Analyse mathématique et simulation numérique d'un modèle micro-macro de fluide complexe

Yousra GATI

CERMICS - Ecole Nationale des Ponts et Chaussées

20 février 2002

E.Cances I.Catto Y.Gati C.Le Bris

Fluides Newtoniens: eau, air $\longrightarrow$ Navier-Stokes.

Fluides complexes: suspensions (sang,béton..), polymères... $\longrightarrow$?

D'où:

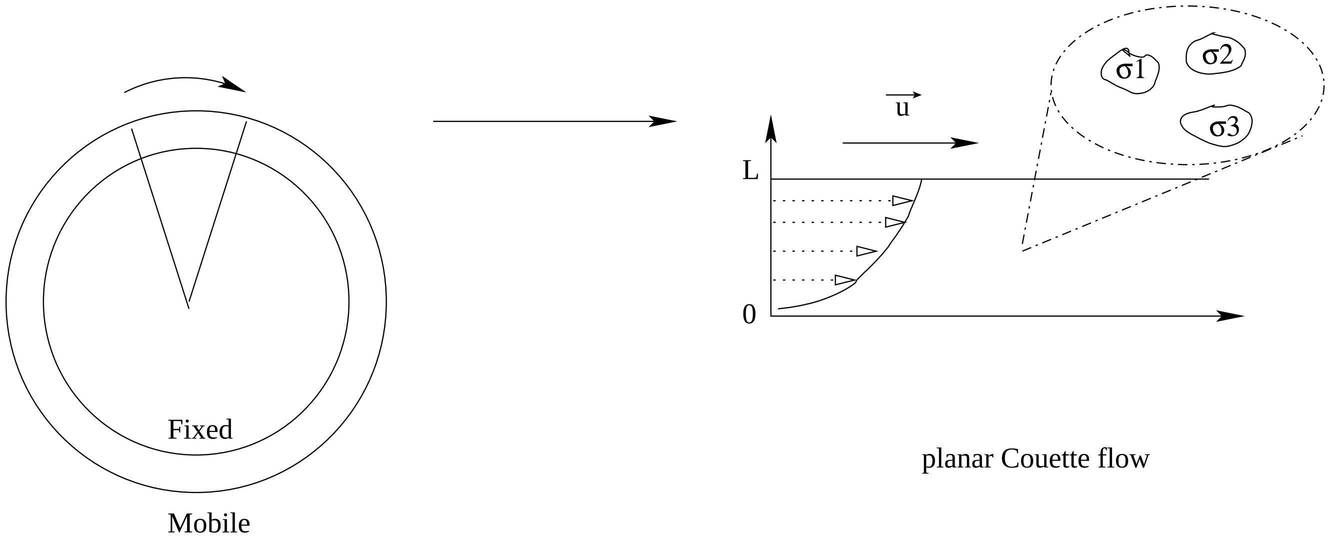
Rhéologie:

étudier les déformations et l'écoulement d'un matériel pour identifier ses principaux comportement en vue de lui associer un modèle mathématique et prédire son comportement.

Suspensions concentrées de particules molles:

Comportement pâteux ie lors d'un écoulement, le mouvement des particules est collectif et conduit à un réarrangement complexe des particules.

Modèle micro-macro de suspensions concentrées en écoulement Couette:



Le tenseur de contraintes est évalué en chaque point “macroscopique” de l’écoulement et en chaque instant par un calcul à l’échelle microscopique.

Modèle micro-macro de suspensions concentrées incompressibles dans un écoulement Couette plan:

$$
(I)\left\{\begin{array}{ll}
\partial_t u \;=\; \partial_y \tau; & (I_1)\\
\partial_t p \;=\; -G_0\,\partial_y u\,\partial_\sigma p + D\,\partial^2_{\sigma\sigma} p - \dfrac{H(|\sigma|>\sigma_c)}{T_0}\,p + \dfrac{D}{\alpha}\,\delta_0(\sigma); & (I_2)\\
\tau \;=\; \displaystyle\int_{\mathrm{R}} \sigma p\,d\sigma; & \\
D \;=\; \displaystyle\int_{|\sigma|>\sigma_c} p\,d\sigma; & \\
u(t,0)=0, \qquad u(t,L)=V(t); & \boxed{\text{C.L}}\\
u(0,y)=0 & \boxed{\text{C.I}}\\
p^0 \ge 0, \quad \displaystyle\int_{\mathrm{R}} p^0\,d\sigma = 1; & \\
t \in [0;T], \quad y \in [0;L], \quad \sigma \in \mathbb{R}. &
\end{array}\right.
$$

avec

(I_1) : équation de la conservation de la quantité de mouvement;

$u(t, y)$: vitesse;

$p(t, y, \sigma)$: probabilité pour que la contrainte à t et en y soit égale à σ;

$\tau(t, y)$: composante xy du tenseur des contraintes;

$D(t, y)$: Coefficient de diffusion;

σ_c : contrainte critique;

G_0, T_0, α : paramètres positifs.

