

Résumé de l'Habilitation à Diriger des Recherches soutenue le 3 juin 2009
par **Tony Lelièvre** sur le thème
Analyse mathématique et numérique de modèles pour les matériaux,
de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique.

La première partie du mémoire concerne l'étude de modèles multi-échelles (ou micro-macro) pour les fluides complexes. L'intérêt de ces modèles est d'éviter d'avoir à postuler des lois de comportements phénoménologiques, en couplant une description macroscopique classique (lois de conservations de la quantité de mouvement et de la masse) sur la vitesse et la pression, à des modèles microscopiques pour l'évolution des microstructures dans le fluide, à l'origine du caractère non-newtonien du fluide. La loi de comportement consiste alors à exprimer le tenseur des contraintes en fonction de la conformation des microstructures. Durant la thèse, nous avons obtenu quelques résultats d'existence et de convergence des méthodes numériques utilisées pour ces modèles. Plus récemment, nous proposons une méthode numérique pour coupler des modèles micro-macro (fins mais chers) avec des modèles macroscopiques (plus grossiers, mais beaucoup plus économiques en temps de calcul). Nous analysons par ailleurs une méthode de résolution des équations aux dérivées partielles en grande dimension qui a été proposée dans le contexte de la résolution numérique des modèles à l'échelle microscopique pour les fluides polymériques.

L'essentiel de nos travaux les plus récents sur le sujet concerne le comportement en temps long de ces modèles, avec un double objectif : théoriquement, la compréhension des modèles physiques passe souvent par l'étude de la stabilité des solutions stationnaires, et de la vitesse de convergence vers l'équilibre ; numériquement, la stabilité des schémas en temps long est cruciale, car on utilise typiquement des simulations instationnaires en temps long pour calculer des solutions stationnaires. Nous montrons comment analyser le comportement des modèles micro-macro en temps long, en utilisant des méthodes d'entropie. Cette étude a ensuite permis de comprendre le comportement en temps long de modèles macroscopiques standard (type Oldroyd-B), et de préciser sous quelles conditions les schémas numériques vérifient des propriétés similaires de stabilité en temps long.

La seconde partie du mémoire résume des travaux en simulation moléculaire, à l'échelle quantique, ou à l'échelle de la dynamique moléculaire classique. A l'échelle quantique, nous nous intéressons aux méthodes *Quantum Monte Carlo*. Il s'agit de méthodes numériques probabilistes pour calculer l'état fondamental d'une molécule (plus petite valeur propre de l'opérateur de Schrödinger à N corps). Essentiellement, il s'agit de donner une interprétation probabiliste du problème par des formules de Feynman-Kac, afin de pouvoir appliquer des méthodes de Monte Carlo (bien adaptées pour des problèmes de ce type, en grande dimension). Nous proposons tout d'abord une étude théorique de la méthode *Diffusion Monte Carlo*, et notamment d'un biais introduit par l'interprétation probabiliste (appelé *fixed node approximation*). Nous analysons ensuite les méthodes numériques utilisées en *Diffusion Monte Carlo*, et proposons une nouvelle stratégie pour améliorer l'échantillonnage des méthodes *Variational Monte Carlo*.

En dynamique moléculaire, nous étudions des méthodes numériques pour le calcul de différences d'énergie libre. Les modèles consistent à décrire l'état d'un système par la position (et éventuellement la vitesse) de particules (typiquement les positions des noyaux dans un système moléculaire), qui interagissent au travers d'un potentiel (qui idéalement proviendrait d'un calcul de mécanique quantique pour déterminer l'état fondamental des électrons pour une position donnée des noyaux). L'objectif est de calculer des moyennes par rapport à la mesure de Boltzmann-Gibbs associée à ce potentiel (moyennes dans l'ensemble canonique). Mathématiquement, il s'agit d'un problème d'échantillonnage de mesures métastables (ou multi-modales), en très grande dimension. La particularité

de la dynamique moléculaire est que, bien souvent, on a quelques informations sur les "directions de métastabilité" au travers de coordonnées de réaction. En utilisant cette donnée, de nombreuses méthodes ont été proposées pour permettre l'échantillonnage de la mesure de Boltzmann-Gibbs. Dans une série de travaux, nous avons analysé les méthodes basées sur des équations différentielles stochastiques avec contraintes (dont les solutions vivent sur des sous-variétés définies comme des lignes de niveaux de la coordonnée de réaction). Il s'agit en fait d'analyser des méthodes d'échantillonnage de mesures définies sur des sous-variétés de grande dimension. Plus récemment, nous avons étudié des méthodes adaptatives qui ont été proposées pour se débarrasser des métastabilités. Mathématiquement, il s'agit de méthodes d'échantillonnage préférentiel, avec une fonction d'importance qui est calculée au cours de la simulation de manière adaptative. Nous avons étudié la vitesse de convergence vers la mesure d'équilibre pour ces méthodes adaptatives, en utilisant des méthodes d'entropie. Nous avons proposé de nouvelles méthodes numériques à la communauté appliquée pour utiliser au mieux ces idées.

La troisième partie du mémoire résume des travaux issus d'une collaboration avec l'entreprise Rio Tinto (anciennement Pechiney puis Alcan), leader mondial pour la technologie des cuves d'électrolyse de l'aluminium. Cette collaboration a été entamée il y a plusieurs années par C. Le Bris, et notamment au travers de la thèse de J-F. Gerbeau. Mathématiquement, il s'agit d'analyser et de discrétiser les équations de la magnétohydrodynamique pour deux fluides incompressibles non miscibles, séparés par une interface libre. Nous expliquons le contexte industriel et la modélisation, nous résumons la méthode numérique adoptée (méthode *Arbitrary Lagrangian Eulerian*) et donnons quelques propriétés satisfaites par le schéma (stabilité, conservation de la masse). Nous montrons ensuite comment ce modèle permet d'étudier un phénomène (potentiellement déstabilisant) observé dans les cuves d'électrolyse : le *rolling*. Ces résultats ont été pour la plupart obtenus durant la thèse.

Plus récemment, dans le prolongement de l'étude industrielle, nous nous sommes intéressés à un problème de modélisation fondamental pour les écoulements à surface (ou interface) libre: le mouvement de la ligne de contact (*i.e.* le bord de la surface libre qui glisse le long de la paroi). En résumé, nos travaux consistent essentiellement en deux contributions: (i) une compréhension variationnelle d'une condition aux limites permettant de modéliser correctement le mouvement de la ligne de contact (*Generalized Navier Boundary Condition*), et son implémentation dans un schéma *Arbitrary Lagrangian Eulerian*, (ii) une analyse de la stabilité du schéma obtenu.