



HAL
open science

Couplages moléculaire- théorie cinétique pour la simulation du comportement des matériaux complexes

Guillaume Maitrejean

► **To cite this version:**

Guillaume Maitrejean. Couplages moléculaire- théorie cinétique pour la simulation du comportement des matériaux complexes. Autre. Université de Grenoble, 2011. Français. NNT : 2011GRENI067 . tel-00681032

HAL Id: tel-00681032

<https://theses.hal.science/tel-00681032>

Submitted on 20 Mar 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

Spécialité : Matériaux, Mécanique, Génie Civil, Electrochimie

Arrêté ministériel : 7 août 2006

Présentée par

Guillaume MAÎTREJEAN

Thèse dirigée par **Amine AMMAR** et
codirigée par **Francisco CHINESTA**

préparée au sein du **Laboratoire de Rhéologie de Grenoble**
dans l'**École Doctorale IMEP2**

Contributions à la modélisation numérique de la théorie cinétique des suspensions

Thèse soutenue publiquement le **30 Novembre 2011**
devant le jury composé de :

Monsieur Jean-Robert CLERMONT

Directeur de Recherche CNRS à l'UJF de Grenoble, Président

Monsieur Elias CUETO

Professeur des universités à l'Université de Saragosse, Rapporteur

Monsieur Patrice LAURE

Directeur de Recherche CNRS à l'UNS de Nice, Rapporteur

Monsieur Miroslav GRMELA

Directeur de Recherche à l'École Polytechnique de Montréal,
Examineur

Monsieur Amine AMMAR

Professeur des universités à l'ENSAM d'Angers, Directeur de thèse

Monsieur Francisco CHINESTA

Professeur des universités à l'EC de Nantes, Directeur de thèse



Remerciements

Lorsqu'on commence un travail de thèse, on est loin d'imaginer les nombreuses difficultés qui apparaîtront inévitablement tout au long de son déroulement. Heureusement je n'étais pas seul lors de cette entreprise et je voudrais remercier dans ce qui suit toutes les personnes, amis et collègues qui m'ont aidé, soutenu, motivé, réconforté ou tout simplement fait rire durant ces trois années.

Tout d'abord, je souhaite remercier très sincèrement Amine Ammar qui a su, malgré la distance, diriger et encadrer ma thèse grâce à sa disponibilité et ses conseils avisés. Je le remercie, en outre, pour son dynamisme et son infatigable énergie ainsi que son précieux secours lors des moments de doute. Je remercie aussi Francisco Chinesta qui m'a fait l'honneur de co-encadrer ma thèse et dont l'implication et l'optimisme ont tout particulièrement contribué à la réalisation de mes travaux.

Je tiens à remercier vivement tous les membres du jury d'avoir accepté de lire et rapporter ma thèse et tout particulièrement, Jean-Robert Clermont qui a accepté d'en être le président. Merci aussi à Albert Magnin ainsi qu'à tout le personnel du laboratoire de Rhéologie de m'avoir accueilli, et notamment à Frédéric et Mohammed pour toutes ces discussions aussi intéressantes qu'hétéroclites.

Merci à Stéphane mon co-bureau pour toutes ces histoires de grimpes qui ont égaillé les froides journées d'hiver et rafraîchi les chaudes journées d'été. Et qui m'a permis de découvrir la plus belle ville au monde, Annecy! Un très sincère merci à Nicolas, le collègue du bureau d'à côté, pour son aide indispensable et sa compagnie dans les (très) bons comme dans les (un peu) moins bons moments.

Comme on dit, on garde le meilleur pour la fin. Merci alors à tous mes amis, en commençant par tous les Montpelliérains, Vincent, Marion, Isa, Nico, Kevin, Micka, ..., qui sont si présents depuis maintenant un bon bout de temps. Merci Sylvain et Cédric pour les bons moments passés ensemble. Un grand merci à Margot et Thomas, les meilleurs skieurs, grimpeurs et vélivoles qu'on ait jamais vu entre Romanin et Briançon. Merci, Étienne, Lulu et Solo, de nous avoir accueilli avant le grand départ et pour toutes ces soirées inoubliables passés à refaire le monde.

Merci Pierre pour avoir été présent du tout début jusqu'à la soutenance malgré les impératifs d'un futur papa. Promis on se le fera ce biplace !

Merci de tout cœur à mes parents, Morgane et Manuel pour leur précieux soutien et leur présence indispensable. Vous avez contribué plus que vous ne l'imaginez !

Merci Lauriane de m'avoir tant aidé, soutenu et encouragé depuis toutes ces années. Je te dois énormément.

Enfin merci à toutes les personnes que je n'ai pas citées ici et qui se reconnaîtront dans ces quelques lignes.

Table des matières

Introduction	1
I Techniques de réduction dimensionnelle	5
1 État de l'art	9
1.1 Méthode de réduction <i>a posteriori</i>	11
1.2 Méthodes de réduction <i>a priori</i>	16
2 Description de la méthode PGD	19
2.1 Présentation et séparabilité	19
2.2 Cadre général et stratégies de résolution	23
2.3 Illustration de l'utilisation de la PGD : résolution de l'équation de la chaleur	31
3 Algorithme de résolution de la PGD : optimalité et vitesse de convergence	35
3.1 Influence du conditionnement du système	36
3.2 Équation de diffusion pure instationnaire	43
3.3 Équation de convection diffusion instationnaire	52
3.4 Problème symplectique	62
4 Résolution de systèmes linéaires sous forme séparée : algorithmes "standards" et PGD <i>a posteriori</i>	68
4.1 Algorithmes de résolution de systèmes linéaires	73
4.2 Équation de diffusion pure instationnaire	76
4.3 Équation de convection-diffusion instationnaire	79
4.4 Problème symplectique	82
5 Conclusion du chapitre	86

II	Approche microstructurale des suspensions fluides	89
1	État de l'art	93
2	Approche microstructurale du mélange	94
2.1	Description de l'évolution de l'interface	95
2.2	Définition du tenseur d'aire	97
2.3	Introduction des effets physiques : terme de relaxation	100
2.4	Jeu d'équations complet : utilisation de relations de fermeture	104
2.5	Vers une modélisation microstructurale dans le cadre de la théorie cinétique .	108
3	Technique de résolution en écoulement homogène	112
3.1	Fonction d'orientation d'aire	112
3.2	Équation d'évolution du Tenseur d'aire	116
3.3	Forme adimensionnelle des équations du modèle	116
3.4	Évaluation de l'efficacité des relations de fermeture	118
4	Approche microstructurale en écoulement complexe	123
4.1	Approche micro-macro avec PGD	123
4.2	Exemple de mélange complexe avec relation de fermeture et modèle physique complet	134
4.3	Application du tenseur d'aire : caractérisation de l'efficacité d'une géométrie de mélangeur	139
5	Une modélisation Polydisperse du mélange	142
5.1	Équation d'évolution de la concentration	143
5.2	Couplage avec le tenseur d'aire	146
5.3	Résultats numériques du nouveau modèle de tenseur d'aire avec polydispersité	148
6	Conclusion du chapitre	158
III	Description continue de systèmes de suspensions colloïdales	159
1	État de l'art	162
2	Équations du modèle	165
2.1	Fonction de corrélation de paire	165
2.2	Conditions aux limites du problème de théorie cinétique	167

2.3	Expression du tenseur des extra-contraintes fluides	170
3	Fonction de corrélation de paire en écoulement homogène	171
3.1	Approche par la méthode des Éléments Finis	171
3.2	Discrétisation de l'espace des configurations	174
3.3	Résultats numériques en écoulement homogène stationnaire	175
4	Approche micro-macro en écoulement complexe : description macroscopique ou technique de réduction dimensionnelle?	180
4.1	Description macroscopique de la fonction de corrélation de paire	180
4.2	Technique de réduction dimensionnelle	186
4.3	Approche micro-macro pour un écoulement recirculant simple	188
4.4	Approche micro-macro pour un écoulement de cavité	194
5	Conclusion du chapitre	206
Conclusion		209
Bibliographie		212

Notations

Opérateurs

\otimes	Produit tensoriel
\cdot	Produit simplement contracté
$:$	Produit doublement contracté
	Vecteur
	Matrice
$\underline{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)^T$	Opérateur gradient
$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$	Opérateur Laplacien
$\frac{\partial}{\partial t}$	Dérivée partielle par rapport à t
$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla}$	Dérivée particulaire
$\frac{D}{Dt}$	Dérivée totale sur l'espace physique et l'espace des configurations
Tr	Trace de matrice
$\ \cdot \ $	Norme
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Produit scalaire
δ	Symbole de Kronecker

Séparation de variables

$\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots$	Opérateurs tensoriels multidimensionnels
\oplus	Somme de deux vecteurs ou matrices au sens tensoriel
\ominus	Soustraction de deux vecteurs ou matrices au sens tensoriel
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Produit scalaire de vecteurs au sens tensoriel

Description des suspensions fluides

$\underline{x} = (x, y, z)^T$	Coordonnées de l'espace physique
\underline{n}	Vecteur unité donnant l'orientation de la microstructure
\underline{q}	Tenseur d'interface
\underline{A}	Tenseur d'aire
$Q = S_V$	Aire d'interface par unité de volume - aussi dénoté <i>surface spécifique</i>
\mathcal{S}	Espace des configurations représenté par la sphère unité et repéré par \underline{n}
$\Psi(\underline{x}, t, \underline{n})$	Fonction de distribution d'aire
ϕ	Volume d'une goutte de la phase discrète
$C(\phi)$	Concentration de gouttes ayant le même volume ϕ
\underline{I}	Matrice identité
\underline{v}	Vitesse fluide
$\mathcal{V}_{\text{Discrète}}$	Volume de la phase discrète
$\mathcal{V}_{\text{Total}}$	Volume total du mélange

Description des suspensions solides

$\underline{x} = (x, y, z)^T$	Coordonnées de l'espace physique
$\underline{R} = (u, v, w)^T$	Coordonnées de l'espace des configurations
a	Rayon d'une suspension
k_B	Constante de Boltzmann
n_p	Densité de particules
T	Température
η_0	Viscosité du solvant
$\underline{\Lambda}, \underline{\lambda}$	Coefficients cinétiques
U	Potentiel interparticulaire d'attraction-répulsion
ϵ	Paramètre caractérisant le potentiel de Lennard-Jones
\underline{v}	Vitesse fluide
\underline{D}	Tenseur des taux de déformation
$\underline{\sigma}$	Tenseur des contraintes fluides
$g(\underline{x}, \underline{R}, t)$	Fonction de corrélation de paire
$\underline{m}(\underline{x}, \underline{R}, t)$	Moment d'ordre 2 de g

Paramètres adimensionnels

Pe Nombre de Péclet

Re Nombre de Reynolds

Abréviations usuelles

Chap. Chapitre

Sec. Section

Fig./Figs. Figure (singulier / pluriel)

Eq./Eqs. Équation (singulier / pluriel)

Tab. Tableau

Alg. Algorithme

Introduction

L'importance accrue des simulations numériques dans de très nombreux domaines industriels engendre une recherche de précision croissante des résultats obtenus. Cela se traduit à la fois par une augmentation de la complexité des modèles étudiés mais aussi par une augmentation de la quantité d'informations à traiter. Malgré l'accroissement continu des ressources informatiques disponibles, de nouvelles stratégies de résolution doivent être envisagées car les techniques de simulation numérique classiques sont soumises à la terrible *malédiction de la dimensionnalité* : la complexité des algorithmes mis en jeu augmente exponentiellement avec le nombre de dimensions du problème. Or même sans augmenter le nombre de dimensions d'un problème, l'augmentation du nombre d'inconnues sur chaque dimension, résultant de la volonté d'augmenter la précision des résultats, entraîne l'explosion du nombre total d'inconnues du problème et nécessite alors des moyens informatiques très importants tant au niveau de la capacité mémoire qu'au niveau de la puissance de calcul.

Aussi, afin de pouvoir traiter ce type de problème sans recourir à des ressources informatiques de types *cluster de calcul*, d'autres alternatives peuvent être envisagées, au sein desquelles la réduction dimensionnelle : la solution d'un problème multidimensionnel est décrite par une somme de produits de fonctions, définies sur des sous-espaces (idéalement de dimension 1) du domaine initial. L'écriture de la solution sous cette forme, appelée forme séparée, permet, si ce n'est de s'affranchir, du moins d'alléger le poids de la *malédiction de la dimensionnalité* : la complexité des algorithmes augmente linéairement en fonction du nombre de dimensions du problème.

Application à la simulation des écoulements de fluides complexes

Pour simuler les écoulements de fluides complexes, il est possible de considérer différentes approches qui dépendent de l'échelle à laquelle on se place pour effectuer la description du système.

En partant de la plus petite échelle, l'approche de la *dynamique moléculaire* correspond à la description la plus fine du système considéré puisqu'elle prend en compte tous ses composants à travers la simulation de l'évolution de la structure moléculaire du fluide. Bien que ce type de simulation permette une bonne compréhension des phénomènes locaux, le nombre élevé de particules ainsi que le pas de temps très faible de la simulation rendent son application très coûteuse et, en pratique, inutilisable pour les écoulements de fluides complexes. Si l'on se place à l'échelle supérieure, nous entrons dans le cadre de la *dynamique brownienne*. Cette approche, tout comme celle de la dynamique

moléculaire, est une approche discrète nécessitant un grand nombre de particules représentatives. Bien que dans ce cas le pas de temps de la simulation ne soit pas aussi faible, elle demeure une approche très coûteuse en temps de calcul, rendant difficile voire impossible son application pour la simulation des fluides complexes. Pour ne plus avoir à gérer le bruit statistique inhérent aux simulations stochastiques, *la théorie cinétique* considère non plus les particules individuellement mais une population de particules de façon probabiliste. La théorie cinétique, ou approche micro-macro, a néanmoins comme inconvénient majeur d'être définie sur un espace à haute dimension rendant son utilisation difficile sans technique spécifique (de type réduction dimensionnelle). Finalement nous pouvons citer les simulations à l'échelle macroscopique qui prennent en compte les phénomènes apparaissant aux échelles mésoscopique et inférieures à l'aide de lois de comportement dont dépend fortement la précision de la méthode. En pratique les phénomènes microscopiques complexes sont très difficiles à reproduire à l'aide de lois de comportements, introduisant une grande incertitude sur les résultats issus des simulations macroscopiques.

Parmi les stratégies de simulation précédentes la théorie cinétique est une approche particulièrement intéressante car elle permet de décrire les phénomènes microscopiques complexes et de les lier à l'échelle macroscopique, et cela, dans le cadre d'une approche déterministe. Néanmoins l'utilisation d'une technique numérique adaptée est indispensable à l'utilisation de la description en théorie cinétique. Les techniques de réduction dimensionnelle sont alors particulièrement intéressantes dans l'approche continue de la description de fluides complexes dans le cadre de la théorie cinétique.

