرَازِيَّةِ يُغَيِّرُ فَقَطْ مِنْ نِسْبَةِ التَمَرُّحِ وَلَكِنْ لَا يُغَيِّرُ مِنْ مَظْهَرِ القُطْبِيَّةِ الرَمَلِيَّةِ وَلَا مِنَ القَوَائِنِ السَّلْمِيَّةِ لِلتَمَرُّحِ. الأَهَمُّ مِنْ هَذَا، هُوَ أَنَّنا نَظْهَرُ أَنَّهُ خِلَالَ مَرَحَلَةِ النِظَامِ مَا تَحْتَ الإِنْتِشَارِي بِإِمْكَانِنَا إِدْمَاجَ دِرَاسَةِ الإِحْتِكَالِ الفِعْلِيِّ فِيمَا بَيْنَ القَاعِدَةِ وَالقُطْبِيَّةِ الرَمَلِيَّةِ فِي إِطَارِ نَظْرِيَّةِ التَدَفُّقِ تَحْتَ القِصِّ أَوْ مَا يُسَمَّى $\mu(I)$ -rheology .

أَلْفَاظُ الدَّلِيلِيَّةُ : قُطْبِيَّةٍ رَمَلِيَّةٍ، إِهْتِرَازَاتٍ، تَمَرُّحٍ، المَظْهَرِيَّةِ، التَدَفُّقِ تَحْتَ القِصِّ.

Résumé

À l'aide de simulations d'éléments discrets (DEM), nous avons étudié l'étalement d'une goutte granulaire sur une plateforme vibrée horizontalement. À l'exception d'un régime transitoire rapide avec une forme parabolique, la gouttelette embrasse un profil triangulaire durant le processus d'étalement. La dynamique d'étalement est gouvernée par deux régimes: un régime super-diffusif au début provoqué par un écoulement de surface, suivi d'un régime sous-diffusif qui lui est gouverné par un écoulement dans le volume. La bosselure du substrat vibré modifie uniquement le taux d'étalement mais n'affecte ni le profil de la gouttelette granulaire, ni les lois d'échelle de l'étalement. Plus important encore, nous montrons que durant le régime sous-diffusif, le frottement effectif entre le substrat et la gouttelette granulaire peut être interprété dans le cadre de la $\mu(I)$ -rhéologie.

Mots clés: Gouttelette granulaire, vibrations, étalement, morphologie, rhéologie.

Abstract

By means of three-dimensional discrete element simulations (DEM), we studied the spreading of a granular droplet on a horizontally vibrated plate. Apart from a short transient with a parabolic shape, the droplet adopts a triangular profile during the spreading. The dynamics of the spreading is governed by two distinct regimes: A super-diffusive regime in the early stages driven by surface flow followed by a second one which is sub-diffusive and governed by bulk flow. The plate bumpiness is found to alter only the spreading rate but plays a minor role on the shape of the granular droplet and on the scaling laws of the spreading. Importantly, we show that in the sub-diffusive regime, the effective friction between the plate and the granular droplet can be interpreted in the framework of the $\mu(I)$ -rheology.

Keywords: Granular droplet, vibrations, spreading, morphology, rheology.



Remerciements

À LA MÉMOIRE DE MON PÈRE.

Mes remerciements les plus sincères à tous les membres du jury qui ont accepté d'évaluer ce travail.

Ma reconnaissance va à **Fouzia Ould-Kaddour** qui, avec son flair de physicienne, m'a toujours introduit à des sujets fondamentaux d'actualité.

Mon entière gratitude va à **Alexandre Valance** qui a su avec patience et bonté me remotiver maintes fois pour aller jusqu'au bout de cette problématique.

Le travail de thèse présenté dans ce mémoire a été effectué dans le cadre du programme Algéro-Français **CMEP-Tassili N° 05MDU 644**. Dans un premier temps, ce travail a été entamé au sein du laboratoire de la physique et de la mécanique des milieux hétérogènes **PMMH** à l'**ESPCI-Paris**. Ensuite, quelques séjours de courtes durées au sein de l'équipe de la physique des milieux divisés à l'**Institut de Physique de Rennes** ont été nécessaires pour le développement et la mise au point des outils numériques qui ont servi à l'étude de l'étalement des films granulaires sous vibrations. Ainsi, je remercie les personnes avec qui j'ai travaillé à l'**ESPCI**: **Bruno Andreotti**, **Philippe Claudin**, sans oublier les post-docs **Shio Inagaki** et **Chay Goldenberg**, qui m'ont permis de comprendre comment développer des outils d'analyse post-traitement dans les systèmes granulaires. Mes remerciements vont aussi à l'équipe des milieux granulaires à **Rennes**: **Daniel Bideau** pour l'accueil, **Luc Oger**, **Renaud Delannay** et **Sean McNamara** pour les multiples discussions et bien d'autres suggestions. Une pensée particulière pour **Hervé Tabuteau** et *son café*. Je remercie également tous ceux qui m'ont prêté main forte par emails interposés sans jamais les avoir rencontrés: **Stefan Luding**, **Gaël Combe** et **Nicolas Brodu**.

Cette thèse est essentiellement basée sur le calcul numérique. Les codes de production de données et d'analyse ont nécessité de grandes ressources de calcul. À

cette fin, nous avons eu accès à l'unité de calcul intensif **Altair** de l'université Abou Bekr Belkaïd de Tlemcen. Nous remercions les responsables de ce centre d'avoir mis à notre disposition cet outil moderne et inestimable, en particulier, mes amis de longue date **Amazigh F. Dib** et **Mohammed R. Boufatah**.

Je remercie (bien sûr) ma mère, mon épouse, mes soeurs, en particulier **Ghania**, pour leur soutien indéfectible.

Merci également à tous mes amis pour leurs encouragements.

سَوَابِقُ الِهَمِّ لَا تَخْرِقُ أَسْوَارَ الْأَقْدَارِ
(حِكْمُ إِبْنِ عَطَاءِ اللَّهِ)

Les aspirations antérieures ne percent pas les murs de la destinée

(Aphorismes d'Ibn Ata Allah)

Table des matières

Introduction	10
1 Méthodes de simulations numériques discrètes des milieux granulaires	15
1.1 Méthode collisionnelle (<i>Event Driven</i>)	16
1.2 Méthode de dynamique des contacts (DC)	18
1.3 Dynamique moléculaire (DM)	18
1.3.1 Algorithme de base de la DM	19
1.3.2 Optimisation du calcul des forces: liste de Verlet	24
1.3.3 Conditions aux bords périodiques	26
2 Méthodologie	28
2.1 Système étudié	28
2.2 Préparation de la gouttelette	29
2.3 Choix du pas d'intégration de la dynamique moléculaire	33
2.4 Test des conditions aux bords périodiques	35
3 Résultats et discussion	36
3.1 Morphologie de la gouttelette	36
3.2 Dynamique d'étalement	39
3.3 Effet des conditions aux bords périodiques	44
3.4 Effet de la résistance de roulement	45
3.5 Effet de la bosselure basale	49
3.6 Champ de vitesse dans la gouttelette	51

3.7 Rhéologie effective	54
4 Conclusions et perspectives	60
A Listing de quelques scripts	62
A.1 Construction d'un substrat bosselé	62
A.2 Analyse morphologique et structurelle de la gouttelle granulaire .	64
A.3 Extraction du champs de vitesse	72
B Publication	77
Bibliographie	89

Notations principales

DM	Dynamique moléculaire
DEM	<i>Discrete Element Method</i> (Méthode d'éléments discrets)
k_n, k_t	Raideurs normale et tangentielle dans un contact
γ_n, γ_t	Amortissements normal et tangentiel dans un contact
δ	Distance de chevauchement normal dans un contact
ξ	Déplacement relatif tangentiel dans un contact
e_n, e_t	Coefficients de restitution normal et tangentiel
t_n	Durée d'un contact normal
μ_p	Coefficient de friction microscopique
μ	Coefficient de friction effectif
λ	Bosselure basale
R	Rayon d'un grain sphérique
d	Diamètre d'un grain sphérique
\mathbf{r}	Vecteur position d'un grain
ρ	Densité solide des grains
v	Vitesse linéaire d'un grain
ω	Vitesse angulaire d'un grain
$\mathbf{u}_n, \mathbf{u}_t$	Vecteurs unitaires normal et tangentiel dans un contact
a	Amplitude des vibrations du substrat
T	Période des vibrations du substrat
ω_0	Pulsation des vibrations du substrat
Γ	Accélération réduite du substrat
g	Accélération de la pesanteur
I	Nombre inertiel
H	Hauteur instantannée de la gouttelette granulaire
W	Largeur instantannée de la gouttelette granulaire
ϕ	Fraction volumique de la gouttelette granulaire

Table des figures

1-1	Collision binaire entre deux grains sphériques parfaitement rigides .	17
1-2	Collision entre deux sphères molles	21
1-3	Modèle d'interaction viscoélastique sur les deux directions normale et tangentielle	22
1-4	Construction des listes de Verlet	25
1-5	La zone de simulation (en noir) peut être répétée périodiquement (en gris) sur une seule dimension.	26
2-1	Chronologie de la préparation de la gouttelette granulaire	30
2-2	Schéma représentant la gouttelette granulaire simulée par DEM . .	31
2-3	Énergie cinétique lors de la phase de relaxation de la gouttelette . .	32
2-4	Énergie cinétique par particule durant la phase d'étalement	34
2-5	Comparaison des énergies cinétiques par particules pour des pas d'in- tégration différents	34
2-6	Effet des conditions aux bords périodiques sur l'énergie cinétique moyenne.	35
3-1	Profils de la gouttelette granulaire à différents instants à $\Gamma = 1.10$ et $\lambda = 1$	37
3-2	Profils bidimensionnels moyens pour $\Gamma = 0.39$ et $\lambda = 1$	38
3-3	Profils bidimensionnels moyens normalisés pour $\Gamma = 0.39$ et $\lambda = 1$.	39
3-4	Évolution temporelle de la hauteur de la gouttelette granulaire $H(t)$ et sa largeur $W(t)$ pendant qu'elle soit vibrée horizontalement sur un substrat bosselé ($\lambda = 1$) à différentes accélérations réduites Γ . . .	40

3-5	Dynamique d'étalement d'une gouttelette granulaire sur un substrat bosselé ($\lambda = 1$) à l'instar du modèle proposé dans l'étude expérimentale de Sanchez et ses collaborateurs (figure 3d dans la référence) à différents taux d'accélération Γ	41
3-6	Représentation en log-log de la largeur de contact de la gouttelette granulaire sur un substrat bosselé ($\lambda = 1$) pour des taux d'accélération $\Gamma = 0.39$ et 1.10	42
3-7	Évolution de la fraction volumique ϕ à $\lambda = 1$	43
3-8	Évolution temporelle de la hauteur de la gouttelette granulaire pour des systèmes d'épaisseurs L_y différentes.	44
3-9	Évolution temporelle de la largeur de la gouttelette granulaire pour des systèmes d'épaisseurs L_y différentes.	44
3-10	Évolution temporelle de la fraction volumique pour des systèmes d'épaisseur L_y différentes.	45
3-11	Effet de la résistance au roulement sur l'énergie cinétique moyenne.	46
3-12	Évolution temporelle de la hauteur de la gouttelette granulaire pour des modèles de forces avec et sans frottement de roulement FR.	46
3-13	Évolution temporelle de la largeur W de la gouttelette granulaire pour des modèles de forces avec et sans frottement de roulement FR.	47
3-14	Évolution temporelle de la fraction volumique pour des modèles de forces avec et sans frottement de roulement FR.	47
3-15	Effets des conditions aux bords périodiques et du frottement de roulement sur les profils de la gouttelette	48
3-16	Évolution temporelle de W par rapport à sa valeur initiale W_0 pour différentes bosselures basales λ à la même accélération $\Gamma = 1.10$ (partie supérieure). Le rapport des hauteurs H/H_0 est également représenté (partie inférieure).	49
3-17	Fraction volumique normalisée pour différentes valeurs de la bosselure basale et à la même accélération $\Gamma = 1.10$	50
3-18	Hauteur et largeur normalisées à différentes accélérations et à valeur de la bosselure basale fixée $\lambda = 0$	51

3-19	Profils des champs scalaire et vectoriel des vitesses.	52
3-20	Profils verticaux des vitesses horizontale v_x et verticale v_z	53
3-21	Évolution temporelle du coefficient de frottement effectif μ à différents taux d'accélération Γ et à bosselure basale fixée $\lambda = 1$	54
3-22	Coefficient de frottement effective μ à différentes bosselures basales λ . Les lignes droites sont les meilleurs ajustements	57
3-23	Fraction volumique moyenne pour différentes valeurs de la bosselure basale λ . Les lignes droites sont les meilleurs ajustements.	58

Liste des tableaux

1.1	Paramètres d'interactions utilisés dans les simulations	23
3.1	Exposants critiques m et n des lois d'échelle de la dynamique d'étalement dans le cas $\lambda = 1$	42
3.2	Exposants critiques m et n des lois d'échelle de la dynamique d'étalement dans le cas $\Gamma = 1$	50
3.3	Résumé des lois de la $\mu(I)$ -rhéologie répertoriées dans la littérature.	56
3.4	Parameters d'ajustement de $\mu(I)$ et $\phi(I)$	58

Introduction

*“Le désordre à petite échelle est un animal bien dompté,
le désordre à grande échelle nécessite de nouveaux
explorateurs.”*

Pierre–Gilles de Gennes (1932 -- 2007)

La physique des milieux granulaires étudie le comportement de matériaux composés d'un très grand nombre d'objets macroscopiques. Du café moulu ou en grains, en passant par le riz ou le blé, jusqu'au matériaux de construction tels le gravier ou le sable, la matière en grains est universellement répandue autour de nous. Plus de trois siècles après les travaux fondateurs de Coulomb sur la stabilité des talus, la physique des milieux granulaires est une jeune discipline qui suscite l'engouement face à de multiples défis fondamentaux. Les milieux granulaires sont caractérisés par une variété de comportements et de propriétés exceptionnels qui, le plus souvent, défient toute intuition. Suffisamment robustes pour supporter le poids d'un immeuble, ils peuvent couler dans un sablier comme un fluide ou être transportés par le vent pour façonner les dunes et sculpter les déserts. Depuis une vingtaine d'années, la problématique des milieux granulaires s'est déplacée du champ d'étude des ingénieurs et a investi le champ de la physique, à la croisée de la physique statistique, de la mécanique et de l'étude des milieux désordonnés [1]. L'alliance entre expériences de laboratoire sur des matériaux modèles, simulations numériques discrètes et approches théoriques issues d'autres domaines de la physique a ainsi contribué à enrichir et à renouveler notre compréhension des matériaux granulaires ces dernières années [2].

Définitions

Un milieu granulaire peut être défini comme une collection de particules solides macroscopiques, c'est-à-dire, au moins visible à l'œil nu, typiquement de taille supérieure à $100\ \mu\text{m}$. Cette limite inférieure sur la taille des particules est intimement liée à la nature des interactions existant entre les grains: les grains interagissent pour l'essentiel par contact mécanique et toute tentative d'invocation du mouvement brownien reste irréaliste [3]. Pour des particules plus petites, typiquement entre $1\ \mu\text{m}$ et $100\ \mu\text{m}$, on parle plutôt de poudre. Dans ce cas, les interactions de van der Waals, les effets de l'humidité et le rôle de l'air sont souvent prépondérants. Enfin, pour des particules de tailles encore plus fines situées entre $1\ \text{nm}$ et $1\ \mu\text{m}$, on bascule dans le monde des colloïdes où l'agitation thermique ne peut plus être négligeable.

Entre solide et fluide

Nonobstant l'omniprésence de la matière en grains dans la nature et l'abondance de ses applications industrielles et géophysiques, cette dernière est caractérisée par une multitude de comportements qui mettent au défi notre compréhension, d'où l'explosion des recherches publiées dans ce domaine depuis quelques années. Il faut avouer qu'à l'heure des super collisionneurs de particules, des super télescopes et autres super ordinateurs, il n'existe aucune théorie qui explique la multitude des comportements observés dans ces matériaux qui sont pourtant si familiés. Comme disait Pierre-Gilles de Gennes, *la physique de la matière en grains n'est peut être pas couteuse, mais elle est soigneuse!* Nous pouvons essayer de dresser une liste peu exhaustive des défis inhérents à ce type de matière [2].

- *Le grand nombre de particules*

Une simple cuillère à café remplie de sucre peut contenir plus d'un million de particules de diamètre de $100\ \mu\text{m}$! soit près du nombre qu'un super ordinateur moderne peut simuler.

- *Les fluctuations thermiques sont négligeables*

En physique statistique, le nombre élevé de particules n'est pas vraiment un obstacle lorsque les fluctuations thermiques sont présentes car elles nous permettent de faire une transition du microscopique vers le macroscopique. Dans les milieux granulaires, les fluctuations thermiques sont négligeables car les particules sont trop grandes pour présenter des mouvements browniens significatifs.

- *La granularité est observable*

Contrairement aux liquides et aux gaz, la séparation entre les échelles microscopique et macroscopique est assez floue dans le cas des milieux granulaires.

- *Les interactions entre grains sont complexes*

À l'échelle du grain, les lois du contact solide entre deux particules traduisent souvent la présence de phénomènes non linéaires très complexes.

- *le milieu est fortement dissipatif*

Un milieu granulaire est hautement dissipatif. Pour s'en rendre compte, il suffit de se rappeler combien il est fatiguant de courir sur une plage de sable fin et sec.

- *les milieux granulaires existent sous plusieurs états: solide, liquide ou gaz.*

Selon le mode de sollicitations auxquelles est soumis le milieu granulaire, ce dernier peut se comporter différemment.

Objectif et plan de la thèse

La dynamique d'étalement d'un matériau granulaire sujet à des excitations horizontales extérieures peut être cruciale dans quelques industries comme celle du revêtement ou du médicament. Mais contrairement à l'étalement d'un liquide sur un solide, les films granulaires vibrés n'ont pas reçus une grande attention. Rappelons que des études expérimentales, théoriques ou numériques extensives, ont montré que l'étalement d'une goutte liquide passe par deux étapes; un régime précoce lent d'origine capillaire gouverné par la loi de Tanner $r \sim t^{1/10}$, quand le rayon de la gouttelette r est plus petit que la longueur capillaire, suivi d'un régime rapide gravitationnel $r \sim t^{1/7}$, quand la gouttelette a une forme de crêpe [4]. Cependant,

lorsque la dissipation visqueuse est négligée et qu'un équilibre est invoqué entre l'inertie et la tension superficielle, la loi d'échelle de la dynamique d'étalement devient $r \sim t^{1/2}$ aux stades primaires et $r \sim t^{2/3}$ pour les stades postérieures [5, 6]. Dans d'autres études, il a été également montré que l'étalement de nano gouttelettes de polymères dans la géométrie cylindrique varie comme $r(t) \sim t^{1/7}$ durant les premiers stades et comme $r(t) \sim t^{1/5}$ pour les stades asymptotiques [7, 8, 9].

L'étalement d'un système granulaire nécessite généralement des excitations mécaniques externes afin de vaincre le frottement solide. Un grand nombre d'études ont été menées sur des systèmes granulaires vibrés mais en géométries confinées, voir l'étude comparative par Nadler et ses collaborateurs [10]. Cependant, un travail pionnier par Sanchez et ses collaborateurs [11] a été conduit afin d'analyser la dynamique d'étalement d'un dépôt granulaire sur une surface vibrante contrôlée. Cette étude montre que la largeur transversale W du film granulaire suit une loi d'échelle d'étalement unique $W(t) \sim t^{1/3}$ et que la morphologie de la gouttelette obéit à un profil parabolique invariant par changement d'échelle. Un modèle de diffusion non-linéaire pour la dynamique d'étalement a également été proposé et qui reproduit raisonnablement bien les résultats expérimentaux. À partir d'un simple modèle de frottement de Coulomb, cette équipe a pu identifier deux comportements rhéologiques différents pour la gouttelette granulaire: un épaissement par cisaillement (*Shear thickening*) à des énergies de vibrations faibles et un amincissement par cisaillement (*Shear thinning*) dans le cas de grandes énergies de vibrations, conduisant ainsi à un comportement non monotone du coefficient de frottement effectif μ en fonction du nombre inertiel I de la $\mu(I)$ -rhéologie, contrastant clairement avec le comportement dépendant du taux de cisaillement déjà observé dans le régime granulaire inertiel [12].

Une limitation spécifique majeure dans cette expérience est le fait que le processus d'étalement et la morphologie de la gouttelette sont induits exclusivement à partir de l'évolution temporelle de la forme géométrique de la gouttelette et non pas des propriétés physiques dans le volume. Afin de surmonter cette limitation, mais aussi pour une meilleure compréhension des mécanismes physiques sous-jacents, nous effectuons des simulations numériques de type éléments discrets

(DEM) pour étudier l'étalement d'une gouttelette granulaire déposée sur une surface vibrée horizontalement. Nous investigons aussi bien la dynamique d'étalement que le frottement entre la gouttelette et le substrat pour une large gamme d'énergies de vibrations et de bosselure de la base. Nous analysons également les propriétés dans le volume de la gouttelette granulaire durant le processus d'étalement comme le champ de vitesse ou la fraction volumique.

Ce travail est organisé comme suit. Dans le chapitre 1, nous introduisons les différentes techniques de simulations numériques des milieux granulaires, en particulier la méthode de dynamique moléculaire (DM) de sphères molles appliquée aux matériaux granulaires. Ensuite, nous faisons une présentation du système étudié et discutons le choix des différents paramètres dans les simulations numériques réalisées. Les résultats sont présentés dans le chapitre 4 qui comporte la morphodynamique de la gouttelette granulaire, les lois d'échelle de la dynamique d'étalement extraites des simulations numériques, l'influence de la bosselure basale et du frottement de roulement. À la fin, nous étudions la rhéologie de l'étalement de la gouttelette. La conclusion et les perspectives seront présentées à la fin de cet exposé.

Chapitre 1

Méthodes de simulations numériques discrètes des milieux granulaires

Les techniques de simulations numériques, comme la dynamique moléculaire ou la méthode de Monte Carlo, ont été utilisées intensivement depuis déjà plus d'un demi-siècle dans l'étude et la compréhension du comportement des gaz et des liquides. De même, la modélisation numérique des différentes facettes que revêt la physique de la matière en grain est un outil indispensable qui répond à des besoins pratiques et industriels, tels que les phénomènes de ségrégation ou de blocage dans les écoulements, mais apporte aussi une solution aux limitations auxquelles peuvent être confrontées des méthodes expérimentales; à l'instar du coefficient de restitution ou du coefficient de frottement des billes de verre utilisées dans les expériences et qu'on ne peut pas faire varier beaucoup, alors qu'en simulations numériques, on peut leur conférer des valeurs à notre guise.

Ces méthodes de simulations numériques discrètes (DEM) offre la possibilité de suivre le mouvement individuel de chaque grain [13]. Elles permettent d'accéder à des variables qui sont parfois inaccessibles expérimentalement, comme les forces entre grains, la distribution des contacts ou bien la fraction volumique. Elles permettent aussi la transition vers une analyse continue (champ de vitesse, tenseur des contraintes et tenseur des déformations) grâce aux techniques de moyennage ou d'homogénéisation. En revanche, la modélisation numérique des milieux granulaires

reste difficile puisqu'il n'existe pas une méthode unique qui permet de reproduire tous les comportements que peut avoir un matériau granulaire, la multiplicité des méthodes proposées dans la littérature en est le témoin [2, 14, 15]. Il n'existe pas une méthode meilleure qu'une autre, chacune possède des avantages et des inconvénients en termes de fiabilité de reproduction de comportements et de prévision, mais aussi en termes d'optimisation de temps de calcul. Malgré la puissance croissante des ordinateurs, les méthodes de simulation restent très gourmandes en temps de calcul et sont limitées en nombre de particules. Les imperfections inhérentes à ces méthodes nous poussent à plus de prudence quant à leur choix ou leur domaine d'utilisation. On peut énumérer principalement trois grandes familles de méthodes de simulations discrètes.

1.1 Méthode collisionnelle (*Event Driven*)

La description d'un contact solide-solide entre deux grains est compliquée. Nous sommes alors tentés de schématiser les constituants des matériaux granulaires par des sphères dures. Le qualificatif *dur* ne signifie pas que les chocs sont parfaitement élastiques, mais traduit plutôt l'absence d'interpénétration ou de déformation des sphères au moment du choc, qui doit être infiniment bref. La déperdition de la quantité de mouvement est contenue dans le coefficient de restitution e . Cette méthode collisionnelle, en anglais *Event Driven*, qui se traduit par *dirigée par les événements*, convient bien lorsque les grains sont très agités et interagissent par collisions binaires et instantanées, on parle alors de régime collisionnel [16]. Supposons que les vitesses et les positions des particules sont connues au temps t . Alors, il est possible pour chaque paire de particules de déterminer si elles se rencontreront et à quel instant. Le principe de ce type de simulation consiste à prédire l'instant où se produira la prochaine collision et quelles particules seront impliquées, et ensuite à incrémenter le temps et la position des particules jusqu'à cet instant. Les vitesses initiales de deux particules sont notées $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$ et leurs vitesses après le choc $(\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2)$. Le

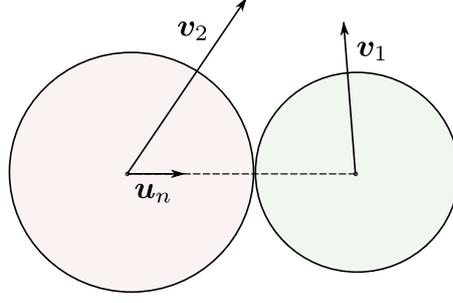


FIGURE 1-1 – Collision binaire entre deux grains sphériques parfaitement rigides

coefficient de restitution e , appelé également coefficient d'inélasticité, est défini par

$$(\mathbf{v}'_2 - \mathbf{v}'_1) \cdot \mathbf{u}_n = -e(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{u}_n, \quad (1.1)$$

où \mathbf{u}_n est le vecteur unitaire de la direction normale joignant les centres des deux particules comme schématisé dans la figure 1-1.

Les règles d'une collision instantanée sont données par les équations :

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \frac{m_{\text{eff}}}{m_1}(1 + e)[(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{u}_n]\mathbf{u}_n, \quad (1.2)$$

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 - \frac{m_{\text{eff}}}{m_2}(1 + e)[(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{u}_n]\mathbf{u}_n, \quad (1.3)$$

où m_1 et m_2 sont les masses respectives des particules impliquées dans la collision. La masse effective est définie par

$$m_{\text{eff}} \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (1.4)$$

Dans le cas où les particules ont des masses identiques, leurs vitesses respectives après collision se réduisent aux expressions

$$\mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \frac{1 + e}{2}[(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{u}_n]\mathbf{u}_n, \quad (1.5)$$

$$\mathbf{v}'_2 = \mathbf{v}_2 - \frac{1 + e}{2}[(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \cdot \mathbf{u}_n]\mathbf{u}_n. \quad (1.6)$$

Les équations 1.2 et 1.3 sont alors appliquées aux deux particules de la paire, puis on répète cette opération pour chercher quand et où aura lieu la prochaine

collision. L'incrément de temps dans la simulation n'est donc pas constant, la simulation avançant de collision en collision. Cette méthode a été beaucoup utilisée pour étudier les problèmes de refroidissement de gaz granulaires dissipatifs [16]. Notons que lorsque le milieu devient très dense, les collisions deviennent alors de plus en plus fréquentes, le taux de collisions diverge dans ce cas, ce qui diminue l'incrément de temps et peut rendre impossible le déroulement de la simulation.

1.2 Méthode de dynamique des contacts (DC)

En se basant essentiellement sur l'hypothèse de sphères parfaitement rigides, la méthode de dynamique des contacts est moins intuitive surtout quant à l'implémentation de la loi de Coulomb du frottement solide-solide sans régularisation. Le contact entre deux particules est donc décrit par deux lois non régulières: la règle de non-interpénétrabilité qui stipule que la force normale entre deux particules est nulle si il n'y a pas de contact et indéterminée dans le cas contraire, et la règle de Coulomb qui stipule que la force tangentielle est égale au coefficient de friction que multiplie la force normale si la vitesse tangentielle relative au contact est non nulle et inférieure si elle est nulle. La méthode de la dynamique des contacts est basée sur la résolution implicite des équations de mouvement qui permet, à chaque pas de temps, de déterminer un ensemble de forces de contact vérifiant ces règles non régulières et compatibles avec les équations de la dynamique. La grande force de cette méthode est qu'elle permet de rendre compte à la fois de collisions instantanées, de contacts de longue durée et de collisions multiples [2]. Pour un exposé explicite et détaillé de cette technique, qui n'est pas vraiment adaptée à la problématique de cette thèse, nous renvoyons le lecteur intéressé vers la thèse de Gaël Combe [13] où toute une section lui est consacrée.