Objectifs des études de ce modèle:

Théorique:

- Le système d'équations est bien défini et admet un unique couple $(u; p)$ de solutions.

Numérique:

- Approcher ce couple de solutions en développant des schémas numériques adéquats (stabilité, convergence,...);
- Comparer avec l'expérience pour caler les différents paramètres puis conclure pour la robustesse du modèle.

Etude théorique:

- p est une densité de probabilité.

- $\sigma_c = 0$: Le système (I) est réduit à

$$
(II) \begin{cases} \partial_t u \ - \varepsilon \Delta u = \ \partial_y \tau; & (II_1) \\ \partial_t p \quad = -G_0 \, \partial_y u \, \partial_\sigma p + \dfrac{\alpha}{T_0} \partial^2_{\sigma\sigma} p - \dfrac{1}{T_0} p + \dfrac{1}{T_0} \delta_0(\sigma); & (II_2) \\ \tau \quad = \displaystyle\int_{\mathrm{R}} \sigma p \, d\sigma; & \\ + \boxed{\text{C.I}} + \boxed{\text{C.L}}. & \end{cases}
$$

Théorème 1: Sous des conditions sur p^0, τ^0 et V, on a:
$\forall \, \varepsilon \geq 0$ Alors (II) admet une unique solution $(u; p)$ dans $U \times P$ avec

$$
\begin{aligned}
U &= C^0_t(H^2_y) \cap C^1_t(L^2_y) \\
P &= \{ p \in C^0_{t,y}(H^1_\sigma) \, / \, \sigma^k p \in C^0_{t,y}(H^2_\sigma); \ \forall k \geq 1 \}.
\end{aligned}
$$

Et on a:

$$
\tau \in C^0_t(H^1_y) \cap C^1_t(L^2_y).
$$

Idée de la démonstration: On montre que:

1. Pour $(u;p)$ solution de (II), u est solution de (III):

$$(III)\begin{cases} \partial^2_{tt}u + \dfrac{1}{T_0}\partial_t u = (G_0 + \dfrac{\varepsilon}{T})\partial^2_{yy}u + \varepsilon\,\partial^3_{tyy}u \\ u(t,0) = 0, \qquad u(t,L) = V(t) \\ u(0,y) = 0, \qquad \partial_t u(0,y) = 0. \end{cases}$$

2. (III) admet une unique solution $u \in U$.

3. pour ce u trouvé, (II_2) admet une unique solution p dans P.

4. pour τ définie comme $\int_{\mathbb{R}} \sigma p$ on a (u,τ) solution de (II_1).

Théorème 2: Pour $p^0 \in L^\infty_y(H^1_\sigma)$ et pour $V \in H^1_t$ tel que $V(0) = 0$, il existe un unique couple de solutions $(u;p)$ de (II) dans $U \times P$ avec

$$\begin{aligned} U &= C^0_t(L^2_y) \cap L^2_t(H^1_y) \\ P &= L^\infty_{t,y}(H^1_\sigma) \cap L^\infty_{t,y}(L^1_\sigma). \end{aligned}$$

Et on a

$$\tau \in L^2_t(L^2_y).$$

Idée de la démonstration:

1. Par le théorème de point fixe de Picard, il existe un unique couple de solutions $(u;\tau)$ à:

$$(III) \begin{cases} \partial_t u - \varepsilon \Delta u = \partial_y \tau; & (III_1) \\ \partial_t \tau + \dfrac{1}{T_0} \tau = G_0 \, \partial_y u & (III_2) \\ \tau^0 = \displaystyle\int_{\mathbb{R}} \sigma p^0 \, d\sigma & (III_3) \\ + \boxed{\text{C.I}} + \boxed{\text{C.L}}. \end{cases}$$

   tel que $u \in C^0_t(L^2_y) \cap L^2_t(H^1_y)$ et $\tau \in L^2_{t,y}$.