Objectifs et plan de l'étude

Ce travail a pour objectif l'étude et l'optimisation des techniques de simulation des suspensions dans les fluides. L'objectif est de formuler des stratégies précises et utilisables sans moyens informatiques spécifiques à l'aide d'approches continues du type micro-macro et ce pour deux types de suspensions : les suspensions fluides dans le cadre de problématiques de mélanges de fluides immiscibles et les systèmes suspensions solides de type colloïdales.

On s'intéressera tout d'abord à la technique de réduction dimensionnelle utilisée pour la résolution de problèmes définis dans le cadre de la théorie cinétique. Après un bref exposé des techniques existantes nous nous focaliserons sur la Proper Generalized Decomposition (PGD) qui est une

stratégie *a priori* de résolution de systèmes linéaires sous forme séparée. Nous allons en particulier étudier les propriétés de convergence de la méthode PGD à travers l'optimalité de la base de produits de fonctions obtenue permettant de décrire la solution et proposer une autre approche de résolution de systèmes linéaires sous forme séparée.

Ensuite nous étudierons la problématique associée à la simulation de mélanges de fluides immiscibles. La présence de deux phases fluides, qui peuvent être newtoniennes, entraînent une modifications non linéaire de l'écoulement au travers de nombreux phénomènes (tels que la coalescence ou le fractionnement des gouttes de la phase discrète). De plus la taille caractéristique de ces phénomènes complexes est très inférieure celle de l'écoulement interdisant une approche macroscopique. La simulation de tels écoulements nécessite alors l'introduction d'outils mathématiques spécifiques et nous choisirons d'utiliser le *tenseur d'aire*. Une étude approfondie de ce dernier sera menée en utilisant une description équivalente définie en théorie cinétique et l'enrichissement du tenseur d'aire par un modèle polydisperse sera présenté.

Finalement nous étudierons les systèmes colloïdaux à travers une approche continue définie par l'équation de Smoluchowski. Cette description micro-macro sera alors résolue à l'aide de la méthode PGD et les différents résultats obtenus seront largement discutés permettant ainsi d'appréhender non seulement les limites de cette description mais aussi les possibilités offertes par l'approche continue de la description de systèmes colloïdaux.

Chapitre I

Techniques de réduction dimensionnelle

Résumé :

Dans ce chapitre nous étudions les stratégies visant à la **résolution de systèmes linéaires dans le cadre de la séparation de variables**. Après une brève présentation des méthodes majeures de réduction dimensionnelle *a posteriori* et *a priori* nous présentons la **Proper Generalized Decomposition** (PGD) et étudions en détail les propriétés de convergence pour plusieurs algorithmes de la méthode et à travers différents problèmes types. Dans l'optique d'améliorer la vitesse de convergence de la méthode, nous présentons pour chaque cas-test **les résultats du problème préconditionné un grand nombre de fois** afin d'établir s'il existe **un lien entre conditionnement de l'opérateur et vitesse de convergence**. Finalement nous présentons une autre approche de l'utilisation de la méthode en s'appuyant sur la capacité de la PGD à obtenir le rang de séparation optimal *a posteriori* d'une variable sous forme séparée. Cette propriété permet alors **la résolution de systèmes linéaires à l'aide d'algorithmes itératifs classiques** (du type Gradient, Gradient Conjugué, etc) réécrits pour être utilisés sous forme séparée.

Sommaire

1	État de l'art	9
1.1	Méthode de réduction <i>a posteriori</i>	11
1.1.a	Décomposition Orthogonale en modes Propres - POD	11
1.1.b	Analyse en composantes principales - PCA - et Décomposition de Karhunen-Loève- KLD	12
1.1.c	Décomposition en valeurs singulières - SVD	13
1.2	Méthodes de réduction <i>a priori</i>	16
1.2.a	Hyper Réduction A Priori - APhR	16
1.2.b	Décomposition Généralisée en modes Propres- PGD	17
2	Description de la méthode PGD	19
2.1	Présentation et séparabilité	19
2.2	Cadre général et stratégies de résolution	23
2.2.a	PGD progressive pondérée	25
2.2.b	PGD avec mise à jour	29
2.2.c	Synthèse des différentes stratégies pour la méthode PGD	30
2.3	Illustration de l'utilisation de la PGD : résolution de l'équation de la chaleur	31
3	Algorithme de résolution de la PGD : optimalité et vitesse de conver- gence	35
3.1	Influence du conditionnement du système	36
3.1.a	Conditionnement : définition et rappel	37
3.1.b	Préconditionnement de la méthode PGD	40
3.2	Équation de diffusion pure instationnaire	43
3.3	Équation de convection diffusion instationnaire	52
3.3.a	Premier cas	52
3.3.b	Deuxième cas	57
3.3.c	Influence du conditionnement : convergence du problème précon- ditionné	60
3.4	Problème symplectique	62
4	Résolution de systèmes linéaires sous forme séparée : algorithmes "standards" et PGD <i>a posteriori</i>	68

4.1	Algorithmes de résolution de systèmes linéaires	73
4.1.a	Méthode du Gradient à pas variable - G	73
4.1.b	Méthode du Gradient Conjugué - CG	74
4.1.c	Méthode du Gradient BiConjugué Stabilisé - BiCGStab	75
4.2	Équation de diffusion pure instationnaire	76
4.3	Équation de convection-diffusion instationnaire	79
4.4	Problème symplectique	82
5	Conclusion du chapitre	86

1 État de l'art

La simulation numérique de modèles physiques est aujourd'hui un élément incontournable de nombreux domaines de la science et de l'ingénierie. Du fait de l'augmentation de la complexité des modèles, il est nécessaire d'utiliser des méthodes numériques robustes et très souvent de raffiner de manière importante la discrétisation afin d'obtenir des prédictions fiables de leurs réponses. Bien que les ressources informatiques disponibles soient en constante augmentation, certains problèmes restent hors de portée des méthodes de résolution classique à moins de posséder d'importantes ressources en puissance de calcul et en espace de stockage. Cependant l'approche consistant à utiliser des moyens toujours plus importants pour résoudre les problèmes à l'aide des stratégies numériques classiques peut être comparée à une approche de force brute. Ce type de démarche atteint rapidement ses limites en terme de coûts alors que des stratégies innovantes peuvent être mise en œuvre permettant de réduire fortement à la fois le temps de calcul et l'espace de stockage nécessaires.

Une des possibilités pour s'affranchir, ou tout du moins alléger, ces problèmes de calcul s'inscrit dans les méthodes de réduction dimensionnelle. Ces méthodes sont basées sur le fait que la réponse à un problème complexe peut être avantageusement approchée¹ par la réponse d'un autre, qui est la projection du problème initial dans une base réduite de basse dimension. Cette approche nécessite l'introduction de ce que nous appellerons indifféremment la *forme séparée* ou *décomposition tensorielle* : soit une équation définie sur un espace de D dimensions, il est possible d'obtenir une forme approchée de la solution f par une fonction séparable telle que

$$f(x_1, \dots, x_D) \approx \sum_{i=1}^{n_F} F_1^i(x_1) \cdots F_D^i(x_D) + \mathcal{O}(\epsilon) \quad (\text{I.1})$$

L'entier n_F défini (I.1) est appelé *rang de séparation*. Pour un ϵ donné, le rang de séparation optimal est le plus petit n_F permettant d'obtenir la solution approchée sous forme séparée [Beylkin et Mohlenkamp, 2002]. Dans le cas où $n_F = 1$ le tenseur est appelé *tenseur de rang 1*.

Tenseur de rang 1 : Un tenseur $\mathbf{F} \in \mathcal{R}^{I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N}$ d'ordre N est de *rang 1* s'il peut être écrit

1. La précision atteinte par ces méthodes peut être raisonnablement suffisante et ainsi réduire avantageusement le temps de calcul et l'espace de stockage nécessaire.

comme un produit tensoriel de N vecteurs [Kolda et Bader, 2009], soit

$$\mathbf{F} = \mathbb{F}_1 \otimes \mathbb{F}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{F}_D \quad (\text{I.2})$$

Remarque :

Si la meilleure approximation de f sous la forme (I.1) n'est pas suffisamment précise, f n'étant alors pas un tenseur de rang 1, il n'est pas possible dans ce cadre d'améliorer la précision.

Afin de simplifier les notations, nous écrirons dans la suite du manuscrit la représentation séparée pour un certain ϵ d'une solution F

$$F(x_1, \dots, x_D) \equiv \sum_{i=1}^{n_F} \mathbb{F}_1^i \otimes \cdots \otimes \mathbb{F}_D^i \quad (\text{I.3})$$

Si l'origine de décomposition tensorielle remonte à Hitchcock en 1927 [Hitchcock, 1927], l'intérêt pour cette formulation s'est étendu depuis quelques années à de très nombreux champs d'applications tels que le traitement du signal [De Lathauwer et De Moor, 1998] [De Lathauwer et de Baynast, 2008], l'algèbre linéaire numérique [Grigorasu et Regalia, 1999], la neuroscience [Beckmann et Smith, 2005], l'analyse numérique [Beylkin et Mohlenkamp, 2002] et bien d'autres. Cet engouement est largement motivé par le fait que les algorithmes écrits sous forme séparée ne sont pas sujets à la terrible "malédiction de la dimensionnalité" (*curse of dimensionality* en anglais [Bellman, 1966]) : la complexité d'un algorithme écrit sous forme séparée en dimension d augmente linéairement en d alors qu'elle augmente exponentiellement en d dans le cas de l'écriture classique.

Dans ce chapitre nous allons présenter différentes techniques de réduction de modèle en distinguant les méthodes dites *a posteriori*, dont la base réduite ne peut être obtenue qu'en connaissant tout ou partie de la solution, des méthodes dites *a priori*, c'est à dire qui ne nécessitent aucune connaissance initiale de la solution. Dans les méthodes *a posteriori* nous présenterons la *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) qui est une des méthodes de réduction de modèle les plus utilisées et qui permet d'obtenir le rang de séparation optimal. Parmi les méthodes *a priori* nous présenterons succinctement la méthode APHR (*A Priori HyperReduction method*) pour ensuite nous concentrer

plus largement sur la *Proper Generalized Decomposition* PGD. Une description détaillée de la méthode ainsi que l'exploration de différentes pistes de recherches, motivée par l'amélioration de la convergence et de l'optimalité de la méthode, seront finalement exposées.

1.1 Méthode de réduction *a posteriori*

1.1.a Décomposition Orthogonale en modes Propres - POD

De nombreuses méthodes de réduction dimensionnelle *a posteriori* ont été développées en fonction du problème étudié. Cependant la *Decomposition Orthogonale en modes Propres* (ou *Proper Orthogonal Decomposition* - POD - en anglais) est incontestablement la technique de réduction qui a donné lieu au plus grand nombre de publications ces dernières années. Ainsi le concept de POD a été appliqué à un impressionnant nombre de domaines de recherche différents : l'analyse statistique, la compression d'images, la mécanique ou encore dans le domaine du biomédical. En fait, l'utilisation de la POD est intimement liée à sa capacité de réduction au sens large : tous les domaines traitant un nombre important de données sont alors intéressés par la réduction de leur coût de stockage et de traitement.

Si les premiers travaux sur la POD datent du début du XXIème siècle [Pearson, 1901], le développement de la méthode a impliqué de nombreux chercheurs et notamment [Lumley, 1970] qui a introduit la méthode dans les problèmes de mécanique des fluides. Soit $u(x, t)$ solution du problème défini par

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{L}(u) = f$$

ou $\mathcal{L}(u)$ est un opérateur linéaire et $x \in \Omega, t \in I$.

L'idée principale de la POD consiste à trouver une représentation séparée u_m de la solution $u \in \Omega \times I$ de telle sorte qu'elle soit optimale par rapport à une certaine métrique. Une représentation optimale d'ordre m , notée

$$u_m(x, t) = \sum_{i=1}^m \omega_x^i \otimes \lambda_t^i, \quad \omega_x^i \in \Omega, \lambda_t^i \in I \quad (\text{I.4})$$

est classiquement définie comme une représentation qui minimise la distance par rapport à la solution

exacte u , en fonction d'une norme donnée $\|\cdot\|$ sur $\Omega \times I$, soit

$$\|u - u_m\|^2 = \min \|u - \sum_{i=1}^m \omega_x^i \otimes \lambda_t^i\|^2 \quad (\text{I.5})$$

Les fonctions ω et λ dans la décomposition de u_m peuvent alors être considérées comme des fonctions de base réduite optimales par rapport à la norme choisie.

Aussi si de nombreux auteurs considèrent la POD comme une décomposition de Karhunen-Loève (Karhunen-Loève Decomposition - KLD), d'autres considèrent que la POD consiste en trois méthodes selon le contexte : la KLD, la *Principal Component Analysis* (PCA) et la *Singular Value Decomposition* (SVD) [Chatterjee, 2000]. Ces trois méthodes sont néanmoins équivalentes et mènent à des résultats similaires [Liang *et al.*, 2002]. Nous présentons dans ce qui suit les différentes méthodes.

1.1.b Analyse en composantes principales - PCA - et Décomposition de Karhunen-Loève- KLD

Les méthodes *Principal Component Analysis* (PCA) et *Karhunen-Loève Decomposition* sont assez similaires et utilisent une transformation orthogonale pour convertir un jeu d'observations potentiellement corrélées en un jeu de valeurs de variables non corrélées appelées *composantes principales*. Le nombre de composantes principales est inférieur ou égal au nombre de variables originelles. Cette transformation est définie de telle manière que la première composante principale a une variance aussi haute que possible (c'est à dire qu'elle prend en compte un maximum de variabilité dans les données). Chacune des composantes principales suivantes a, elle aussi, une variance maximale sous condition d'être orthogonale (et donc non corrélée) avec les composantes précédentes. Supposons qu'une série de données $\{\underline{u}_i\}_{i=1}^{m \times n}$ soit réarrangée dans la matrice $\underline{\underline{A}}$ tel que

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{u}_1^1 & \underline{u}_1^2 & \cdots & \underline{u}_1^m \\ \underline{u}_2^1 & \underline{u}_2^2 & \cdots & \underline{u}_2^m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \underline{u}_n^1 & \underline{u}_n^2 & \cdots & \underline{u}_n^m \end{pmatrix} \quad (\text{I.6})$$

Alors la matrice de covariance est définie par

$$\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{A}} \underline{\underline{A}}^T \quad (\text{I.7})$$

Les caractéristiques de cette matrice sont directement liées à la dépendance linéaire des données entre elles. En effet plus la matrice contient de termes et plus les données sont corrélées. Inversement plus la matrice est creuse et moins les données sont corrélées. Dans ce cadre le calcul POD par la méthode PCA ou KLD consiste à résoudre le problème aux valeurs propres suivant

$$\underline{\underline{C}} \underline{\underline{\phi}}_i = \lambda_i \underline{\underline{\phi}}_i \quad (\text{I.8})$$

La base orthonormale constituée par les vecteurs $\{\underline{\underline{\phi}}_i\}_{i=1}^m$ est le résultat de la POD.