1.3 Dynamique moléculaire (DM)

Contrairement aux deux méthodes citées précédemment, les algorithmes de la dynamique moléculaire se basent sur le principe des sphères molles. Historiquement,

cette technique fut développée pour réaliser des simulations de systèmes liquides et gazeux en analysant les mouvements individuels des atomes ou molécules [17]. L'application de cette méthode aux milieux granulaires a été proposée par Cundall et Strack [18]. Dans le cas particulier des milieux granulaires, cette méthode de dynamique moléculaire considère donc les sphères déformables et les particules interagissent lors de chocs décrits par des lois de répulsion et de frottement. Les interactions de frottement et le mécanisme de restitution interviennent uniquement lorsque les sphères s'interpénètrent. Dans cette méthode, les trajectoires individuelles sont calculées explicitement en intégrant les équations de mouvement. Avec les moyens de calculs modernes, cette méthode s'est développée de façon importante, elle bénéficie d'une bibliothèque très riche en algorithmes, elle est probablement la plus utilisée aujourd'hui pour les simulations des milieux granulaires. Malgré le fait que cette technique soit arrivée à une certaine maturité, elle reste sujette à quelques critiques. La modélisation des frottements est un point très délicat et tout à fait discutable.

1.3.1 Algorithme de base de la DM

La meilleure introduction à la méthode de dynamique moléculaire est de considérer un programme simple. L'algorithme schématique ci-dessous permet de saisir la structure du programme et d'illustrer les principales caractéristiques de la méthode de DM. Le programme est construit de la façon suivante:

1. L'initialisation positionne les grains et leur donne des vitesses de rotation et de translation initiales.
2. Les forces et les moments agissant sur chaque grain sont calculées (gravité, chocs, frottement).
3. Les équations du mouvement sont intégrées de façon simultanée pour l'ensemble des grains.
4. On enregistre les grandeurs utiles (positions, vitesses, forces, ...)

Les étapes 2 à 4 sont répétées jusqu'à atteindre la durée désirée de la simulation.

En présence d'un champ gravitationnel \mathbf{g} , les grains ont des accélérations de translation et de rotation déterminées en intégrant numériquement la deuxième loi de la dynamique newtonienne en utilisant, par exemple, l'algorithme de Verlet [17, 19]. Les forces et les moments agissant sur une particule i de masse m_i sont:

$$\mathbf{F}_i^{\text{total}} = m_i \mathbf{g} + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t, \quad (1.7)$$

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\text{total}} = -\frac{1}{2} \sum_j \mathbf{r}_{ij}^n \times \mathbf{F}_{ij}^t, \quad (1.8)$$

où l'indice j est itéré sur tous les grains en contact mécanique avec le grain i . Un grain de diamètre $d_i = 2R_i$ est repéré par le vecteur position \mathbf{r}_i . Les exposants n et t représentent, respectivement, les composantes *normale* et *tangentielle* de la force de contact. Les forces \mathbf{F}^n et \mathbf{F}^t sont fonctions de la position relative des particules mais aussi de leur vitesse relative. Elles ont chacune une composante conservative (élastique) et une autre dissipative (visqueuse). Les forces de contact normale et tangentielle s'écrivent comme suit [20]:

$$\mathbf{F}^n = f(\delta/d)(k_n \delta + \gamma_n v_n) \mathbf{u}_n, \quad (1.9)$$

$$\mathbf{F}^t = f(\delta/d)(k_t \xi + \gamma_t v_t) \mathbf{u}_t, \quad (1.10)$$

où $\delta \equiv R_i + R_j - |r_i - r_j|$ est la distance de chevauchement ou d'interpénétration, $k_{n,t}$ et $\gamma_{n,t}$ sont les constantes d'élasticité et de viscoélasticité définies ci-dessous. Dans ce travail, nous prenons la fonction $f(x) = 1$ qui correspond au modèle ressort-amortisseur linéaire ou hookien (*Linear Spring-Dashpot Model*). Il est toutefois fréquent et d'usage de choisir $f(x) = \sqrt{x}$, ce qui correspond au modèle hertzien de sphères viscoélastiques. Le vecteur unitaire de la direction normale ou radiale est défini par

$$\mathbf{u}_n = \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (1.11)$$

\mathbf{u}_t est son équivalent tangentiel. v_n et v_t sont, respectivement, les amplitudes des composantes normale et tangentielle de la vitesse relative au niveau du contact

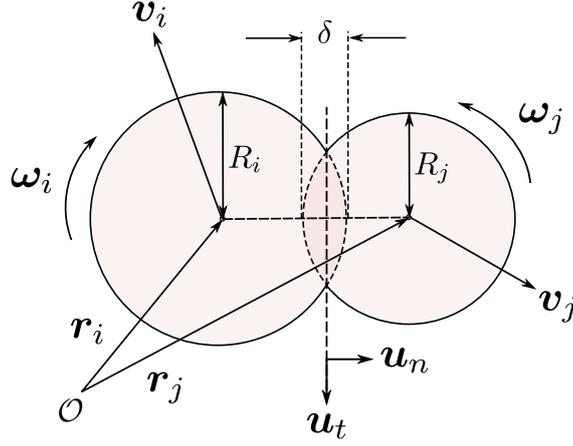


FIGURE 1-2 – Collision entre deux sphères molles

mécanique:

$$\mathbf{v}_n = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{u}_n \mathbf{u}_n, \quad (1.12)$$

$$\mathbf{v}_t = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j - \mathbf{v}_n + \frac{1}{2}(d_i \boldsymbol{\omega}_i + d_j \boldsymbol{\omega}_j) \times \mathbf{u}_n, \quad (1.13)$$

avec \mathbf{v}_i et $\boldsymbol{\omega}_i$ qui représentent, respectivement, les vitesses linéaire et angulaire de la particule i . Nous pouvons ainsi définir un vecteur unitaire tangentiel $\mathbf{u}_t \equiv \mathbf{v}_t/v_t$.

Nous notons par ξ le déplacement relatif élastique dans la direction tangentielle entre deux particules en contact, il est calculé en intégrant la vitesse relative tangentielle durant la durée de vie d'un contact formé à l'instant t_0 :

$$\xi = \int_{t_0} v_t(t') dt'. \quad (1.14)$$

Le taux de variation du vecteur déplacement élastique tangentiel $\boldsymbol{\xi}$, pris nul au début du contact, est donné par

$$\frac{d\boldsymbol{\xi}}{dt} = \mathbf{u}_t - \frac{(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{u}_{ij}) \mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^2}. \quad (1.15)$$

Il est connu que les forces de frottement sec présentent une irrégularité, ou plutôt une indétermination, si nous ne connaissons pas l'histoire du contact [3]. Une régularisation impose un seuil statique supérieur pour rester en conformité avec la loi de Coulomb, caractérisé par un frottement local ou microscopique μ .

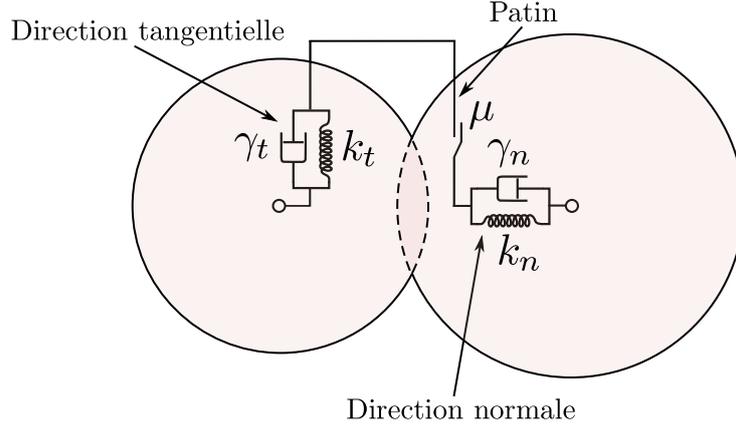


FIGURE 1-3 – Modèle d’interaction viscoélastique sur les deux directions normale et tangentielle

Ce seuil nous impose de tronquer ξ si nécessaire pour satisfaire la condition

$$|\mathbf{F}_{ij}^t| < \mu |\mathbf{F}_{ij}^n|. \quad (1.16)$$

Lorsque deux grains entrent en collision, le modèle de forces ressort-amortisseur linéaire garde ces derniers en contact durant une durée finie avant qu’ils ne se séparent de nouveau. Nous avons vu précédemment dans la méthode collisionnelle que le rapport des vitesses relatives normales avant et après le choc définit un coefficient de restitution normal e_n relié directement à γ_n par [20]:

$$e_n = \exp\left(-\frac{\gamma_n}{2m_{\text{eff}}}t_n\right), \quad (1.17)$$

et

$$t_n = \pi \left(\frac{k_n}{m_{\text{eff}}} - \left(\frac{\gamma_n}{2m_{\text{eff}}} \right)^2 \right)^{-1/2} \quad (1.18)$$

est la durée de la collision. m_{eff} est la masse effective définie par l’équation (1.4). De même, il est possible de définir un coefficient de restitution tangential e_t pour les vitesses relatives tangentielles. Les coefficients de restitution e_n et e_t fixent les valeurs des paramètres d’interaction γ_n et γ_t . Nous choisissons pour ces derniers des valeurs qui correspondent à des billes de verre usées [21] comme indiqué dans la Table 1.1.

La valeur de la raideur du ressort est en principe déterminée par les propriétés

Paramètre	symbole	grain/grain	grain/base	unités
Constante d'élasticité	k_n	2×10^5	2×10^5	mg/d
Restitution normale	e_n	0.972	0.8	
Restitution tangentielle	e_t	0.25	0.35	
Frottement microscopique	μ_p	0.5	0.5	

TABLE 1.1 – Paramètres d’interaction utilisés dans les simulations. La masse de la particule m , son diamètre d et l’accélération de la pesanteur g sont utilisés pour renormaliser les paramètres du matériau et donc sont posés égaux à l’unité. Une polydispersité dans la taille des grains de l’ordre de $\pm 20\%$ a été introduite afin d’éviter toute cristallisation.

du matériau étudié. Un lien avec le module de Young Y et le coefficient de Poisson ν est possible pour les contacts hertziens. Pour les modèles linéaires, par contre, nous sommes amenés à faire des approximations ad hoc [22]. Pour ce dernier modèle, en égalisant les temps de contact normal et tangentiel, nous obtenons une relation entre k_n et k_t qui s’écrit:

$$7k_t(\pi^2 + (\ln e_n)^2) = 2k_n(\pi^2 + (\ln e_t)^2). \quad (1.19)$$

Cette relation est différente de l’usuelle $k_t/k_n = 2/7$ pour des coefficients de restitutions e_n et e_t égaux. Nous employons une valeur classique de la littérature : $k_n = 2 \times 10^5 mg/d$ (voir Table 1.1) [22, 23]: . Cette valeur est celle de particules molles plutôt que de billes de verre réelles, mais elle a le mérite de permettre des simulations plus rapides. Il est très important d’utiliser des valeurs réalistes des coefficients k_n ou k_t dans le but d’obtenir des durées de collisions réalistes. Certains effets parasites peuvent apparaître si les valeurs de ces paramètres sont mal choisies, d’où la nécessité d’avoir recours à des tests au préalable avant de se lancer dans les calculs.

Nous choisissons une valeur unique $\mu_p = 0.5$ pour les coefficients de frottement grain-grain et grain-substrat, cette valeur correspond à des valeurs standards rencontrées dans la littérature et qui correspondent à un frottement plutôt statique que dynamique [24, 25, 26]. Notons enfin, que les mesures dans nos simulations sont exprimées en unités adimensionnées en choisissant le diamètre de la particule d , sa masse m et l’accélération de la pesanteur g égaux à l’unité.

Il est important de rappeler que la liste des lois de contact solide-solide pour les efforts normaux et tangentiels est riche, on y trouve même des modèles rhéologiques tenant compte de la cohésion entre grains [27]. Choisir une loi de contact par rapport à une autre n'est pas chose aisée. Dans une étude comparative, Schäfer et ses collaborateurs [20] ont conclu qu'il n'existe pas de loi de contact meilleure qu'une autre, le plus important est de se laisser guider par le type de simulation que l'on souhaiterait réaliser: statique, écoulement, etc. . .

1.3.2 Optimisation du calcul des forces: liste de Verlet

L'algorithme de DM décrit dans 1.3.1 est assez complet, seulement, il reste inefficace d'un point de vue temps de calcul. L'efficacité de n'importe quel programme de DM se mesure principalement par l'efficacité avec laquelle les forces agissant sur les particules sont évaluées. Dans la simulation d'un système contenant $N = 1000$ particules, à chaque pas de temps, toutes les paires possibles de particules doivent être considérées, soit $N(N - 1)/2 \approx 500\,000$ calculs de forces sont nécessaires. Dans le cas d'interactions à courte portée, la majorité des calculs de ces forces est inutile puisque les particules sont très éloignées les unes des autres. Pour des particules de tailles du même ordre, chaque particule ne peut être en contact avec plus de 6 autres particules. Ainsi, à peu près, seulement $3N = 3\,000$ calculs de forces sont nécessaires. Dans le cas des forces utilisées dans ce travail et citées dans 1.3.1, plus d'une centaine de paires sont évaluées inutilement. Ceci nous pousse à trouver des astuces qui réduisent le nombre de paires de particules à évaluer dans le calcul des forces. Puisque dans les milieux granulaires les forces sont de très courte portée, le calcul des forces peut être restreint aux paires de particules qui sont proches voisines.

Décider quelles particules sont proches voisines n'est cependant pas trivial du tout puisqu'il faut absolument tenir compte de toutes les paires de particules qui sont proches, autrement si une seule particule est omise des calculs, des conséquences désastreuses peuvent impacter la validité de la simulation. L'idée naïve de vérifier simplement si toutes les particules sont proches nécessite elle aussi quelques

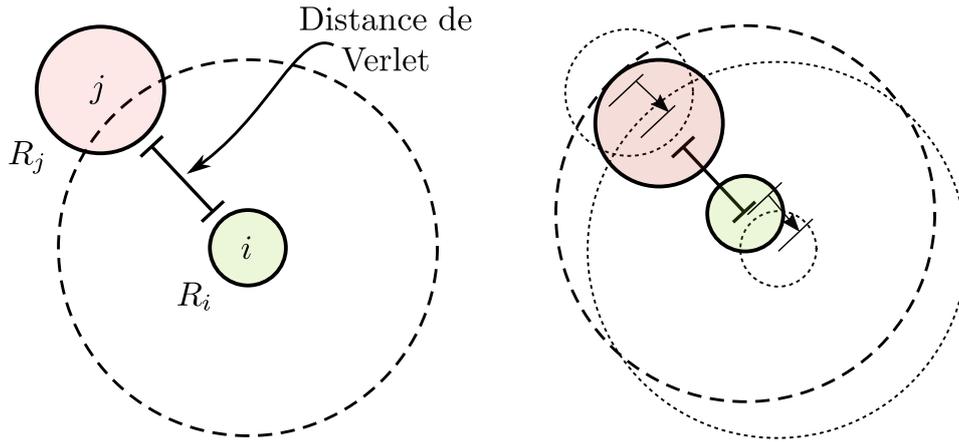


FIGURE 1-4 – Dans la figure de gauche, les grains i et j ne sont pas considérés comme voisins puisque la séparation entre leurs surfaces est plus grande que `distance_de_verlet`. Le rayon du cercle en traits discontinus est $R_i + R_{\max} + \text{distance_de_verlet}$. À droite, nous présentons le cas idéal où les deux grains se rapprochent frontalement à la même vitesse. Aussitôt que l'un des grains ait parcouru la distance $\text{distance_de_verlet}/2$ (flèches), la liste de Verlet doit être reconstruite. Les particules i et j sont reconnues maintenant comme voisines. [15]

chose comme 500 000 calculs ! Afin de surmonter ce nouveau problème, plusieurs algorithmes ont été proposés depuis l'avènement des techniques de la DM, tels que *la liste de Verlet*, *Linked Cell* ou même *Lattice algorithm* [28, 19, 15].

Nous nous intéresserons ici à la liste de Verlet qui est basée sur une propriété simple de la dynamique des particules : le voisinage d'une particule change très lentement, ainsi deux particules voisines le resteront, au moins, pour quelques pas de temps postérieurs supplémentaires. Au moment de l'initialisation de la simulation, les relations de voisinages entre particules sont déterminées, la distance entre les grains proches voisins est évaluée. Deux particules sont considérées comme proches voisines si la distance séparant leurs surfaces respectives est inférieure à une distance de référence appelée `distance_de_verlet`, voir Fig 1-4. Dans le cas de grains parfaitement sphériques, comme dans ce travail, ce critère s'écrit:

$$(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| - R_i - R_j) < \text{distance_de_verlet}$$

Pour chaque grain, il existe une liste dite de Verlet dans laquelle tous les voisins de ce grain sont enregistrés. Au cours de la simulation, les configurations de voisinage changent, il est alors nécessaire de mettre à jour les listes de Verlet régulièrement en se basant sur un critère simple : les listes sont reconstruites lorsque la parti-

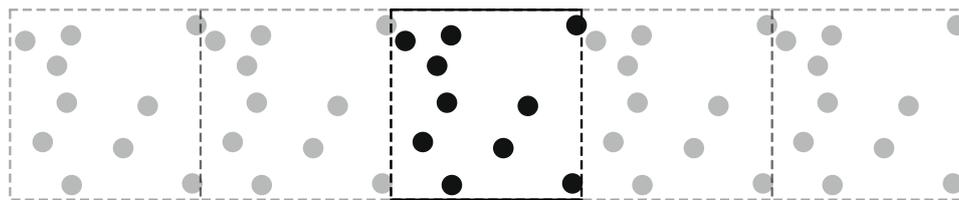


FIGURE 1-5 – La zone de simulation (en noir) peut être répétée périodiquement (en gris) sur une seule dimension.

cule la plus rapide ait parcouru la distance `ratio_de_verlet × distance_de_verlet`, où `ratio_de_verlet` > 0.5 . Le choix d’une valeur optimale de ce dernier paramètre nécessite quelques tests préliminaires. Enfin, les grains qui ne font pas partie de la liste de Verlet d’un grain donné, c’est-à-dire qui ne sont pas considérés comme des voisins de ce dernier, ne seront jamais inclus dans le calcul des forces.

1.3.3 Conditions aux bords périodiques

Des systèmes de taille finie ou infinie restent très dissemblables, et la réponse à la question de savoir qu’elle est la taille minimale d’un système relativement petit pour qu’il puisse fournir des résultats représentatifs d’un système infini ne fait pas l’unanimité.

Des conditions aux bords périodiques sont introduites afin de mimer des systèmes très grands, voire infinis. Ceci revient à dupliquer à l’infini, dans une direction ou mêmes plusieurs, une boîte de simulation primaire, comme indiqué schématiquement dans la figure 1-5. Deux conséquences s’en suivent de cette périodicité artificielle. La première impose à une particule qui sort du volume de simulation élémentaire de rentrer immédiatement dans celui-ci par la face opposée. La deuxième fait que des particules très proches des bords peuvent interagir avec d’autres particules également proches des bords, mais qui se trouvent du côté opposé, induisant un effet de recouvrement qui peut avoir des conséquences désastreuses dans le cas d’interactions à longue portée, comme c’est le cas des forces électrostatiques où chaque particule du volume élémentaire possède un nombre infini de copies avec lesquelles elle peut interagir. Dans le cas des systèmes granulaires, ce genre de problème n’est pas pertinent puisque les interactions se font uniquement par contacts

mécaniques, il suffit que la taille du volume élémentaire soit juste supérieure au diamètre d'un grain ! Ceci dit, lorsque le volume de simulation élémentaire est trop petit, des corrélations apparaissent entre les faces opposées de ce dernier, les structures spatiales peuvent avoir une taille de l'ordre de la taille du système lui-même. Dans ce travail, des précautions ont été prises afin d'éviter ces problématiques en effectuant des tests sur les effets des conditions aux bords et qui sont exposés dans les sections 2.4 et 3.3.

L'effet de recouvrement dû aux conditions aux bords périodiques doit être considéré dans l'intégration des équations de mouvement et aussi dans l'évaluation des interactions. À la suite de chaque pas d'intégration, les coordonnées des particules sont examinées, si nous trouvons qu'un grain est sorti du volume élémentaire, ces coordonnées doivent être ajustées de telle manière à le ramener à l'intérieur de ce dernier. Si, par exemple, la coordonnées y est confinée entre les extensions $-L_y/2$ et $L_y/2$, où L_y est la taille transverse du système, le test pour une particule i s'écrit:

- Si $y_i \geq L_y/2$, $y_i = y_i - L_y$;
- Sinon, si $y_i < -L_y/2$, $y_i = y_i + L_y$.

Enfin, notons qu'il est parfois utile de tenir compte également de l'effet de recouvrement durant l'analyse des données d'une simulation [28].

Chapitre 2

Méthodologie

2.1 Système étudié

Nous réalisons des simulations d'éléments discrets (DEM) en 3D sur des systèmes modèles polydisperses ($\pm 20\%$), composés de sphères de diamètres distribués uniformément autour de la valeur moyenne d et de densité de matière ou masse volumique uniforme ρ . La boîte de simulation est rectangulaire ($900d \times 10d \times 30d$) avec des conditions aux bords périodiques le long de la direction y , les bords sont libres le long de l'axe des x (pas de murs rigides), elle est limitée dans la direction z par une base et un plafond ouvert. La base est faite bosselée ou bien lisse, nous utilisons quatre bases distinctes : trois bosselées (rugueuses) et une qui est lisse. Les premières sont réalisées en fixant des billes sphériques sur les nœuds d'un réseau carré (voir l'appendice A.1). Le diamètre moyen de ces billes est $d_s = \lambda d$, avec $\lambda = 0.25, 0.5$ et 1 . Le cas lisse correspond à $\lambda = 0$. La plateforme est vibrée horizontalement en lui imposant un mouvement sinusoïdal $x(t) = a \sin(\omega_0 t)$, où a et ω_0 sont, respectivement, l'amplitude et la pulsation de la vibration. En optant pour les mêmes choix que dans l'expérience de Sanchez et al. [11], nous posons $a = d$ et utilisons une gamme de pulsation de $0.5 \sqrt{g/d}$ à $2.5 \sqrt{g/d}$, où g est l'accélération de la pesanteur. En termes de l'accélération réduite $\Gamma = a\omega_0^2/g$, nous explorons des valeurs allant de $0.4 g$ à $6 g$ pour cette dernière.

2.2 Préparation de la gouttelette

Nous menons des simulations numériques dans le but de reproduire l'expérience de l'étalement d'un dépôt granulaire par vibrations horizontales décrite dans [11]. Afin de construire la configuration initiale, nous plaçons à l'intérieur de la boîte de simulation deux parois transversales à des positions y symétriques par rapport au centre de la boîte de simulation et qui sont séparées d'une distance de $150d$. Nous remplissons en suite la boîte intérieure ainsi créée en versant dedans 47000 grains par pluviation au moyen d'une distribution aléatoire diluée à partir d'un réseau cubique simple (figure 2-1-(a)). Une fois que les grains ont sédimenté (figure 2-1-(b)), nous secouons vigoureusement toute la boîte de simulation à l'aide de vibrations horizontales avec une accélération réduite $\Gamma = 4.38$, durant un intervalle de temps $\Delta t = 130T$ où $T = 2\pi/\omega_0$ est la période de vibrations. Une fois le cycle des vibrations terminé et que le système s'est suffisamment relaxé (figure 2-1-(c)), nous écartons lentement les parois internes jusqu'à ce qu'elles atteignent les limites latérales de la boîte de simulation (figure 2-1-(d,e,f)). À la fin de ce processus, les parois transversales ne sont plus en contact avec la gouttelette granulaire et peuvent donc être supprimées en toute sécurité. Ainsi, nous obtenons un tas de grains avec deux facettes en pente et un sommet plat et qui mesure $220 \times d$ en largeur, $29 \times d$ en hauteur et $10 \times d$ en profondeur (figure 2-1-(g)). Enfin, nous schématisons par la figure 2-2 une gouttelette granulaire modèle utilisée dans nos simulations de DM. Les dimensions du volume élémentaire de la boîte de simulation sont également représentées.

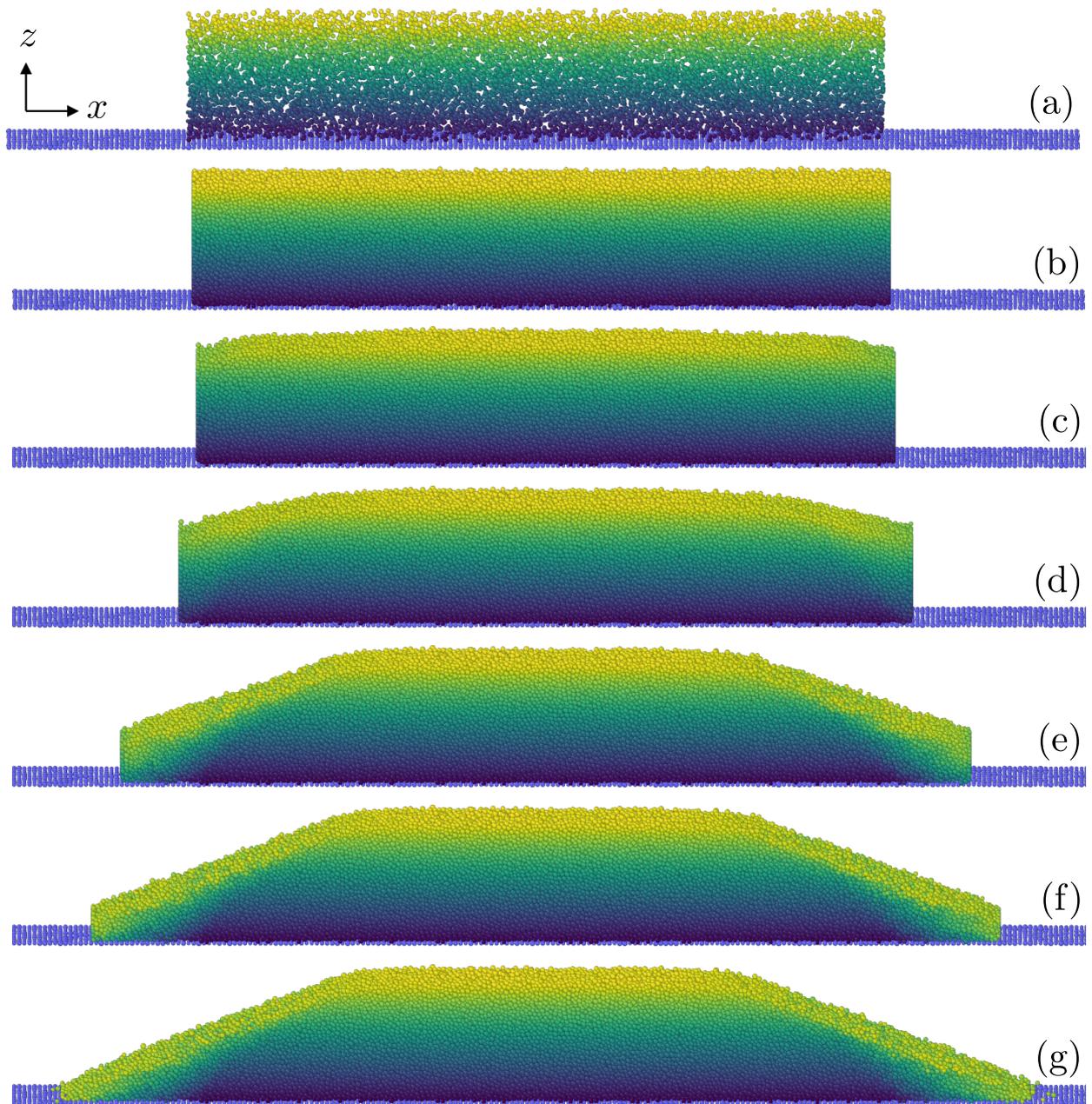


FIGURE 2-1 – Séquence des différentes étapes de la préparation de la gouttelette granulaire. (a) et (b) Début et fin de l'étape de remplissage du volume primaire par pluviation. (c) Arrêt des vibrations horizontales qui ont servi à compacter le dépôt initial, d'où l'aspect bombé de la surface du dépôt. (d), (e) et (f) Écartement des murs latéraux pour former la gouttelette. (g) Retrait des murs latéraux et obtention du dépôt final qui servira aux simulations d'étalement. Le code couleur représente la position z des grains à la fin de l'étape de remplissage.