2. pour ce u et pour $p^0 \in L^\infty_y(H^1_\sigma)$ il existe une unique solution de

$$(IV)\begin{cases} \partial_t p = -G_0 \partial_y u \, \partial_\sigma p + \dfrac{\alpha}{T_0} \partial^2_{\sigma\sigma} p - \dfrac{1}{T_0} p + \dfrac{1}{T_0} \delta_0(\sigma); & (IV_1) \\ p^0 & (IV_2). \\ + \boxed{\text{C.I}} + \boxed{\text{C.L}}. & \end{cases}$$

3. On pose $\tau_1 = \displaystyle\int_{\mathrm{R}} \sigma p \, d\sigma$, et on montre que τ_1 vérifie $(III_2) - (III_3)$

4. d'où $\tau = \tau_1$ par unicité de la solution.

Etude numérique:

- L'équation (I_1) est résolue par un schéma d'éléments finis $\mathbb{P}_1$ en u et $\mathbb{P}_0$ en τ.
- L'équation (I_2) est fixée en espace puis approchée par deux méthodes:

1. **déterministe:** où τ est évalué comme une somme de Riemann

$$\tau_k^n = \Sigma_{i=1}^{nds} \sigma_i \, p_{k+\frac{1}{2},i}^n.$$

   n étant l'indice de temps, i celui des σ et k celui de l'espace. nds étant le nombre de pas de discrétisation en σ

2. **stochastique:** où τ est évalué comme l'espérance de la solution de l'équation différentielle stochastique sous jacente.

$$\tau_k^n = \frac{1}{N} \Sigma_{i=1}^{N} \Sigma_{k+\frac{1}{2},i}^n.$$

   n étant l'indice de temps, i celui de la particule et k celui de l'espace.

Approche déterministe:

1. **discrétisation en temps par la méthode de splitting:**

   En remarquant que (I_2) s'écrit sous la forme de

$$\partial_t p \;=\; A(t).p \;+\; D(t).p \;+\; S.p$$

   où $A(t)$ et $D(t)$ sont deux opérateurs linéaires dépendants du temps et S linéaire indépendant du temps, on a

$$p_{k,i}^{n+1} \;=\; \exp\Big(\int_{t_n}^{t_{n+1}} (A(s) + D(s) + S)ds\Big).p_{k,i}^{n}$$

   La formule de Trotter permet d'écrire:

$$p_{k,i}^{n+1} \;=\; \big(e^{\frac{dt}{2}A(n.dt)}e^{\frac{dt}{2}D(n.dt)}e^{S.dt}e^{\frac{dt}{2}D(n.dt)}e^{\frac{dt}{2}A(n.dt)} + o(dt^2)\big)\; p_{k,i}^{n}.$$

$\rightarrow$ ceci permet de traiter séparement 3 problèmes:

(a) Advection

$$\begin{cases} \partial_t p_1 & = A(t).p_1 \\ p_1^0 & = p_{k,i}^n, \end{cases}$$

(b) Diffusion

$$\begin{cases} \partial_t p_2 & = D(t).p_2 \\ p_2^0 & = p_1^{n+\frac{1}{2}}, \end{cases}$$

(c) Source

$$\begin{cases} \partial_t p_3 & = S.p_3 \\ p_3^0 & = p_2^{n+\frac{1}{2}} \end{cases}$$

2. **résolution:**

- L'équation d'advection est discrétisée par le schéma de *Lax Friedrichs*:

$$p_{k,i}^{n+1} = \frac{1}{2}(p_{k+1,i}^n + p_{k-1,i}^n) - \frac{\lambda}{2}a(p_{k+1,i}^n - p_{k-1,i}^n)$$

où $\lambda = \dfrac{dt}{d\sigma}$ et $a = G_0\dfrac{(u_{k+1}^n - u_k^n)}{dy}$.

- L'équation de la diffusion est discrétisée en σ par la méthode d'éléments finis $\mathbb{P}_1$, en temps par un schéma d'Euler implicite si $D\dfrac{dt}{d\sigma} > \dfrac{1}{2}$, explicite couplé à une technique de *mass lumping* pour accélérer la méthode sinon.