1.1.c Décomposition en valeurs singulières - SVD

La *Décomposition en Valeurs Singulières* (ou SVD en anglais pour *Singular Value Decomposition*) est une puissante technique de factorisation matricielle utilisée dans un grand nombre de domaines [Strang, 2006] tels que la compression d'image (voir Fig. I.1), le traitement du signal ou encore l'étude des langues naturelles. Historiquement la SVD a été introduite pour les matrices carrées à coefficients réels par Beltrami et Jordan dans les années 1870, pour les matrices à coefficients complexes en 1902 puis a été généralisée (pour tout type de matrice) en 1939 par Eckhart et Young. Dans ce qui suit, bien que nous traitons de matrices à coefficients réels telles que l'on en rencontre dans la résolution d'équations aux dérivées partielles, le développement proposé reste valide pour les matrices à coefficients complexes².

2. Dans le cas de coefficients complexes, il faut lire à la place de matrice transposée et orthogonale respectivement matrice adjointe et unitaire.

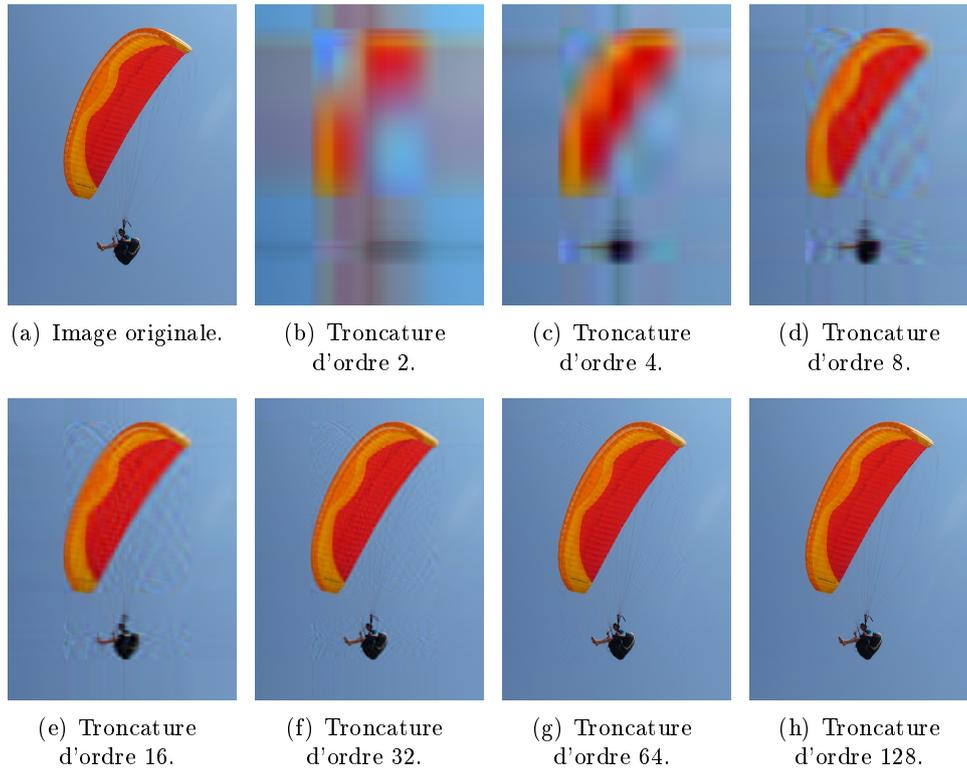


FIGURE I.1 – Utilisation de la SVD tronquée pour la compression d'image : reconstruction de l'image originale en fonction du t de l'équation I.15.

Soit $\underline{\underline{A}}$ une matrice $m \times n$ à coefficients réels, alors la décomposition SVD consiste à écrire la matrice $\underline{\underline{A}}$ sous la forme

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{\Sigma}} \underline{\underline{V}}^T \quad (\text{I.9})$$

avec $\underline{\underline{U}}$ une matrice orthogonale de dimension $m \times m$, $\underline{\underline{\Sigma}}$ une matrice diagonale de dimension $m \times n$ et $\underline{\underline{V}}$ une matrice orthogonale de dimension $n \times n$. D'après l'équation (I.9), on peut écrire en utilisant la propriété d'orthogonalité³ des matrices $\underline{\underline{U}}$ et $\underline{\underline{V}}$:

$$\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{V}} \underline{\underline{\Sigma}}^T \underline{\underline{U}}^T \underline{\underline{U}} \underline{\underline{\Sigma}} \underline{\underline{V}}^T = \underline{\underline{V}} \underline{\underline{\Sigma}}^T \underline{\underline{\Sigma}} \underline{\underline{V}}^T \quad (\text{I.10})$$

$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{A}}^T = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{\Sigma}} \underline{\underline{V}}^T \underline{\underline{V}} \underline{\underline{\Sigma}}^T \underline{\underline{U}}^T = \underline{\underline{U}} \underline{\underline{\Sigma}} \underline{\underline{\Sigma}}^T \underline{\underline{U}}^T \quad (\text{I.11})$$

$$(\text{I.12})$$

Dans les équations précédentes, le terme de droite décrit la décomposition en valeurs propres de

3. Une matrice carrée $\underline{\underline{U}}$ (n lignes, n colonnes) à coefficients réels est dite orthogonale si elle vérifie : $\underline{\underline{U}}^T \underline{\underline{U}} = \underline{\underline{I}}$, où $\underline{\underline{I}}$ est la matrice identité.

celui de gauche. Ainsi il vient :

- Les colonnes de $\underline{\underline{V}}$ sont les vecteurs propres de $\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}}$.
- Les colonnes de $\underline{\underline{U}}$ sont les vecteurs propres de $\underline{\underline{A}} \underline{\underline{A}}^T$.
- les éléments non nuls de $\underline{\underline{\Sigma}}$ sont les racines carrées de valeurs propres non nulles de $\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}}$ ou $\underline{\underline{A}} \underline{\underline{A}}^T$.

Lors de l'utilisation de la SVD il est rare d'utiliser l'algorithme donnant la SVD complète particulièrement quand m et n sont grands. Afin de diminuer le coût en temps de calcul et en mémoire, des versions réduites de la SVD sont souvent préférées parmi lesquelles on peut distinguer trois algorithmes principaux :

SVD Fine : Seuls les n premiers vecteurs colonnes de $\underline{\underline{U}}$, correspondant au nombre de vecteurs colonnes de $\underline{\underline{V}}$ sont calculés :

$$\underline{\underline{A}} \approx \underline{\underline{U}}_n \underline{\underline{\Sigma}}_n \underline{\underline{V}}^T \quad (\text{I.13})$$

La matrice $\underline{\underline{U}}_n$ est de dimension $m \times n$ alors que les matrices $\underline{\underline{\Sigma}}_n$ et $\underline{\underline{V}}^T$ sont des matrices de dimensions $n \times n$.

Cet algorithme est particulièrement intéressant lorsque $n \ll m$ car il est alors bien plus rapide et économique que la SVD complète.

SVD Compacte : Seuls les r premiers vecteurs colonnes de $\underline{\underline{U}}$ et les r premiers vecteurs colonnes de $\underline{\underline{V}}$ correspondant aux valeurs singulières non nulles de $\underline{\underline{\Sigma}}$ sont calculés :

$$\underline{\underline{A}} \approx \underline{\underline{U}}_r \underline{\underline{\Sigma}}_r \underline{\underline{V}}_r^T \quad (\text{I.14})$$

Cet algorithme est plus rapide que celui de la SVD fine si $r \ll n$. La matrice $\underline{\underline{U}}_r$ est de dimension $m \times r$, $\underline{\underline{\Sigma}}_r$ est diagonale de dimension $r \times r$ et $\underline{\underline{V}}_r^T$ est de dimension $r \times n$.

SVD Tronquée : Dans ce cas seuls les t vecteurs colonnes de $\underline{\underline{U}}$ et les r vecteurs lignes de $\underline{\underline{V}}$ correspondant aux t plus grandes valeurs singulières de $\underline{\underline{\Sigma}}_t$ sont calculés, et le reste de la matrice

est ignoré :

$$\underline{\tilde{A}} \approx \underline{U}_t \underline{\Sigma}_t \underline{V}_t^T \quad (\text{I.15})$$

Cette méthode est alors bien plus rapide et plus économique que la SVD compacte si $t \ll r$. La matrice \underline{U}_t est de dimension $m \times t$, $\underline{\Sigma}_t$ est diagonale de dimension $t \times t$ et \underline{V}_t^T est de dimension $t \times n$. Bien entendu la matrice $\underline{\tilde{A}}$ obtenue avec la SVD tronquée n'est plus la décomposition exacte de la matrice \underline{A} originale mais cette approximation est très utile car c'est la meilleure approximation de \underline{A} obtenue à partir d'une matrice de rang t . La figure I.1 est représentée l'utilisation de la SVD tronquée lors de la compression d'image.

Remarque :

La décomposition SVD est générale dans le sens où elle s'applique à toute matrice de taille $m \times n$. Ainsi dans le cas de résolution de systèmes linéaires issus d'équations aux dérivées partielles, la SVD de l'opérateur peut s'appliquer à tout type de décomposition (espace-espace, espace-temps, temps-espace, espace de configuration -espace physique, etc) dépendant de la discrétisation choisie pour construire l'opérateur. De plus cette décomposition est optimale au sens énergétique c'est à dire que la base de fonctions obtenue avec cette méthode est la meilleure approximation possible de la matrice originale.

1.2 Méthodes de réduction *a priori*

1.2.a Hyper Réduction A Priori - APHR

La méthode d'hyper réduction *a priori* (A Priori HyperReduction method, APHR, en anglais) est une stratégie adaptative pour construire un modèle d'ordre réduit lorsque l'évolution d'état est implicitement définie par un jeu d'équations non-linéaires. Développée par Ryckelynck [Ryckelynck, 2002], [Ryckelynck, 2005] elle a été utilisée pour résoudre différents problèmes : problèmes thermo-mécaniques, modèle FENE pour écoulements visco-élastiques [Ammar *et al.*, 2006b], équations de Navier-Stokes [Verdon, 2007] ou encore traiter des problèmes élasto-visco-plastiques [Ryckelynck et Missoum Benziane, 2010]. Tout comme la POD, l'APHR recherche une solution sous forme séparée

sur deux sous-espaces. Soit $u(\underline{x}, t)$ cette solution

$$u(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^{n_u} \mathbb{U}_{\underline{x}}^i \mathbb{U}_t^i \quad (\text{I.16})$$

Cependant contrairement à la POD qui nécessite la connaissance de la solution $u(\underline{x}, t)$ pour calculer la forme séparée, l'APHR n'a besoin d'aucune information *a priori* sur la solution. L'algorithme de l'APHR est divisé en trois étapes :

- Initialisation de la base.
- Résolution du système réduit.
- Enrichissement et amélioration de la base.

Bien que l'APHR soit une méthode *a priori*, il n'est pas possible d'opérer une réduction dimensionnelle sur plus de deux sous-espaces ce qui reste une forte contrainte quand le nombre de dimensions est important.

1.2.b Décomposition Généralisée en modes Propres- PGD

Une autre méthode *a priori* initialement appelée "radial time-space approximation" a été introduite par Ladevèze [Ladevèze et Simmonds, 1998] afin de réduire le temps de calcul de le cadre de la méthode LATIN (LArge Time INcrement method) dont la résolution du problème global linéaire eut été trop lourde à gérer avec les méthodes de résolution classiques. Dans ce contexte la décomposition de la solution $u(\underline{x}, t)$ proposée est une décomposition spatio-temporelle telle que

$$u(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^{n_u} \mathbb{U}_{\underline{x}}^i \otimes \mathbb{U}_t^i \quad (\text{I.17})$$

L'utilisation de la PGD couplée à la méthode LATIN permet d'obtenir de très bons résultats notamment dans la résolution de problèmes mécaniques impliquant différentes échelles [Ladevèze et Nouy, 2003] [Nouy et Ladevèze, 2004].

En 2006 [Ammar *et al.*, 2006a] présentent l'utilisation de la PGD pour la résolution de problèmes multidimensionnels dont la décomposition n'est plus seulement spatio-temporelle mais totalement

séparée. Dans cette approche on définit l'approximation d'ordre n_u de la solution $u(x_1, \dots, x_D)$ par

$$u(x_1, \dots, x_D) = \sum_{i=1}^{n_u} \mathbb{U}_1^i \otimes \dots \otimes \mathbb{U}_D^i \quad (\text{I.18})$$

Cette décomposition part d'un constat simple : lorsque le problème est défini sur un espace à grand nombre de dimensions, la résolution générale la plus simple consiste à utiliser une stratégie déterministe à maillage fixe et ne peut être réalisée qu'en écrivant le problème sous forme totalement séparée. Par exemple considérons le comportement d'une molécule modélisée à l'aide de 30 ressorts connectés entre eux, dont chaque ressort est défini sur un espace à trois dimensions (deux coordonnées pour son orientation et une troisième pour son allongement). Dans ce cas le problème est défini sur un espace à 90 dimensions. Il suffit de mailler grossièrement chacune des dimensions à l'aide de 10 nœuds pour obtenir 10^{90} degrés de liberté, un chiffre bien supérieur au nombre supposé de particules dans l'univers : 10^{80} . Ainsi Ammar et al. résolvent dans [Ammar *et al.*, 2006a] l'équation de Fokker-Planck définie sur un espace de dimension 20 dont la simulation a nécessité 10^5 degrés de liberté, quand une résolution classique par éléments finis aurait nécessité 10^{40} degrés de liberté. D'autres exemples sont présentés dans [Ammar *et al.*, 2007] dont le temps qui est traité comme une dimension du problème. La PGD a ensuite été utilisée pour résoudre de nombreux problèmes tels que l'équation de Schrödinger [Ammar et Chinesta, 2008] [F. Chinesta et Joyot, 2008], une équation chimique maîtresse [Chinesta *et al.*, 2010a] ou encore la prise en compte de modèles non-linéaires dans [Ammar *et al.*, 2010c].

Comme l'explique Chinesta et al. dans [Chinesta *et al.*, 2010b], l'utilisation de la PGD pour résoudre des problèmes multidimensionnels ouvre de nouvelles possibilités pour les modèles qui sont par nature hautement multidimensionnels tels que la chimie quantique, la mécanique statistique, la biologie, ou encore l'ingénierie financière mais aussi certains autres (modèles standards) qui pourraient être traités comme des problèmes hautement multidimensionnels.

Cependant, bien que la PGD ait été utilisée avec succès dans un grand nombre de domaines, de nouveaux développements de la méthode restent d'actualité afin de mieux cerner son potentiel mais aussi ses limites.

2 Description de la méthode PGD

Présentons tout d'abord la *Proper Generalized Decomposition* (PGD) pour la résolution d'équations aux dérivées partielles (EDP) dans un cadre général. Pour ce faire et afin de mieux appréhender la stratégie de résolution mise en jeu lors de l'utilisation de la méthode PGD, la résolution d'une EDP simple par la méthode des éléments finis classiques est tout d'abord présentée suivie de l'approche PGD utilisant la même discrétisation éléments finis. Cette comparaison permet de mettre en avant la philosophie de la réduction dimensionnelle portée par la PGD dans un cadre général à l'aide d'opérateurs simples.