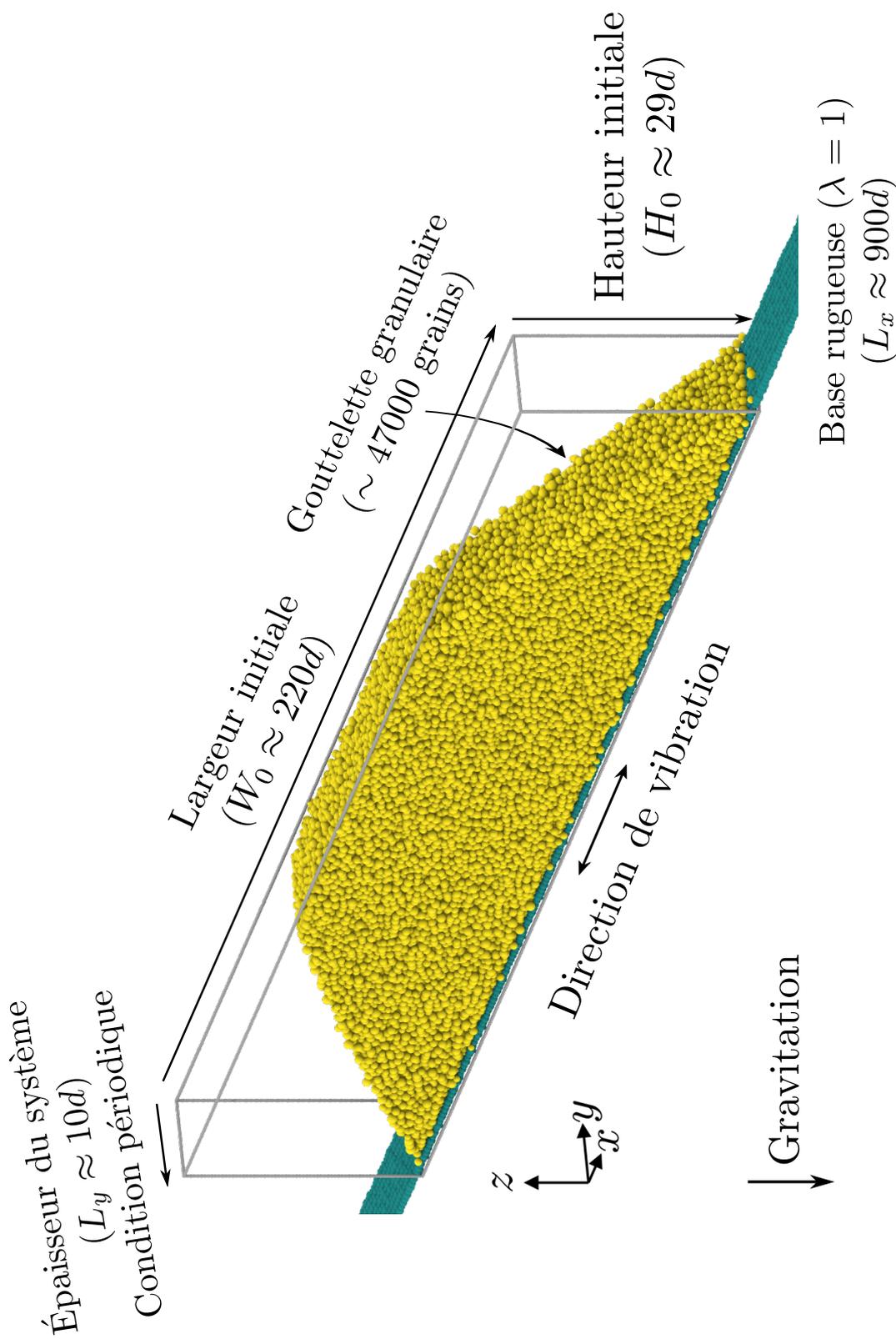


FIGURE 2-2 – Schéma représentatif de la gouttelette granulaire reposant sur un substrat bosselé et vibré horizontalement simulée par DEM et imitant l'expérience dans [11].

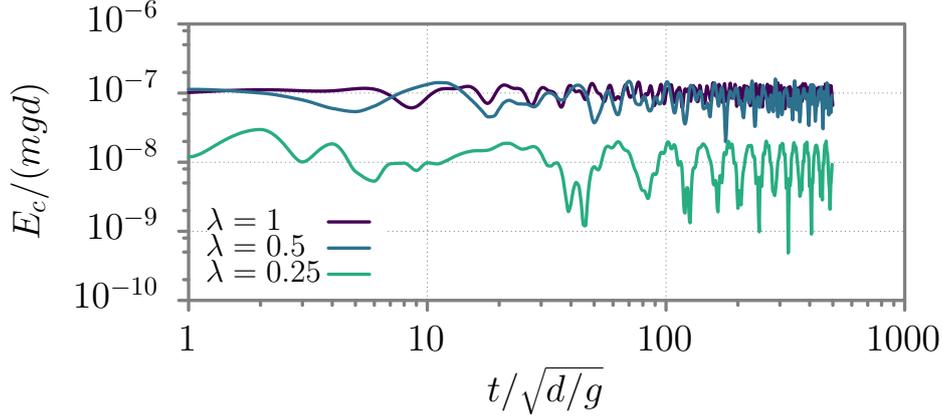


FIGURE 2-3 – Contrôle de l'énergie cinétique moyenne par particule lors de la phase de relaxation de la gouttelette sur trois substrats différents.

Notons que dans l'expérience menée dans [11], la surface au sommet de la préparation initiale ressemble à la toiture d'un chalet. Ceci est dû à un protocole de préparation différent dans lequel une boîte sans fond est d'abord remplie de grains de sable ou de verre, puis elle est secouée pour niveler le dépôt, avant qu'elle ne soit soulevée. Notre procédure de préparation est utilisée pour générer les configurations initiales pour toutes les simulations. Les empilements granulaires générés peuvent légèrement varier en fonction de la bosselure du substrat.

Après avoir obtenu une goutte granulaire et avant d'entamer le mouvement de vibrations de la base, nous laissons les différentes configurations initiales se relaxer suffisamment longtemps pour obtenir des empilements stables. Nous contrôlons cette étape en mesurant l'énergie cinétique des grains. Lorsque celle-ci est suffisamment stable et petite par rapport aux énergies typiques rencontrées, nous pouvons considérer l'empilement comme quasi-statique et est donc pris comme configuration initiale pour les expériences d'étalement. Les énergies cinétiques des empilements granulaires en état quasi-statique dépendent de l'interaction du tas avec le substrat et aussi de sa nature, ceci est visible dans la figure 2-3. Rappelons que la stabilité des empilements granulaires aussi dépend fortement de la nature des forces entre grains [29, 30].

Enfin, pour chaque bosselure basale qui correspond à différentes valeurs du paramètre λ , nous faisons tourner le même ensemble de simulations pour la gamme des accélérations réduites suivante $\Gamma = \{0.39, 0.49, 0.62, 0.80, 1.10, 1.58, 2.47, 4.39, 6.32\}$.

2.3 Choix du pas d'intégration de la dynamique moléculaire

Dans ce genre de simulations, il faut s'assurer que la dynamique lors d'une collision soit bien modélisée, ce qui impose de choisir un pas de temps beaucoup plus petit que le temps typique d'une collision. Une règle ad-hoc est de prendre le pas d'intégration $\Delta t_{\text{DM}} = t_n/50$, où t_n est le temps de contact normal [22]. Si les grains sont très durs, cette contrainte rendrait le calcul très coûteux, ce qui motive parfois un choix de particules beaucoup plus molles que la réalité. Une fois ce choix fait, il faut alors prendre soin de s'assurer que la raideur du contact ou les autres paramètres ne jouent pas un grand rôle dans l'étude que l'on réalise. Dans ce travail, l'influence de la nature des forces et des conditions aux limites périodiques sur la morphologie de la goutte granulaire soumise aux vibrations, mais aussi sur la dynamique sera analysée dans le chapitre 3.

Une manière de vérifier que le pas d'intégration choisi nous permet de reproduire l'essentiel de la physique, sans passer à côté d'évènements très rapides, ni sans sacrifice du temps de calcul, est de mesurer l'énergie cinétique moyenne par grain durant le processus d'étalement de la gouttelette granulaire correspondant à des pas d'intégration Δt_{DM} différents.

L'énergie cinétique par particule durant le processus d'étalement présente des oscillations qui reflètent les vibrations auxquelles est soumis le système comme représenté dans la figure 2-4 (E_c instantannée). Quand on s'intéresse à sa valeur moyenne, on voit bien que l'énergie cinétique passe par une phase transitoire où elle double de valeur brusquement, puis décroît pour se maintenir à une valeur constante dans un régime asymptotique comme on peut le voir dans la figure 2-4 (E_c moyenne). En choisissant deux pas d'intégration pour l'algorithme de la DM

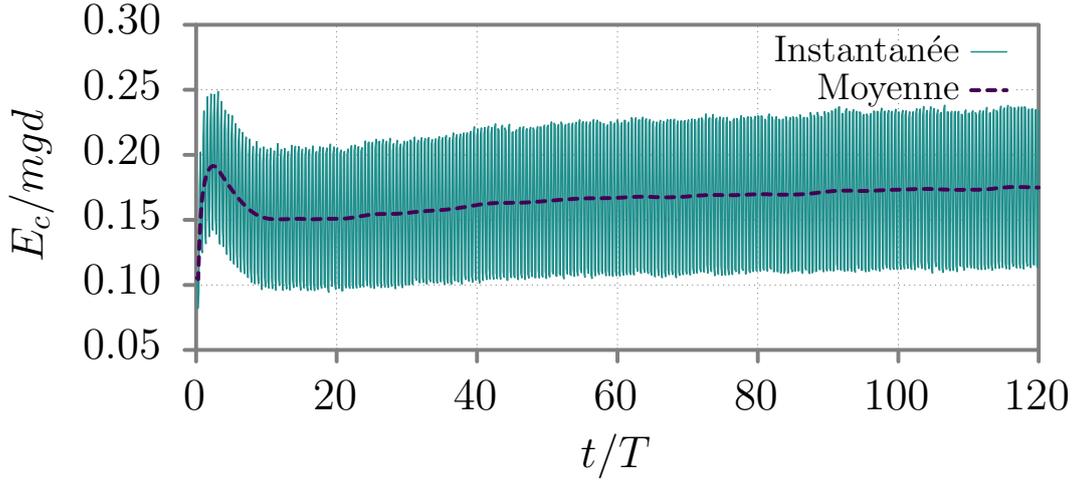


FIGURE 2-4 – En trait continu, les oscillations de l'énergie cinétique par particule qui sont dues aux vibrations durant la phase d'étalement. En trait discontinu, la valeur moyenne de cette énergie.

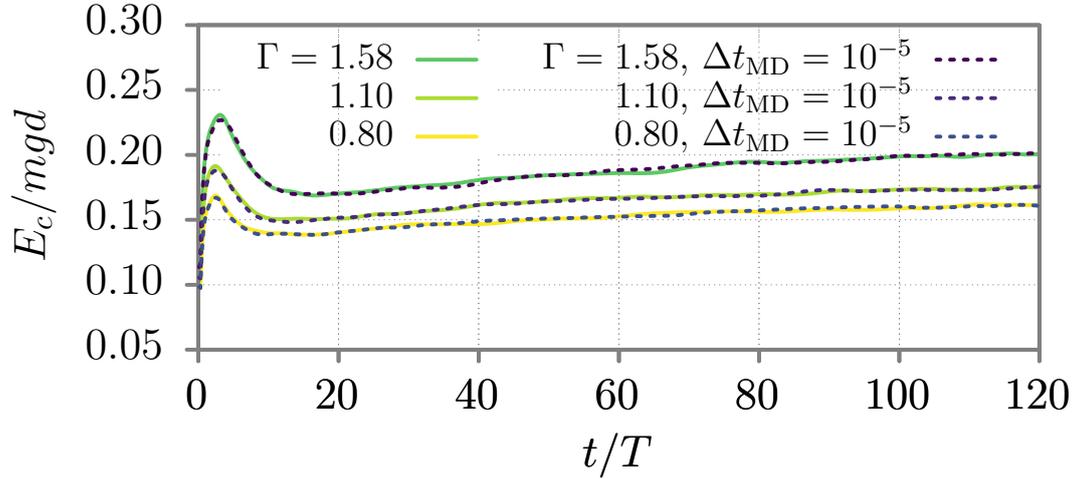


FIGURE 2-5 – En traits continus, l'énergie cinétique par particule pour $\Delta t_{DM} = 10^{-4}$. En traits discontinus, la même grandeur dans le cas d'un pas d'intégration $\Delta t_{DM} = 10^{-5}$. Ici, la bosselure basale est fixée à $\lambda = 1$ et Γ est l'accélération réduite du substrat.

qui diffèrent d'un ordre de grandeur, $\Delta t_{DM} = 10^{-4}$ et $\Delta t_{DM} = 10^{-5}$, et en étalant la même gouttelette granulaire avec le même jeu d'accélération réduite, nous n'observons aucune différence dans l'évolution de l'énergie cinétique moyenne par particule. Voir la figure 2-5. Ainsi, avec une certaine assurance, nous choisissons pour l'ensemble des simulations réalisées dans cette thèse la valeur $\Delta t_{DM} = 10^{-4}$ [23].

2.4 Test des conditions aux bords périodiques

L'un des avantages des simulations du type DM est la possibilité de faire varier un grand nombre de paramètres. Afin de s'assurer du bon choix des dimensions du système étudié et du modèle des forces d'interaction, nous avons mené une série de tests comme il a été attesté dans la sous section 1.3.3. Dans un premier temps, nous avons gardé tous les paramètres de simulation identiques à ceux utilisés jusqu'ici à l'exception de l'épaisseur du système qui a été doublée, ainsi nous passons d'un système de largeur $L_y = 10d$ à $L_y = 20d$. Dans la gamme des taux d'accélération choisis, $\Gamma = 0.80, 1.10$ et 1.58 , l'évolution de l'énergie cinétique moyenne par particule est insensible à ce changement de taille comme le montre la figure 2-6. Dans la section 3.3, par une étude complémentaire, nous présentons également les effets de ces mêmes conditions aux bords sur la dynamique d'étalement de la gouttelette granulaire ainsi que sur la fraction volumique moyenne de celle-ci.

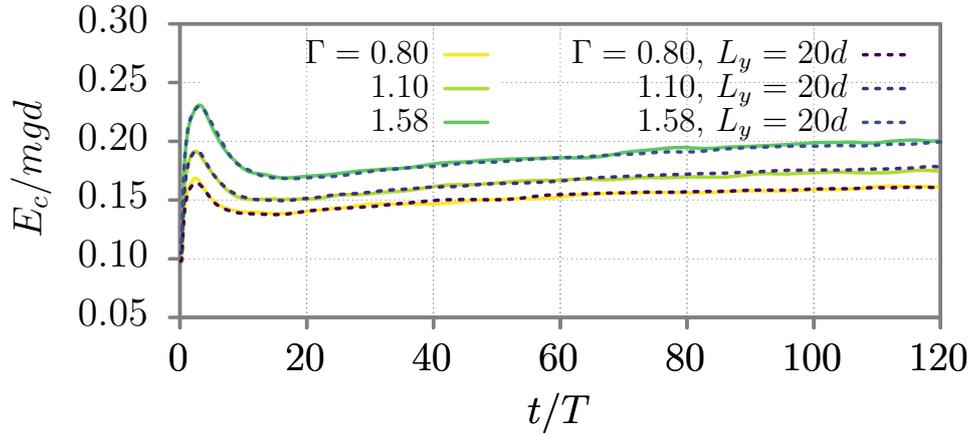


FIGURE 2-6 – Effet des conditions aux bords périodiques sur l'énergie cinétique moyenne par particule à différentes accélérations et à bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

Chapitre 3

Résultats et discussion

Les simulations présentées dans cette section sont basées sur la méthode de dynamique moléculaire (MD) présentée dans la section 1.3. En premier lieu, nous exposons les résultats uniquement dans le cas d'un coefficient de bosselure basale $\lambda = 1$, puis nous montrons les effets de la bosselure basale sur la morphologie et la dynamique d'étalement. À la fin, nous analysons les propriétés rhéologiques de la gouttelette granulaire durant le processus d'étalement.

3.1 Morphologie de la gouttelette

Il a été précisé dans la section 2.3 que la configuration initiale est un empilement granulaire ayant deux faces en pente et un sommet quasiment plat. En introduisant les vibrations, et après un régime transitoire qui dure environ $t = 3T$, la surface libre de la gouttelette s'arrondit. Le profil de la gouttelette granulaire est représenté dans la figure 3-2 à des instants différents pendant qu'elle s'étale sur une base forcée par des vibrations horizontales périodiques. Suite à ce régime transitoire, nous enregistrons le profil de la gouttelette à des intervalles de temps régulièrement espacés de $T/8$ mesurés en multiples de la période de vibration T . Les vibrations prennent fin une fois les queues de la gouttelette granulaire ont atteint les limites latérales de la boîte de simulation.



FIGURE 3-1 – Profils d'une gouttelette granulaire durant le processus d'étalement à une accélération réduite $\Gamma = 1.10$ sur un substrat avec une bosselure $\lambda = 1$. Les séquences chronologiques ont été enregistrées à des instants mesurés en unités de la période de vibration: $t/T = 1/8$ (haut), $t/T = 3$ (milieu) et $t/T = 12$ (bas). Le gradient des couleurs codifie la position z des grains. Ces représentations graphiques ont été réalisées avec The Open Visualisation Tool OVITO [31]

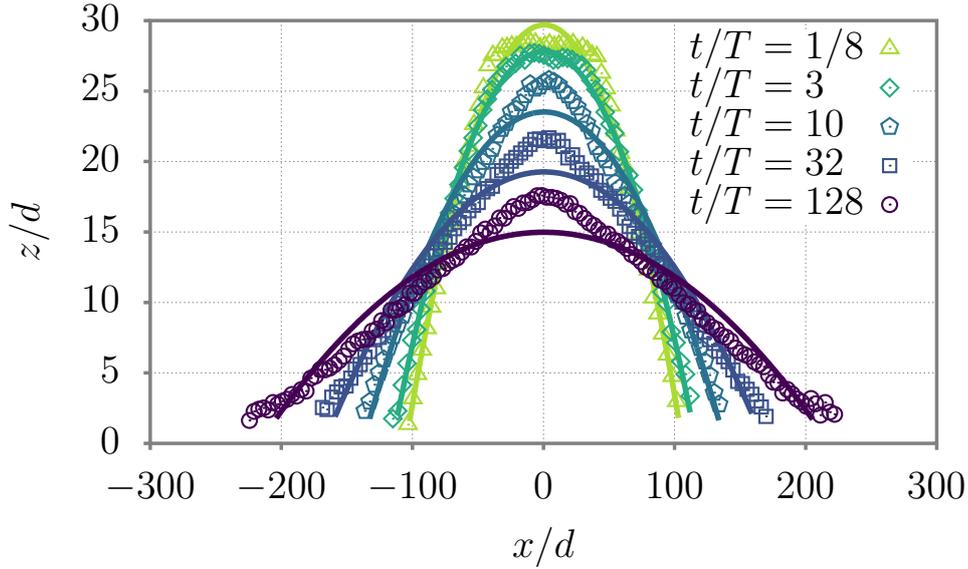


FIGURE 3-2 – Profils bidimensionnels moyens (symboles creux) d’une gouttelette granulaire à des instants différents avec les meilleurs ajustements paraboliques associés (lignes solides) pour $\Gamma = 0.39$ et $\lambda = 1$. Notons l’écart important entre les échelles verticale et horizontale.

En raison de l’invariance par symétrie le long de l’axe y , nous concentrons nos efforts sur les propriétés morphologiques du profil unidimensionnel $z(x)$ de la gouttelette granulaire. À partir de ce dernier, il est aisé d’extraire la hauteur maximale $H(t)$ et la largeur latérale $W(t)$, puis d’étudier leur évolution temporelle. Pour se faire, nous extractons la surface libre de la gouttelette puis nous gardons son profil moyen projeté sur le plan xz (voir le code Python dans l’annexe A.2).

Dans la figure 3-2, nous représentons l’évolution dans le temps du profil unidimensionnel de la surface libre obtenu avec une accélération $\Gamma = 0.39$. Les lignes continues correspondent aux meilleurs ajustements (*fittings*) paraboliques des données numériques. Tout au début du processus d’étalement, alors que nous sommes encore dans le régime transitoire ($t/T = 1/8$), nous pouvons voir que le tas à une surface au sommet quasi-plate qui s’arrondit progressivement. L’empilement granulaire adopte alors une forme qui peut être aisément assimilée à un profil parabolique à l’instant $t = 3T$.

Plus tard, le profil de la gouttelette s’écarte significativement de la forme parabolique et présente plutôt un profil triangulaire. Ceci marque le premier écart notable avec les expériences menées dans [11] où l’empilement adopte plutôt un

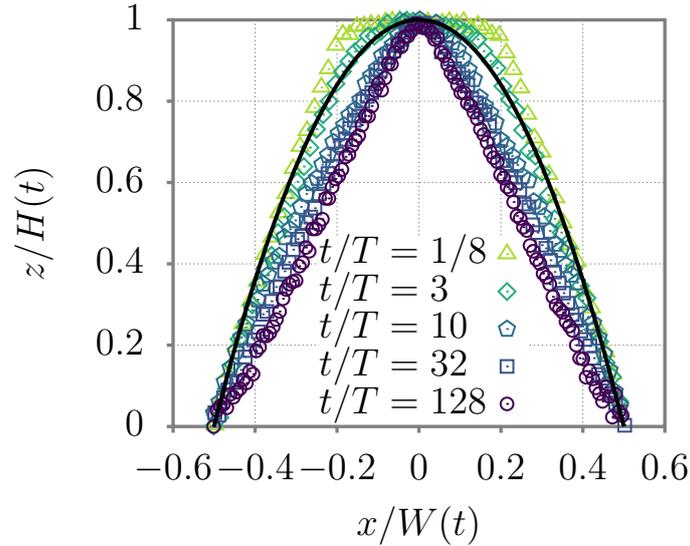


FIGURE 3-3 – Les profils de la gouttelette granulaire de la figure 3-2 sont normalisés ici par les valeurs instantannées de la largeur maximale W et la hauteur maximale H (symboles creux). La ligne solide noire représente une fonction parabolique normalisée $z(x) = 1 - (2x)^2$ ajoutée ici pour servir de repère.

profile parabolique tout au long du processus d'étalement. Il est important de signaler que l'échelle de la dimension verticale dans la figure 3-2 a été décuplée par rapport à son équivalent horizontal, raison pour laquelle les écarts par rapport aux profils paraboliques sont visuellement exagérés. Les profils redimensionnés respectivement, par rapport à leurs hauteur $H(t)$ et largeur $W(t)$ maximales, sont représentés dans la figure 3-3. Dans cette dernière, la transition d'un profile parabolique durant les premiers instants vers un profile triangulaire plus tard est clairement mise en évidence.

3.2 Dynamique d'étalement

Une des caractéristiques clés pour mieux comprendre la dynamique d'étalement d'une gouttelette granulaire est de quantifier le taux d'étalement en fonction de l'intensité des vibrations. Dans la figure 3-4, nous montrons l'évolution temporelle de la hauteur H et de la largeur W de la gouttelette granulaire en fonction de l'accélération réduite Γ . Comme on peut s'y attendre, la hauteur décroît dans le temps alors que la largeur augmente. Nous trouvons aussi que la taux d'étalement

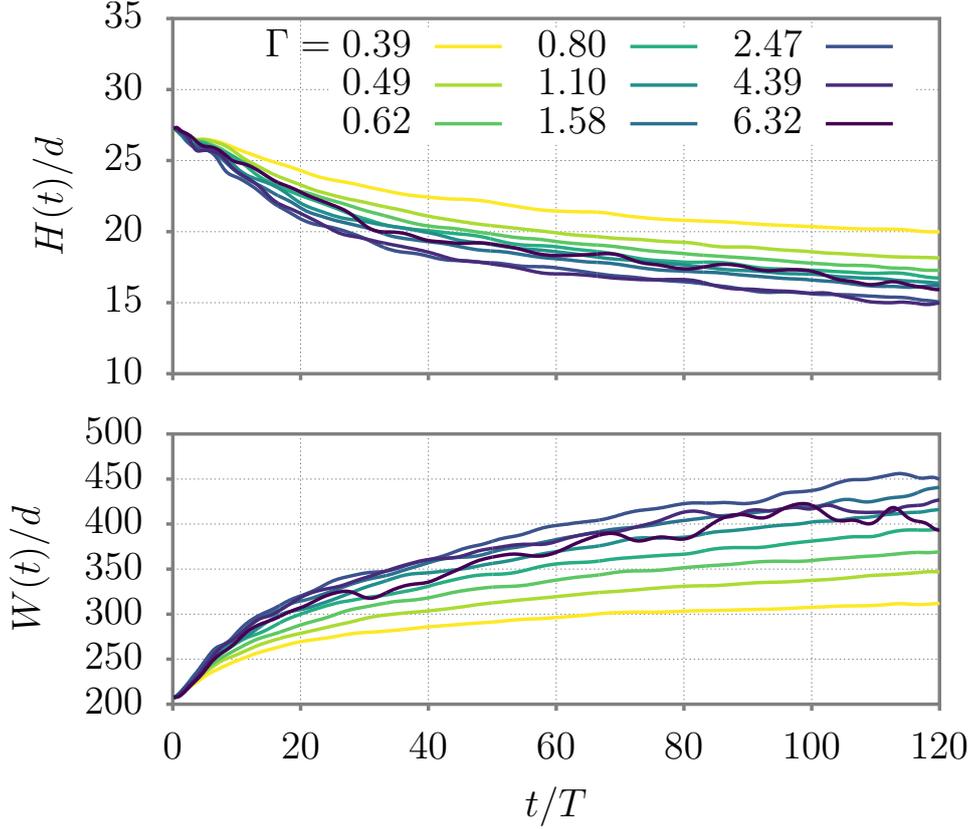


FIGURE 3-4 – Évolution temporelle de la hauteur de la gouttelette granulaire $H(t)$ et sa largeur $W(t)$ pendant qu'elle soit vibrée horizontalement sur un substrat bosselé ($\lambda = 1$) à différentes accélérations réduites Γ .

augmente avec une accélération croissante Γ . La forte corrélation apparente entre la hauteur et la largeur de la gouttelette granulaire indique que son volume reste quasiment constant. En d'autres termes, les processus de compaction et de décompaction restent marginaux. Nous reviendrons à ce point plus loin dans le présent travail en analysant l'évolution de la fraction volumique moyenne ϕ .

Il est important de mentionner le fait que durant les premiers instants du processus d'étalement, (i.e., $t \lesssim 5T$), les courbes $H(t)$ et $W(t)$ obtenues pour différentes valeurs de Γ se superposent toutes suivant une tendance unique. Ce régime transitoire semble être indépendant de l'énergie de vibrations injectée dans le système. En fait, ces états transitoires précoces correspondent à un processus de décompaction légère comme il sera discuté plus loin. À la suite de ce transitoire, l'efficacité de l'étalement est d'autant plus importante que l'accélération est grande, à l'exception de quelques accélérations extrêmes ($\Gamma = 4.39$ and 6.32), pour lesquelles le

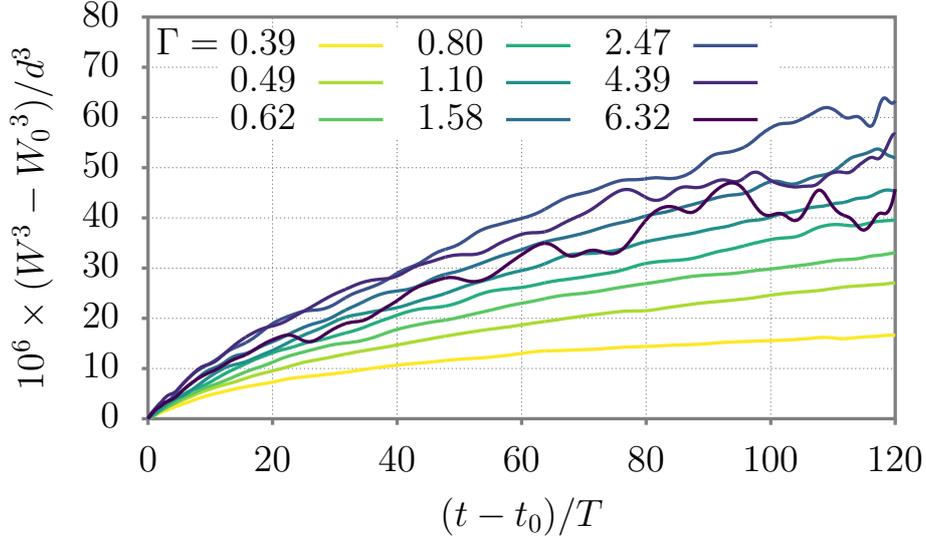


FIGURE 3-5 – Dynamique d'étalement d'une gouttelette granulaire sur un substrat bosselé ($\lambda = 1$) à l'instar du modèle proposé dans l'étude expérimentale de Sanchez et ses collaborateurs (figure 3d dans la référence) à différents taux d'accélération Γ

taux d'étalement sature, voire décroît même.