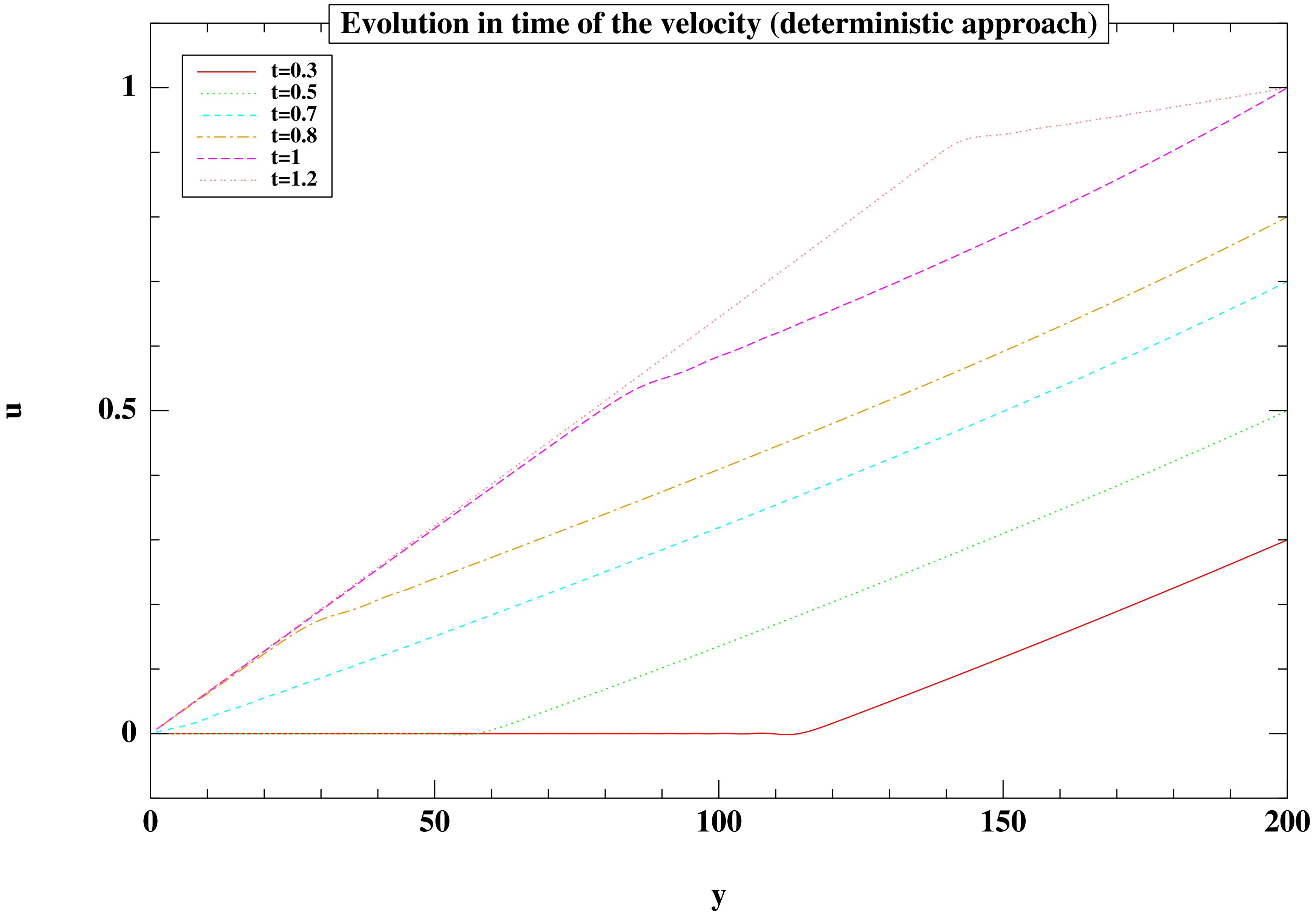
- L'équation source est résolue analytiquement.