2.1 Présentation et séparabilité

Cadre général

Premièrement, considérons l'équation

$$\frac{\partial U(x, t)}{\partial t} + \mathcal{L}(U(x, t)) = 0 \quad (\text{I.19})$$

où $U(x, t)$ est le champ inconnu défini de façon générale pour tout point $x \in \Omega$ et pour tout temps t , ce qui signifie qu'il peut être scalaire ou vectoriel. Par souci de simplicité et sans perte de généralité on définit $U(x, t)$ comme un champ scalaire. Dans le même souci, on note par $\mathcal{L}(U(x, t))$ un opérateur linéaire quelconque défini seulement sur x . Dans l'équation précédente, le champ $U(x, t)$ est défini sur un espace à deux dimensions repéré par les variables x et t . Par souci de clarté, on omettra par la suite la dépendance de U en x et t .

Méthode des Éléments Finis :

Pour résoudre l'équation (I.19) dans une approche éléments finis classique, on discrétise le champ

U tel que

$$\begin{aligned} U(x) &= (N_1(x), \dots, N_p(x)) \begin{pmatrix} U_1 \\ \vdots \\ U_p \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{N}^T \underline{U} \end{aligned} \quad (\text{I.20})$$

où les $N_i(x)$ font référence aux fonctions de forme et U_i les valeurs nodales (discrètes) du champ U pour tout nœud $i = 1..p$. Après introduction du champ test U^* qui s'écrit sous forme discrète de façon analogue au champ U soit $U^* = \underline{\mathbf{N}}^T \underline{U}^*$, la forme faible de l'équation (I.19) s'écrit

$$\int_{\Omega} U^* \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \mathcal{L}(U) \right) dx = 0 \quad (\text{I.21})$$

En utilisant les formes discrètes de U et U^* , l'équation précédente se réécrit

$$\int_{\Omega} (\underline{U}^*)^T \left(\frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{N}\mathbf{N}^T \underline{U}) + \mathbf{N}\mathcal{L}(\mathbf{N}^T \underline{U}) \right) dx = 0 \quad (\text{I.22})$$

soit

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} \frac{\partial \underline{U}}{\partial t} + \underline{\underline{\mathbf{K}}} \underline{U} = 0 \quad (\text{I.23})$$

avec

$$\underline{\underline{\mathbf{M}}} = \int_{\Omega} \mathbf{N}\mathbf{N}^T dx \quad \text{et} \quad \underline{\underline{\mathbf{K}}} = \int_{\Omega} \mathbf{N}\mathcal{L}(\mathbf{N}^T) dx$$

Afin de résoudre l'équation (I.23) il est usuel de discrétiser le terme temporel avec un schéma issue des différences finies tel que

$$\frac{\partial \underline{U}}{\partial t} = \frac{\underline{U}^{t+1} - \underline{U}^t}{\Delta t} \quad (\text{I.24})$$

L'utilisation d'un tel schéma permet de ne pas avoir à traiter la dimension temporelle comme une dimension supplémentaire avec support de maillage mais suppose que les pas de temps soient suffisamment faibles (que ce soit en schéma implicite ou explicite) afin de s'assurer de la convergence.

Méthode PGD :

Dans le cadre de la méthode PGD on souhaite écrire la solution sous forme séparée , c'est à dire

que U s'écrive en une somme de produits de fonctions telle que

$$U(x, t) = \sum_{i=1}^{n_U} \mathbb{F}_x^i \otimes \mathbb{G}_t^i \quad (\text{I.25})$$

où \mathbb{F}_x^i et \mathbb{G}_t^i sont des fonctions respectivement définies sur x et t . La méthode PGD est itérative et ne nécessite pas de connaître la solution *a priori*. A chaque itération i on évalue la précision de la solution obtenue avec l'équation (I.25) et si cette précision est jugée insuffisante, un nouveau produit de fonctions est ajouté et on répète ce processus jusqu'à atteindre la précision désirée. Cet algorithme est résumé dans l'Algorithme 1.

Choix de ϵ .
tant que $Erreur > \epsilon$ **faire**
 Calcul et ajout d'un nouveau produit de fonctions $\mathbb{F}_x \otimes \mathbb{G}_t$
 $Erreur =$ Évaluation de l'erreur de la solution U
fin

Algorithme 1: Algorithme général pour la méthode PGD

La recherche de la solution sous forme séparée implique l'écriture sous forme séparée de l'opérateur. Dans le cadre de la méthode PGD, la dimension temporelle n'est pas forcément distinguée des autres dimensions. Ainsi le temps peut être considéré comme une dimension supplémentaire (voir [Ammar *et al.*, 2007]) qui nécessite un maillage et un traitement équivalent aux autres dimensions. L'équation I.23 s'écrit alors sous forme séparée

$$(\mathbb{L}_t \mathbb{N}_x + \mathbb{N}_t \mathbb{L}_x) U = 0 \quad (\text{I.26})$$

avec les opérateurs temporels et spatiaux

$$\begin{aligned} \mathbb{N}_t &= \int_I \mathbf{N}_t \mathbf{N}_t^T dt & \mathbb{N}_x &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_x \mathbf{N}_x^T dx \\ \mathbb{L}_t &= \int_I \mathbf{N}_t \frac{\partial \mathbf{N}_t^T}{\partial t} dt & \mathbb{L}_x &= \int_{\Omega} \mathbf{N}_x \mathcal{L} \mathbf{N}_x^T dx \end{aligned}$$

Séparabilité de l'opérateur

Un des critères majeurs concernant l'utilisation de la PGD concerne la séparabilité de l'opérateur,

linéaire ou non, définissant l'EDP. Prenons par exemple l'équation définie par

$$\mathcal{L}(U(x, y, z, t)) = 0 \quad (\text{I.27})$$

où l'opérateur linéaire \mathcal{L} est quelconque. Cette équation peut être résolue avec la PGD s'il est possible d'écrire l'opérateur sous forme séparée soit

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{n_L} \mathbb{L}_i(x) \otimes \mathbb{L}_i(y) \otimes \mathbb{L}_i(z) \otimes \mathbb{L}_i(t) \quad (\text{I.28})$$

ou toute autre forme séparée permettant d'exprimer l'opérateur comme une somme de produits de fonctions.

Cependant la question de la séparabilité n'est pas triviale et il n'y a pas à notre connaissance de critère(s) permettant de conclure *a priori* à la séparabilité d'une équation. D'autres analyses mathématiques restent nécessaires pour répondre à cette question.

En pratique la plupart des équations aux dérivées partielles peuvent être écrites sous forme séparée et donc être résolues par la méthode PGD. Cependant pour un même problème on peut très souvent choisir plusieurs types de séparation. Ainsi si nous choisissons de résoudre avec la PGD un problème défini à la fois sur un domaine spatial défini par $\underline{x} \in \Omega$, et sur un domaine temporel $t \in I$, il existe trois façon de résoudre ce problème :

1. Premièrement d'effectuer une décomposition spatio-temporelle telle que la solution s'écrive sous la forme

$$U(\underline{x}, t) = \sum_i \mathbb{F}_x^i \otimes \mathbb{G}_t^i \quad (\text{I.29})$$

Si cette décomposition est très souvent la plus simple à réaliser, elle peut devenir problématique lorsque le nombre de degré de liberté augmente dans Ω . En effet dans ce cas on doit résoudre un problème de grande taille à chaque enrichissement de la base de produits de fonctions.

2. Pour s'affranchir du problème posé par la précédente décomposition, on peut choisir de décomposer le problème sur chacune des variables de \underline{x} et sur le temps. Dans le cas où $\underline{x} = (x, y)^T$

$$U(\underline{x}, t) = \sum_i \mathbb{F}_x^i \otimes \mathbb{G}_y^i \otimes \mathbb{H}_t^i \quad (\text{I.30})$$

Bien que cette décomposition ait pour avantage de ne traiter que d'espaces à une dimension, en pratique elle augmente significativement le nombre d'enrichissements nécessaires à la convergence comme on peut le voir sur la Fig. I.2 publiée par [Ammar, 2010] où un même problème de diffusion pure instationnaire est résolu à la fois avec une décomposition $3 \times 1D$ et une décomposition spatio-temporelle.

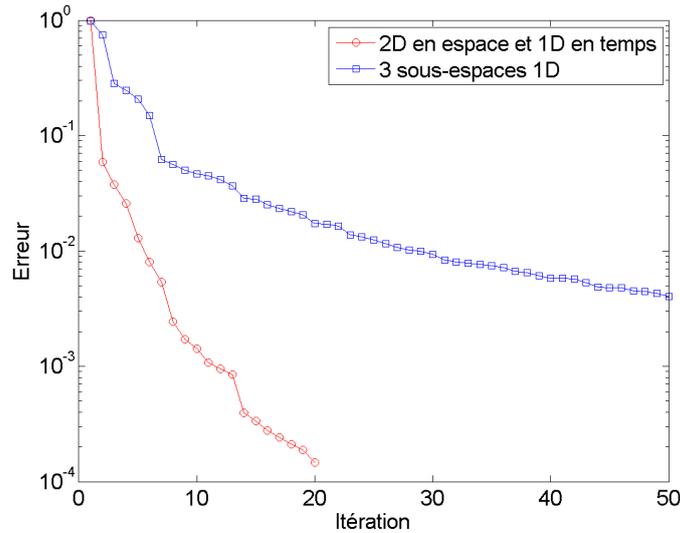


FIGURE I.2 – Comparaison publiée par [Ammar, 2010] des courbes de convergence pour le même problème en fonction de la décomposition utilisée.

3. Finalement il est possible d'utiliser une approche incrémentale en temps et d'effectuer une séparation à chaque pas de temps n'impliquant que les variables spatiales. Dans le cas où $\underline{x} = (x, y)^T$

$$U^t(\underline{x}) = \sum_i \mathbb{F}_x^i \otimes \mathbb{G}_y^i \quad (\text{I.31})$$

L'approche temporelle ainsi considérée est la même que celle utilisée dans la méthode des éléments finis classiques.

2.2 Cadre général et stratégies de résolution

Comme nous l'avons vu précédemment, l'idée principale de la PGD réside dans la représentation sous forme séparée des inconnues du problème. Dans la section qui suit nous présentons la PGD dans un cadre plus général pour tout problème multidimensionnel et quelle que soit la séparation choisie.

Soit $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \cdots \times \Omega_D$ un espace multidimensionnel défini par les coordonnées x_1, x_2, \dots, x_D appartenant respectivement à $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \cdots \times \Omega_D$. Notons que chaque sous espace n'est pas nécessairement unidimensionnel. Nous cherchons la solution $u(x_1, x_2, \dots, x_D)$ solution du système linéaire

$$a u = b \quad (\text{I.32})$$

Ce système peut s'écrire sous forme discrète

$$\mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{B} \quad (\text{I.33})$$

Le problème est défini sur un espace de dimension D et en supposant qu'il peut être écrit sous forme séparée, il vient :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} &= \sum_{i=1}^{n_A} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^i \otimes \cdots \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_D^i \\ \mathcal{U} &= \sum_{i=1}^{n_U} \underline{\underline{\mathbb{U}}}_1^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{U}}}_2^i \otimes \cdots \otimes \underline{\underline{\mathbb{U}}}_D^i \\ \mathcal{B} &= \sum_{i=1}^{n_B} \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^i \otimes \cdots \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_D^i \end{aligned} \quad (\text{I.34})$$

La représentation séparée de \mathcal{A} et \mathcal{B} est directement issue des opérateurs que l'on retrouve dans la formulation faible de l'équation (I.33)

$$\mathcal{U}^{*T} \mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{U}^{*T} \mathcal{B} \quad (\text{I.35})$$

et qui nécessite l'introduction du champ test \mathcal{U}^* .

De nombreuses stratégies peuvent être utilisées pour résoudre un problème en utilisant la méthode PGD. Dans la section qui suit nous allons développer certaines d'entre elles qui nous paraissent intéressantes pour une meilleure compréhension de la PGD en vue de son amélioration.

2.2.a PGD progressive pondérée

Cette stratégie de résolution est actuellement celle qui est la plus utilisée car c'est celle qui présente le meilleur compromis en termes d'efficacité et d'optimalité. Le terme "progressif" vient du fait qu'à chaque itération on enrichit la base de produits de fonctions avec un seul nouveau produit. Ainsi à l'itération n , les vecteurs $\underline{\mathbb{U}}_j^i, \forall i \leq n$ et $\forall j \leq D$ sont supposés connus. Nous cherchons alors un enrichissement tel que

$$\mathcal{U} = \sum_{i=1}^{n_U} \underline{\mathbb{U}}_1^i \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{U}}_D^i + \underline{\mathbb{R}}_1 \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{R}}_D \quad (\text{I.36})$$

où $\underline{\mathbb{R}}_i, i = 1, \dots, D$, sont les vecteurs d'enrichissement inconnus. Les $\underline{\mathbb{U}}_i$ sont enrichis progressivement, l'un après l'autre, les fonctions précédentes n'étant jamais recalculées.

Cependant, afin garantir l'optimalité au sens de Galerkin de la base de fonctions obtenue à l'aide de la méthode PGD, il faut imposer lors de chaque enrichissement que le nouveau produit soit orthogonal au résidu de l'équation

$$\langle \mathcal{A}\mathcal{U}, \underline{\mathbb{U}}_j^i \rangle = \langle \mathcal{B}, \underline{\mathbb{U}}_j^i \rangle \quad (\text{I.37})$$

$\forall i = 1..n_u$ et $j = 1..D$ avec $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire. Ainsi cela consiste à normaliser les fonctions calculées et à ajouter par le biais d'une projection des coefficients de pondération. La solution recherchée s'écrit alors sous la forme

$$\mathcal{U} = \sum_{i=1}^{n_u} \alpha_i \underline{\mathbb{U}}_1^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_2^i \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{U}}_D^i \quad (\text{I.38})$$

Une fois la base enrichie d'un nouveau produit de fonctions, les fonctions obtenues sont normalisées par rapport à la norme L^2 de ces mêmes fonctions, puis chacun des produits de fonctions $\underline{\mathbb{U}}_1^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_2^i \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{U}}_D^i$ est pondéré par un coefficient α_i qui est obtenu en résolvant le système suivant :

$$\left\langle \mathcal{A} \left(\sum_{i=1}^{n_u} \alpha_i \underline{\mathbb{U}}_1^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_2^i \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{U}}_D^i \right), \underline{\mathbb{U}}_1^k \otimes \underline{\mathbb{U}}_2^k \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{U}}_D^k \right\rangle = \langle \mathcal{B}, \underline{\mathbb{U}}_1^k \otimes \underline{\mathbb{U}}_2^k \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{U}}_D^k \rangle \quad (\text{I.39})$$

avec $1 \leq k \leq n_u$.

Ainsi les coefficients sont recalculés à toutes les itérations, mais la taille du système à résoudre est

définie par le nombre de fonctions n_u , généralement faible⁴, ce qui rend cette opération peu coûteuse.