Dans les expériences de Sanchez et al. [11], il est reporté que la dynamique d'étalement est *sous-diffusive* et obéit à la loi d'échelle suivante:

$$W^3(t) - W^3(t_0) \sim t. \quad (3.1)$$

Afin de tester cette loi d'échelle, nous représentons l'évolution temporelle de la largeur relative $W^3(t) - W^3(t_0)$ comme dans la figure 3-5. Nous écartons la partie transitoire et posons comme origine du temps l'instant $t_0 = 5T$. On voit clairement que les courbes obtenues par DM n'ont pas une allure linéaire comme on pouvait s'y attendre selon les prédictions de la loi d'échelle tirée de l'expérience. Dans la figure 3-6, un graphique en log-log révèle plutôt que la dynamique d'étalement exhibe deux régimes très distincts de la forme:

$$W(t) - W(t_0) \sim t^{m,n}, \quad (3.2)$$

où m et n sont deux exposants distincts relatifs aux deux régimes d'étalement observés.

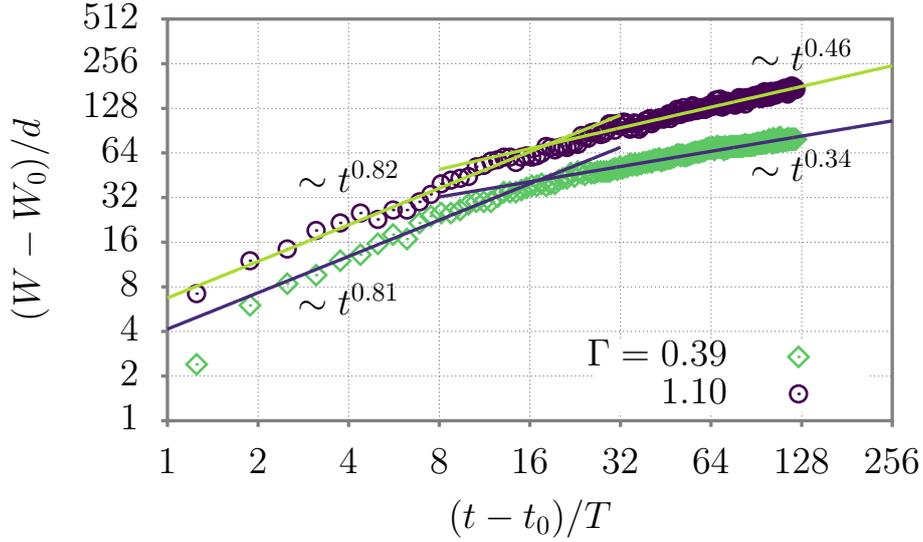


FIGURE 3-6 – Représentation en log-log de la largeur de contact de la gouttelette granulaire sur un substrat bosselé ($\lambda = 1$) pour des taux d’accélération $\Gamma = 0.39$ et 1.10 . Deux régimes d’étalement sont mis en évidence.

Le premier régime (i.e., $(t - t_0)/T \leq 16$) est *super-diffusif*: l’exposant m est de l’ordre de 0.8 . Le second régime est caractérisé par un exposant d’échelle $n < 0.5$, correspondant ainsi à une dynamique plus lente et donc à un étalement *sous-diffusif*. Les valeurs respectives de m et n obtenues pour les différents taux d’accélération Γ sont reportées dans la table 3.1. Nous observons une légère variation des exposants d’échelle avec le taux d’accélération: m varie de 0.61 à 0.81 , tandis que n prend des valeurs allant de 0.34 à 0.48 . Au définitif, il n’y pas une tendance de variation claire pour m et n en fonction de Γ .

À ce stade, il est important de souligner que le second régime sous-diffusif observé dans nos simulations est compatible avec celui observé dans les expériences de Sanchez et al. [11]. En effet, nous obtenons un exposant d’échelle proche de $1/3$.

Γ	0.39	0.49	0.62	0.80	1.10	1.58	2.47	4.39	6.32
m	0.81	0.70	0.76	0.78	0.82	0.72	0.71	0.73	0.61
n	0.34	0.40	0.42	0.44	0.46	0.47	0.48	0.40	0.43

TABLE 3.1 – Exposants critiques m (super-diffusif) et n (sous-diffusif à diffusif) tirés des lois d’échelle de l’étalement en log-log pour une bosselure basale $\lambda = 1$ et à différents taux d’accélération Γ .

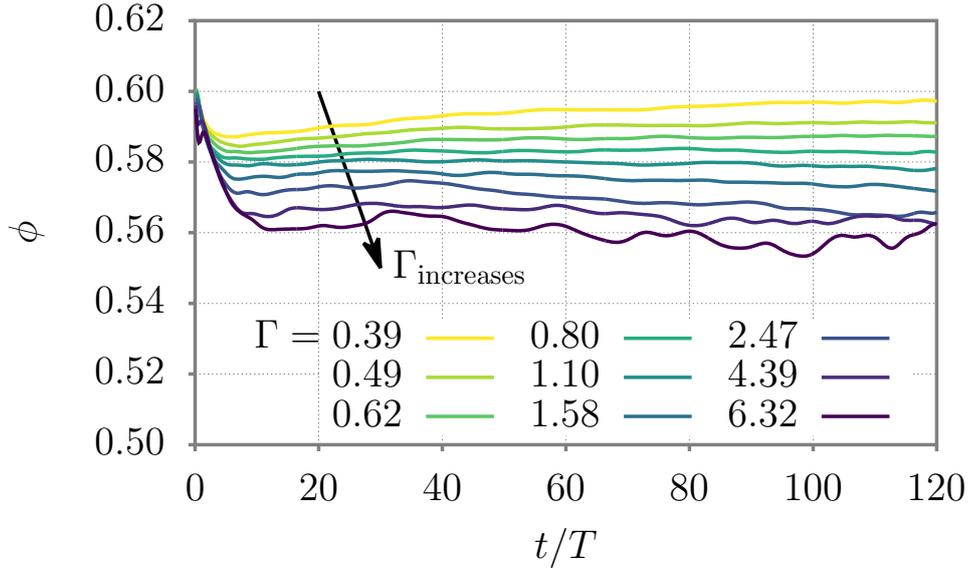


FIGURE 3-7 – Évolution de la fraction volumique ϕ moyennée sur l'épaisseur de la gouttelette granulaire dans le cas d'une bosselure $\lambda = 1$ à différents taux d'accélération Γ .

Un des avantages qu'offrent les simulations de DM par rapport à l'expérience et la mesure de propriétés dans le volume à l'image de la fraction volumique ϕ . Nous analysons donc ce paramètre qui pourrait évoluer au cours de l'étalement à cause des sollicitations extérieures. Le système étudié est invariant le long de la direction y , ce qui nous autorise à évaluer ϕ comme le rapport de deux surfaces $\phi = S_s/S_r$, où S_s est la surface d'intersection d'un plan vertical (xz) à une position y donnée avec l'ensemble tridimensionnel des sphères à cette même position, et S_r est l'aire de la surface de référence sous le profile de la gouttelette. La valeur de la fraction volumique ϕ est donc moyennée à travers l'épaisseur de la gouttelette le long de la direction y (voir le code Python dans l'annexe A.3). Dans la figure 3-7, nous représentons l'évolution temporelle de la valeur moyenne de la fraction volumique solide de la gouttelette. Dans le régime transitoire, (i.e., $t < 5T$), nous observons un processus de décompaction qui croit en intensité avec l'accélération: plus Γ est grand, plus cette décompaction est effective. À la suite du transitoire, la fraction volumique ϕ reste quasiment constante au cours du temps. Nous signalons également une légère recompaction de la gouttelette granulaire dans le cas des faibles accélérations ($\Gamma = 0.39$ et 0.49).

3.3 Effet des conditions aux bords périodiques

Les évolutions temporelles de la hauteur $H(t)$ et de la largeur $W(t)$ restent quasiment identiques à celles obtenues dans le cas d'un système d'épaisseur $L_y = 10d$ comme nous pouvons le voir dans les figures 3-8 et 3-9. Par contre, dans la figure 3-10, on voit bien que les fractions volumiques ϕ se sont décalées vers des valeurs légèrement supérieures quoique ces écarts restent tout de même contenus ($< 7\%$).

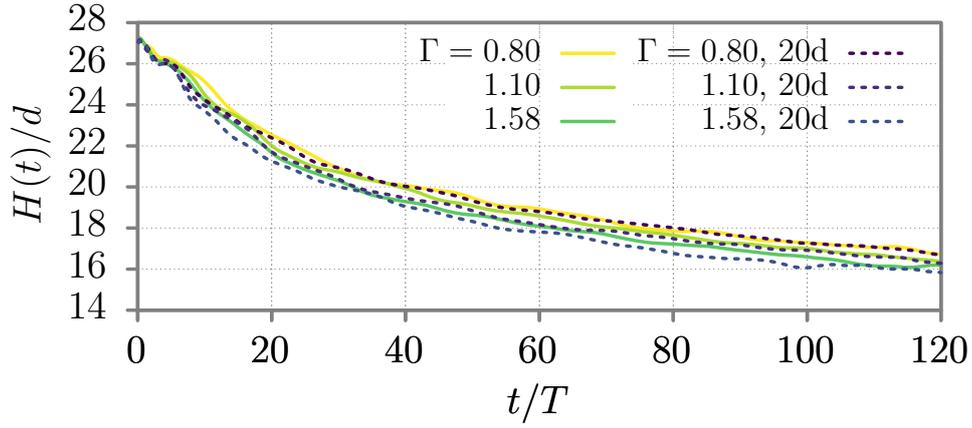


FIGURE 3-8 – Évolution temporelle de la hauteur de la gouttelette granulaire pour des systèmes d'épaisseurs $L_y = 10d$ (lignes continues) et $L_y = 20d$ (lignes discontinues) à différentes accélérations Γ avec une bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

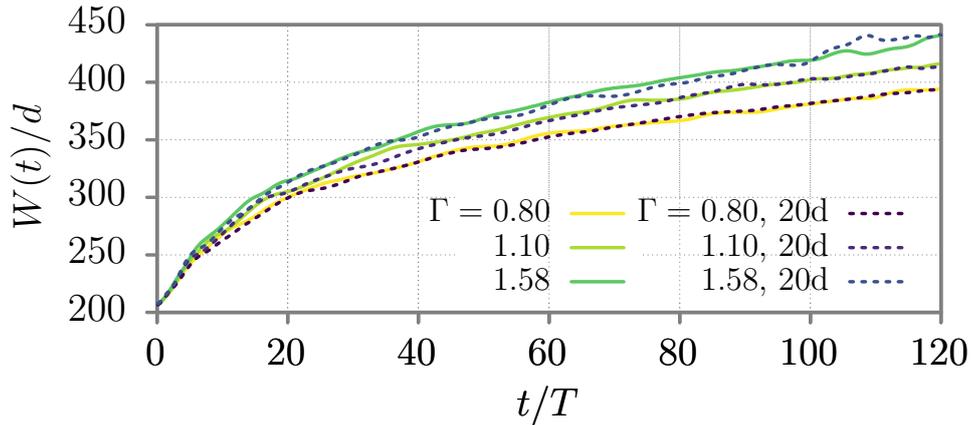


FIGURE 3-9 – Évolution temporelle de la largeur de la gouttelette granulaire pour des systèmes d'épaisseurs $L_y = 10d$ (lignes continues) et $L_y = 20d$ (lignes discontinues) à différentes accélérations Γ avec une bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

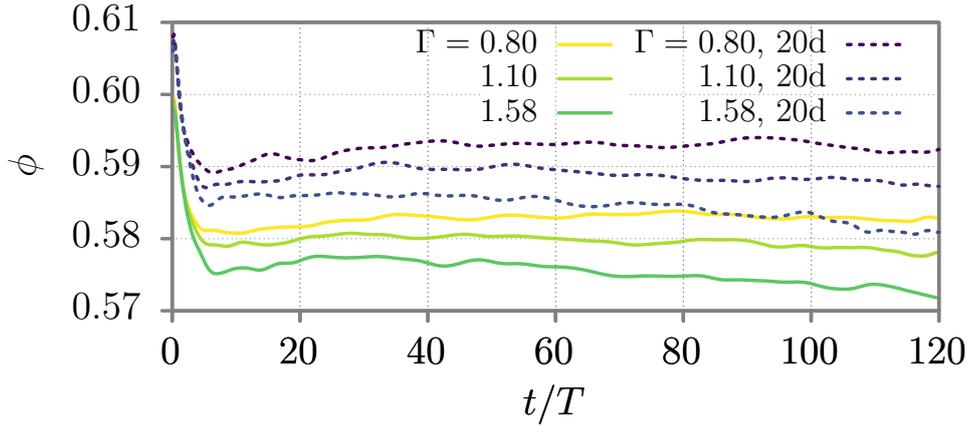


FIGURE 3-10 – Évolution temporelle de la fraction volumique de la gouttelette granulaire pour des systèmes d'épaisseurs $L_y = 10d$ (lignes continues) et $L_y = 20d$ (lignes discontinues) à différentes accélérations Γ avec une bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

3.4 Effet de la résistance de roulement

D'autre part, nous avons maintenu tous les paramètres de simulations identiques, y compris l'épaisseur de la boîte de simulation $L_y = 10d$, mais une résistance ou un frottement de roulement FR a été ajouté au modèle de force 1.9 et 1.10. L'introduction de ce type de force supplémentaire peut être motivée afin de tenir compte de certains phénomènes physiques qui apparaissent à la surface de contact entre les grains en interaction à l'instar de la déformation plastique, l'hystérésis visqueux, l'adhésion de surface ou même les effets de forme. Dans la littérature, on trouve un grand nombre de modèles de forces qui tiennent compte de la résistance au roulement et dont les effets peuvent être différents selon les propriétés mécaniques du système étudié [30]. Certains modèles conviennent mieux à des régimes statiques ou quasi-statiques, d'autres plutôt à des régimes collisionnels denses à l'instar de notre cas. Dans notre démarche, nous avons opté pour un modèle ressort-amortisseur élastique-plastique (*Elastic plastic spring-dashpot: EPSD*) dans lequel le ressort ou l'élasticité k et le vérin ou la viscosité γ apportent chacun un couple additionnel:

$$M_{\text{FR}} = M_{\text{FR}}^k + M_{\text{FR}}^\gamma. \quad (3.3)$$

Nous observons que les effets induits par cette force supplémentaire peuvent être quantitativement significatifs, mais ils restent tout de même qualitativement sem-

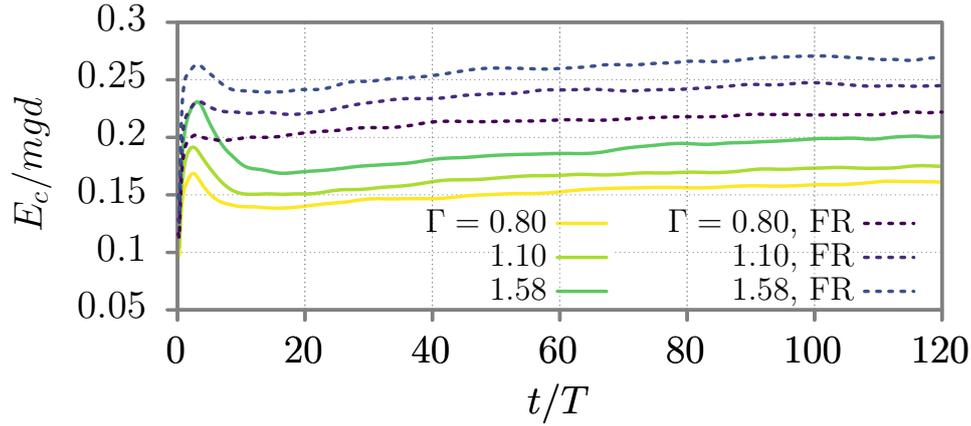


FIGURE 3-11 – Énergie cinétique moyenne en présence de la résistance au roulement FR (lignes discontinues) et en absence de celle-ci (lignes continues) à différentes accélérations et à bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

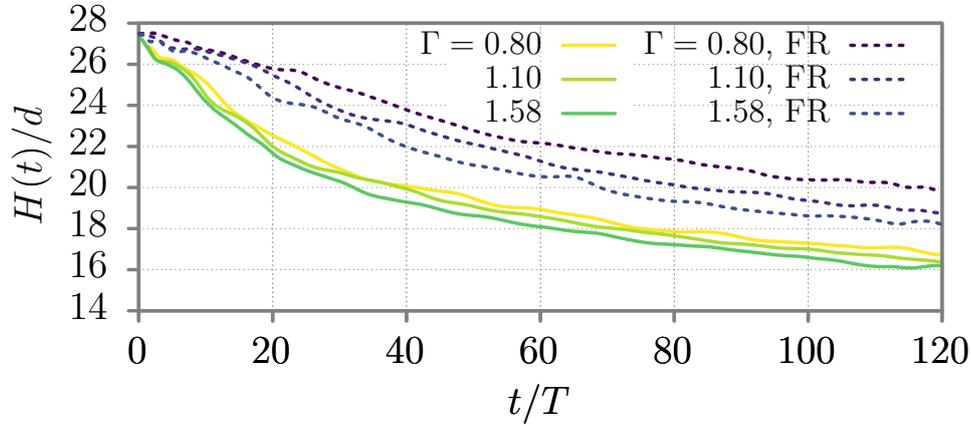


FIGURE 3-12 – Évolution temporelle de la hauteur de la gouttelette granulaire pour des modèles de forces avec (lignes discontinues) et sans (lignes continues) frottement de roulement FR à différentes accélérations Γ et bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

blables. Les écarts en énergie cinétique, de rotation et de translation, sont de l'ordre de 30% en faveur des systèmes où le frottement de roulement est présent, ce qui semble paradoxal, puisque celle-ci doit être inférieure. Toujours en présence de cette force de résistance, la gouttelette granulaire reste plus compacte et s'étale moins vite, la hauteur et la largeur de la gouttelette granulaire évoluent plus lentement qu'en absence de cette force (voir figures 3-12 et 3-13), mais ces effets restent minimes et la morphologie quasi-identique comme on peut le voir dans la figure 3-15. On peut dire de même en ce qui concerne la fraction volumique ϕ (voir figure 3-14), les allures sont identiques et les écarts non-significatifs.

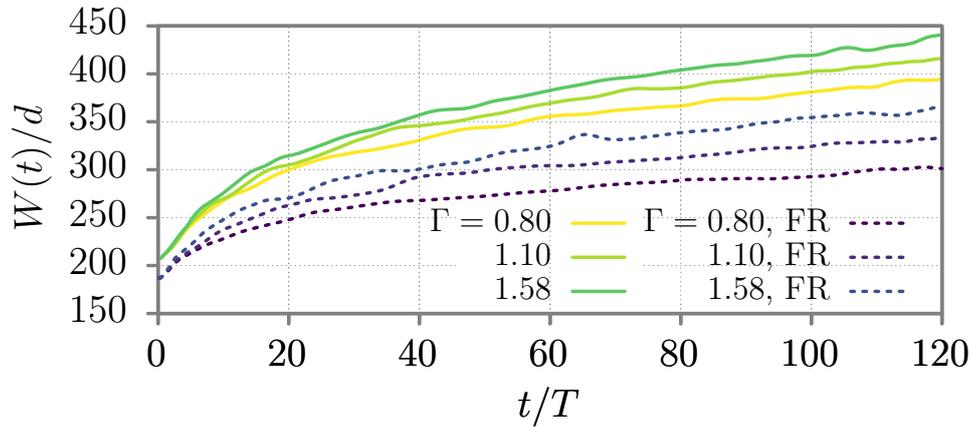


FIGURE 3-13 – Évolution temporelle de la largeur de la gouttelette granulaire pour des modèles de forces avec (lignes discontinues) et sans (lignes continues) frottement de roulement FR à différentes accélérations Γ et bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

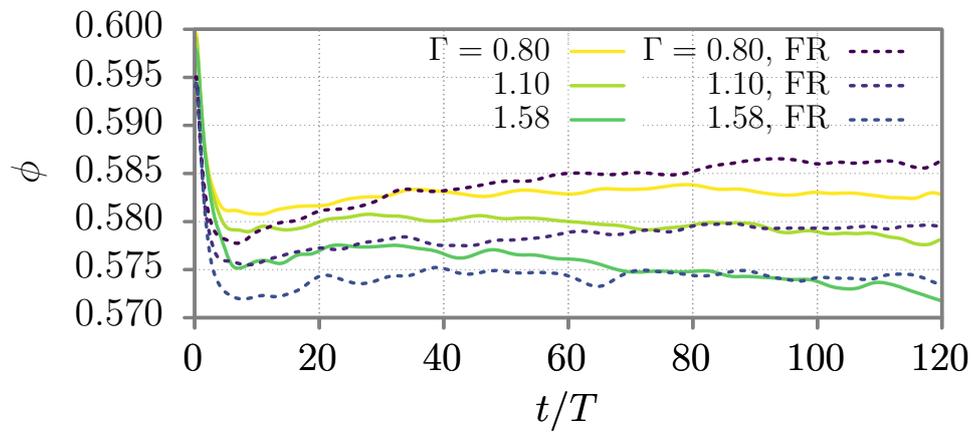


FIGURE 3-14 – Évolution temporelle de la fraction volumique pour des modèles de forces avec (lignes discontinues) et sans (lignes continues) frottement de roulement FR à différentes accélérations Γ et bosselure basale fixée à $\lambda = 1$.

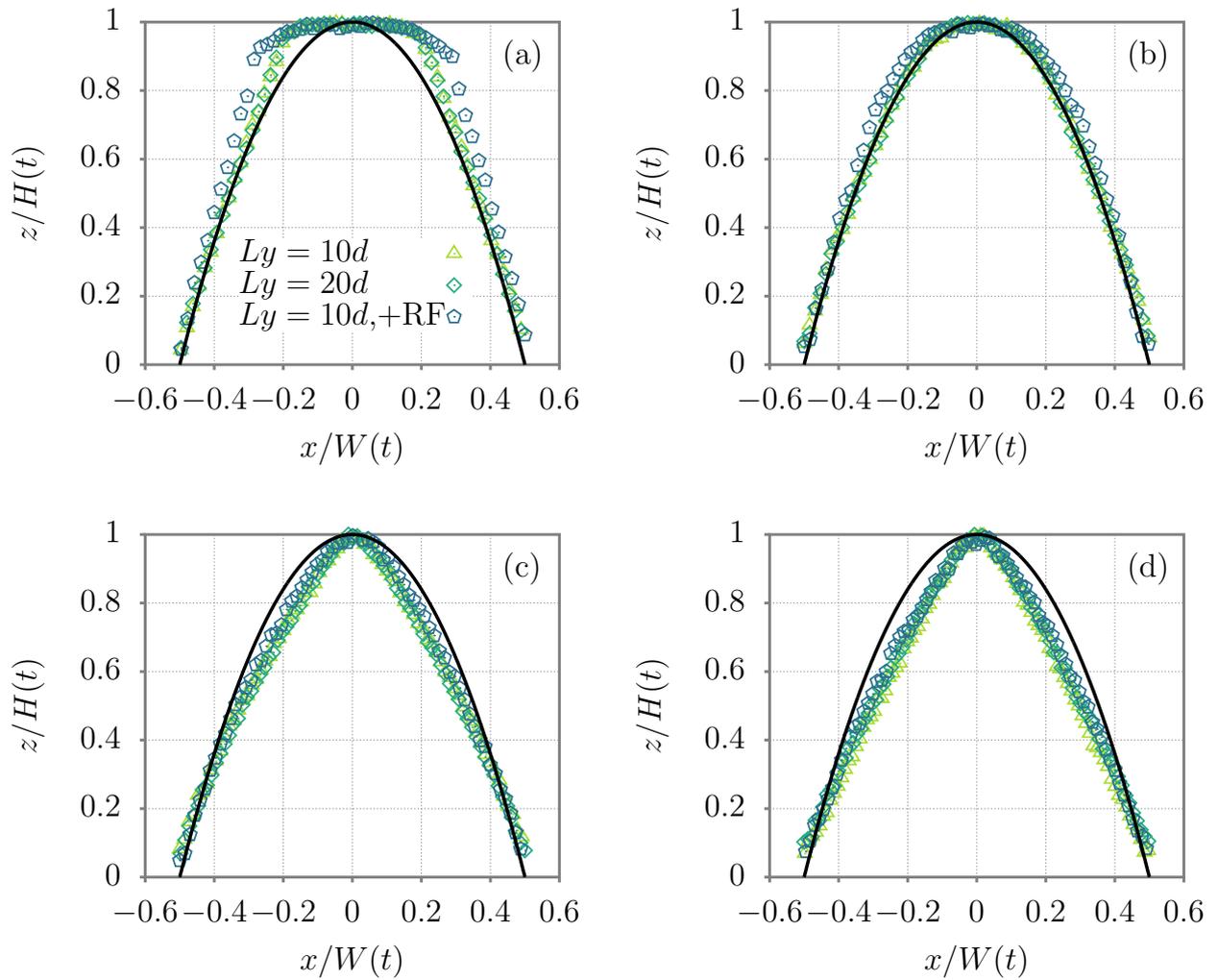


FIGURE 3-15 – Comparaison des profils de la gouttelette granulaire normalisés sans frottement de roulement à des épaisseurs différentes $L_y = 10d$ et $L_y = 20d$, et avec frottement de roulement FR pour $L_y = 10d$. La ligne continue est celle d'une parabole normalisée $f(x) = 1 - (2x)^2$

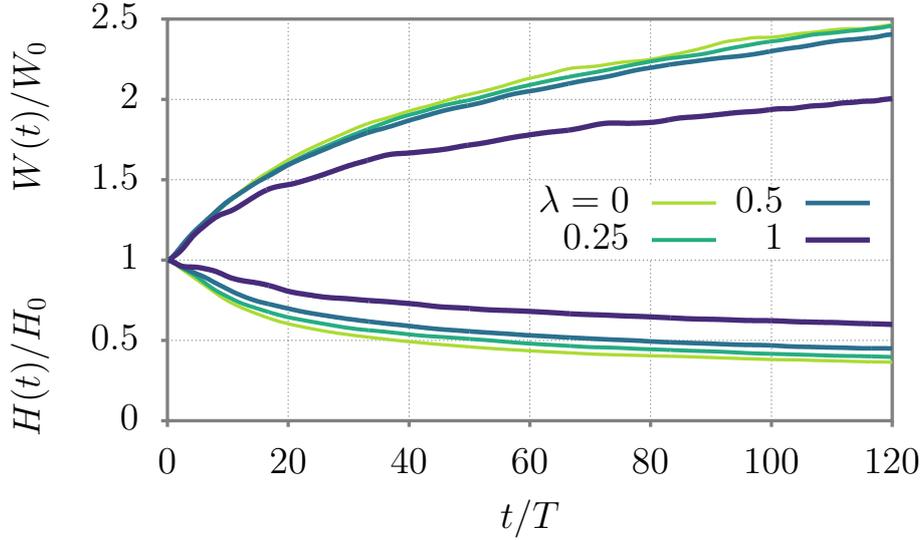


FIGURE 3-16 – Évolution temporelle de W par rapport à sa valeur initiale W_0 pour différentes bosselures basales λ à la même accélération $\Gamma = 1.10$ (partie supérieure). La rapport des hauteurs H/H_0 est également représenté (partie inférieure).