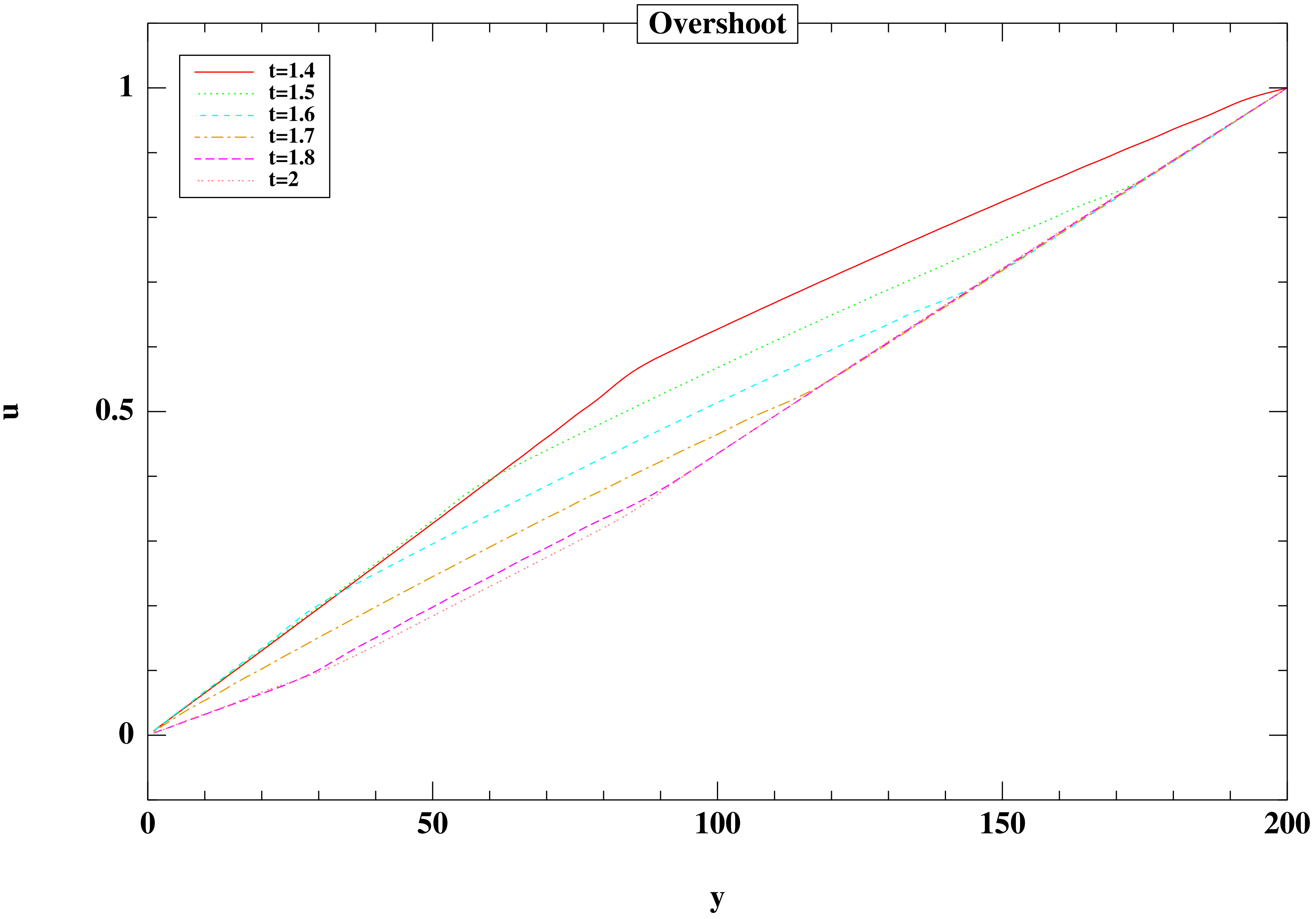
Approche stochastique:

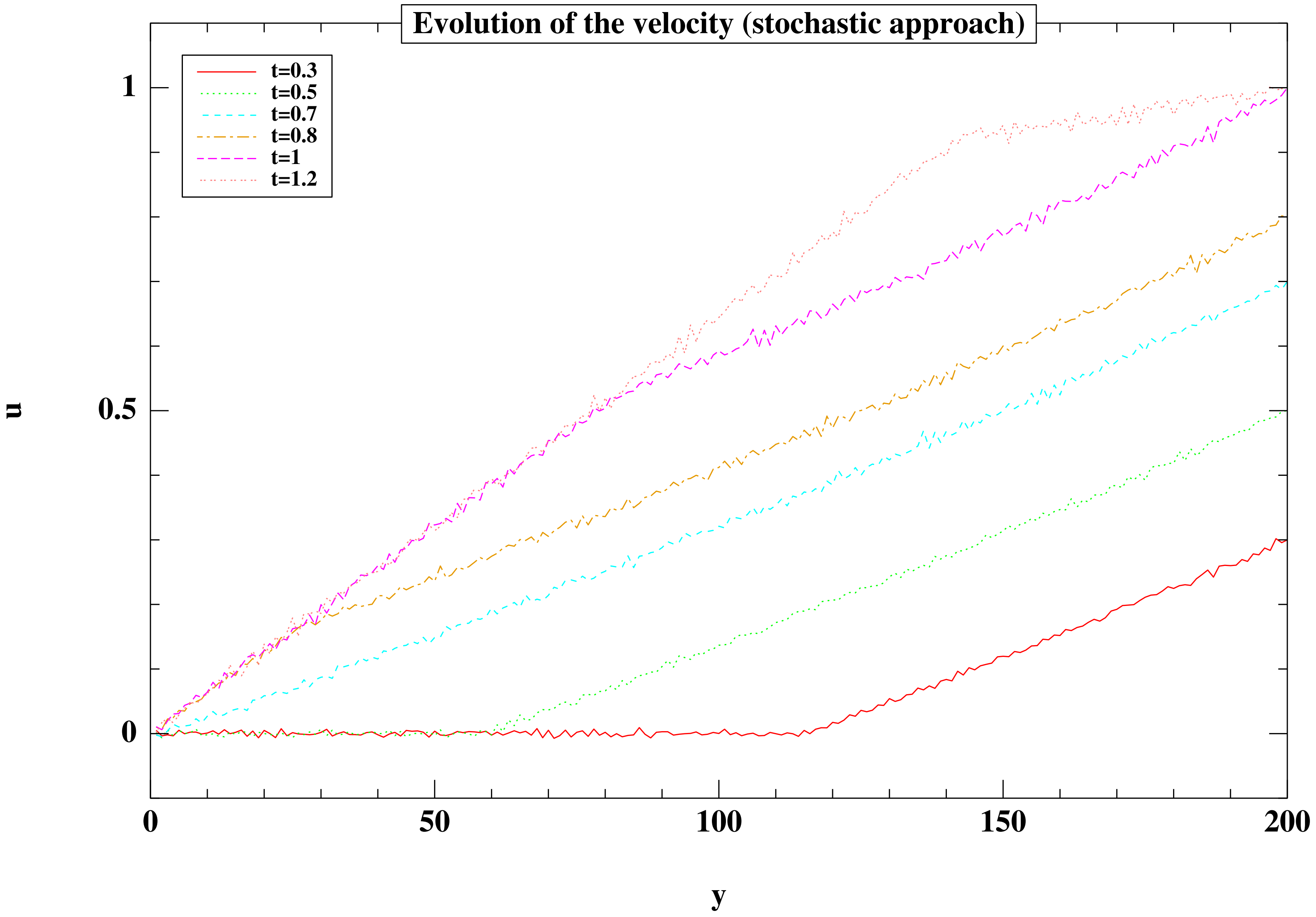
1. On reconnait dans l'équation d'évolution de p l'équation de Fokker-Planck d'un processus stochastique de diffusion non linéaire au sens de McKean avec sauts se produisant au taux $\frac{1}{T0}$ quand $|\sigma| > \sigma_c$.
2. On discrétise par un schéma d'Euler explicite en temps.