Illustration dans un cas général de la PGD P

Supposons que le champ test s'écrit de la manière suivante :

$$\mathcal{U}^* = \underline{\mathbb{R}}_1^* \otimes \underline{\mathbb{R}}_2 \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{R}}_D + \cdots + \underline{\mathbb{R}}_1 \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{R}}_{D-1} \otimes \underline{\mathbb{R}}_D^* \quad (\text{I.40})$$

En introduisant l'approximation enrichie (Eq. (I.36)) dans la formulation faible (Eq. (I.35)), il vient la forme discrète :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n_A} \sum_{j=1}^{n_U} (\underline{\mathbb{R}}_1^*)^T \underline{\mathbb{A}}_1^i \underline{\mathbb{U}}_1^j \otimes \cdots \otimes (\underline{\mathbb{R}}_D)^T \underline{\mathbb{A}}_D^i \underline{\mathbb{U}}_D^j + \cdots + \sum_{i=1}^{n_A} \sum_{j=1}^{n_U} (\underline{\mathbb{R}}_1)^T \underline{\mathbb{A}}_1^i \underline{\mathbb{U}}_1^j \otimes \cdots \otimes (\underline{\mathbb{R}}_D^*)^T \underline{\mathbb{A}}_D^i \underline{\mathbb{U}}_D^j \\ & \quad \sum_{i=1}^{n_A} (\underline{\mathbb{R}}_1^*)^T \underline{\mathbb{A}}_1^i \underline{\mathbb{U}}_1^j \otimes \cdots \otimes (\underline{\mathbb{R}}_D)^T \underline{\mathbb{A}}_D^i \underline{\mathbb{U}}_D^j + \cdots + \sum_{i=1}^{n_A} (\underline{\mathbb{R}}_1)^T \underline{\mathbb{A}}_1^i \underline{\mathbb{U}}_1^j \otimes \cdots \otimes (\underline{\mathbb{R}}_D^*)^T \underline{\mathbb{A}}_D^i \underline{\mathbb{U}}_D^j = \\ & \quad \sum_{i=1}^{n_B} \left((\underline{\mathbb{R}}_1^*)^T \underline{\mathbb{B}}_1^i \otimes \cdots \otimes (\underline{\mathbb{R}}_D)^T \underline{\mathbb{B}}_D^i + \cdots + (\underline{\mathbb{R}}_1)^T \underline{\mathbb{B}}_1^i \otimes \cdots \otimes (\underline{\mathbb{R}}_D^*)^T \underline{\mathbb{B}}_D^i \right) \end{aligned} \quad (\text{I.41})$$

qui peut se réécrire sous forme plus compacte

$$\underbrace{\sum_{k=1}^{n_A} \left(\underline{\mathbb{R}}_j^{*T} \underline{\mathbb{A}}_j^k \underline{\mathbb{R}}_j \prod_{\substack{h=1 \\ h \neq j}}^D \underline{\mathbb{R}}_h^T \underline{\mathbb{A}}_h^k \underline{\mathbb{R}}_h \right)}_{\underline{\mathbb{R}}_j^{*T} \underline{\mathbb{K}} \underline{\mathbb{R}}_j} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n_U} \sum_{k=1}^{n_A} \left(\alpha_i \underline{\mathbb{R}}_j^{*T} \underline{\mathbb{A}}_j^k \underline{\mathbb{U}}_j^i \prod_{\substack{h=1 \\ h \neq j}}^D \underline{\mathbb{R}}_h^T \underline{\mathbb{A}}_h^k \underline{\mathbb{U}}_h^i \right)}_{\underline{\mathbb{R}}_j^{*T} \underline{\mathbb{V}}} = \underbrace{\sum_{k=1}^{n_B} \left(\underline{\mathbb{R}}_j^{*T} \underline{\mathbb{B}}_j^k \prod_{\substack{h=1 \\ h \neq j}}^D \underline{\mathbb{R}}_h^T \underline{\mathbb{B}}_h^k \right)}_{\underline{\mathbb{R}}_j^{*T} \underline{\mathbb{F}}} \quad (\text{I.42})$$

ou encore

$$\underline{\mathbb{K}} \underline{\mathbb{R}}_j + \underline{\mathbb{V}} = \underline{\mathbb{F}} \quad (\text{I.43})$$

La résolution de ce système, fortement non linéaire, est réalisée grâce à un algorithme de linéarisation de point fixe à directions alternées : à chaque itération la fonction $\underline{\mathbb{R}}_j$ est calculée, considérant les autres connues. La convergence est considérée atteinte à l'itération k lorsque $\|\underline{\mathbb{R}}_j^k - \underline{\mathbb{R}}_j^{k-1}\|_{\mathcal{A}}$, $j = 1..D$ est inférieure à un certain critère d'arrêt ϵ_k .

4. En pratique le nombre d'enrichissements dépasse rarement les quelques dizaines.

La convergence globale est considérée atteinte lorsque l'erreur

$$Err = \|\mathcal{A}\mathcal{U} - \mathcal{B}\|_2 \quad (\text{I.44})$$

est inférieure à ϵ_m qui est le critère d'arrêt global. La détermination du critère d'arrêt global dépend fortement du problème étudié et donc de la convergence de la solution obtenue. En terme de minimisation, la formulation variationnelle suivante est équivalente à la minimisation de la fonctionnelle suivante

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathcal{U}) &= (\mathcal{U} - \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B})\mathcal{A}(\mathcal{U} - \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}) \\ &= \|\mathcal{U} - \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\|_{\mathcal{A}} \end{aligned} \quad (\text{I.45})$$

Dans le cas où \mathcal{A} est un opérateur symétrique la convergence est garantie, dans le cas contraire (opérateur non symétrique du type bilinéaire hyperbolique), la convergence du point fixe est diminuée et on assiste à une perte d'optimalité par rapport au nombre d'enrichissements de produits de fonctions nécessaires. Afin de se prévenir de ce problème il est nécessaire de construire un nouvel opérateur préconditionné et une nouvelle fonctionnelle à minimiser :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathcal{U}) &= \|\mathcal{U} - \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}\|_{\mathcal{A}^T\mathcal{A}} \\ &= (\mathcal{U} - \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B})\mathcal{A}^T\mathcal{A}(\mathcal{U} - \mathcal{A}^{-1}\mathcal{B}) \\ &= \|\mathcal{A}\mathcal{U} - \mathcal{B}\|_2 \end{aligned} \quad (\text{I.46})$$

Dans ce cas le nouveau problème à résoudre s'écrit :

$$\mathcal{A}^T\mathcal{A}\mathcal{U} = \mathcal{A}^T\mathcal{B} \quad (\text{I.47})$$

Dans la suite nous nous référerons à la PGD progressive pondérée non symétrisée et symétrisée respectivement par PGD P et PGD PS.

En appelant \mathcal{T} l'application permettant d'obtenir les nouvelles fonctions $\underline{\mathbb{R}}_i$, correspond à la résolution du système (I.43), l'algorithme suivant résume la stratégie utilisée pour la PGD progressive pondérée.

PGD Progressive pondérée orthogonale

```

Données : Opérateur  $\mathcal{A}$ , second membre  $\mathcal{B}$ 
cas où  $algorithme = PGD\ PS$ ,  $\mathcal{A} = \mathcal{A}^T \mathcal{A}$  et  $\mathcal{B} = \mathcal{A}^T \mathcal{B}$ 
tant que ( $m < m_{max}$  et  $Err_m > \epsilon_k$ ) faire
  Initialisation de  $\underline{\mathbb{R}}_j$  (génération aléatoire)
  tant que ( $k < k_{max}$  et  $Err_k > \epsilon_k$ ) faire
    pour ( $i = 1$  a  $D$ ) faire
      Calcul de  $\underline{\mathbb{R}}_i = \mathcal{T}(\underline{\mathbb{R}}_k)$ ,  $k = [1, i - 1] \cup [i + 1, D]$ 
    fin
    Évaluation de l'erreur  $Err_k$ 
  fin
  Normalisation des fonctions  $\underline{\mathbb{R}}_i$ 
   $\underline{\mathbb{U}}_j^{i=1,m} = (\underline{\mathbb{U}}_j^{i=1,m-1}, \underline{\mathbb{R}}_j)$ 
  Calcul des coefficients de pondération  $\alpha_i$ 
  Évaluation de l'erreur  $Err_m$ 
fin

```

Algorithme 2: Algorithme général pour la méthode PGD progressive pondérée (PGD P et PGD PS).

On recherche la meilleure optimalité possible quant à la base de produits de fonctions obtenue ; or l'orthogonalité des fonctions entre elles est un élément essentiel. C'est pourquoi nous proposons d'ajouter une condition d'orthogonalité pour chaque nouvelle fonction calculée avec l'algorithme PGD PS (PGD progressive pondérée). La condition d'orthogonalité, qui implique que le nouveau produit de fonctions soit orthogonal à ceux précédemment calculés, s'écrit à l'enrichissement m

$$\langle \underline{\mathbb{F}}_1^m \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{F}}_D^m, \underline{\mathbb{F}}_1^i \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{F}}_D^i \rangle = 0 \quad (\text{I.48})$$

$i = 1..m - 1$.

Or en utilisant les propriétés du produit scalaire, l'équation (I.48) se réécrit

$$\langle \underline{\mathbb{F}}_1^m, \underline{\mathbb{F}}_1^i \rangle \otimes \cdots \otimes \langle \underline{\mathbb{F}}_D^m, \underline{\mathbb{F}}_D^i \rangle = 0 \quad (\text{I.49})$$

$i = 1..m - 1$, et donc qu'au moins un produit $\langle \underline{\mathbb{F}}_j^m, \underline{\mathbb{F}}_j^i \rangle = 0$, $j = 1..D$. Dans ce cas l'algorithme de la méthode est identique à celui de la PGD PS (Algorithme 2), où l'application \mathcal{T} contient une condition supplémentaire telle que la nouvelle fonction soit orthogonale à celles précédemment calculées sur le même sous-espace. Cette condition est appliquée à l'aide des multiplicateurs de Lagrange. Cette stratégie est appelée PGD PS*.

2.2.b PGD avec mise à jour

Dans les stratégies précédemment décrites (PGD P, PS et PS*), les fonctions sont calculées progressivement à chaque enrichissement. Afin de garantir l'orthogonalité, et ainsi améliorer l'optimalité de la base de fonctions obtenue, on propose de mettre à jour toutes les fonctions à chaque itération.

PGD avec Mise à jour itérative (PGD M)

La première solution pour mettre à jour toutes les fonctions consiste à recalculer chacune des fonctions de chaque sous-espace en considérant les autres fonctions connues. L'Algorithme 3 résume cette stratégie qui est dénommée PGD M.

```

tant que ( $m < m_{max}$  et  $Err_m > \epsilon_k$ ) faire
  Initialisation de  $\mathbb{R}_{j=1,D}^{i=1,m}$  (génération aléatoire)
  tant que ( $k < k_{max}$  et  $Err_k > \epsilon_k$ ) faire
    pour ( $d = 1$  a  $D$ ) faire
      pour ( $n_R = 1$  a  $m$ ) faire
        Calcul de  $\mathbb{R}_d^{n_R} = \mathcal{T}(\mathbb{R}_{j=1,D}^i)$ ,  $i = 1, m$  si  $j \neq d$  sinon  $i = [1, d - 1] \cup [d + 1, m]$ 
      fin
    fin
    Évaluation de l'erreur  $Err_k$ 
  fin
  Normalisation des fonctions  $\mathbb{R}_j^i$ 
   $\underline{\mathbb{U}}_{j=1,D}^{i=1,m} = \mathbb{R}_{j=1,D}^{i=1,m}$ 
  Calcul des coefficients de pondération  $\alpha_i$ 
  Évaluation de l'erreur  $Err_m$ 
fin

```

Algorithme 3: Algorithme général pour la méthode PGD avec Mise à jour PGD M.

PGD avec Mise à jour orthogonale (PGD M*)

La PGD M* est une variante de la précédente stratégie, qui correspond à la PGD M agrémentée d'une condition d'orthogonalité appliquée à l'aide des multiplicateurs de Lagrange dans l'application \mathcal{T} de l'Alg. 3, garantissant que chaque fonction est orthogonale à celles précédemment définies sur le même sous-espace.

PGD avec Mise à jour Simultanée (PGD MS)

La PGD MS implique une mise à jour simultanée de toutes les fonctions pour chaque sous espace. Une fois initialisée toutes les fonctions, on résout un système qui permet d'obtenir toutes les fonctions

appartenant au même sous-espace. Un algorithme de point fixe est ensuite utilisé pour faire converger les résultats obtenus sur chaque sous-espace. La convergence étant plus délicate à atteindre, et pour éviter tout risque de divergence, on relaxe partiellement le point fixe avec un paramètre de relaxation fixé à 0.5. L'algorithme 4 décrit la stratégie PGD MS.

```

tant que ( $m < m_{max}$  et  $Err_m > \epsilon_k$ ) faire
  Initialisation de  $\mathbb{R}_{j=1,D}^{i=1,m}$  (génération aléatoire)
  tant que ( $k < k_{max}$  et  $Err_k > \epsilon_k$ ) faire
    pour ( $d = 1$  a  $D$ ) faire
      | Calcul de  $(\mathbb{R}_d^1, \dots, \mathbb{R}_d^m) = \mathcal{T}(\mathbb{R}_{j \neq d}^{i=1,m})$ 
    fin
       $\mathbb{R}_j^i = \omega(\mathbb{R}_j^i)_k + (1 - \omega)(\mathbb{R}_j^i)_{k-1}$ 
      Évaluation de l'erreur  $Err_k$ 
    fin
    Normalisation des fonctions  $\mathbb{R}_j^i$ 
     $\underline{\mathbb{U}}_{j=1,D}^{i=1,m} = \mathbb{R}_{j=1,D}^{i=1,m}$ 
    Calcul des coefficients de pondération  $\alpha_i$ 
    Évaluation de l'erreur  $Err_m$ 
  fin

```

Algorithme 4: Algorithme général pour la méthode PGD avec Mise à jour Simultanée PGD MS.

Remarque :

La mise à jour de toutes les fonctions à chaque itération est un processus qui s'avère très coûteux particulièrement si les sous-espaces ne sont pas unidimensionnels. En effet dans le cadre de la PGD M, le nombre d'enrichissement réellement effectué à l'itération m et $\sum_{n=1}^m n$ et pour la PGD MS, la taille du système à résoudre augmente de l'ordre de m^2 . Dans [Nouy, 2010] il est proposé de n'utiliser ces stratégies que dans le cadre d'une décomposition spatio-temporelle et de ne mettre à jour que l'espace temporel (de dimension 1).

2.2.c Synthèse des différentes stratégies pour la méthode PGD

Dans le tableau I.1 sont résumées les différentes stratégies décrites dans les précédentes sections adoptées pour la méthode PGD.