3.5 Effet de la bosselure basale

Nous examinons désormais l’effet de la bosselure basale sur la dynamique d’étalement. Dans la figure 3-16, nous représentons l’évolution temporelle de la largeur W et la hauteur H d’une gouttelette granulaire déposée sur quatre plateformes de bosselures basales différentes $\lambda = 0, 0.25, 0.5$ et 1 , obtenues à une accélération de vibration unique $\Gamma = 1.10$. Comme on peut s’y attendre, le taux d’étalement croit avec une bosselure décroissante. La croissance du taux d’étalement est spectaculaire lorsque nous passons de $\lambda = 1$ à $\lambda = 0.5$, par contre elle reste faible pour des valeurs de λ bien inférieures.

Il est important de noter que nous n’avons observé aucune variation significative des exposants m et n des lois d’échelle en fonction de la bosselure basale (voir la table 3.2). Nous avons toujours un premier régime super-diffusif suivi d’un autre asymptotique qui est sous-diffusif.

Nous nous sommes également intéressé à l’influence de la bosselure basale sur l’évolution temporelle de la fraction volumique ϕ durant le processus d’étalement (voir la figure 3-17). On peut dire que la réduction de la bosselure basale induit une forte recompaction de l’empilement granulaire. Dans le cas lisse ($\lambda = 0$), la fraction

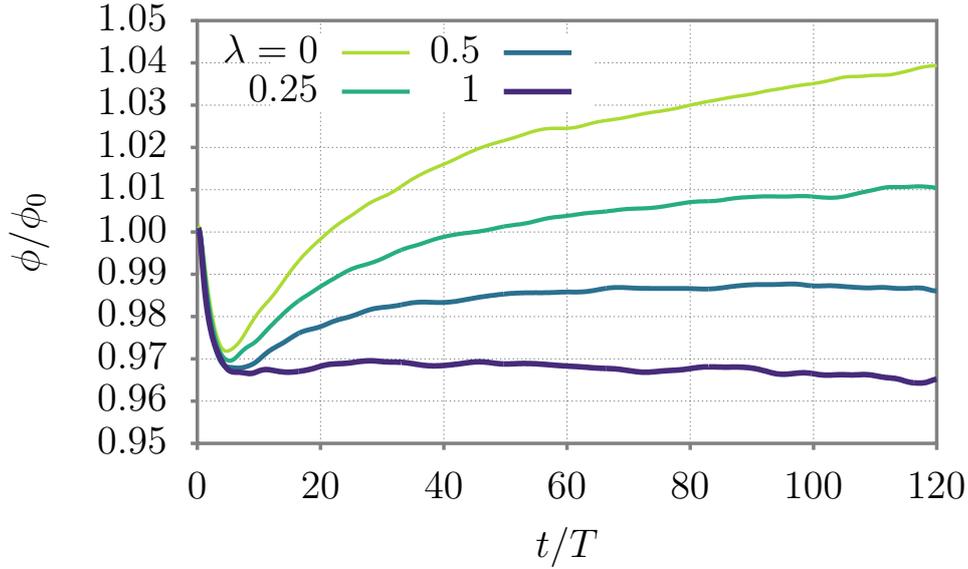


FIGURE 3-17 – Fraction volumique normalisée pour différentes bosselures basales et à la même accélération $\Gamma = 1.10$. ϕ_0 est la fraction volumique avant l’activation des vibrations.

volumique de la goutte vers la fin du processus d’étalement (i.e., $t/T = 120$) est plus grande de 7% par rapport au cas le plus rugueux ($\lambda = 1$). Le phénomène de compaction observé pour les faibles bosselures s’interprète comme un processus de réorganisation de l’empilement granulaire induit par une base lisse.

Enfin, nous pouvons dire quelque chose à propos des effets combinés de la bosselure basale et de l’accélération due aux vibrations. Pour une bosselure finie, (i.e., $\lambda \neq 0$), le taux d’étalement a une dépendance non-linéaire avec la période de vibration T comme on peut le constater dans la figure 3-4. D’un autre côté, le cas lisse est bien particulier dans le sens où l’étalement devient dépendant de la période T . Dans la figure 3-18, les courbes $H(t/T)$ et $W(t/T)$ obtenues pour diverses accélérations se superposent étonnamment les unes sur les autres.

λ	0	0.25	0.5	1
m	0.81	0.85	0.78	0.82
n	0.47	0.50	0.49	0.46

TABLE 3.2 – Exposants critiques m (super-diffusif) et n (sous-diffusif à diffusif) des lois d’échelle d’étalement pour différentes bosselures basales λ mais à un taux d’accélération fixé $\Gamma = 1.10$.

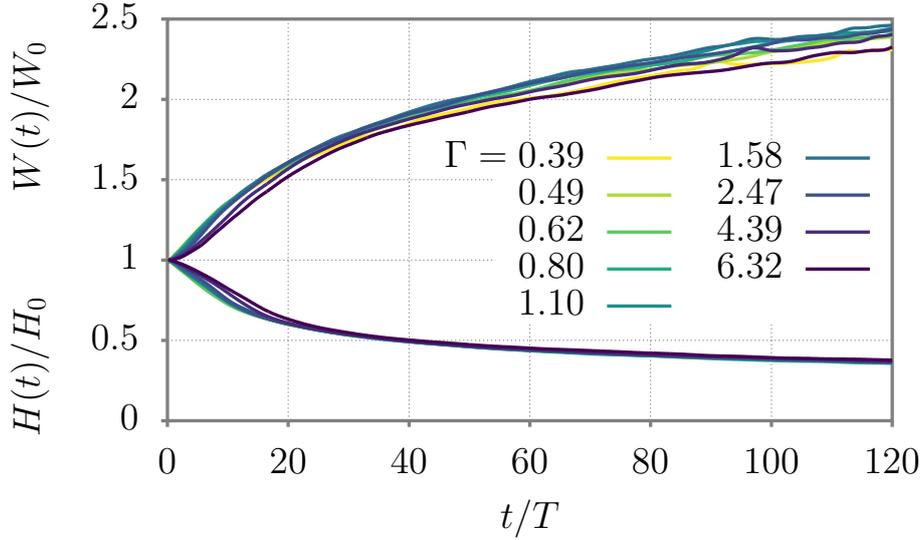


FIGURE 3-18 – Hauteur et largeur normalisées à différentes accélérations et à bosselure basale fixée $\lambda = 0$. W_0 et H_0 sont, respectivement, la largeur et la hauteur initiales.

3.6 Champ de vitesse dans la gouttelette

Nous avons examiné la cartographie des champs de vitesses obtenue par le calcul des moyennes de celles-ci sur l'épaisseur du système pendant une durée de deux périodes de vibrations. Nous observons une différence notable dans les champs des vitesses correspondants aux deux régimes d'étalement. Dans le premier régime ($t/T = 5$), (voir la partie supérieure de la cartographie dans la figure 3-19 et les profils de vitesses verticaux (a) et (c) dans la figure 3-20). La phase en écoulement est localisée proche de la surface libre: elle s'étend du sommet de la gouttelette jusqu'au pieds de celle-ci et pénètre à l'intérieur de la gouttelette sur une épaisseur de quelques dizaines de tailles de grains. La dynamique d'étalement à ce stade correspond au régime super-diffusif dans lequel l'écoulement semble être contrôlé par des processus superficiels similaires aux avalanches sur un empilement granulaire. Par contre, l'écoulement dans le second régime qui est sous-diffusif (partie inférieure de la figure 3-19) n'est plus localisé à la surface libre mais s'étend uniformément à l'intérieur de la gouttelette. Ainsi, le processus d'étalement est gouverné essentiellement par un écoulement dans le volume qui s'étend sur toute la profondeur de la gouttelette plutôt qu'un écoulement de surface (parties (b) et (d) de la figure 3-20).

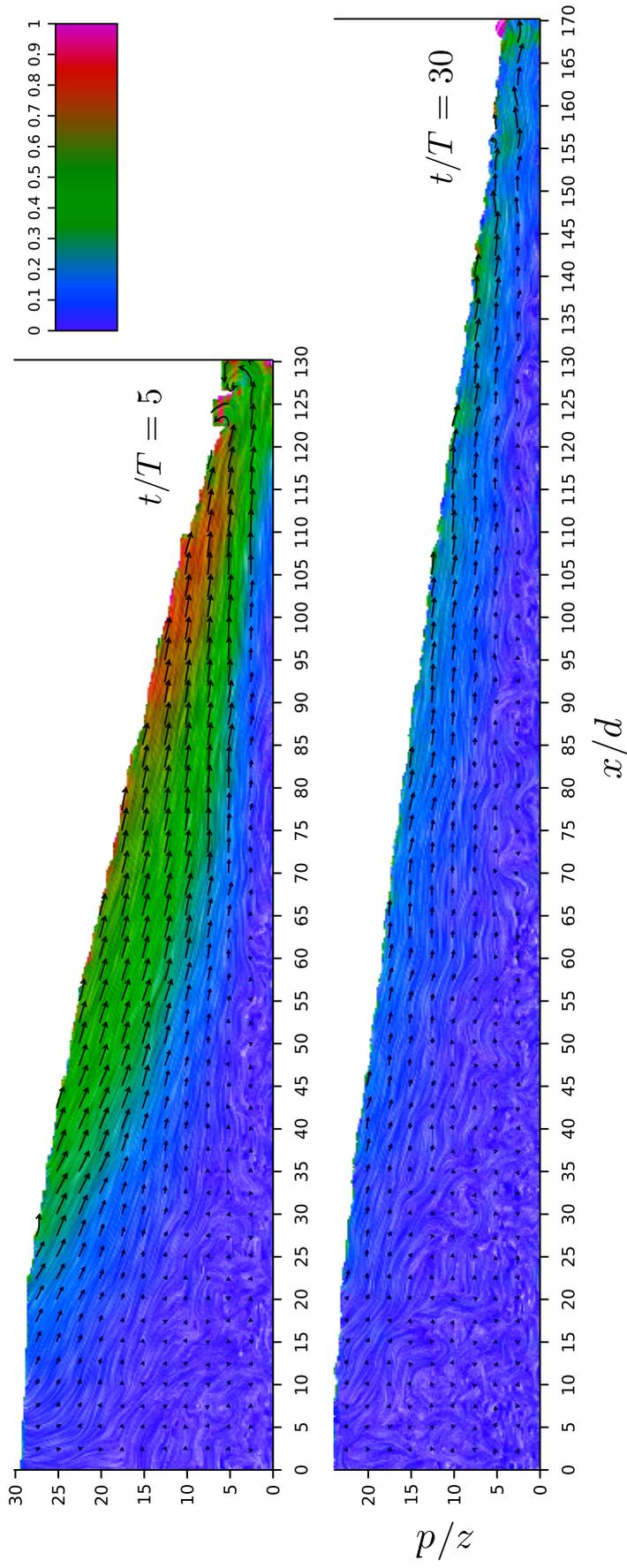


FIGURE 3-19 – Profils des champs de vitesses scalaire et vectoriel moyennés sur deux périodes de vibrations. Toutes les vitesses sont normalisées par la vitesse maximale dans les deux configurations $t/T = 5$ (haut) et $t/T = 30$ (bas). la bosselure basale est $\lambda = 1$ et le taux d'accélération fixé $\Gamma = 1.10$. Nous montrons uniquement la moitié de la gouttelette puisque l'étalement est symétrique. Ces figures ont été réalisées à l'aide du code open-source VSFLOT [32].

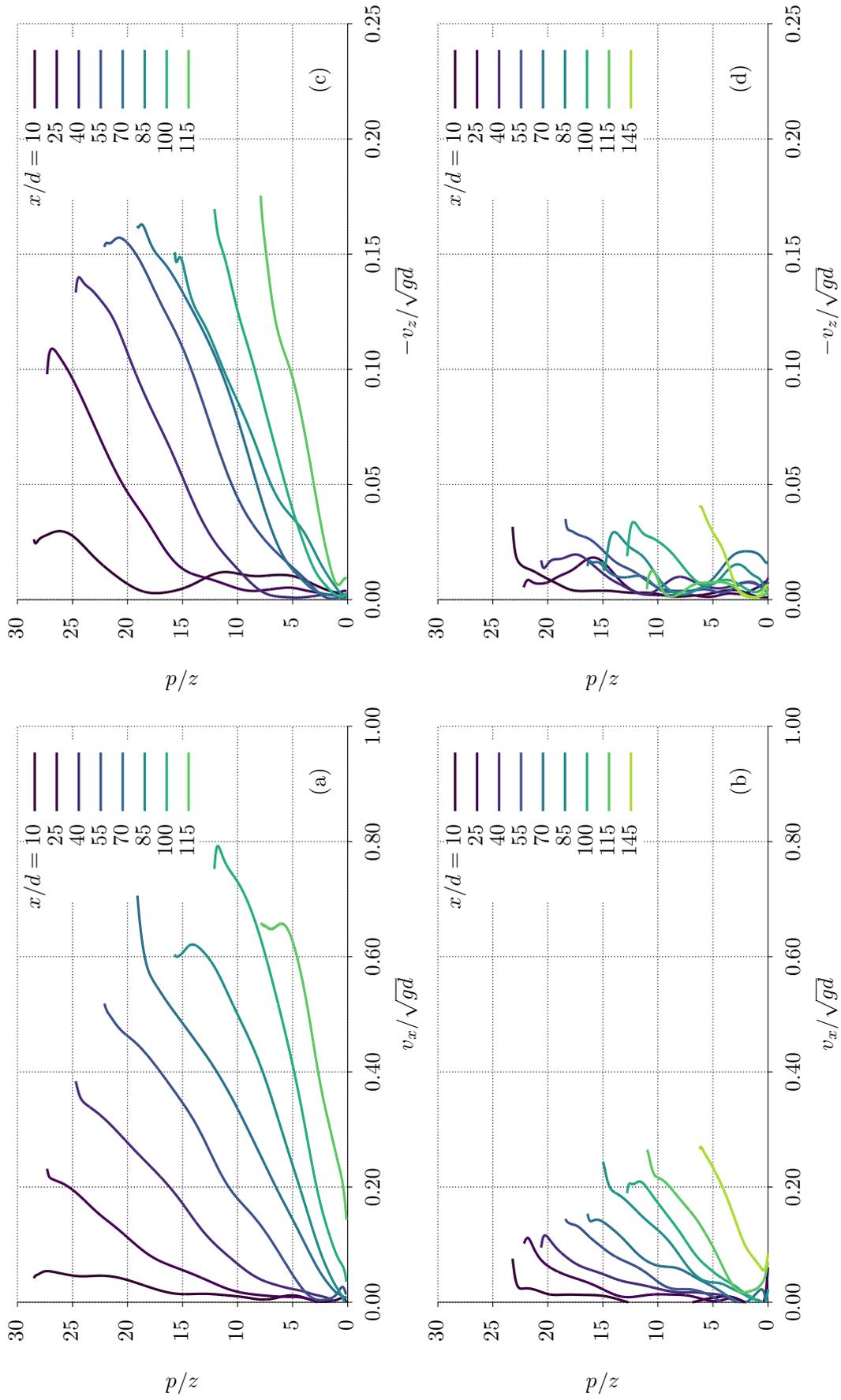


FIGURE 3-20 – Profils verticaux des vitesses horizontale et verticale (v_x et v_z) évalués à $t = 5T$ ((a) et (c)) et à $t = 30T$ ((b) et (d)), respectivement.

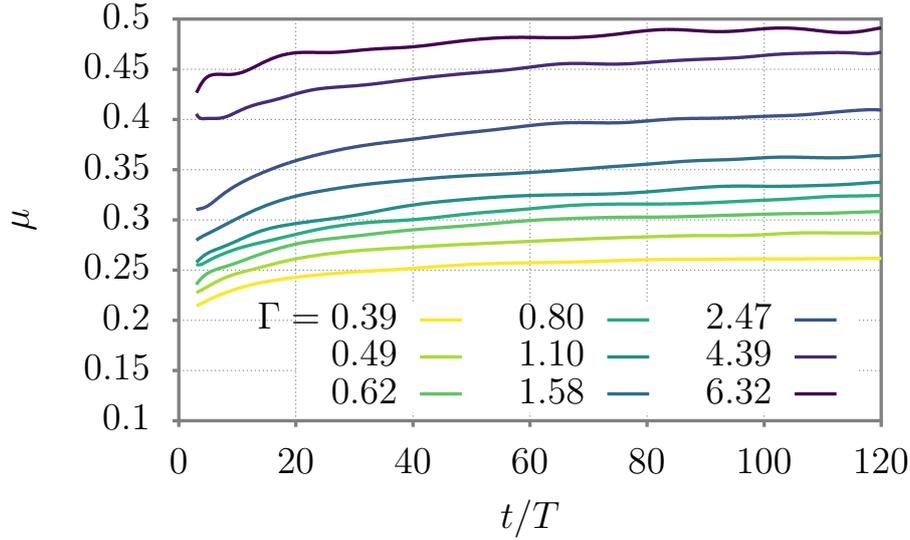


FIGURE 3-21 – Évolution temporelle du coefficient de frottement effectif μ à différents taux d'accélération Γ et à bosselure basale fixée $\lambda = 1$.

3.7 Rhéologie effective

Nous nous intéressons désormais à la rhéologie effective dans le régime asymptotique sous-diffusif où le coefficient de friction effectif $\mu_e \equiv \mu$ entre la gouttelette et le substrat est quasiment constant durant l'étalement (voir la figure 3-21). Les modèles les plus récents concernant la rhéologie dans la matière granulaire [33, 12, 34, 35, 36, 37] montrent que les écoulements denses unidirectionnels peuvent être décrits justement en ayant recours à un coefficient de frottement unique qui varie avec un paramètre adimensionné qu'on appelle le nombre inertiel I ; défini comme le rapport d'un temps de réarrangement granulaire à l'échelle microscopique et d'un temps d'écoulement macroscopique. Cette rhéologie peut être assimilée à une généralisation du modèle de frottement solide de Coulomb, avec un coefficient de frottement qui varie selon le taux de cisaillement local τ et la pression de confinement P :

$$\mu(I) = \tau/P = \mu_s + \frac{\mu_\infty - \mu_s}{1 + I_0/I}. \quad (3.4)$$

Les constantes μ_s et μ_∞ correspondent, respectivement, à un coefficient de frottement minimal pour de faibles valeurs de I et à un autre asymptotique pour I grand. Dans le cas d'expériences d'écoulement réalisées avec des billes monodisperses en

verre de diamètre $d = 0.5$ mm, nous trouvons $\mu_s = \tan(20.9^\circ)$, $\mu_\infty = \tan(32.76^\circ)$ et $I_0 = 0.279$ [35]. Dans le cas de l'étalement d'une goutte granulaire, le temps macroscopique est associé à la durée pour qu'un grain se déplace d'une distance d sous l'effet de la vitesse de cisaillement $a\omega_0$, tandis que le temps microscopique est donné par la durée nécessaire à un grain de faire une chute libre de hauteur d sous l'effet seul de la gravitation. On obtient alors:

$$I = t_{\text{micro}}/t_{\text{macro}} = (d/\sqrt{gd})/(d/a\omega_0) = a\omega_0/\sqrt{gd}, \quad (3.5)$$

qui se réduit simplement au rapport de deux vitesses.

Dans notre étude numérique, le nombre inertiel I varie de 0.6 à 2.5. L'amplitude de ce dernier donne souvent une indication sur la nature de l'écoulement granulaire [2]. Dans la limite des I très petits ($I \leq 10^{-3}$), le flux peut être considéré comme indépendant du cisaillement (μ est constant et est confondu avec μ_s). Pour des valeurs de I intermédiaires (i.e., $10^{-2} \leq I \leq 10^{-1}$), ce cas est appelé le régime inertiel dense avec une dépendance avec le taux de cisaillement. À des valeurs de I très élevées ($I \geq 1$), l'écoulement est rapide et plus dilué et ainsi quitte le régime frictionnel gouverné par l'équation 3.4 pour entrer dans une phase collisionnelle qui est très bien décrite par la théorie cinétique d'un gaz granulaire dissipatif [38].

La $\mu(I)$ -rhéologie frictionnelle est le plus souvent complétée par une relation additionnelle qui stipule que la fraction solide ϕ est une fonction décroissante du paramètre I seul. Durant la dernière décennie, une vaste gamme d'études expérimentales et numériques confirme l'importance de la μ -rhéologie pour les écoulements granulaires denses unidirectionnels comme nous le montrons dans la table 3.3.

Dans cette thèse, nous analysons le régime d'étalement asymptotique dans le cadre de la $\mu(I)$ -rhéologie frictionnelle. Puisqu'il existe une relation directe entre le nombre inertiel I et l'accélération de vibration réduite Γ , il est relativement aisé de mesurer la variation du coefficient de frottement effectif μ de la goutte granulaire avec la base et la fraction volumique moyenne en fonction du nombre inertiel. Les valeurs calculées de μ et ϕ dans nos simulations numériques sont tous les deux moyennés sur deux périodes de vibrations durant le second régime d'étalement.

Écoulement	Étude	I	$\mu(I)$ loi	Références
Cisaillement plan	2D-DEM	≤ 0.3	$\mu_0 + aI$	[33]
Cisaillement plan	2D-DEM	≤ 0.1	$\mu_0 + aI^\alpha$	[39, 40]
Cisaillement plan	3D-DEM	~ 1	$\mu_0 + aI$	[41]
Cisaillement annulaire	2D-DEM	≤ 0.1	$\mu_0 + aI + be^{-(I/C)}$	[42]
Cisaillement annulaire plan	Expérimentale	≤ 0.1	$\mu_0 + aI$	[43, 44]
Empilement entre deux parois rugueuses	Expérimentale	≤ 0.5	Eq. (3.5)	[37]
Film granulaire vibro-fluidifié	Expérimentale	~ 1	$a - b(I - I_c)^2$	[11]
Cisaillement scissométrique et vibro-fluidifié	Expérimentale	$[10^{-5}, 10]$	$\tilde{\mu}(I)$	[45]

TABLE 3.3 – Résumé non exhaustif des lois de la $\mu(I)$ -rhéologie collectées dans la littérature. L'équation $\tilde{\mu}(I)$ dans [45] représente un modèle rhéologique unifié basé sur une loi de Pouliquen modifiée en plus d'autres corrections tenant compte de la pression de Bernoulli et de la rhéologie de Bagnold.

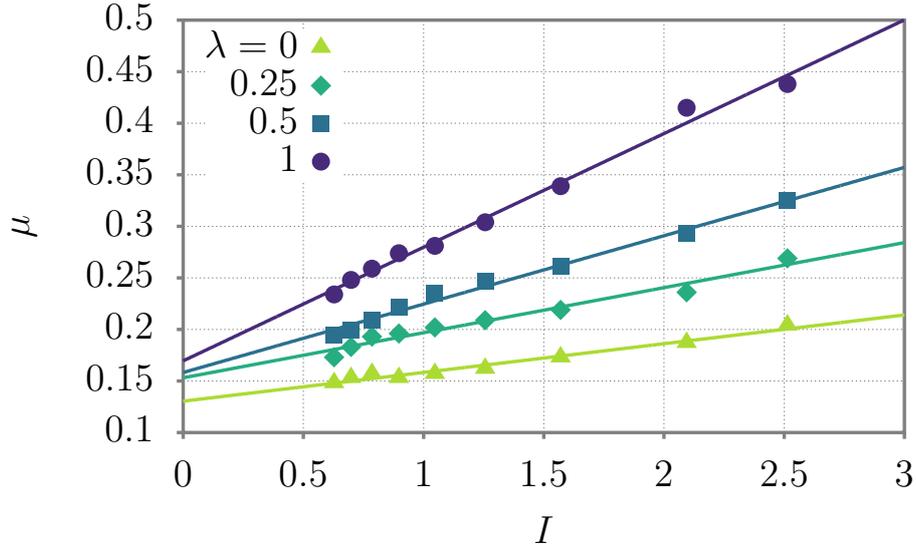


FIGURE 3-22 – Coefficient de frottement effective μ à différentes bosselures basales λ . Les lignes droites sont les meilleurs ajustements

Dans les figures 3-22 et 3-23, nous montrons les courbes de $\mu(I)$ et $\phi(I)$ obtenues pour les quatre configurations de bosselure basale. En ce qui concerne le frottement effectif, nous pouvons noter en premier lieu que les valeurs obtenues ne dépassent jamais la valeur du frottement microscopique utilisée dans nos simulation (i.e., $\mu < \mu_p = 0.5$). En suite, nous observons un joli comportement linéaire jusqu'à des valeurs élevées du nombre inertiel. Le coefficient de frottement effectif μ peut être très bien modélisé par une fonction affine de I :

$$\mu(I) = \mu_0 + a I . \quad (3.6)$$

Les coefficients d'ajustement (*fitting parameters*) μ_0 et a sont donnés dans la table 3.4. Le paramètre μ_0 exhibe une légère dépendance avec la bosselure basale, il croit de 0.13 à 0.17 lorsque λ passe de 0 à 1. En revanche, la pente a a une forte dépendance de la bosselure basale puisqu'elle passe de 0.03 à 0.11. Troisièmement, nos résultats diffèrent de ceux prédits par le modèle développé dans [11] où le coefficient de frottement effectif exhibe une allure non-monotone. Il a été prédit par le modèle phénoménologique qu'il présenterait un maximum vu comme la transition entre un régime d'épaississement par cisaillement (*Shear thickening*) à I petit et un autre d'amincissement par cisaillement (*Shear thinning*) à des valeurs élevées de I .

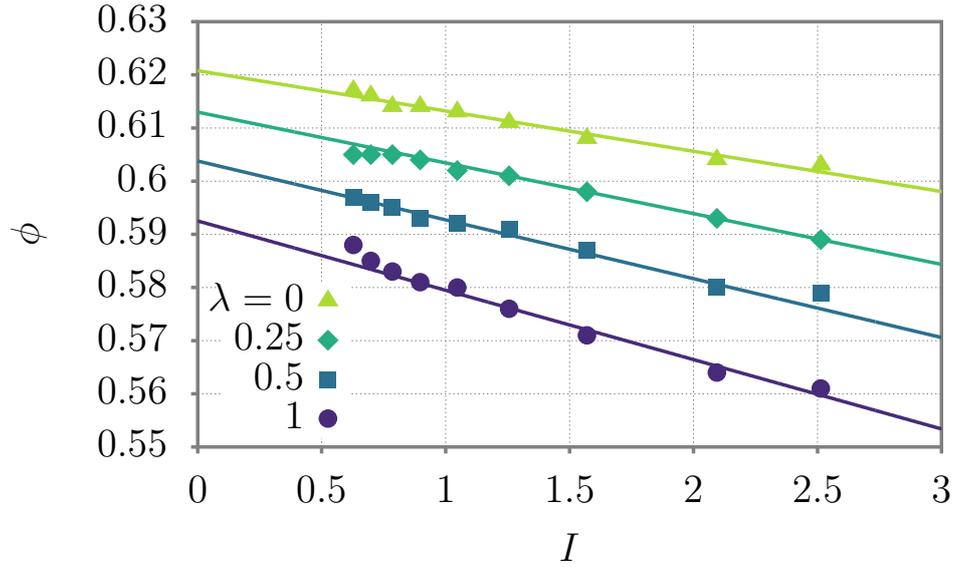


FIGURE 3-23 – Fraction volumique moyenne pour différentes valeurs de la bosselure basale λ . Les lignes droites sont les meilleurs ajustements.

Par ailleurs, nous trouvons que la fraction volumique ϕ exhibe aussi une variation linéaire avec le nombre inertiel I qui peut être approchée par la relation

$$\phi(I) = \phi_0 - bI, \quad (3.7)$$

où les coefficients d'ajustement ϕ_0 et b sont donnés dans la table 3.4.

La dépendance de ces coefficients de la bosselure basale contraste avec celle observée pour μ_0 et a de la loi $\mu(I)$. Nous trouvons que la pente b est faiblement dépendante de la bosselure basale tandis que ϕ_0 décroît significativement avec un facteur de bosselure λ croissant. Il est remarquable de voir que la valeur de la pente b qui est de l'ordre de 0.01 est plus petite que la valeur de référence de 0.2 reportée usuellement dans la littérature. Nous notons également que le comportement du

λ	0	0.25	0.5	1
μ_0, a	0.13, 0.03	0.15, 0.04	0.16, 0.07	0.17, 0.11
ϕ_0, b	0.62, 0.01	0.61, 0.01	0.60, 0.01	0.59, 0.01

TABLE 3.4 – Paramètres d'ajustement de la friction effective $\mu = \mu_0 + aI$ et de la fraction volumique $\phi = \phi_0 - bI$ correspondant à différentes bosselures basales λ .

coefficient de frottement effectif μ et la loi de la fraction volumique ϕ s'apparentent parfaitement à celles observées dans le cas des écoulements granulaires cohesifs denses. La bosselure λ induit des effets similaires à ceux de l'intensité de la cohésion sur les variations de $\mu(I)$ et $\phi(I)$ [27].