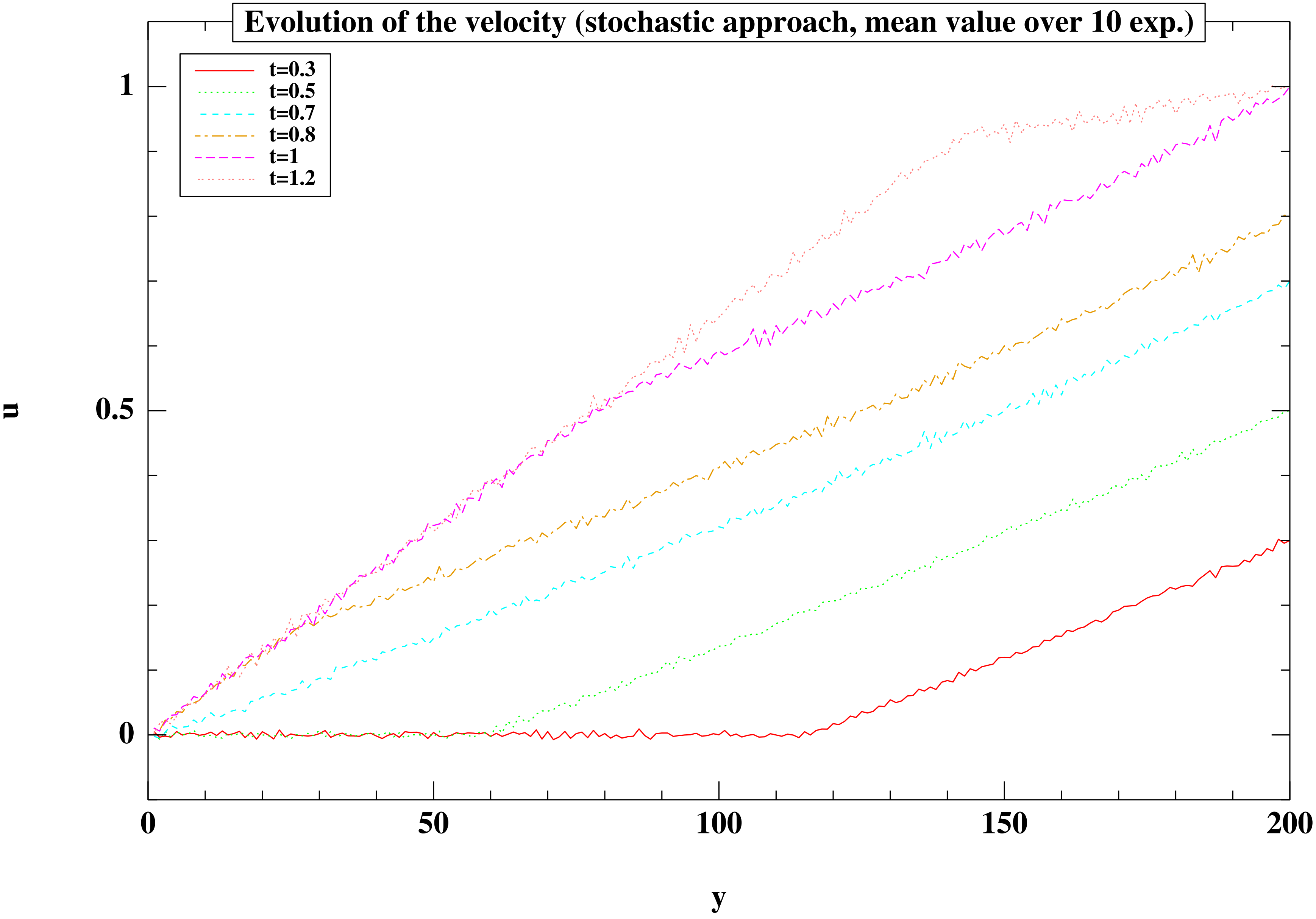
$$\begin{array}{llll} \text{Si} \quad |\sigma| < \sigma_c & \text{alors} & \Sigma^{n+1}_{k+\frac{1}{2},i} = \Sigma^{n}_{k+\frac{1}{2},i} + G_0 \dfrac{(u^n_{k+1} - u^n_k)}{dy} dt + \nu^n_{k+\frac{1}{2}} \sqrt{dt} G^n_i & \\ \quad \text{sinon} & \text{si} & w^n_i \in [0, \dfrac{dt}{T_0}] \qquad \Sigma^{n+1}_{k+\frac{1}{2},i} = 0 & \\ & & \text{sinon} \quad \Sigma^{n+1}_{k+\frac{1}{2},i} = \Sigma^{n}_{k+\frac{1}{2},i} + G_0 \dfrac{(u^n_{k+1} - u^n_k)}{dy} dt + \nu^n_{k+\frac{1}{2}} \sqrt{dt} G^n_i. & \end{array}$$

$\Sigma^n_{k+\frac{1}{2},i}$: état de la contrainte à l'instant $n.dt$ de la i-ème particule au point $(k+\frac{1}{2}).dy$. $\nu^n_k = \sqrt{2D^n_{k+\frac{1}{2}}}$ et $D^n_{k+\frac{1}{2}} = \dfrac{\alpha}{T_0\,N} Card\{i; |\Sigma^n_{k+\frac{1}{2},i}| > \sigma_c\}$. G^n_i étant une variable aléatoire suivant la loi normale et w^n_i une variable aléatoire suivant la loi uniforme.