PGD P	PGD PS et PGD PS*
1. Initialisation de $\mathbb{R}_{j=1,D}$ 2. Point fixe $\mathbb{R}_{j=1,D} = \mathcal{T} \left(\mathbb{R}_{k=1,D}^{k \neq j} \right)$ 3. $\mathcal{U}_m = \mathcal{U}_{m-1} + \mathbb{R}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbb{R}_D$ jusqu'à convergence	1. $\mathcal{A} = \mathcal{A}^T \mathcal{A}$ et $\mathcal{B} = \mathcal{A}^T \mathcal{B}$ 2. Initialisation de $\mathbb{R}_{j=1,D}$ 3. Point fixe $\mathbb{R}_{j=1,D} = \mathcal{T} \left(\mathbb{R}_{k=1,D}^{k \neq j} \right)$ Si PGD PS*, ajout d'une condition d'orthogonalité dans \mathcal{T} 4. $\mathcal{U}_m = \mathcal{U}_{m-1} + \mathbb{R}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbb{R}_D$ jusqu'à convergence
PGD M et PGD M*	PGD MS
1. $\mathcal{A} = \mathcal{A}^T \mathcal{A}$ et $\mathcal{B} = \mathcal{A}^T \mathcal{B}$ 2. Initialisation de $\mathbb{R}_{j=1,D}^{i=1,m}$ 3. Point fixe $\mathbb{R}_{d=1,D}^{n=1,m} = \mathcal{T} \left(\mathbb{R}_{j=1,D}^{i=1,m} \text{ si } j \neq d \text{ sinon } i \neq n \right)$ Si PGD M*, ajout d'une condition d'orthogonalité dans \mathcal{T} 4. $\mathcal{U}_m = \mathbb{R}_1^1 \otimes \cdots \otimes \mathbb{R}_D^1 + \cdots + \mathbb{R}_1^m \otimes \cdots \otimes \mathbb{R}_D^m$ jusqu'à convergence	1. $\mathcal{A} = \mathcal{A}^T \mathcal{A}$ et $\mathcal{B} = \mathcal{A}^T \mathcal{B}$ 2. Initialisation de \mathbb{R}_j 3. Point fixe $(\mathbb{R}_{d=1,D}^1, \cdots, \mathbb{R}_{d=1,D}^m) = \mathcal{T}(\mathbb{R}_{j \neq d}^{i=1,m})$ 4. $\mathcal{U}_m = \mathbb{R}_1^1 \otimes \cdots \otimes \mathbb{R}_D^1 + \cdots + \mathbb{R}_1^m \otimes \cdots \otimes \mathbb{R}_D^m$ jusqu'à convergence

TABLE I.1 – Synthèse des différentes stratégies adoptées pour la méthode PGD.

2.3 Illustration de l'utilisation de la PGD : résolution de l'équation de la chaleur

Dans ce qui suit nous illustrons la construction de la PGD en considérant un problème simple d'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial u(\underline{x}, t)}{\partial t} - k \Delta u(\underline{x}, t) - f = 0 \quad (\text{I.50})$$

où u , solution de l'équation (I.50), est définie à la fois sur l'espace physique \underline{x} et temporel t . Chaque point de l'espace physique est repéré par le vecteur \underline{x} . De plus $(\underline{x}, t) \in \Omega \times \Omega_t$ et par souci de clarté, le terme source et la conductivité sont supposés constant ($k = cte$ et $f = cte$).

Nous choisissons de façon arbitraire de séparer la solution recherchée en fonction des espaces de différentes "natures" : espace physique et espace temporel. La solution de l'équation (I.50) sous

forme séparée pour une certaine erreur ϵ s'écrit

$$\mathcal{U}(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^N \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_t^i \quad (\text{I.51})$$

où N est le nombre de produits de fonction et $\underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i$ et $\underline{\mathbb{U}}_t^i$ sont les représentations discrètes (nodales) des fonctions normalisées définies respectivement sur Ω et Ω_t .

Enrichissement de la base de produits de fonctions

On considère connue \mathcal{U}^n , l'approximation de u à l'itération n :

$$\mathcal{U}^n(\underline{x}, t) = \sum_{i=1}^n \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_t^i \quad (\text{I.52})$$

Nous souhaitons enrichir la base de produit de fonction avec les nouvelles fonctions $\underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^{n+1}$ et $\underline{\mathbb{U}}_t^{n+1}$, notées $\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}$ et $\underline{\mathbb{R}}_t$ en vue d'alléger la notation. L'approximation à l'itération $n+1$ s'écrit

$$\mathcal{U}^{(n+1)}(\underline{x}, t) = \left(\sum_{i=1}^n \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_t^i \right) + \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{R}}_t \quad (\text{I.53})$$

Comme nous l'avons vu dans la section précédente, la détermination des fonctions $\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}$ et $\underline{\mathbb{R}}_t$ induit la résolution d'un problème fortement non linéaire. Nous choisissons la même stratégie que dans la PGD P, c'est à dire de linéariser le système par la méthode du point fixe à directions alternées. Cela consiste à calculer un nouveau $\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}$ en supposant $\underline{\mathbb{R}}_t$ connu de l'itération précédente. Une fois mis à jour le nouveau $\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}$, un nouveau $\underline{\mathbb{R}}_t$ est calculé et mis à jour. La procédure est répétée jusqu'à convergence, c'est à dire jusqu'à ce que la différence entre les nouvelles fonctions mises à jour et les anciennes soient inférieures à l'erreur définie par l'utilisateur. Par souci de clarté, on omettra par la suite la dépendance en (\underline{x}, t) de \mathcal{U} .

La forme faible de l'équation (I.50) s'écrit

$$\int_{\Omega \times \Omega_t} \mathcal{U}^* \left(\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} - k \Delta \mathcal{U} - f \right) d\underline{x} dt = 0 \quad (\text{I.54})$$

où

$$\mathcal{U} = \left(\sum_{i=1}^n \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_t^i \right) + \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{R}}_t \quad (\text{I.55})$$

et \mathcal{U}^* est le champ test associé.

Calcul de $\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}$ à partir de $\underline{\mathbb{R}}_t$

Dans ce cas la fonction test \mathcal{U}^* s'écrit :

$$\mathcal{U}^*(\underline{x}, t, k) = \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}^* \otimes \underline{\mathbb{R}}_t \quad (\text{I.56})$$

En introduisant (I.55) et (I.56) dans (I.54) il vient

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \times \Omega_t} (\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}^* \otimes \underline{\mathbb{R}}_t) \otimes \left(\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \frac{\partial \underline{\mathbb{R}}_t}{\partial t} - k \cdot \Delta \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{R}}_t - f \right) d\underline{x} dt = \\ - \int_{\Omega \times \Omega_t} (\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}^* \otimes \underline{\mathbb{R}}_t) \otimes \mathcal{R}^n d\underline{x} dt \end{aligned} \quad (\text{I.57})$$

où \mathcal{R}^n définit le résidu à l'itération n qui s'écrit

$$\mathcal{R}^n = \sum_{i=1}^n \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i \otimes \frac{\partial \underline{\mathbb{U}}_t^i}{\partial t} - k \sum_{i=1}^n \Delta \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_t^i - f \quad (\text{I.58})$$

Maintenant, puisque nous connaissons tous les fonctions impliquant le temps, nous pouvons intégrer les termes de l'équation (I.57) dans Ω_t .

En prenant en compte les notations suivantes :

$$\left[\begin{array}{ll} r_1 = \int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} d\underline{x} & s_1 = \int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t \otimes \underline{\mathbb{R}}_t dt \\ r_2 = \int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \Delta \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} d\underline{x} & s_2 = \int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t \otimes \frac{d\underline{\mathbb{R}}_t}{dt} dt \\ r_3 = \int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} d\underline{x} & s_3 = \int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t dt \\ r_4^i = \int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \Delta \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i d\underline{x} & s_4 = \int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t \otimes \frac{d\underline{\mathbb{U}}_t^i}{dt} dt \\ r_5^i = \int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i d\underline{x} & s_5^i = \int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t \otimes \underline{\mathbb{U}}_t^i dt \end{array} \right] \quad (\text{I.59})$$

et en intégrant sur Ω_t , l'équation (I.57) devient

$$\int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}^* \otimes (s_2 \otimes \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} - s_1 \otimes (k \cdot \Delta \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}})) d\underline{x} = - \int_{\Omega} \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}^* \otimes \left(\sum_{i=1}^n s_4^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i - \sum_{i=1}^n s_5^i \otimes (k \cdot \Delta \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i) - s_3 \cdot f \right) d\underline{x} \quad (\text{I.60})$$

L'équation (I.60) définit un problème aux limites stationnaire elliptique qui peut être résolu dans le cadre de techniques de discrétisation (éléments finis, volumes finis, ...). En dehors des techniques variationnelles on peut résoudre directement :

$$s_2 \otimes \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} - s_1 \otimes (k \cdot \Delta \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}) = - \left(\sum_{i=1}^n s_4^i \otimes \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i - \sum_{i=1}^n s_5^i \otimes (k \cdot \Delta \underline{\mathbb{U}}_{\underline{x}}^i) - s_3 \cdot f \right) \quad (\text{I.61})$$

Calcul de $\underline{\mathbb{R}}_t$ à partir de $\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}$

Dans ce cas la fonction test \mathcal{U}^* s'écrit

$$\mathcal{U}^*(\underline{x}, t, k) = \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{R}}_t^* \quad (\text{I.62})$$

et la forme faible

$$\int_{\Omega \times \Omega_t} (\underline{\mathbb{R}}_t^* \otimes \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}) \otimes \left(\underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \frac{\partial \underline{\mathbb{R}}_t}{\partial t} - k \cdot \Delta \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}} \otimes \underline{\mathbb{R}}_t - f \right) d\underline{x} dt = - \int_{\Omega \times \Omega_t} (\underline{\mathbb{R}}_t^* \otimes \underline{\mathbb{R}}_{\underline{x}}) \otimes \mathcal{R}^n d\underline{x} dt \quad (\text{I.63})$$

qui après intégration sur Ω et en prenant en compte les notation de (I.59), s'écrit

$$\int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t^* \otimes \left(r_1 \otimes \frac{\partial \underline{\mathbb{R}}_t}{\partial t} - k \cdot r_2 \otimes \underline{\mathbb{R}}_t \right) dt = - \int_{\Omega_t} \underline{\mathbb{R}}_t^* \otimes \left(\sum_{i=1}^n r_5^i \cdot \frac{\partial \underline{\mathbb{U}}_t^i}{\partial t} - \sum_{i=1}^n k \cdot r_4^i - r_3 \cdot f \right) dt \quad (\text{I.64})$$

La formulation de forte de l'équation (I.64) est

$$r_1 \otimes \frac{\partial \underline{\mathbb{R}}_t}{\partial t} - k \cdot r_2 \otimes \underline{\mathbb{R}}_t = - \left(\sum_{i=1}^n r_5^i \cdot \frac{\partial \underline{\mathbb{U}}_t^i}{\partial t} - \sum_{i=1}^n k \cdot r_4^i - r_3 \cdot f \right) \quad (\text{I.65})$$

Cette équation peut être résolue en utilisant les différences finies décentrées amont, ou un schéma

de Runge-Kutta d'ordre supérieur, entre autres.

3 Algorithme de résolution de la PGD : optimalité et vitesse de convergence

Dans la section précédente nous avons présenté différents algorithmes PGD pour la résolution de systèmes linéaires sous forme séparée. Tous ces algorithmes présentent la même stratégie des directions alternées pour la résolution du système non-linéaire lors de l'enrichissement de nouvelles bases de produits de fonctions. Si d'autres stratégies de linéarisation peuvent être envisagées (comme par exemple une procédure de linéarisation du type Newton-Raphson - NR), le point fixe à directions alternées a pour avantage d'être faiblement sensible à l'initialisation des produits de fonctions (contrairement à la stratégie NR) et l'intense utilisation dans la littérature de la PGD avec cette stratégie a prouvé son efficacité. Il a de plus été prouvé dans [Ammar *et al.*, 2010b] que la solution du problème obtenue par PGD convergeait toujours vers la solution du modèle complet. D'autre part, les recherches menées par [Ammar *et al.*, 2010a] montrent que le résidu du problème n'est pas le meilleur critère d'un point de vue mécanique permettant de caractériser la convergence de la méthode. En effet il peut être plus judicieux de définir un nouvel estimateur d'erreur basé sur la solution du problème dual. Cependant cette stratégie n'améliore pas l'optimalité globale de la méthode puisque le meilleur estimateur d'erreur reste, d'un point de vue strictement mathématique, le résidu du problème.

Dans la suite de cette section nous présentons des résultats permettant de mieux comprendre le lien entre les différents algorithmes dans le cadre de la recherche de l'amélioration de l'optimalité de la base des produits de fonctions. Nous nous sommes tout d'abord intéressé à l'influence du conditionnement sur la convergence de la méthode. Sans prétendre mener une étude complète de l'influence du conditionnement et de l'utilisation de préconditionneur, nous avons cherché à établir (s'il existe) un lien direct entre conditionnement de l'opérateur et convergence. Ensuite nous nous sommes intéressés à la méthode PGD, en utilisant les différentes stratégies d'enrichissement de la base de produits de fonctions. La comparaison avec les résultats issus de la POD, qui peuvent être considérés comme optimaux, est ainsi un moyen d'évaluation de l'optimalité de chaque méthode. La PGD "classique" (PGD P et PGD PS), telle que définie dans les sections précédentes est comparée

avec des versions bien plus coûteuses (en termes de temps de calcul et de mémoire) où toutes les fonctions sont recalculées à chaque enrichissement (PGD M, PGD M* et PGD MS). Ces stratégies sont aussi comparées aux résultats issus de la POD, obtenus à l'aide de la décomposition en valeurs singulières. Nous nous proposons d'évaluer l'impact de chaque stratégie sur l'optimalité de la base obtenue pour plusieurs cas test :

- un cas de diffusion pure instationnaire,
- un cas de convection-diffusion instationnaire,
- un problème symplectique dont la solution présente la particularité de pouvoir être exactement décomposée à l'aide de deux produits de fonctions (rang de séparation de 2).

3.1 Influence du conditionnement du système

Lors de la résolution (directe ou itérative) d'un système linéaire, la convergence vers la solution dépend de plusieurs facteurs. Tout d'abord, considérons le problème suivant : trouver x tel que

$$F(x, d) = 0 \tag{I.66}$$

où d est l'ensemble des données dont dépend la solution et F est une relation fonctionnelle entre x et d . Selon la nature du problème qui est présenté en (I.66), les variables peuvent être des nombres réels, des tenseurs, des fonctions, etc. Le problème (I.66) est dit bien posé, ou stable, si la solution x existe, est unique et dépend continument des données d . Or, dans le cas contraire, on ne peut espérer qu'une méthode numérique traite les instabilités d'un problème mal posé ou instable [Quarteroni *et al.*, 2004], et il faut s'assurer avant tout de la stabilité du problème. Dans la suite, nous ne considérons que des problèmes bien posés.