Chapitre 4

Conclusions et perspectives

En utilisant des simulations tridimensionnelles d'éléments discrets (DEM), nous étudions dans ce travail l'étalement d'une gouttelette granulaire placée sur un substrat vibré horizontalement. Nous utilisons toute une variété de substrats avec des bosselures basales variées. Nous montrons que lors d'un court régime transitoire, la gouttelette granulaire épouse une forme de profile parabolique comme il a été observé expérimentalement, puis adopte une forme triangulaire pour des temps ultérieurs jusqu'à la fin des simulations. Nous trouvons également que la dynamique d'étalement est gouvernée par deux régimes distincts, un super-diffusif au début du processus d'étalement, suivi d'un régime asymptotique sous-diffusif. Ces résultats contrastent avec l'expérience où seul le second régime sous-diffusif est observé [11]. Nous identifions le régime super-diffusif avec des écoulements de surface similaires aux avalanches sur un empilement granulaire, cependant le régime sous-diffusif est gouverné par un écoulement en volume qui peut être modélisé par une équation de diffusion non-linéaire qui aboutit à une loi d'échelle d'exposant $1/3$ comme il a été démontré dans [11]. Nous trouvons que les écoulements de surface sont nettement plus efficaces pour étaler la gouttelette et conduisent donc au régime super-diffusif.

Cette transition est également marquée par un changement dans l'évolution du frottement basale. En effet, dans le premier régime, le coefficient de frottement effectif croit durant l'étalement tandis que durant le second régime, le frottement atteint un plateau.

La variation de la bosselure du substrat n'a pas un impact fort sur la morphologie de la gouttelette, ni d'ailleurs sur les lois d'échelle de l'étalement : la forme triangulaire des profils est persistente et l'étalement est toujours caractérisé par deux régimes distincts avec des exposants d'échelle faiblement dépendants de la bosselure du substrat.

Finalement, nous observons dans le régime asymptotique sous-diffusif que le coefficient de frottement basale est une fonction linéaire du nombre inertiel. Nous montrons également que la fraction volumique décroît linéairement en fonction du nombre inertiel comme prédit par le frottement de la $\mu(I)$ -rhéologie. Plus important encore, nos simulations montrent que le coefficient de frottement effectif et la fraction volumique de la gouttelette dépendent fortement de la bosselure basale.

Dans des études futures, il serait intéressant de développer une analyse quantitative basée sur un modèle continuum afin de dériver la valeur de l'exposant dans le régime super-diffusif. L'enjeu principal est d'utiliser une loi de la rhéologie appropriée. Une première tentative serait l'utilisation d'une loi de $\mu(I)$ -rhéologie classique ou bien des lois rhéologiques non-locales comme celles proposées dans [39, 46].

Annexe A

Listing de quelques scripts

A.1 Construction d'un substrat bosselé

make_rand_susbstrate.py

```
1  #!/usr/bin/env python
2
3  ### Generate a granular substrate
4  ### Randomness in particle sizes not in positions
5  ### Dec 09 2014 <sm.khefif@essa-tlemcen.dz>
6  ### Last modified: Dec. 18 2014
7
8  import math
9  import random
10
11 D      = 1.0   #Particle diameter
12 Dmax   = 1.2*D
13 Dmin   = 0.8*D
14 rho    = 1.91 #Particle density
15 id     = 0     #Particle id counter
16 type   = 2     #Wall-Atom type
17 z      = 0.5*Dmax
18
19 STEP   = 1.1*D
20
21 Lx     = 900
22 Ly     = 10
```

```

23 Lz      = 30
24
25 content = ""
26
27 for i in xrange(0, int(Lx/STEP)):
28     for j in xrange(0, int(Ly/STEP)):
29         rr = random.random()
30         Dr = Dmin*Dmax/(Dmax-rr*(Dmax-Dmin))
31         ##z = Dr*0.5
32         x = -0.5*Lx+STEP*(i+0.5)
33         y = -0.5*Ly+STEP*(j+0.5)
34         id += 1
35         content += "%d %d %f %f %f %f %f\n" % (id,type,Dr,rho,x,y,z)
36
37 N = id
38
39 header = "Substrate file made by Sidi M. Khefif\n\n"
40 header += "%d atoms\n" % N
41 header += "2 atom types\n\n"
42 header += "%f %f xlo xhi\n" % (-Dmax-Lx/2.,Dmax+Lx/2.)
43 header += "%f %f ylo yhi\n" % (-Ly/2.,Ly/2.)
44 header += "%f %f zlo zhi\n" % (0,Lz+Dmax)
45 header += "\n"
46 header += "Atoms\n\n"
47
48 fo = open("substrate.dat", "wb")
49 fo.write(header);
50 fo.write(content)
51 fo.close()

```

A.2 Analyse morphologique et structurelle de la gouttelle granulaire

analyse_droplet_spread.py

```
1  #!/usr/bin/env python
2  #
3  """
4      Extract granular drop surface and its mean profile in a (xz) plane.
5      The droplet morphology, width, height and the packing fraction
6      inside it are also infered.
7
8      Version 1.0 by Sidi M. Khefif @ IPR-Rennes(F) <27 jan 2016, 13:00:40>
9      Version 2.0 by Sidi M. Khefif @ Tlemcen <23 jan 2017, 13:50:33>
10     <sm.khefif@essa-tlemcen.dz>
11 """
12 import os
13 import sys
14 import glob
15 import math
16 import pylab
17 import re
18 import numpy as np
19 import scipy as sp
20 from numpy import *
21
22 try:
23     dumpfile = sys.argv[1]
24 except:
25     print "Usage: ",sys.argv[0], "dumpSuffix period tspan FitPolyOrder";
26     sys.exit(1)
27
28 """
29 Naturally sorting files by Ned Batchelder
30 """
31 def tryint(s):
32     try:
33         return int(s)
34     except:
```

```

35         return s
36
37 def alphanum_key(s):
38     return [ tryint(c) for c in re.split('([0-9]+)', s) ]
39
40 # Return effectif radius
41 def reff(r,z1,z0):
42     return math.sqrt(r**2-(z1-z0)**2)
43
44 # Return a disk surface
45 def disksurf(r):
46     return math.pi*r**2
47
48 def group(key, value):
49     """
50     group the values by key
51     returns the unique keys, their corresponding per-key sum, and the
    ↪ keycounts
52     """
53     #upcast to numpy arrays
54     key = np.asarray(key)
55     value = np.asarray(value)
56     #first, sort by key
57     I = np.argsort(key)
58     key = key[I]
59     value = value[I]
60     #the slicing points of the bins to sum over
61     slices = np.concatenate(([0], np.where(key[:-1]!=key[1:])[0]+1))
62     #first entry of each bin is a unique key
63     unique_keys = key[slices]
64     #sum over the slices specified by index
65     per_key_sum = np.add.reduceat(value, slices)
66     #number of counts per key is the difference of our slice points. cap
    ↪ off with number of keys for last bin
67     key_count = np.diff(np.append(slices, len(key)))
68     return unique_keys, per_key_sum, key_count
69
70 dumpsuf = sys.argv[1]
71 period = float(sys.argv[2])
72 tspan = int(sys.argv[3])

```

```

73 polyord = sys.argv[4]
74
75 ## The file to keep time, height and width and other stuff
76 f1 = open("dynamics.dat", 'w')
77 f1.write("#time    H    W    H_fit    W_fit    del_H(%)    del_W(%)
    ↪    S_fit    S_unfit    phi_fit    phi_unfit\n")
78
79 dumplist = glob.glob('dump*.' + '%s' % dumsuf)
80 dumplist.sort(key=alphanum_key)
81
82 timeseries = [re.split('([0-9]+)', i)[1] for i in dumplist]
83 ## Select spaced configs
84 ntimes=[]
85
86 tstart = int(period*64*10000) ## Start stats after m periods
87 tstop = tstart+int(period*tspan*10000) ## Average over n periods
    ↪    (n<=128)
88 tdelta = int(period*1250) ## 10000/8=1250
89
90 for i in range(tstart, tstop, tdelta):
91     ntimes.append(str(i))
92
93 ## THIS IS THE BIG LOOP
94 for dumpfile in ntimes:
95
96     ## Open dump file
97     dfname = open("dump" + "%s" % dumpfile + "." + "%s" % dumsuf, 'r')
98
99     ## Read and ignore header/comment lines
100    for i in range(5):
101        dfname.readline()
102
103    ## Read simulation box size
104    poslo = []; poshi = []
105    for i in range(3):
106        line = dfname.readline()
107        line = line.strip()
108        columns = line.split()
109        poslo.append(float(columns[0]))
110        poshi.append(float(columns[1]))

```

```

111
112     ## Close input file
113     dfname.close()
114
115     ## Extract from every dump file the particles positions (x,y,z) and
116     ↪ their radius (r)
117     ## Pick up mobile grains only!
118     ## Save the data to a temporary "pile.dat" file
119     os.system("awk 'NR>9 && $2==1' + '{print $3, $4, $5, $12}' dump" +
120     ↪ "%s" % dumpfile + "." + "%s" % dumpsuf + "> pile.dat")
121
122     ## Open heap file
123     pilefile = open("pile.dat", 'r')
124
125     ## Create some empty lists
126     x0 = []; y0 = []
127     z0 = []; r0 = []
128
129     ## Pick up grains positions and sizes
130     for line in pilefile:
131         line = line.strip()
132         columns = line.split()
133         x0.append(float(columns[0])); y0.append(float(columns[1]))
134         z0.append(float(columns[2])); r0.append(float(columns[3]))
135
136     ## Destroy the temporary file
137     pilefile.close()
138     os.remove("./pile.dat")
139
140     ## Compute some characteristic lengths
141     npart=len(x0)
142     xmin=float(min(x0)); xmax=float(max(x0))
143     ymin=float(min(y0)); ymax=float(max(y0))
144     rmax=float(max(r0)); rmin=float(min(r0))
145
146     ## The cell size
147     cell=2*rmax
148
149     x2 = []; z2 = []

```

```

149     ## Here begins the computing of the granular drop profile
150     xc=xmin+cell/2.
151     while (xmin+cell/2. <= xc <= xmax-cell/2.):
152         yc=ymin+cell/2.
153         x1 = []; y1 = []
154         z1 = []; r1 = []
155         while (ymin+cell/2. <= yc <= ymax-cell/2.):
156             ix=0
157             zmax=0
158             for i in range(npart):
159                 if ((xc-cell/2. <= x0[i] <= xc+cell/2.) and %
160                     (yc-cell/2. <= y0[i] <= yc+cell/2.)):
161                     if z0[i] >= zmax:
162                         zmax=z0[i]
163                         ix=i
164             x1.append(x0[ix]), y1.append(y0[ix]), z1.append(z0[ix]),
165             ↪ r1.append(r0[ix])
166             ## Uncomment the print below to save the drop surface
167             ## print x0[ix], y0[ix], z0[ix], r0[ix]
168             ##
169             ## Average z inside every x bin whatever y is
170             x2.append(xc), z2.append(sum(z1)/len(z1))
171             yc += cell
172             xc += cell
173
174     ## Average heights (z) that have the same abscissa (x) bin
175     x2_uniq, z2_sum, z2_count = group(x2, z2)
176     z2_ave = z2_sum/z2_count
177
178     ## Fix a threshold and keep away solitary grains
179     tshold = min(z2_ave)
180
181     z3p=[]
182     x3p=[]
183     for i in range(len(z2_ave)):
184         if (x2_uniq[i] >= 0):
185             if (z2_ave[i] <= 1.2*tshold):
186                 z3p.append(z2_ave[i])
187                 x3p.append(x2_uniq[i])
188
189     z3n=[]

```

```

188     x3n=[]
189     for i in range(len(z2_ave)):
190         if (x2_uniq[i] < 0):
191             if (z2_ave[i] <= 1.2*tshold):
192                 z3n.append(z2_ave[i])
193                 x3n.append(x2_uniq[i])
194
195     if (x3p==[] and x3n==[]):
196         print 'Problem at time step:', dumpfile, '[' , ntimes.index('%s' %
           ↪ dumpfile)+1, '/', len(ntimes), ']'
197     elif (x3p == []):
198         xmed = -max(x3n)
199     elif (x3n == []):
200         xmed = min(x3p)
201     else:
202         xmed=0.5*(min(x3p)-max(x3n))
203
204     z3=[]
205     x3=[]
206     for i in range(len(z2_ave)):
207         if (-xmed <= x2_uniq[i] <= xmed):
208             z3.append(z2_ave[i])
209             x3.append(x2_uniq[i])
210
211     ## Keep track of the work done
212     print 'Time step:', dumpfile, '[' , ntimes.index('%s' % dumpfile)+1,
           ↪ '/', len(ntimes), ']'
213
214     ## Fit with a polynomial of order "polyord",
215     z4 = polyfit(x3, z3, int(polyord))
216     ## than construct the polynomial
217     p4 = poly1d(z4)
218
219     # ## Open heap and fit files
220     f2 = open("fit_heap_" + "%s" % dumpfile + ".dat", 'w')
221     f3 = open("unfit_heap_" + "%s" % dumpfile + ".dat", 'w')
222     f4 = open("norm_heap_" + "%s" % dumpfile + ".dat", 'w')
223
224     x3fit=[]
225     z3fit=[]

```

```

226     for i,j in zip(x3, p4(x3)):
227         if (float(str(j)) >= tshold):
228             x3fit.append(float(str(i)))
229             z3fit.append(float(str(j)))
230             f2.write("%6.3f %8.3f\n" % (float(str(i)), float(str(j))))
231     f2.close()
232
233     for i,j in zip(x3, z3):
234         f3.write("%6.3f %8.3f\n" % (float(str(i)), float(str(j))))
235     f3.close()
236
237     ## Compute surface under parabola
238     area_fit = trapz(z3fit, x3fit)
239     area_unfit = trapz(z3, x3)
240
241     ## Height and width of heap profile
242     width = max(x3)-min(x3)
243     height = max(z3)-min(z3)
244
245     width_fit = max(x3fit)-min(x3fit)
246     height_fit = max(z3fit)-min(z3fit)
247
248     ## Errors of the fits
249     height_err = 100*abs(height_fit-height)/height
250     width_err = 100*abs(width_fit-width)/width
251
252     dely = 0.5*rmax
253
254     ypmin = -7*rmax
255     ypmax = +7*rmax
256
257     yp = ypmin-rmax
258
259     s0 = 0
260     pf=[]
261     while (yp <= ypmax+rmax):
262         for i in range(len(y0)):
263             if (-xmed <= x0[i] <= xmed): ## Not all the grains!
264                 if (abs(yp-y0[i]) < r0[i]): ## The plane and the grain can
                    → intersect

```

```

265         rf = reff(r0[i],y0[i],yp)
266         s0 += disksurf(rf)
267
268     pf.append(s0)
269     ## Move the slice forward and reset counter for packing fraction
270     s0 = 0
271     yp += dely
272
273     phi_fit = sp.average(pf)/area_fit
274     phi_unfit = sp.average(pf)/area_unfit
275
276     f1.write("%8d %9.3f %9.3f %9.3f %9.3f %7.2f %7.2f %10.3f %10.3f %8.3f
↪ %8.3f\n" (float(dumpfile), height, width, height_fit, width_fit, %
277         height_err, width_err, area_fit, area_unfit, phi_fit, phi_unfit))
278     ## Print the normalized granular drop
279     xnorm=[]
280     ynorm=[]
281
282     for i in range(len(x3)):
283         xnorm.append(x3[i]/width)
284         ynorm.append((z3[i]-tshold)/height)
285
286     f1.close()

```

A.3 Extraction du champs de vitesse

prepapre_velocity_field.py

```
1  #!/usr/bin/env python
2  #
3  """
4      Prepare data to plot vector and scalar velocity fields
5
6      Version 1.0 by Sidi M. Khefif @ Tlemcen <Fri 10 Feb 10:45:47 CET 2017>
7      Version 1.1 by Sidi M. Khefif @ Tlemcen <Fri 16 Jun 22:30:17 CET 2017>
8      Version 1.2 by Sidi M. Khefif @ Tlemcen <Thu 02 Nov 18:40:17 CET 2017>
9      <sm.khefif@essa-tlemcen.dz>
10 """
11 import os
12 import sys
13 import glob
14 import math
15 import pylab
16 import re
17 import numpy as np
18 import scipy as sp
19 from numpy import *
20
21 try:
22     dumpsurf = sys.argv[1]
23     timeleap = sys.argv[2]
24     Lx = sys.argv[3]
25     Lz = sys.argv[4]
26 except:
27     print "Usage: ",sys.argv[0], "dumpSuffix timeLeap width height";
28     sys.exit(1)
29
30 """
31 Naturally sorting files by Ned Batchelder
32 """
33 def tryint(s):
34     try:
35         return int(s)
36     except:
```

```

37         return s
38
39     def alphanum_key(s):
40         return [ tryint(c) for c in re.split('([0-9]+)', s) ]
41
42     dumpsuf = sys.argv[1]
43     timeleap = sys.argv[2]
44     Lx = float(sys.argv[3])
45     Lz = float(sys.argv[4])
46
47     ## The file to keep time, height and width and other stuff
48     f1 = open("vsf.dat", 'w')
49     #f1.write("#x      z      v_x      v_z      norm_v\n")
50
51     dumplist = glob.glob('dump*.' + '%s' % dumpsuf)
52     dumplist.sort(key=alphanum_key)
53
54     timeseries = [re.split('([0-9]+)', i)[1] for i in dumplist]
55     ## Select spaced configs
56     ntimes=[]
57     for i in range(len(timeseries)):
58         if (fmod(int(timeseries[i]), int(timeleap)) == 0):
59             ntimes.append(timeseries[i])
60
61     ## Set the grid
62     xgrid = []; zgrid = []
63
64     step = 0.2
65
66     nxz = 0
67     for i in xrange(0, int(Lx/step)):
68         for j in xrange(0, int(Lz/step)):
69             xgrid.append(i*step)
70             zgrid.append(j*step)
71             nxz += 1
72
73     xgmax = max(xgrid)
74     zgmax = max(zgrid)
75     xgmin = min(xgrid)
76     zgmin = min(zgrid)

```

```

77
78 # Smoothing length
79 sl = 2.5 ## 1.5*D
80
81 ## Prepare empty list for cumulative data over several configurations
82 vxav = [0 for i in range(nxz)]; vzav = [0 for i in range(nxz)]
83 vav = [0 for i in range(nxz)]; vmav = [0 for i in range(nxz)]
84 nav = [0 for i in range(nxz)];
85
86 ## THIS IS THE BIG LOOP
87 for dumpfile in ntimes:
88
89     ## Open dump file
90     dfname = open("dump" + "%s" % dumpfile + "." + "%s" % dumpsuf, 'r')
91
92     ## Read and ignore header lines
93     for i in range(5):
94         dfname.readline()
95
96     ## Read simulation box size
97     poslo = []; poshi = []
98     for i in range(3):
99         line = dfname.readline()
100        line = line.strip()
101        columns = line.split()
102        poslo.append(float(columns[0]))
103        poshi.append(float(columns[1]))
104
105    ## Close input file
106    dfname.close()
107
108    ## Extract from every dump file the particles positions (x,y,z) and
109    ↪ their radius (r)
110    ## Pick up mobile grains only!
111    ## Save the data to a temporary "pile.dat" file
112    #os.system("awk 'NR>9 && $2==1' + \"{print $3, $4, $5, $6, $8}' dump" +
113    ↪ "%s" % dumpfile + "." + "%s" % dumpsuf + "> pile.dat")
114
115    os.system("awk 'NR>9 && $2==1 && $3 >= 0.0 && $5 >= 0.0' +
116    ↪ \"{print $3, $4, $5, $6, $8}' dump" +

```

```

115         "%s" % dumpfile + "." + "%s" % dumpsuf + "> pile.dat")
116
117     ## Open heap file
118     pilefile = open("pile.dat", 'r')
119
120     ## Create empty lists for positions, velocities and grain size
121     x0 = []; y0 = []; z0 = []
122     vx = []; vz = []
123
124     ## Pick up grains positions and sizes
125     for line in pilefile:
126         line = line.strip()
127         columns = line.split()
128         x0.append(float(columns[0])); y0.append(float(columns[1]));
129         ↪ z0.append(float(columns[2]))
130         vx.append(float(columns[3])); vz.append(float(columns[4]))
131
132     ## Destroy the temporary file
133     pilefile.close()
134     os.remove("./pile.dat")
135
136     npart = len(x0)
137     xmax=float(max(x0)); xmin=float(min(x0))
138     ymax=float(max(y0)); ymin=float(min(y0))
139     zmax=float(max(z0)); zmin=float(min(z0))
140
141     #f2 = open("vel_map_" + "%s" % dumpfile + ".dat", 'w')
142
143     print 'Please wait, processing file:', dumpfile, '[',
144     ↪ ntimes.index('%s' % dumpfile)+1, '/', len(ntimes), ']'
145
146     jj = 0
147     xp = 0
148     while (xp <= xgmax):
149         zp = 0
150         vx0 = 0; vz0 = 0; vmod = 0; count = 0
151         while(zp <= zgmax):
152             for i in range(npart):
153                 if (-4 <= y0[i] <= 4):
154                     if (sqrt((x0[i]-xp)**2+(z0[i]-zp)**2) <= s1):

```

```

153             vx0 += vx[i]
154             vz0 += vz[i]
155             vmod += sqrt(vx[i]**2+vz[i]**2)
156             count += 1
157
158             vxav[jj] += vx0
159             vzav[jj] += vz0
160             vmav[jj] += vmod
161             nav[jj] += count
162             jj += 1
163
164             vx0 = 0; vz0 = 0; vmod = 0; count = 0
165             zp += step
166
167             xp += step
168
169             #f2.close()
170             ##
171             ## Compute average values over all configs
172
173             for i in range(nxz):
174                 if (nav[i] > 0):
175                     vxav[i] /= nav[i]
176                     vzav[i] /= nav[i]
177                     vmav[i] /= nav[i]
178                     vav[i] = sqrt(vxav[i]**2+vzav[i]**2)
179
180             #vmax = max(x for x in vav)
181
182             for i in range(nxz):
183                 if (nav[i] > 0):
184                     f1.write("%7.2f %7.2f %10.7f %10.7f %10.7f\n" % \
185                             (xgrid[i], zgrid[i], vxav[i], vzav[i], vmav[i]))
186
187             f1.close()

```

Annexe B

Publication

“Spreading of a Granular Droplet under Horizontal Vibrations.”

Article publié dans *Physical Review E*.

<https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.97.062903>

S. M. Khefif, A. Valance, F. Ould-Kaddour

Nota Bene:

La figure 2 de l'article a été sélectionnée par le comité de rédaction du journal pour apparaître dans le *Kaleidoscopes* du mois de juin 2018.

<https://journals.aps.org/pre/kaleidoscope>

<https://journals.aps.org/pre/kaleidoscope/pre/97/6/062903>

Spreading of a granular droplet under horizontal vibrations

Sidi Mohammed Khelif, ^{1,*} Alexandre Valance, ^{2,†} and Fouzia Ould-Kaddour ³

¹*École Supérieure des Sciences Appliquées, BP 165 RP Bel Horizon, 13000 Tlemcen, Algeria*

²*Institut de physique de Rennes, UMR CNRS 6251, Université de Rennes 1, Campus Beaulieu Bâtiment 11A, 263 av. Général Leclerc, 35042 Rennes Cedex, France*

³*Laboratoire de Physique Théorique, Université Abou Bekr Belkaid, BP 119 13000 Tlemcen, Algeria*



(Received 22 December 2017; revised manuscript received 10 May 2018; published 15 June 2018)

By means of three-dimensional discrete element simulations, we study the spreading of a granular droplet on a horizontally vibrated plate. Apart from a short transient with a parabolic shape, the droplet adopts a triangular profile during the spreading. The dynamics of the spreading is governed by two distinct regimes: a superdiffusive regime in the early stages driven by surface flow followed by a second one which is subdiffusive and governed by bulk flow. The plate bumpiness is found to alter only the spreading rate but plays a minor role on the shape of the granular droplet and on the scaling laws of the spreading. Importantly, we show that in the subdiffusive regime, the effective friction between the plate and the granular droplet can be interpreted in the framework of the $\mu(I)$ -rheology.

DOI: [10.1103/PhysRevE.97.062903](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.062903)

I. INTRODUCTION

The spreading dynamics of a granular material subjected to external horizontal agitations may be crucial in some industries like coatings. But unlike the spreading of a liquid on a solid, vibrated granular films have not been given great attention. As a reminder, extensive experimental, theoretical, and numerical studies have shown that the spreading dynamics of a liquid droplet goes through two stages, an early capillary slow regime governed by Tanner's law $r \sim t^{1/10}$, when the droplet radius r is smaller than the capillary length, followed by a gravitational faster regime $r \sim t^{1/7}$, when the droplet has a pancake shape [1]. However, when the viscous dissipation is neglected and a balance between inertia and surface tension is invoked, the power law of the spreading dynamics become $r \sim t^{1/2}$ at early stages and $r \sim t^{2/3}$ for later ones [2,3]. In other studies, it has also been shown that the spreading of polymer nanodroplets in cylindrical geometry scales as $r(t) \sim t^{1/7}$ for the earlier times and as $r(t) \sim t^{1/5}$ for the asymptotic stages [4–6].

The spreading of a granular system requires in general external mechanical excitation to overcome solid friction. A large number of studies have been conducted on vibrated granular systems but in confined geometries (see, for example, the review by Nadler *et al.* [7]). A pioneering work by Sanchez *et al.* [8] has been conducted to investigate the spreading dynamics of a free granular deposit on a controlled wiggling surface. They show that the transverse width W of the granular film follows a single spreading scaling law $W(t) \sim t^{1/3}$ and that the droplet morphology obeys a scale invariant parabolic profile. They also proposed a nonlinear diffusion model for the spreading dynamics that reproduces reasonably well the experimental outcomes. From a simple Coulomb frictional

model, they were able to identify two different rheological behaviors of the granular droplet: shear thickening at low vibration energies and shear thinning at high energies, leading to a nonmonotonous behavior of the effective friction coefficient μ as a function of the inertial number I of the $\mu(I)$ -rheology, in contrast with the previously observed shear-rate dependent behavior in a granular inertial regime [9].

One major limitation to this specific experiment is that the spreading process and the droplet rheology are inferred only from the temporal evolution of the droplet shape but not from bulk properties. In order to overcome this limitation and get a better understanding of the underlying physical mechanisms, we perform extensive discrete element method (DEM) simulations of the spreading of a granular droplet on a horizontally vibrated plate. We investigate the spreading dynamics as well as the friction between the droplet and the basal substrate for a wide range of vibration energies and various plate bumpiness. We also analyze the bulk properties of the granular droplet during the spreading process, including the velocity field and solid packing fraction.

The paper is organized as follows. In Sec. II we briefly recall the basic elements of the DEM and describe the physical simulated system. Results are presented in Sec. III, which includes the morphodynamics of the granular droplet, the scaling laws of the spreading, the influence of the plate bumpiness on the spreading process, and the effective rheology of the granular droplet. Our conclusion and outlook are given in Sec. IV.

II. SIMULATION PROCEDURE

A. Simulated system

We perform three-dimensional discrete element method (DEM) simulations on model systems of polydisperse ($\pm 20\%$), cohesionless spheres of diameters uniformly distributed around the mean value d and of uniform material density ρ .

*sm.khelif@essa-tlemcen.dz

†alexandre.valance@ipr.univ-rennes.fr

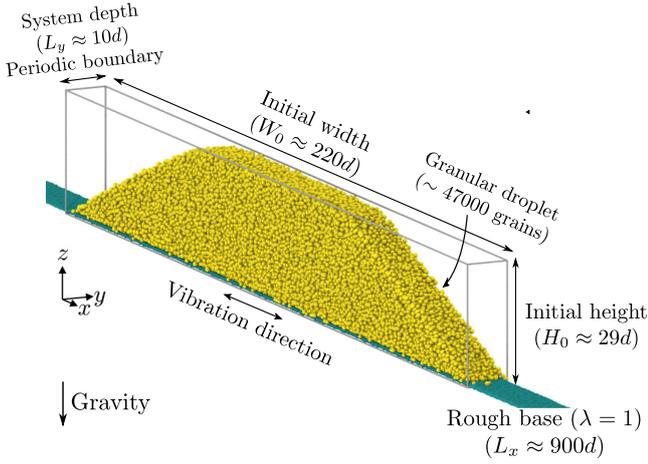


FIG. 1. Sketch of the DEM simulated granular droplet laid on a rough base driven by horizontal vibrations and mimicking the experiment in Ref. [8].