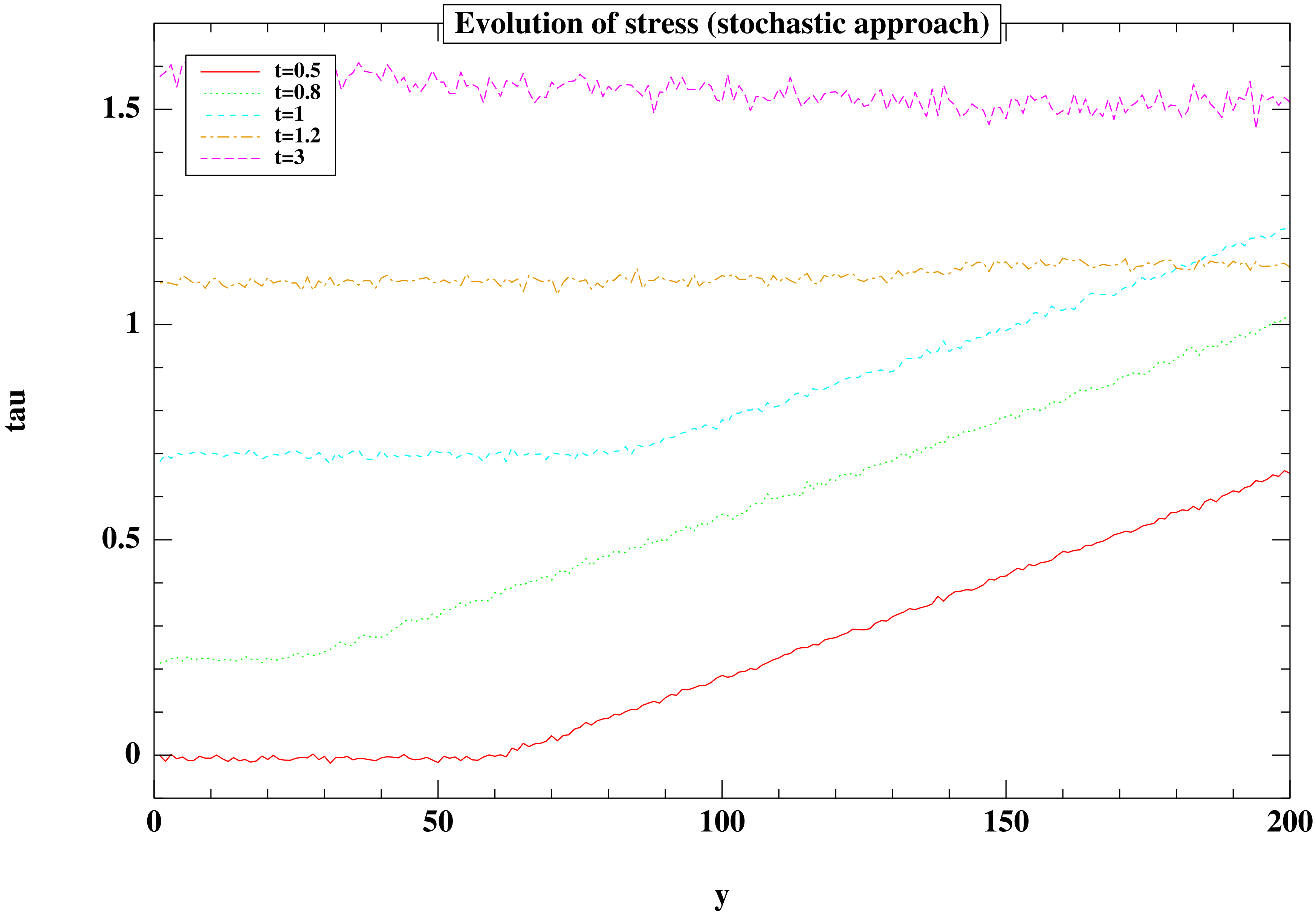

Evolution in time of the velocity (deterministic approach)
t=0.3
t=0.5
t=0.7
t=0.8
t=1
t=1.2
1
0.5
0
u
0
50
100
150
200
y


Overshoot
t=1.4
t=1.5
t=1.6
t=1.7
t=1.8
t=2
u
y
0
0.5
1
0
50
100
150
200


Evolution of the velocity (stochastic approach)
t=0.3
t=0.5
t=0.7
t=0.8
t=1
t=1.2
u
1
0.5
0
y
0
50
100
150
200



Evolution of the velocity (stochastic approach, mean value over 10 exp.)
t=0.3
t=0.5
t=0.7
t=0.8
t=1
t=1.2
1
0.5
0
u
0
50
100
150
200
y


Evolution of stress (stochastic approach)
t=0.5
t=0.8
t=1
t=1.2
t=3
tau
y
0
0.5
1
1.5
0
50
100
150
200

- prouver l'existence et l'unicité d'une solution au système dans le cas $\sigma_c > 0$ (en cours)
- réduire la variance
- comparer avec l'expérience
- passer en dimensions supérieures