Cependant, même dans le cas où le problème est bien posé, un paramètre important à prendre en compte lors de la résolution d'un système linéaire du type $\underline{\underline{A}} x = \underline{\underline{B}}$, est le conditionnement de l'opérateur $\underline{\underline{A}}$. Par exemple il est a été montré dans [Allaire, 2007] que les méthodes de résolution itératives du gradient simple et du gradient conjugué convergent respectivement en fonction du conditionnement de l'opérateur $\underline{\underline{A}}$: plus le conditionnement est faible et plus la convergence est accélérée. Puisque la vitesse de convergence dépend du conditionnement de la matrice $\underline{\underline{A}}$, il est alors judicieux de *préconditionner* la matrice $\underline{\underline{A}}$ en multipliant le système $\underline{\underline{A}} x = \underline{\underline{B}}$ par une matrice $\underline{\underline{P}}$

tel que le conditionnement du produit $\underline{P} \underline{A}$ soit inférieur à celui de \underline{A} . Ce raisonnement est appliqué à la PGD. Dans cette section nous faisons un bref rappel sur le conditionnement et présentons des résultats de l'influence du conditionnement sur la convergence de la méthode PGD.

3.1.a Conditionnement : définition et rappel

Le conditionnement mesure l'influence des erreurs d'arrondi sur la solution d'un problème donné. Il est mis en évidence par une légère perturbation des données initiales. C'est une notion générale qui s'applique aussi bien aux racines d'un polynôme vis-à-vis de la variation de ses coefficients qu'aux valeurs propres ou vecteurs propres d'une matrice vis-à-vis de la perturbation de ses éléments.

Exemple

Soit un système linéaire $\underline{A} \underline{x} = \underline{B}$ où la matrice \underline{A} est définie par

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} 7 & 1 & 11 & 10 \\ 2 & 6 & 5 & 2 \\ 8 & 11 & 3 & 8 \\ 6 & 9 & 3 & 6 \end{pmatrix} \quad (\text{I.67})$$

et le second membre \underline{B} par

$$\underline{B} = \begin{pmatrix} 29 \\ 15 \\ 30 \\ 24 \end{pmatrix} \quad (\text{I.68})$$

Ce système a pour solution

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.69})$$

Si on substitue au second membre \underline{B} le second membre perturbé \underline{B}' défini par

$$\underline{B}' = \underline{B} + \begin{pmatrix} 0.1 \\ -0.1 \\ 0.1 \\ -0.1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 29.1 \\ 14.9 \\ 30.1 \\ 23.9 \end{pmatrix} \quad (\text{I.70})$$

la solution \underline{x}' du système correspondant est donnée par

$$\underline{x}' = \underline{A}^{-1} \underline{B}' \approx \begin{pmatrix} 6.222 \\ 0.133 \\ 1.633 \\ -3.256 \end{pmatrix} \quad (\text{I.71})$$

L'introduction d'une erreur relative de 0.004 dans \underline{B} génère une erreur relative de la solution de l'ordre de 3.4108 soit environ 860 l'erreur relative du second membre. Ce nombre est du même ordre que le conditionnement de la matrice \underline{A} : 1425.

Définition

D'un point de vu algébrique (voir [Jedrzejewski, 2005]) le conditionnement est défini en étudiant les perturbations d'un système linéaire classique $\underline{A} \underline{x} = \underline{B}$ où \underline{A} est une matrice inversible, tel que

$$(\underline{A} + \delta \underline{A})(\underline{x} + \delta \underline{x}) = \underline{B} + \delta \underline{B} \quad (\text{I.72})$$

$\delta \underline{A}$ et $\delta \underline{B}$ sont alors les perturbations dues aux erreurs d'arrondi et $\delta \underline{x}$ l'erreur commise sur la résolution du système linéaire.

$$\begin{aligned} (\underline{A} + \delta \underline{A})\delta \underline{x} &= -(\underline{A} + \delta \underline{A})\underline{x} + \underline{B} + \delta \underline{B} \\ &= -\underline{B} - \delta \underline{A} \underline{x} + \underline{B} + \delta \underline{B} \\ &= \delta \underline{B} - \delta \underline{A} \underline{A}^{-1} \underline{B} \end{aligned} \quad (\text{I.73})$$

Si la matrice $(\underline{I} + \underline{A}^{-1}\delta\underline{A})$ est inversible, alors

$$\delta\underline{x} = (\underline{I} + \underline{A}^{-1}\delta\underline{A})\underline{A}^{-1}(\delta\underline{B} - \delta\underline{A}\underline{A}^{-1}\underline{B}) \quad (\text{I.74})$$

D'où la majoration

$$\|\delta\underline{x}\| = \frac{\|\underline{A}^{-1}\| (\|\delta\underline{B}\| - \|\delta\underline{A}\| \|\underline{A}^{-1}\underline{B}\|)}{(1 + \|\underline{A}^{-1}\| \|\delta\underline{A}\|)} \quad (\text{I.75})$$

avec $\|\cdot\|$ une norme choisie.

Comme $\|\underline{A}^{-1}\underline{B}\| = \|\underline{x}\| \geq \frac{\|\underline{B}\|}{\|\underline{A}\|}$, on a une majoration de l'erreur relative

$$\frac{\|\delta\underline{x}\|}{\|\underline{x}\|} = \frac{\kappa(\underline{A})}{1 - \kappa(\underline{A}) \frac{\|\delta\underline{A}\|}{\|\underline{A}\|}} \left(\frac{\|\delta\underline{B}\|}{\|\underline{B}\|} + \frac{\|\delta\underline{A}\|}{\|\underline{A}\|} \right) \quad (\text{I.76})$$

si la constante $\kappa(\underline{A}) = \|\underline{A}\underline{A}^{-1}\|$ vérifie $\kappa(\underline{A}) \frac{\|\delta\underline{A}\|}{\|\underline{A}\|} < 1$

On appelle conditionnement de \underline{A} le nombre

$$\kappa(\underline{A}) = \|\underline{A}\| \|\underline{A}^{-1}\| \quad (\text{I.77})$$

dépendant du choix de la norme. Il y a ainsi autant de définitions de conditionnement que de normes matricielles :

1-norme ou norme L^1

La norme standard appelée *1-norme* est définie par le maximum de la somme des modules des éléments d'une ligne soit :

$$\|\underline{A}\|_1 = \sup_j \sum_i |A_{ij}| \quad (\text{I.78})$$

2-norme ou norme L^2

Soit $\rho(\underline{A})$ le rayon spectral de \underline{A} , c'est à dire le plus grand des modules des valeurs propres de \underline{A} , la *2-norme* est définie par

$$\|\underline{A}\|_2 = \sqrt{\rho(\underline{A}\underline{A}^*)} = \sqrt{\rho(\underline{A}^*\underline{A})} \quad (\text{I.79})$$

avec $\underline{\underline{A}}^*$ la matrice adjointe (transposée conjuguée) de $\underline{\underline{A}}$ ⁵.

Norme de Frobenius (ou norme euclidienne)

La norme de Frobenius, appelée norme euclidienne dans le cas d'une matrice complexe, est définie par

$$\|\underline{\underline{A}}\|_e = \sqrt{\sum_{i,j} |a_{i,j}|^2} \quad (\text{I.80})$$

Dans la suite nous utiliserons la norme L^2 pour caractériser le conditionnement de l'opérateur $\underline{\underline{A}}$. Le conditionnement utilisant cette norme a les propriétés suivantes :

1. Le conditionnement est un nombre positif.
2. Le conditionnement de la matrice ne varie pas lorsqu'on multiplie la matrice par un scalaire.
3. Le conditionnement est invariant par transformation unitaire. Pour toute matrice unitaire $\underline{\underline{U}}$, on a

$$\text{cond}_2(\underline{\underline{A}} \underline{\underline{U}}) = \text{cond}_2(\underline{\underline{U}} \underline{\underline{A}}) = \text{cond}_2(\underline{\underline{A}}) \quad (\text{I.81})$$

4. Dans le cas d'une matrice symétrique réelle définie positive le conditionnement est donnée par la formule $\text{cond}_2(\underline{\underline{A}}) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$ où λ_{max} et λ_{min} sont respectivement la plus grande et la plus faible des valeurs propres de $\underline{\underline{A}}$.

3.1.b Préconditionnement de la méthode PGD

La PGD est une méthode de résolution itérative de système linéaire et l'idée est d'améliorer la vitesse de convergence de la méthode en preconditionnant le système, c'est à dire en multipliant l'opérateur et le second membre par un terme de manière à baisser le conditionnement du système. Cependant contrairement aux méthodes classiques de résolution itératives de système linéaire, il n'y a pas de lien formellement établi entre le conditionnement et la vitesse de convergence de la méthode PGD. D'autre part nous avons constaté en pratique que dans la majorité des problèmes traités avec la méthode de la PGD itérative, la convergence est très nettement améliorée par la symétrisation du système, c'est à dire que la convergence lors de la résolution du système défini par

$$\mathcal{A}\mathcal{U} = \mathcal{B} \quad (\text{I.82})$$

5. Dans le cas où $\underline{\underline{A}}$ est une matrice réelle, $\underline{\underline{A}}^*$ est équivalent à la matrice transposée $\underline{\underline{A}}^T$.

est améliorée si on résout le système équivalent défini par

$$\mathcal{A}^T \mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{A}^T \mathcal{B} \tag{I.83}$$

Ce premier préconditionnement du système, aussi performant soit-il ne garantit pas l'obtention d'une base de fonctions optimale. D'autre part, l'utilisation de l'opérateur \mathcal{A}^T pour préconditionner le système (I.82) augmente singulièrement le conditionnement du système final si l'opérateur initial est mal conditionné [Quarteroni *et al.*, 2004]. Dans la suite de cette section nous essayons de déterminer s'il existe un lien direct entre conditionnement et convergence de la méthode qu'elle soit préconditionnée (PGD PS) ou non (PGD P).

Pour mesurer l'influence du préconditionnement sur l'optimalité de la base de fonctions obtenue par la méthode PGD nous résolvons une même équation différentielle préconditionnée par un grand nombre de préconditionneurs générés aléatoirement. Le préconditionneur est défini sur chaque sous espace de dimension 1 tel que le système linéaire préconditionné s'écrive :

$$\mathcal{P} \mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{P} \mathcal{B}$$

avec

$$\mathcal{P} = \underline{\underline{\mathbb{P}}}_1 \otimes \underline{\underline{\mathbb{P}}}_2 \otimes \underline{\underline{\mathbb{P}}}_3$$

On choisit de n'utiliser que des préconditionneurs diagonaux et tridiagonaux qui ont pour avantage d'être aisément définis. Afin d'augmenter au maximum l'impact du préconditionneur $\underline{\underline{\mathbb{P}}}_i$ sur le conditionnement celui-ci est défini dans le cas diagonal par

$$\underline{\underline{\mathbb{P}}}_i = r \begin{pmatrix} 1^{r^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & n^{r^2} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} n^{r^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1^{r^2} \end{pmatrix} \tag{I.84}$$

et dans le cas tridiagonal par

$$\underline{\mathbb{P}}_i = r \begin{pmatrix} 1^{r^2} & 1^{r^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 1^{r^2} & 2^{r^2} & 2^{r^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (n-1)^{r^2} & n^{r^2} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} n^{r^2} & (n-1)^{r^2} & 0 & \cdots & 0 \\ (n-1)^{r^2} & (n-1)^{r^2} & (n-2)^{r^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1^{r^2} & 1^{r^2} \end{pmatrix} \quad (\text{I.85})$$

où $i=1..3$, n est le nombre d'inconnues dans la dimension considérée, $r \in [0, 1]$ est un chiffre aléatoire défini suivant la loi normale, chaque r étant un nouveau nombre aléatoire.

Nous évaluons l'influence du préconditionnement en comparant l'erreur à nombre d'itération fixe par rapport au conditionnement du système. L'utilisation de l'erreur comme estimateur de la vitesse de convergence de la méthode est tout fait pertinente en comparant l'erreur obtenue du système préconditionné à l'erreur du problème non préconditionné et à nombre d'itérations égal. Dans la suite on choisit d'évaluer l'erreur après 5 et 10 itérations pour des systèmes préconditionnés avec $\underline{\mathbb{P}}_i$ diagonal ou tridiagonal et en utilisant la stratégie PGD P et PGD PS.

Remarque :

Le conditionnement de \mathcal{A} est obtenu par

$$\text{cond}_2 \mathcal{A} = \text{cond}_2 \left(\underline{\mathbb{A}}_1^1 \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{A}}_D^1 + \cdots + \underline{\mathbb{A}}_1^{n_A} \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{A}}_D^{n_A} \right) \quad (\text{I.86})$$

et celui de l'opérateur préconditionné par

$$\text{cond}_2(\mathcal{P}\mathcal{A}) = \text{cond}_2 \left(\underline{\mathbb{P}}_1 \underline{\mathbb{A}}_1^1 \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{P}}_D \underline{\mathbb{A}}_D^1 + \cdots + \underline{\mathbb{P}}_1 \underline{\mathbb{A}}_1^{n_A} \otimes \cdots \otimes \underline{\mathbb{P}}_D \underline{\mathbb{A}}_D^{n_A} \right) \quad (\text{I.87})$$

où D est le nombre de sous-espaces et n_A le nombre de produits définissant l'opérateur \mathcal{A} qui est issu de la discrétisation de la forme faible de l'équation du problème.

3.2 Équation de diffusion pure instationnaire

Nous considérons le cas stationnaire de diffusion pure suivant, défini $\forall(t, \underline{x}) \in \Omega_t \times \Omega_{xy}$ avec $\underline{x} = (x, y)^T$, $\Omega_t = (0, 1)$ et $\Omega_{xy} = (0, 1) \times (0, 1)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial \underline{x}^2} = f \text{ sur } \Omega_t \times \Omega_{xy} \quad (\text{I.88})$$

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega_t \quad (\text{I.89})$$

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{xy} \quad (\text{I.90})$$

avec $f = 4$ et $\mu = 1$.

L'espace temporel est maillé à l'aide de 100 éléments unidimensionnels linéaires à deux nœuds alors que l'espace physique est maillé avec 625 éléments à 4 nœuds.

L'équation précédente est alors écrite sous forme discrète en utilisant une approximation par élément finis sur chaque espace. Pour ce faire on introduit les vecteurs \mathbf{N} et \mathbf{M} qui contiennent les fonctions de forme associées respectivement à l'espace Ω_t et Ω_{xy} .

Remarque :

Sur l'espace temporel seul un terme de convection est défini. Or il est connu qu'avec la méthode des éléments finis, les calculs deviennent instables lorsque la convection est prépondérante par rapport à la diffusion. Une stabilisation est nécessaire et on utilise alors un décentrement dans la direction amont du flux de convection pour stabiliser l'équation avec une technique SUPG. Cette technique initialement proposée par [Brooks et Hughes, 1982] permet d'obtenir une valeur optimale de décentrement pour les espaces unidimensionnels et consiste à ajouter à l'équation un terme de diffusion afin de compenser l'instabilité de la discrétisation du terme de convection. Dans le cadre de cette stabilisation le champ test du terme de convection est modifié tel que :

$$\underline{U}^* = \bar{\mathbf{N}}^T \underline{U} \quad (\text{I.91})$$

où

$$\bar{\mathbf{N}} = \mathbf{N} + \frac{\beta h}{2} \frac{d\mathbf{N}}{dt} \quad (\text{I.92})$$

h est la taille caractéristique des éléments du maillage et β est le coefficient de décentrement donné par

$$\beta = \coth(Pe) - \frac{1}{Pe} \quad (\text{I.93})$$

avec Pe le nombre de Péclet défini par

$$Pe = \frac{\|c\|h}{2\mu} \quad (\text{I.94})$$

c le coefficient de convection, et μ le coefficient de diffusion.