The simulation box is rectangular ($900d \times 10d \times 30d$) with periodic boundary conditions along the y dimension; it has free boundaries in the x dimension and is limited in the vertical z dimension by a base and an open top as is depicted in Fig. 1. The base is made either bumpy or smooth. We employ four different bases: three that are bumpy and a smooth one. The bumpy bases are made of spherical grains placed at the nodes of a square lattice. The average diameter of the basal spheres is $d_s = \lambda d$, with $\lambda = 0.25, 0.5$ and 1 . The smooth base corresponds to $\lambda = 0$. The substrate is vibrated horizontally by imposing a sinusoidal movement $x(t) = a \sin(\omega t)$, where a and ω are, respectively, the amplitude and the pulsation of the vibration. On the basis of the experiments from Sanchez *et al.* [8], we set $a = d$ and investigate a set of pulsations ranging from $0.5\sqrt{g/d}$ to $2.5\sqrt{g/d}$, where g is the gravity acceleration. In terms of the reduced acceleration $\Gamma = a\omega^2/g$, we thus probe values from $0.4g$ to $6g$ for the latter. We undertook a few simulations with thicker systems ($20d$). We did not notice any major variations in the spreading dynamics in comparison with small systems ($10d$). We thus assume that $10d$ is large enough to avoid the effects of the periodic boundary conditions.

In the presence of a gravitational field \mathbf{g} , the grains have translational and rotational accelerations determined by numerically integrating Newton's second law using the Velocity Verlet algorithm [10]. The total forces and torques acting on a particle i are

$$\mathbf{F}_i^{\text{total}} = m_i \mathbf{g} + \sum_j \mathbf{F}_{ij}^n + \mathbf{F}_{ij}^t, \quad (1)$$

$$\boldsymbol{\tau}_i^{\text{total}} = -\frac{1}{2} \sum_j \mathbf{r}_{ij}^n \times \mathbf{F}_{ij}^t, \quad (2)$$

where index j goes over all the grains in mechanical contact with the grain i , and the superscripts n and t stand for *normal* and *tangential* components of the contact force. The forces \mathbf{F}^n and \mathbf{F}^t are functions of the relative position of the particles and of their relative velocity; they are composed of conservative (elastic) and dissipative (viscous) parts, which can be referred

TABLE I. Interaction values used in the simulations. The particle mass m , its diameter d , and gravitation constant g are used to rescale all the material parameters and hence are set to unity. A polydispersity in the particle size of $\pm 20\%$ is introduced to hinder crystallization.

Parameter	Symbol	Grain/grain	Grain/base	Units
Elastic constant	k_n	2×10^5	2×10^5	mg/d
Normal restitution	e_n	0.972	0.8	
Tangential restitution	e_t	0.25	0.35	
Particle friction	μ_p	0.5	0.5	

to as a spring-dashpot model. The normal and tangential contact forces are written as [11]

$$\mathbf{F}^n = (k_n \delta + \gamma_n v_n) \mathbf{u}_n, \quad (3)$$

$$\mathbf{F}^t = (k_t \xi + \gamma_t v_t) \mathbf{u}_t, \quad (4)$$

where δ is the overlap distance, and $k_{n,t}$ and $\gamma_{n,t}$ are the elastic and the viscoelastic constants and are defined below. The unit vector of the normal direction is $\mathbf{u}_n = (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ and \mathbf{u}_t is its tangential counterpart. v_n and v_t are, respectively, the moduli of the normal and the tangential components of the relative velocity at contact:

$$v_n = (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{u}_n \mathbf{u}_n, \quad (5)$$

$$v_t = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j - v_n + \frac{1}{2}(d_i \boldsymbol{\omega}_i + d_j \boldsymbol{\omega}_j) \times \mathbf{u}_n, \quad (6)$$

where the parameters d_i , \mathbf{v}_i , and $\boldsymbol{\omega}_i$ represent, respectively, the diameter, velocity, and angular velocity of the particle i . We can thus define a tangential unit vector by $\mathbf{u}_t \equiv \mathbf{v}_t/v_t$. We denote by ξ the relative elastic tangential displacement between two particles in contact; it is computed by integrating the tangential relative velocity during the lifetime of a contact that started at time t_0 : $\xi = \int_{t_0} v_t(t') dt'$. The tangential elongation ξ has to be truncated whenever necessary to satisfy the Coulomb's friction law locally $F_t \leq \mu_p F_n$, where μ_p is the interparticle friction coefficient and $F_n \equiv \|\mathbf{F}_n\|$ and $F_t \equiv \|\mathbf{F}_t\|$. This force scheme is identically applied to the particle-substrate interactions but with a different set of model parameters. In Table I we give a set of interaction parameters used in the simulations.

Solid mechanics provides relations between the model parameters. When two grains enter into collision, the linear spring-dashpot model of the forces keep the two grains in contact for a finite duration before they separate again. The ratio of the relative normal velocities before and after the collision defines a normal restitution coefficient e_n which is directly related to γ_n by [11]

$$e_n = \exp\left(-\frac{\gamma_n}{2m_{\text{eff}}} t_n\right), \quad (7)$$

with

$$t_n = \pi \left[\frac{k_n}{m_{\text{eff}}} - \left(\frac{\gamma_n}{2m_{\text{eff}}} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (8)$$

the duration of the collision and $m_{\text{eff}} = m_i m_j / (m_i + m_j)$ the effective mass. Similarly, we can define a restitution coefficient

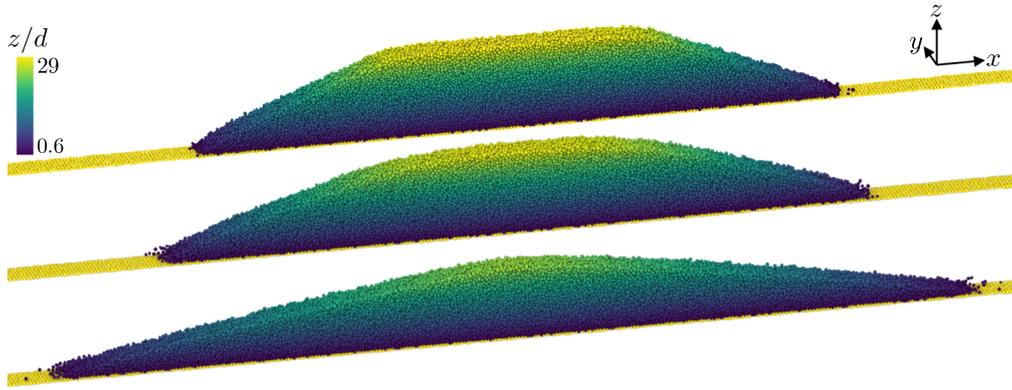


FIG. 2. Profiles of a granular droplet while spreading at acceleration $\Gamma = 1.10$ on a substrate of bumpiness $\lambda = 1$. The chronological sequences have been recorded at times represented in units of the vibration period: $t/T = 1/8$ (top), $t/T = 3$ (middle), and $t/T = 12$ (bottom). The color gradient codes the z position of the grains in the droplet. These simulation snapshots have been rendered by the open visualization tool OVITO [18].

e_t for the tangential relative velocities. The restitution coefficients e_n and e_t set the values of the model parameters γ_n and γ_t . We choose for e_n and e_t values corresponding to spent glass beads [12] as reported in Table I.

The value of the spring stiffness should in principle be related to material properties. A link to the Young modulus and Poisson ratio is possible for Hertzian contacts. For linear models, we have to rely on an *ad hoc* approximation [13]. In the linear spring-dashpot model, taking equal normal and tangential contact durations leads to a relation between the elastic constants k_n and k_t that reads $7k_t[\pi^2 + (\ln e_n)^2] = 2k_n[\pi^2 + (\ln e_t)^2]$. This is different from the usual $k_t/k_n = 2/7$ for equal restitution coefficients e_n and e_t . We employ a classical value used in the literature [13,14]: $k_n = 2 \times 10^5 mg/d$ (see Table I). This value corresponds to softer particles than real glass particles but allows faster simulations. We pick the particle-particle and particle-wall friction coefficients to be both $\mu_p = 0.5$, which corresponds to standard values found in the literature based on static rather than dynamic values [15–17]. Finally, it is noteworthy that all the simulation results are given in dimensionless units obtained by setting the particle diameter d , its mass m , and gravity acceleration g equal to unity.

B. Preparation of the droplet

We conduct numerical simulations to mimic the spreading experiments of a granular droplet reported in Ref. [8]. In order to build up the initial configuration, we add inside the simulation box two transverse walls at symmetric y positions from the middle of the simulation box and are placed $150d$ apart. We then fill the inner box by pouring 47 000 grains from a randomly diluted simple cubic lattice. Once the grains have sedimented, we vigorously shake the whole simulation box horizontally with a dimensionless acceleration $\Gamma = 4.38$ during a time span $t = 130T$ where $T = 2\pi/\omega$ is the vibration period. After turning off the vibrations and letting the system relax, we slowly move apart the transverse lateral walls until they reach the limits of the simulation box. At the end of the process, the transverse walls are no more in contact with the granular droplet so that they can be removed safely. By doing

so, we obtain a granular pile with two slip faces and a flat top which is $220 \times d$ wide, $29 \times d$ high and $10 \times d$ deep (see Fig. 1). In the experiment in Ref. [8], the top surface of the initial pile preparation has the shape of a chalet roof. This is due to a different preparation scheme in the experiment in which a bottomless box is first filled with grains, then horizontally vibrated to level out the deposit before it is lifted up. Our procedure is employed for generating initial configurations of all simulations. The generated granular piles may slightly differ according to the basal bumpiness. For every basal bumpiness corresponding to different values of the parameter λ , we run the same set of simulations for the set of dimensionless accelerations $\Gamma = \{0.39, 0.49, 0.62, 0.80, 1.10, 1.58, 2.47, 4.39, 6.32\}$.

III. RESULTS

We present first the simulation results in the case where the basal bumpiness parameter is $\lambda = 1$ and then investigate the influence of the bumpiness on the spreading dynamics. Finally, we analyze the rheological property of the granular droplet in course of the spreading process.

A. Droplet morphology

As already described in the previous section, the initial state is a granular heap with two slip faces and a nearly flat top. When turning on the vibrations, and after a short transient regime of about $t = 3T$, the free surface of the droplet rounds out. The granular droplet profile is shown in Fig. 2 at different times while spreading over a substrate driven by horizontal vibrations. After this transient, we record the droplet profile at regularly spaced time intervals measured in terms of multiples of the vibration period T . The vibrations are turned off when the toe of the granular droplet reaches the limits of the simulation box.

Due to the invariance in the y direction, we focus our attention on the morphological properties of the one-dimensional profile $z(x)$ of the granular droplet. From the profile, it is easy to extract the maximum height H and lateral width W and study their temporal evolution in course of time.

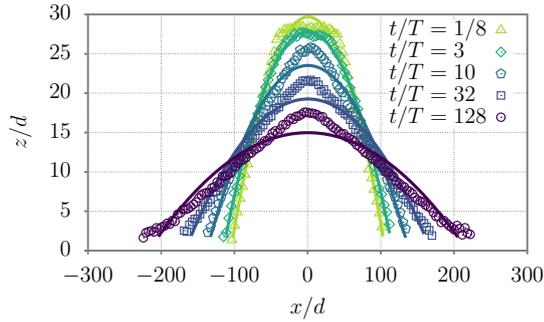


FIG. 3. Mean two-dimensional profiles (open symbols) of a granular droplet at different instants along with their corresponding best parabolic fits (solid lines) for $\Gamma = 0.39$ and substrate bumpiness $\lambda = 1$. Note the large discrepancy between the horizontal and the vertical scales.

In Fig. 3 we present the time evolution of the one-dimensional profile of the free surface obtained at the acceleration $\Gamma = 0.39$. The solid lines correspond to the best parabolic fits of the numerical data. At the very beginning of the spreading process, while still in the transient regime ($t/T = 1/8$), we clearly see that the heap has a nearly flat top which is progressively smoothed out. The heap then adopts a shape that can be pretty well approximated by a parabolic profile at time $t/T = 3$.

At later times, the droplet profile deviates significantly from the parabolic shape and exhibits a triangular morphology. This is the first notable discrepancy with the experiments in Ref. [8] where the heap keeps a parabolic shape during the entire spreading process. It is noteworthy to mention that the scale of the vertical dimension in Fig. 3 has been magnified by a factor of 10 in comparison with the horizontal scale, so that the deviations from the parabolic plots are visually amplified. The profiles rescaled by their respective maximum height $H(t)$ and width $W(t)$ are shown in Fig. 4. In the rescaled plot, we clearly see the transition from a parabolic shape at the initial stages to a triangular one at the final stages.

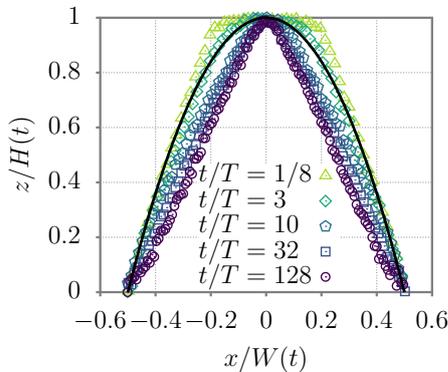


FIG. 4. The granular droplet profiles of Fig. 3 are normalized here by their instantaneous maximum width $W(t)$ and height $H(t)$ (open symbols). The black solid line represents a normalized parabolic function $z(x) = 1 - (2x)^2$ added to the plot as a guide to the eye.

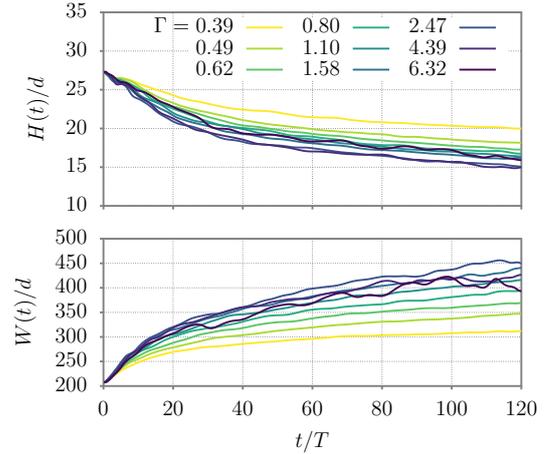


FIG. 5. Time evolution of a granular droplet height $H(t)$ and its width $W(t)$ while horizontally vibrating a rough substrate ($\lambda = 1$) at different acceleration rates Γ .

B. Spreading dynamics

A key feature to understand the spreading dynamics of a granular droplet is to quantify the rate of the spreading process as a function of the intensity of the vibrations. In Fig. 5 we present the time evolution of the height $H(t)$ and width $W(t)$ of the granular droplet versus the reduced acceleration Γ . As expected, the height is decreasing in course of time while the width is increasing. We also find that the spreading rate increases with an increasing acceleration Γ . The strong correlation between the height and width of the granular droplet indicates that its volume keeps roughly constant. In other words, the compaction or decompaction process remains marginal. We will come back to that issue later in the paper.

It is noteworthy to mention that in the first stages of the spreading process (i.e., $t \lesssim 5T$), the curves $H(t)$ and $W(t)$ obtained for different values of Γ all collapse in a unique trend. This transient regime thus seems to be independent of the amount of vibrational energy injected in the system. These earlier stages correspond in fact to a slight decompaction process as discussed later. After this transient, the higher the acceleration rate, the more effective the spreading, except for extreme acceleration values ($\Gamma = 4.39$ and 6.32) for which the spreading rate saturates or even slows down.

The experiments of Sanchez *et al.* [8] reveal that the spreading dynamics is subdiffusive and obeys the following scaling law:

$$W^3(t) - W^3(0) \sim t. \quad (9)$$

To check whether this scaling law holds or not, we replot our data to represent the temporal evolution of the relative width $W^3(t) - W^3(t_0)$ as represented in Fig. 6. We discard the initial transient and set the initial time to $t_0 = 5T$. Definitely, the numerical data do not show a linear trend as would be expected if the experimental scaling law held. In Fig. 7 a log-log plot reveals instead that the spreading dynamics exhibits two distinct power-law regimes of the form

$$W(t) - W(t_0) \sim t^{m,n}, \quad (10)$$

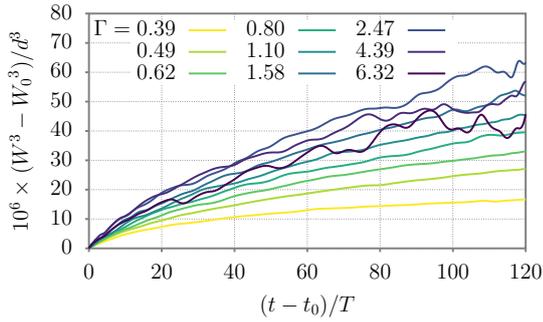


FIG. 6. Spreading dynamics of a granular droplet on a rough substrate ($\lambda = 1$) following the model proposed in Ref. [8] [Fig. 3(d) therein] at different acceleration rates Γ .

where m and n are two distinct exponents relative to the two observed spreading behaviors.

The first regime [i.e., $(t - t_0)/T \leq 16$] is *superdiffusive*: the scaling m is of order of 0.8. The second regime is characterized by a scaling exponent $n < 0.5$, thus corresponding to a slower dynamics and to a *subdiffusive* spreading. The respective values of m and n obtained for the different acceleration rates Γ are listed in Table II. We observe a slight variation of the scaling exponents with the acceleration rate: m ranges from 0.61 to 0.81, while n takes values from 0.34 to 0.48. There is no clear variation trends in m and n with increasing acceleration.

At this stage, it is important to emphasize that the second subdiffusive regime found in the simulation is compatible with that observed in the experiments by Sanchez *et al.* [8]. We indeed obtain a scaling exponent close to $1/3$.

We analyze another important parameter, the solid volume fraction ϕ , which may vary during the spreading due to the vibrations. Since this system is invariant along the y direction, ϕ is computed as the ratio of two surfaces $\phi = S_s/S_r$, where S_s is the intersection surface of a vertical (x, z) plane at a given y position with the three-dimensional assembly of spheres, and S_r is the reference surface area below the droplet profile. The value of the packing fraction ϕ is averaged through the droplet width along the y direction. In Fig. 8 we plot the temporal evolution of the mean solid fraction of the granular droplet. In the transient stage (i.e., $t < 5T$), we observe a decompaction

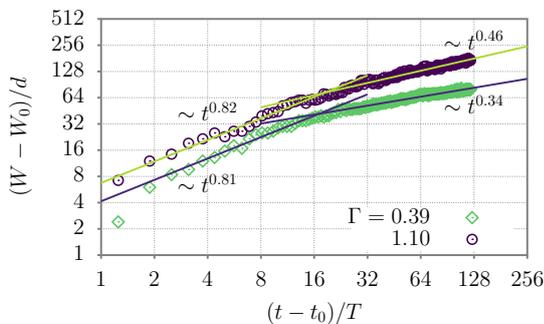


FIG. 7. A log-log plot of the granular droplet contact width on a rough substrate ($\lambda = 1$) for acceleration rates $\Gamma = 0.39$ and 1.10 . Two different spreading regimes are evidenced.

TABLE II. Critical exponents m (superdiffusive) and n (subdiffusive to diffusive) of the log-log spreading scaling laws for substrate bumpiness $\lambda = 1$ at different acceleration rates Γ .

Γ	0.39	0.49	0.62	0.80	1.10	1.58	2.47	4.39	6.32
m	0.81	0.70	0.76	0.78	0.82	0.72	0.71	0.73	0.61
n	0.34	0.40	0.42	0.44	0.46	0.47	0.48	0.40	0.43

process which increases in intensity for increasing acceleration: the higher Γ , the more effective the decompaction. After this transient, the packing fraction ϕ keeps roughly constant in course of time. We can note, however, a slight recompaction of the granular droplet in the case of the smallest acceleration rates ($\Gamma = 0.39$ and 0.49).

C. Bumpiness influence

We now examine the influence of the basal bumpiness on the spreading dynamics. Figure 9 presents the temporal evolution of the width W and height H of a granular droplet on four different substrates with respective bumpiness values $\lambda = 0, 0.25, 0.5$, and 1 , obtained at a vibration acceleration $\Gamma = 1.10$. As expected, the spreading rate increases with decreasing bumpiness values. The increase of the spreading rate is spectacular when we go from $\lambda = 1$ to $\lambda = 0.5$ but is much weaker for lower values of λ .

It is important to note that we do not observe significant variation of the exponents m and n of the scaling laws with the substrate bumpiness (see Table III). We still have a first superdiffusive regime followed by a subdiffusive one.

Additionally, we analyze the influence of the basal bumpiness on the temporal evolution of the solid volume fraction of the droplet during the spreading (see Fig. 10). Interestingly, lowering the bumpiness results in a greater recompaction. For the smooth case ($\lambda = 0$) the packing fraction of the droplet at the end of the spreading process (i.e., $t/T = 120$) is 7% greater than that in the roughest case ($\lambda = 1$). The compaction phenomenon observed for low bumpiness is interpreted as an ordering process of the granular packing induced by the smooth base.

Finally, we shall say a few words about the combined effect of the bumpiness and the vibration acceleration. For finite bumpiness (i.e., $\lambda \neq 0$), the spreading rate is found to have a

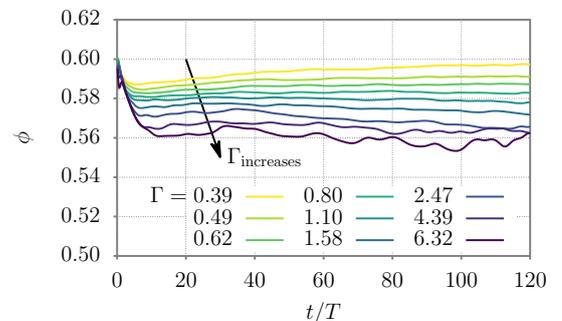


FIG. 8. Evolution of the mean packing fraction ϕ averaged over the granular droplet width in the case of rough substrate $\lambda = 1$ at different acceleration rates Γ .

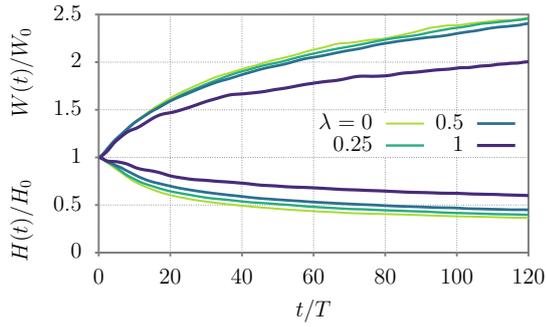


FIG. 9. Time evolution of W relatively to its initial value W_0 for different substrate bumpiness λ at the same acceleration rate $\Gamma = 1.10$ (upper part). The height ratio H/H_0 evolution is also represented (lower part).

nonlinear dependence with the vibration period T (see Fig. 5). In contrast, the smooth case is peculiar in the sense that the spreading becomes linearly dependent of the period T . As seen in Fig. 11, the curves $H(t/T)$ and $W(t/T)$ obtained for different accelerations surprisingly all collapse on each other.

D. Velocity field within the droplet

We looked into the velocity field map obtained by a spatial averaging through the droplet width and a temporal one over a time span of two vibration periods. We observe a marked difference in the velocity field for the two spreading regimes. In the first spreading regime ($t/T = 5$) (see the upper map in Fig. 12 and the vertical velocity profiles in Fig. 13). The flowing phase is localized close to the free surface: it spans from the top of the droplet down to the toe and penetrates the droplet interior over a thickness of about 10 grain diameters. The spreading dynamics at this stage corresponds to the superdiffusive regime in which the flow appears to be controlled by superficial processes similar to avalanches on a granular pile. In contrast, the flow in the second subdiffusive spreading regime (see Figs. 12 and 13) is no longer localized at the free surface but spans more uniformly through the droplet depth. As a result, the spreading process is essentially governed by a bulk flow spanning through the droplet depth rather than a surface flow.

E. Basal friction

The spreading process can be figured out in terms of momentum transfer between the granular droplet and the base. One way to understand how momentum is transferred from the base to the heap is that the whole granular droplet can be seen, in a first approximation, as a solid mass sliding on a substrate

TABLE III. Critical exponents m (superdiffusive) and n (subdiffusive to diffusive) of the spreading scaling laws for different basal bumpiness λ at the same acceleration rate $\Gamma = 1.10$.

λ	0	0.25	0.5	1
m	0.81	0.85	0.78	0.82
n	0.47	0.50	0.49	0.46

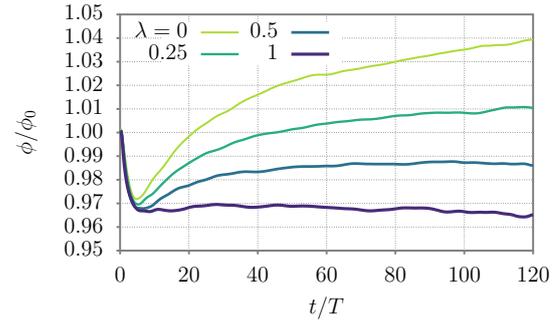


FIG. 10. Normalized solid packing fraction comparison for different substrate bumpiness at the same acceleration rate $\Gamma = 1.10$. ϕ_0 is the packing fraction before activating the vibrations.

with an effective friction coefficient μ which is defined as the ratio of the shear stress τ to the pressure P .

In Fig. 14 we present the time evolution of the effective friction. We observe a first phase during which μ increases monotonously. This increasing phase corresponds to the superdiffusive spreading regime. In a second phase, μ goes towards a stabilization of the friction coefficient. This second phase matches up with the subdiffusive regime identified by a spreading scaling law approaching $t^{1/3}$ as reported in Ref. [8]. In this latter study, a nonlinear diffusion model was developed to explain the $1/3$ exponent. It is based on two assumptions: (1) a constant effective friction coefficient μ and (2) a shallow flow approximation. The latter is justified as long as the vertical velocity are much smaller than their horizontal counterparts. These two assumptions are evidenced in our simulations during the subdiffusive regime. While we have seen that the effective friction is indeed constant (see Fig. 14); the vertical profiles of the horizontal and vertical velocity in Fig. 13 indicate clearly that at $t = 30T$ the vertical velocities are much smaller than the horizontal ones: $v_z \sim -0.02\sqrt{gd}$ and $v_x \simeq 0.1\sqrt{gd}$. The question that naturally arises is Why is the subdiffusive spreading regime not observed in the initial phase of the spreading? In the first regime, the friction coefficient is not constant, but most importantly the hypothesis of shallow flow does not hold anymore. Indeed, we clearly see on the velocity field map (see Fig. 12) that in the first regime, the flow is

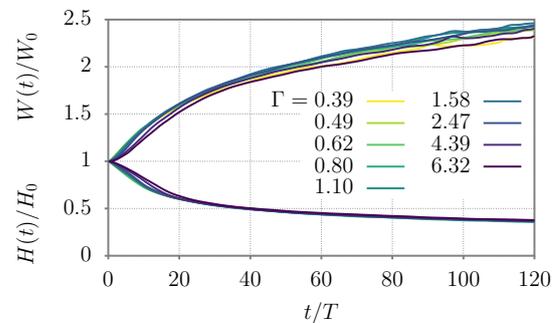


FIG. 11. Normalized width and height comparison for different accelerations at the same bumpiness $\lambda = 0$. W_0 and H_0 are, respectively, the initial width and height.

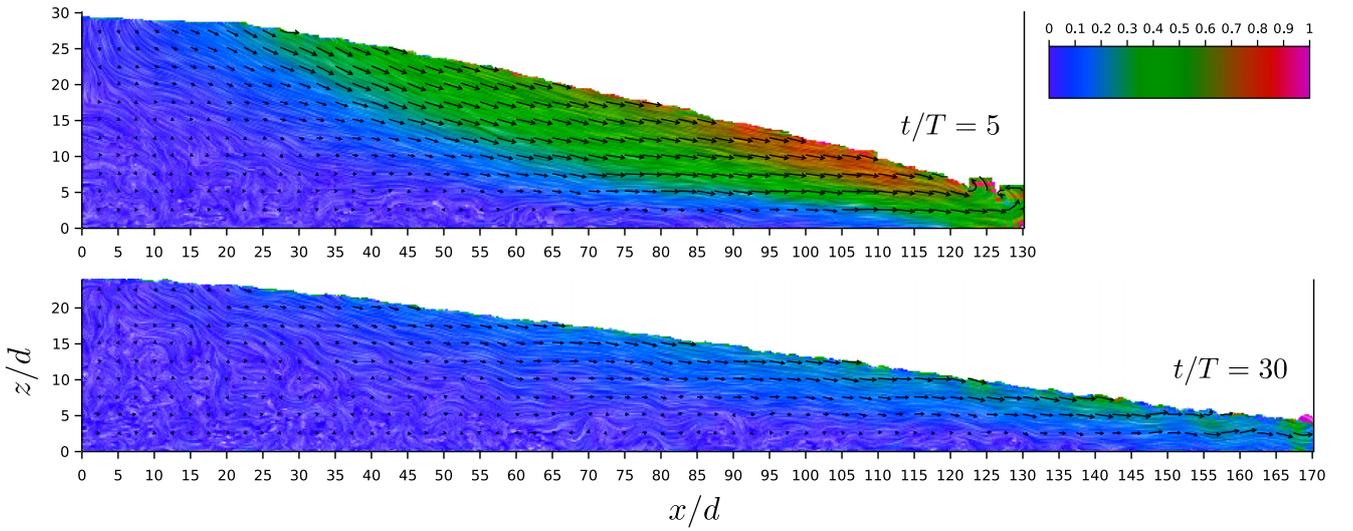


FIG. 12. Profiles of the coarse-grained vector and scalar velocity fields averaged over two vibration periods. All the velocities are normalized by the maximum velocity in both configuration $t/T = 5$ (top) and at $t/T = 30$ (bottom). The substrate bumpiness is $\lambda = 1$ and acceleration $\Gamma = 1.10$. We show only the half of the droplet since the spreading is symmetrical.

localized at the free surface, contrarily to the second regime, in which the flow affects the whole granular droplet. In the first regime, the spreading is thus governed by a surface flow similar to avalanches on a granular pile. This surface flow is more efficient in spreading the droplet and leads to a spreading scaling law with a higher exponent. A more quantitative analysis work remains to be done to be able to derive the value of the exponent. This is what we aim to develop in the

near future using a two-dimensional continuum model with an appropriate rheological law.

F. Effective rheology

We look at the effective rheology in the second asymptotic subdiffusive regime where μ is nearly constant during the spreading. The recent models concerning the rheology of

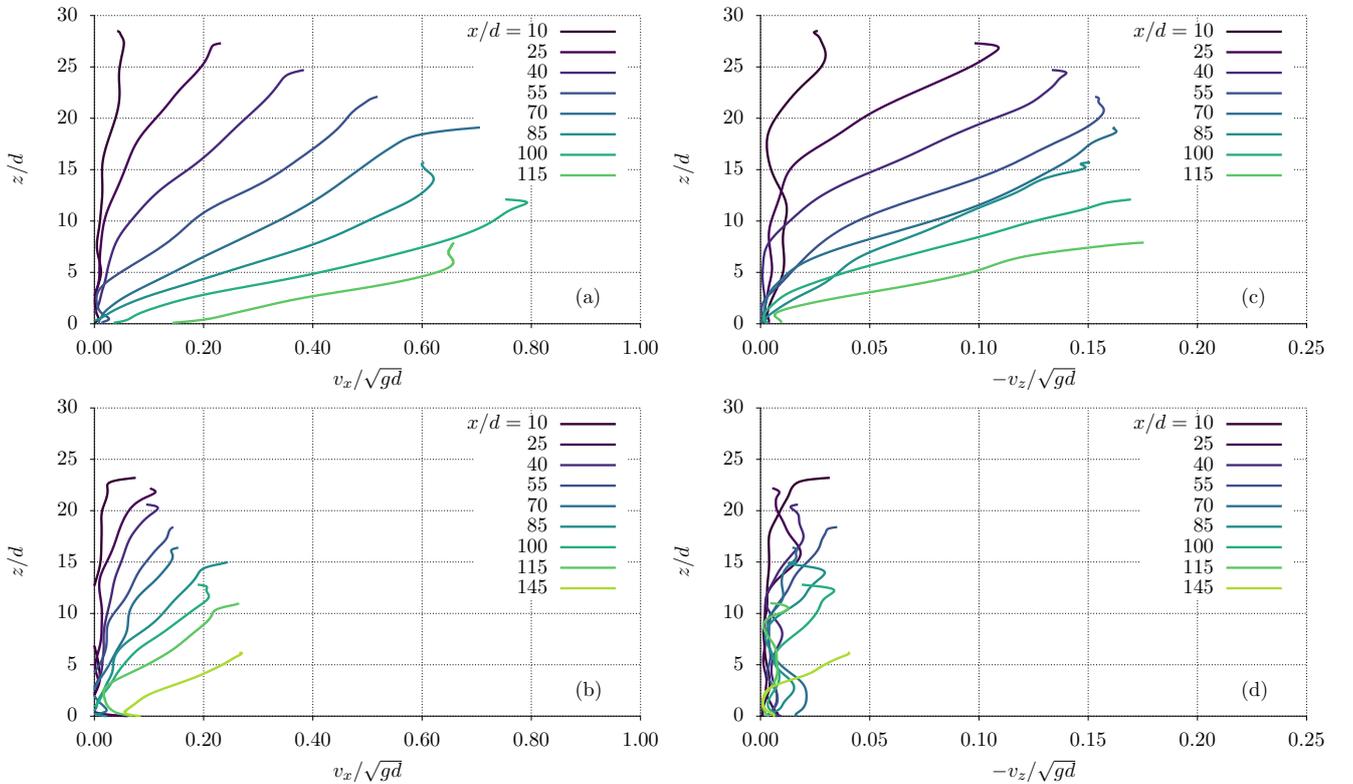


FIG. 13. Vertical profiles of the horizontal and vertical velocity (v_x and v_z) calculated at $t = 5T$ (a, c) and $t = 30T$ (b, d) respectively.

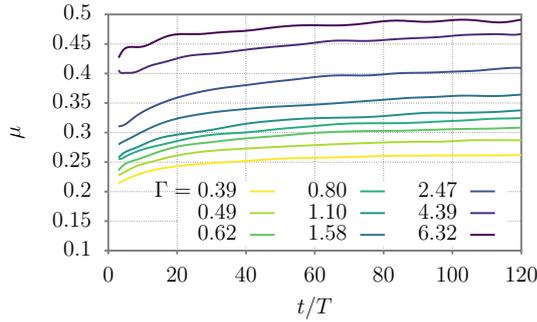


FIG. 14. Time evolution of the effective friction coefficient μ for different acceleration rates Γ at constant bumpiness $\lambda = 1$.

granular matter [9,19–23] show that dense unidirectional granular flows can be fairly well described using a single friction coefficient that varies with an inertial dimensionless parameter I , defined as the ratio of a microscopic grain rearrangement timescale to a macroscopic flow timescale. This rheology which may be seen as a generalization of the basic Coulomb friction model, with a friction coefficient that varies according to the local shear rate τ and confinement pressure P , is usually written as

$$\mu(I) = \tau/P = \mu_s + \frac{\mu_\infty - \mu_s}{1 + I_0/I}. \quad (11)$$

The constants μ_s and μ_∞ correspond, respectively, to a minimum friction coefficient at low I and to an asymptotic friction coefficient at high I values. In the case of the spreading of a granular droplet, the macroscopic time is associated with the duration for a grain to travel a distance d under the shear velocity $a\omega$, while the microscopic time is given by the duration of a free grain to fall over a distance d under gravity. This thus gives $I = t_{\text{micro}}/t_{\text{macro}} = (d/\sqrt{gd})/(d/a\omega) = a\omega/\sqrt{gd}$, which is simply the ratio of two velocity scales.

In our numerical study, this inertial number I is varied from 0.6 to 2.5. The magnitude of the inertial number I gives usually an indication about the nature of the granular flow [24]. In the limit of vanishing I ($I \leq 10^{-3}$), the flow can be considered as shear independent (μ is constant and equal to μ_s). For intermediate values of I (i.e., $10^{-2} \leq I \leq 10^{-1}$), this is the so-called dense inertial regime with a rate-dependent flow. At higher inertial number $I \geq 1$, the flow gets faster and more dilute and quits the frictional regime governed by Eq. (11) to

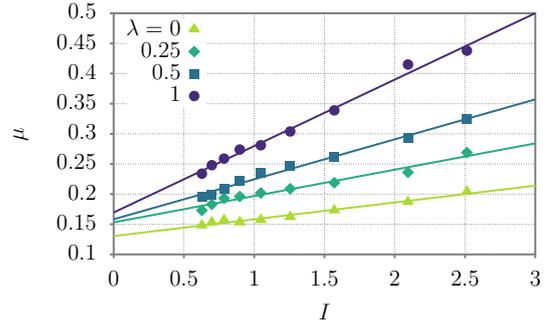


FIG. 15. Effective friction coefficient μ for different bumpiness values λ . Straight lines are the best fits.

enter a collisional regime which is well described by the kinetic theory for dissipative granular gas [25].

The frictional $\mu(I)$ -rheology is usually complemented by an additional relationship which states that the solid fraction ϕ is a decreasing function of the sole parameter I . During the last decade, a large number of experimental and numerical studies confirm the relevance of the frictional $\mu(I)$ -rheology for unidirectional dense granular flows as we report in Table IV.

In the present work, we analyze the asymptotic spreading regime in the framework of the frictional $\mu(I)$ -rheology. As there is one-to-one correspondence between the inertial number and the reduced vibration acceleration, it is relatively easy to compute the variation of the effective friction coefficient μ of the granular droplet with the base and the mean solid volume fraction ϕ as a function of the inertial number. The computed values of μ and ϕ in our study are both averaged over two vibration periods during the second regime of the spreading.

In Figs. 15 and 16, we present the resulting curves $\mu(I)$ and $\phi(I)$ obtained for the four different basal bumpiness. Concerning the effective friction, we can first note that the obtained values never exceed the microscopic friction used in the simulation (i.e., $\mu < \mu_p = 0.5$). Second, we observe a nice linear behavior up to high inertial numbers. The effective friction coefficient μ can therefore be well approximated by an affine function of I

$$\mu(I) = \mu_0 + aI. \quad (12)$$

The fit coefficients μ_0 and a are given in Table V. μ_0 shows a slight dependence with the base bumpiness: it increases from 0.13 to 0.17 when λ goes from 0 to 1. In contrast, the

TABLE IV. Nonexhaustive summary of the $\mu(I)$ rheology laws found in the literature. The $\tilde{\mu}(I)$ equation in Ref. [32] represents a unified rheological model based on a modified Pouliquen law in addition to other corrections due to Bernoulli pressure and Bagnold rheology.

Flow	Study	I	$\mu(I)$ law	References
Plane shear	2D-DEM	≤ 0.3	$\mu_0 + aI$	[19]
Plane shear	2D-DEM	≤ 0.1	$\mu_0 + aI^\alpha$	[26,27]
Plane shear	3D-DEM	~ 1	$\mu_0 + aI$	[28]
Annular shear	2D-DEM	≤ 0.1	$\mu_0 + aI + be^{-(I/C)}$	[29]
Annular plane shear	Experimental	≤ 0.1	$\mu_0 + aI$	[30,31]
Pile between rough sidewalls	Experimental	≤ 0.5	Eq. (11)	[23]
Vibro-fluidized granular film	Experimental	~ 1	$a - b(I - I_c)^2$	[8]
Vibro-fluidized and vane shear	Experimental	$[10^{-5}, 10]$	$\tilde{\mu}(I)$	[32]

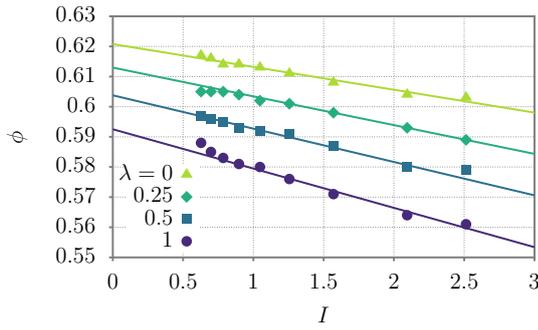


FIG. 16. Mean packing fraction for different bumpiness values λ . Straight lines are the best fits.

slope a exhibits a strong dependence of the base bumpiness since it rises from 0.03 to 0.11. Third, our results differ from those predicted by the model developed in Ref. [8], where the effective friction coefficient reveals a nonmonotonous behavior. It presents a maximum seen as a transition from a shear thickening regime at low I and a shear thinning at higher values.

The solid packing fraction ϕ also exhibits a linear variation with the inertial number I that can be approximated by

$$\phi(I) = \phi_0 - bI. \quad (13)$$

The fit coefficients ϕ_0 and b are given in Table V. The dependence of these coefficients on the basal bumpiness contrasts with that obtained for μ_0 and a . We find that the slope b is weakly dependent on the basal bumpiness, while ϕ_0 decreases significantly with an increasing bumpiness parameter λ . It is noteworthy that the value of the slope b of order of 0.01 is smaller than the standard value of 0.2 usually reported in the literature. We also note that the behavior of the effective friction coefficient μ and the packing fraction ϕ law is akin to those seen in the case of cohesive granular dense flows. The basal bumpiness λ induces similar effects to those of the intensity of cohesion on the variations of $\mu(I)$ and $\phi(I)$ [33].

IV. CONCLUSION AND OUTLOOK

Using discrete element method simulations, we studied the spreading of a granular droplet on a horizontally vibrated substrate. We used a variety of substrates with different bumpiness. We show that during a short transient, the granular droplet takes a parabolic shape as observed experimentally and then adopts a triangular shape for later times up to the end of the simulation. We also find that the spreading dynamics is governed by two distinct regimes: a superdiffusive at the early stages, followed by an asymptotic subdiffusive regime. These results contrast with the experiment where we observe only the second subdiffusive regime [8]. We have identified that

TABLE V. Fitting parameters of the effective friction $\mu = \mu_0 + aI$ and the packing fraction $\phi = \phi_0 - bI$ corresponding to different basal bumpiness λ .

λ	0	0.25	0.5	1
μ_0, a	0.13, 0.03	0.15, 0.04	0.16, 0.07	0.17, 0.11
ϕ_0, b	0.62, 0.01	0.61, 0.01	0.60, 0.01	0.59, 0.01

the superdiffusive regime is driven by surface flows similar to avalanches on a granular pile, while the subdiffusive regime is governed by a bulk flow that can be modeled by a nonlinear diffusion equation leading to a $1/3$ scaling exponent as shown in Ref. [8]. The surface flows are found to be much more efficient to spread the droplet and lead to a superdiffusive regime. The transition is also marked by a change in the evolution of the basal friction. Indeed, in the first regime, the effective friction coefficient increases during the spreading, while in the second regime, the friction reaches a plateau.

Varying the basal bumpiness has no strong impact on the droplet morphology or on the scaling laws of the spreading: the triangular shape of the profiles is persistent, and the spreading is still characterized by two distinct regimes with scaling exponents weakly dependent of the bumpiness.

Finally, we observe in the asymptotic subdiffusive regime that the basal friction coefficient is a linear function of the inertial number. We also show that the packing fraction is a decreasing linear function of the inertial number in accordance with the frictional $\mu(I)$ -rheology. Importantly, our simulation reveals that the effective friction coefficient and the droplet packing fraction are strongly dependent on the base bumpiness.

As further work, it would be worthwhile to develop a quantitative analysis based on continuum model in order to derive the value of the exponent in the superdiffusive regime. The key issue is to use an appropriate rheological law. The first attempt would be the use of the classical $\mu(I)$ -rheology or nonlocal rheological laws as such proposed in Refs. [26,34].

ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by the Algerian-French program CMEP-TASSILI No. 05MDU 644. This work was granted access to the HPC resources of UCI-UABT, Unité de Calcul Intensif of the University Aboubekr Belkaïd of Tlemcen, financed by the DGRSDT, Direction Générale de la Recherche Scientifique et du Développement Technologique. S.M.K. thanks B. Andreotti, P. Claudin, and E. Clément from the Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes at ESPCI-Paris for the subject idea and related suggestions. Special thanks to the staff of Physique des Milieux Divisés at Institut de Physique, Université de Rennes 1, for support and thoughtful discussions.

[1] D. Bonn, J. Eggers, J. Indekeu, J. Meunier, and E. Rolley, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 739 (2009).

[2] A.-L. Biance, C. Clanet, and D. Quéré, *Phys. Rev. E* **69**, 016301 (2004).

[3] P. Kavehpour, B. Ovrin, and G. H. McKinley, *Colloids Surfaces A* **206**, 409 (2002).

[4] D. R. Heine, G. S. Grest, and E. B. Webb, *Phys. Rev. E* **68**, 061603 (2003).

- [5] D. R. Heine, G. S. Grest, and E. B. Webb, *Phys. Rev. E* **70**, 011606 (2004).
- [6] D. R. Heine, G. S. Grest, and E. B. Webb, *Langmuir* **21**, 7959 (2005).
- [7] S. Nadler, O. Bonnefoy, J.-M. Chaix, G. Thomas, and J.-L. Gelet, *Eur. Phys. J. E* **34**, 66 (2011).
- [8] I. Sánchez, F. Raynaud, J. Lanuza, B. Andreotti, E. Clément, and I. S. Aranson, *Phys. Rev. E* **76**, 060301 (2007).
- [9] GDR MiDi, *Eur. Phys. J. E* **14**, 341 (2004).
- [10] M. Allen and D. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 1987).
- [11] J. Schäfer, S. Dippel, and D. E. Wolf, *J. Phys. I France* **6**, 5 (1996).
- [12] A. Lorenz, C. Tuozzolo, and M. Y. Louge, *Exp. Mech.* **37**, 292 (1997).
- [13] L. E. Silbert, D. Ertas, G. S. Grest, T. C. Halsey, D. Levine, and S. J. Plimpton, *Phys. Rev. E* **64**, 051302 (2001).
- [14] N. Brodu, P. Richard, and R. Delannay, *Phys. Rev. E* **87**, 022202 (2013).
- [15] L. E. Silbert, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 098002 (2005).
- [16] S. Luding, *Int. J. Solids Struct.* **41**, 5821 (2004).
- [17] C. Salueña and T. Pöschel, *Eur. Phys. J. E* **1**, 55 (2000).
- [18] A. Stukowski, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18**, 015012 (2010).
- [19] F. da Cruz, S. Emam, M. Prochnow, J.-N. Roux, and F. Chevoir, *Phys. Rev. E* **72**, 021309 (2005).
- [20] O. Pouliquen and Y. Forterre, *J. Fluid Mech.* **453**, 133 (2002).
- [21] P. Jop, Y. Forterre, and O. Pouliquen, *J. Fluid Mech.* **541**, 167 (2005).
- [22] O. Pouliquen, C. Cassar, P. Jop, Y. Forterre, and M. Nicolas, *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* (2006) P07020.
- [23] P. Jop, Y. Forterre, and O. Pouliquen, *Nature (London)* **441**, 727 (2006).
- [24] B. Andreotti, Y. Forterre, and O. Pouliquen, *Granular Media: Between Fluid and Solid* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).
- [25] C. K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, and N. Chepuriniy, *J. Fluid Mech.* **140**, 223 (1984).
- [26] M. Bouzid, M. Trulsson, P. Claudin, E. Clément, and B. Andreotti, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 238301 (2013).
- [27] A. Favier de Coulomb, M. Bouzid, P. Claudin, E. Clément, and B. Andreotti, *Phys. Rev. Fluids* **2**, 102301(R) (2017).
- [28] T. Hatano, *Phys. Rev. E* **75**, 060301 (2007).
- [29] G. Koval, J.-N. Roux, A. Corfdir, and F. Chevoir, *Phys. Rev. E* **79**, 021306 (2009).
- [30] A. Fall, G. Ovarlez, D. Hautemayou, C. Mézière, J.-N. Roux, and F. Chevoir, *J. Rheol.* **59**, 1065 (2015).
- [31] A. Fall, M. Badetti, G. Ovarlez, F. Chevoir, and J.-N. Roux, *EPJ Web Conf.* **140**, 03005 (2017).
- [32] A. Gnoli, A. Lasanta, A. Sarracino, and A. Puglisi, *Sci. Rep.* **6**, 38604 (2016).
- [33] P. G. Rognon, J.-N. Roux, M. Naaïm, and F. Chevoir, *J. Fluid Mech.* **596**, 21 (2008).
- [34] K. Kamrin and G. Koval, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 178301 (2012).

Bibliographie

- [1] P. G. de Gennes. Granular matter: a tentative view. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S374–S382, Mar 1999.
- [2] B. Andreotti, Y. Forterre, and O. Pouliquen. *Granular Media: Between Fluid and Solid*. Cambridge University Press, 2013.
- [3] J. Duran. *Sables, poudres et grains: introduction à la physique des milieux granulaires*. Collection Eyrolles sciences. Eyrolles, 1997.
- [4] Daniel Bonn, Jens Eggers, Joseph Indekeu, Jacques Meunier, and Etienne Rolley. Wetting and spreading. *Rev. Mod. Phys.*, 81:739–805, May 2009.
- [5] Anne-Laure Biance, Christophe Clanet, and David Quéré. First steps in the spreading of a liquid droplet. *Phys. Rev. E*, 69:016301, Jan 2004.
- [6] Pirouz Kavehpour, Ben Ovryn, and Gareth H. McKinley. Evaporatively-driven marangoni instabilities of volatile liquid films spreading on thermally conductive substrates. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 206(1):409 – 423, 2002.
- [7] David R. Heine, Gary S. Grest, and Edmund B. Webb. Spreading dynamics of polymer nanodroplets. *Phys. Rev. E*, 68:061603, Dec 2003.
- [8] David R. Heine, Gary S. Grest, and Edmund B. Webb. Spreading dynamics of polymer nanodroplets in cylindrical geometries. *Phys. Rev. E*, 70:011606, Jul 2004.

- [9] David R. Heine, Gary S. Grest, and Edmund B. Webb. Diverse spreading behavior of binary polymer nanodroplets. *Langmuir*, 21(17):7959–7963, 2005. PMID: 16089405.
- [10] Nadler, S., Bonnefoy, O., Chaix, J.-M., Thomas, G., and Gelet, J.-L. Parametric study of horizontally vibrated grain packings - comparison between discrete element method and experimental results. *Eur. Phys. J. E*, 34(7):66, 2011.
- [11] Iván Sánchez, Franck Raynaud, José Lanuza, Bruno Andreotti, Eric Clément, and Igor S. Aranson. Spreading of a granular droplet. *Phys. Rev. E*, 76:060301, Dec 2007.
- [12] GDR MiDi. On dense granular flows. *Eur. Phys. J. E*, 14(4):341–365, 2004.
- [13] Gaël Combe. *Origine géométrique du comportement quasi-statique des assemblages granulaires denses: étude par simulations numériques*. PhD thesis, École Nationale des Ponts et Chaussées, 2001.
- [14] Luding Stefan. *Molecular Dynamics Simulations of Granular Materials*, chapter 13, pages 297–324. Wiley-Blackwell, 2005.
- [15] Thorsten Pöschel and Thomas Schwager. *Computational Granular Dynamics*. Springer, 2004.
- [16] Nikolai V. Brilliantov and Thorsten Pöschel. *Kinetic Theory of Granular Gases*. Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [17] M.P. Allen and D.J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Pr, 1987.
- [18] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47–65, 1979.
- [19] Daan Frenkel and Berend Smit. *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, Inc., Orlando, FL, USA, 2nd edition, 2001.

- [20] S. Dippel J. Schäfer and D. E. Wolf. Force schemes in simulations of granular materials. *Journal de Physique*, 1:5, Oct 1996.
- [21] A. Lorenz, C. Tuozzolo, and M. Y. Louge. Measurements of impact properties of small, nearly spherical particles. *Experimental Mechanics*, 37(3):292–298, Sep 1997.
- [22] Leonardo E. Silbert, Deniz Ertas, Gary S. Grest, Thomas C. Halsey, Dov Levine, and Steven J. Plimpton. Granular flow down an inclined plane: Bagnold scaling and rheology. *Phys. Rev. E*, 64:051302, Oct 2001.
- [23] Nicolas Brodu, Patrick Richard, and Renaud Delannay. Shallow granular flows down flat frictional channels: Steady flows and longitudinal vortices. *Phys. Rev. E*, 87:022202, Feb 2013.
- [24] Leonardo E. Silbert. Temporally heterogeneous dynamics in granular flows. *Phys. Rev. Lett.*, 94:098002, Mar 2005.
- [25] Stefan Luding. Micro–macro transition for anisotropic, frictional granular packings. *International Journal of Solids and Structures*, 41(21):5821 – 5836, 2004. Granular Mechanics.
- [26] C. Salueña and T. Pöschel. Convection in horizontally shaken granular material. *Eur. Phys. J. E*, 1(1):55–59, 2000.
- [27] Pierre G. Rognon, Jean-Noël Roux, Mohamed Naaïm, and François Chevoir. Dense flows of cohesive granular materials. *Journal of Fluid Mechanics*, 596:21–47, 2008.
- [28] D. C. Rapaport. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge University Press, 2 edition, 2004.
- [29] Y. C. Zhou, B. D. Wright, R. Y. Yang, B. H. Xu, and A. B. Yu. Rolling friction in the dynamic simulation of sandpile formation. *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, 269:536–553, July 1999.

- [30] Jun Ai, Jian-Fei Chen, J. Michael Rotter, and Jin Y. Ooi. Assessment of rolling resistance models in discrete element simulations. *Powder Technology*, 206(3):269 – 282, 2011.
- [31] Alexander Stukowski. Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito—the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1):015012, 2010.
- [32] Nicolas Brodu. *A 2D vector and scalar field plotter*, 2012 (Last update April 18, 2012). <http://nicolas.brodu.net/programmation/vsfplot/index.html>.
- [33] Frédéric da Cruz, Sacha Emam, Michaël Prochnow, Jean-Noël Roux, and François Chevoir. Rheophysics of dense granular materials: Discrete simulation of plane shear flows. *Phys. Rev. E*, 72:021309, Aug 2005.
- [34] Olivier Pouliquen and Yoël Forterre. Friction law for dense granular flows: application to the motion of a mass down a rough inclined plane. *Journal of Fluid Mechanics*, 453:133–151, 2002.
- [35] Pierre Jop, Yoël Forterre, and Olivier Pouliquen. Crucial role of sidewalls in granular surface flows: consequences for the rheology. *Journal of Fluid Mechanics*, 541:167–192, 2005.
- [36] O Pouliquen, C Cassar, P Jop, Y Forterre, and M Nicolas. Flow of dense granular material: towards simple constitutive laws. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2006(07):P07020, 2006.
- [37] Pierre Jop, Yoël Forterre, and Olivier Pouliquen. A constitutive law for dense granular flows. *Nature*, 441:727 EP –, Jun 2006.
- [38] C. K. K. Lun, S. B. Savage, D. J. Jeffrey, and N. Chepurdiy. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield. *Journal of Fluid Mechanics*, 140:223–256, 1984.
- [39] Mehdi Bouzid, Martin Trulsson, Philippe Claudin, Eric Clément, and Bruno Andreotti. Nonlocal rheology of granular flows across yield conditions. *Phys. Rev. Lett.*, 111:238301, Dec 2013.

- [40] Adeline Favier de Coulomb, Mehdi Bouzid, Philippe Claudin, Eric Clément, and Bruno Andreotti. Rheology of granular flows across the transition from soft to rigid particles. *Phys. Rev. Fluids*, 2:102301, Oct 2017.
- [41] Takahiro Hatano. Power-law friction in closely packed granular materials. *Phys. Rev. E*, 75:060301, Jun 2007.
- [42] Georg Koval, Jean-Noël Roux, Alain Corfdir, and François Chevoir. Annular shear of cohesionless granular materials: From the inertial to quasistatic regime. *Phys. Rev. E*, 79:021306, Feb 2009.
- [43] A. Fall, G. Ovarlez, D. Hautemayou, C. Mézière, J.-N. Roux, and F. Chevoir. Dry granular flows: Rheological measurements of the $\mu(i)$ -rheology. *Journal of Rheology*, 59(4):1065–1080, 2015.
- [44] A. Fall, M. Badetti, G. Ovarlez, F. Chevoir, and J-N. Roux. Dry granular flows – rheological measurements of the $\mu(i)$ -rheology. *EPJ Web Conf.*, 140:03005, 2017.
- [45] Andrea Gnoli, Antonio Lasanta, Alessandro Sarracino, and Andrea Puglisi. Unified rheology of vibro-fluidized dry granular media: From slow dense flows to fast gas-like regimes. *Scientific Reports*, 6:38604 EP –, Dec 2016. Article.
- [46] Ken Kamrin and Georg Koval. Nonlocal constitutive relation for steady granular flow. *Phys. Rev. Lett.*, 108:178301, Apr 2012.