Finalement la forme discrète nécessite l'introduction des matrices suivantes :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^1 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} \frac{d\mathbf{N}^T}{dt} dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^1 &= \int_{\Omega_{xy}} \mathbf{M} \mathbf{M}^T d\underline{x} \\ \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^2 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} \mathbf{N}^T dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^2 &= \mu \int_{\Omega_{xy}} \frac{d\mathbf{M}}{d\underline{x}} \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{x}} d\underline{x} \end{aligned}$$

et

$$\underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^1 = \int_{\Omega_t} 2\mathbf{N} dt \quad \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^1 = \int_{\Omega_{xy}} 2\mathbf{M} d\underline{x}$$

La forme discrète s'écrit finalement

$$\mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{B} \quad (\text{I.95})$$

avec

$$\mathcal{A} = \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^1 \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^1 + \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^2 \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^2 \quad (\text{I.96})$$

et

$$\mathcal{B} = \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^1 \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^1 \quad (\text{I.97})$$

La figure I.3 représente la solution recherchée sur Ω_{xy} pour différents t . Cette solution est la solution exacte du problème définie par l'équation (I.88) et obtenue en résolvant le système (I.95), tel que $\mathcal{U} = \mathcal{A}^{-1} \mathcal{B}$.

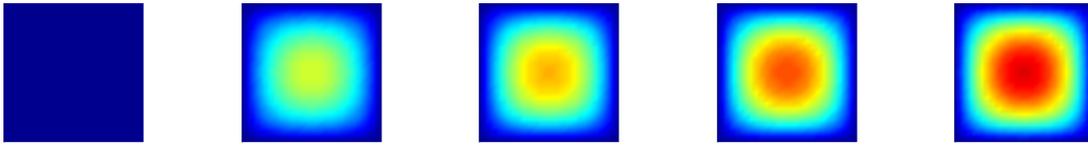


FIGURE I.3 – Solution de référence $u(t)$ aux instants $t = i/5$, pour $i = 0$ (gauche) à $i = 5$ (droite).

La figure I.4 présente l'erreur en fonction du nombre d'enrichissement pour la POD, ainsi que les différentes stratégies de la méthode PGD définies section 2.2. La méthode POD (équivalente ici à une SVD espace temps) est considérée comme la plus optimale et sert donc de référence par rapport aux résultats PGD obtenus. La PGD Progressive pondérée non symétrisée converge légèrement plus vite que la PGD PS. En outre l'ajout de la condition d'orthogonalité pour la PGD PS* affecte négativement la convergence puisque la méthode ne converge quasiment pas : cette condition semble bloquer la méthode. Dans les stratégies avec mise à jour on remarque que la PGD M ne donne pas de très bons résultats : l'erreur après 8 itération est de l'ordre de 10^{-6} , à peine mieux que la PGD PS, et équivalent à la PDG P, contre 10^{-10} pour la POD. La PGD M* et la PGD MS, quant à elles, convergent au même rythme que la POD avant d'atteindre un plateau de l'ordre du critère d'erreur ϵ_k choisi lors de la stratégie du point fixe.

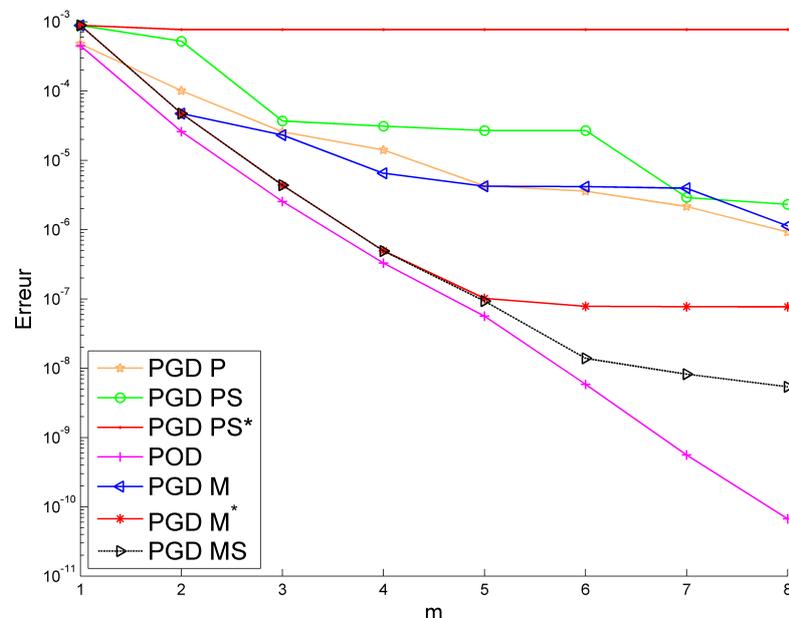


FIGURE I.4 – Convergence des différentes stratégies de la méthode PGD.

En effet, si l'on réduit le critère à $\epsilon_k = 5 \cdot 10^{-10}$ la convergence est améliorée pour la PGD M* et la PGD MS comme on peut le voir sur la Fig. I.5.

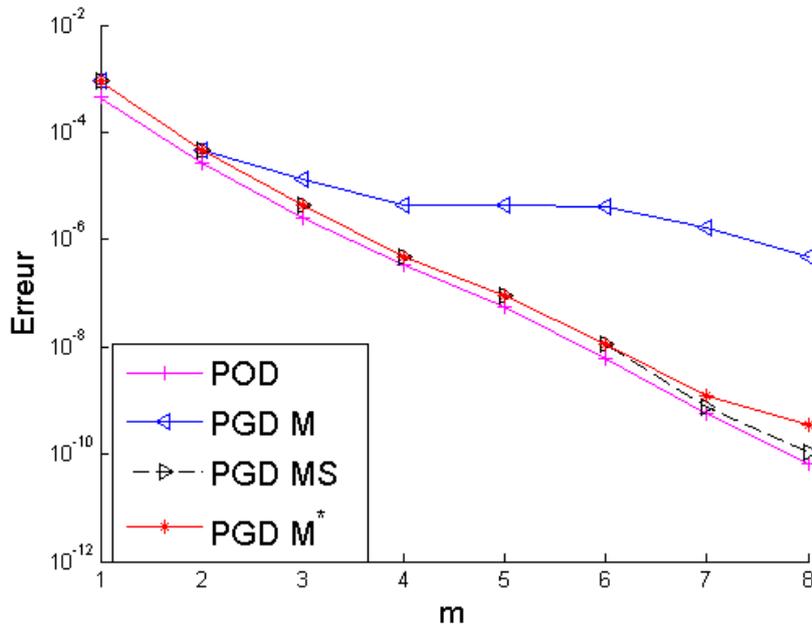


FIGURE I.5 – Convergence des différentes stratégies avec mise à jour pour $\epsilon_k = 5 \cdot 10^{-10}$.

Aussi dans le cas des mises à jour non simultanées l'ajout de la condition d'orthogonalité permet d'obtenir une base de produits de fonctions optimale. La PGD MS ne nécessite pas une telle condition pour trouver automatiquement la base optimale. En terme de convergence du point fixe, l'ajout de la condition d'orthogonalité pour la stratégie PGD M* permet de réduire de plusieurs centaines d'itérations à quelques dizaines. La PGD MS, malgré l'utilisation d'un paramètre de relaxation important (le paramètre de relaxation utilisé tout au long du chapitre est $\alpha = 0.5$), converge aussi en quelques itérations mais le coût en temps de calcul de chaque itération est bien plus important que dans le cadre de la PGD M*.

Les figures I.6 à I.8 présentent les 5 premiers enrichissements sur chaque sous espace et pour les méthodes PGD P, PGD PS et POD.

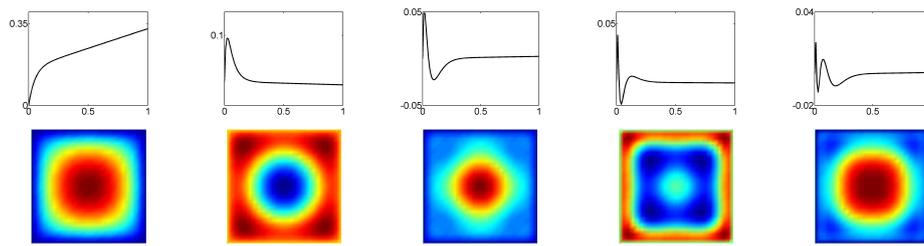


FIGURE I.6 – PGD P - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

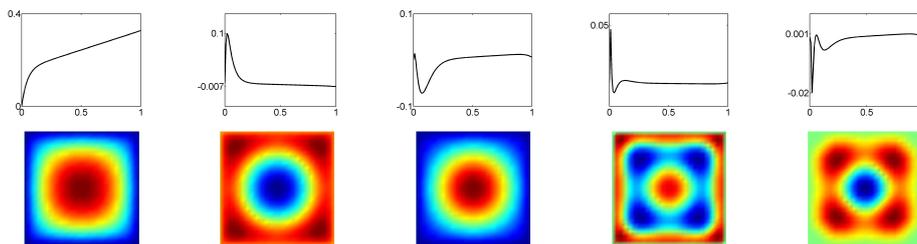


FIGURE I.7 – PGD PS - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

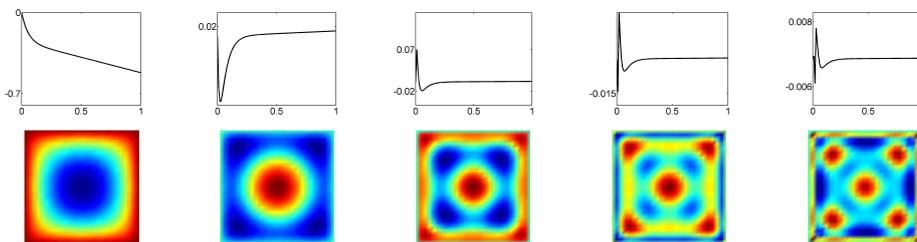


FIGURE I.8 – POD - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

Les stratégies PGD avec mise à jour de toutes les fonctions à chaque enrichissement peuvent modifier à chaque itération les fonctions précédemment calculées. Afin de déterminer dans quelle mesure cette modification peut être liée à la convergence, on trace sur les figures suivantes l'évolution des trois premiers produits de fonctions pour 5 itérations (et donc 5 modifications potentielles) obtenus avec les méthodes avec mise à jour : PGD M, PGD M* et PGD MS. Chaque mode est tracé à l'itération à laquelle il apparaît puis pour les 5 itérations suivantes.

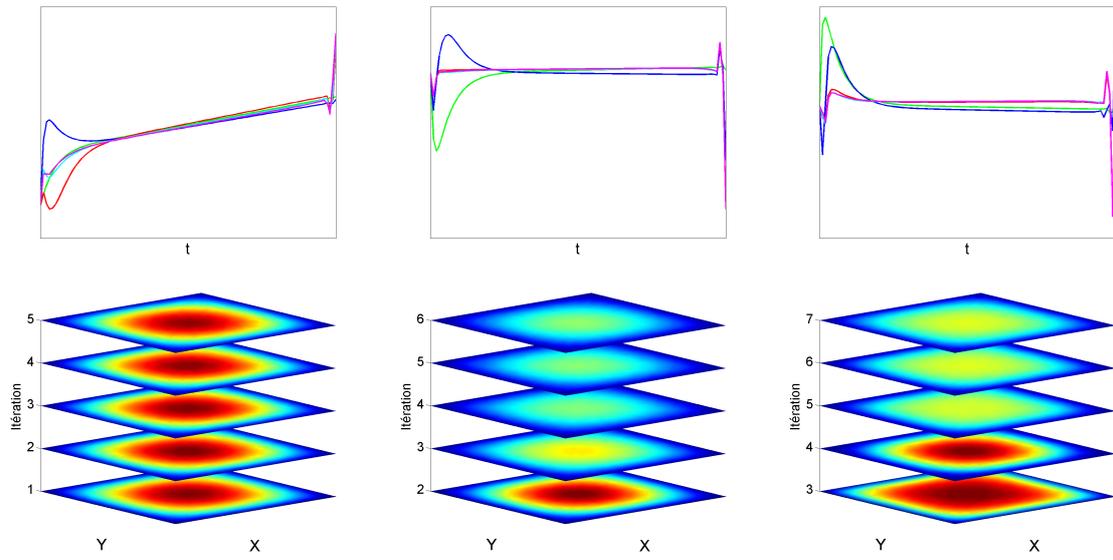


FIGURE I.9 – PGD M - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

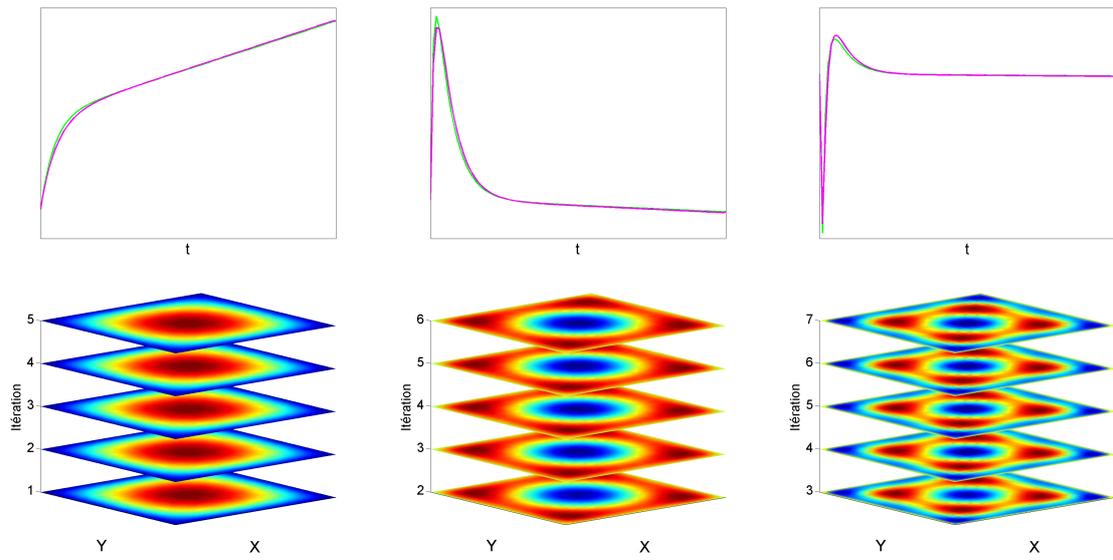


FIGURE I.10 – PGD M* - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

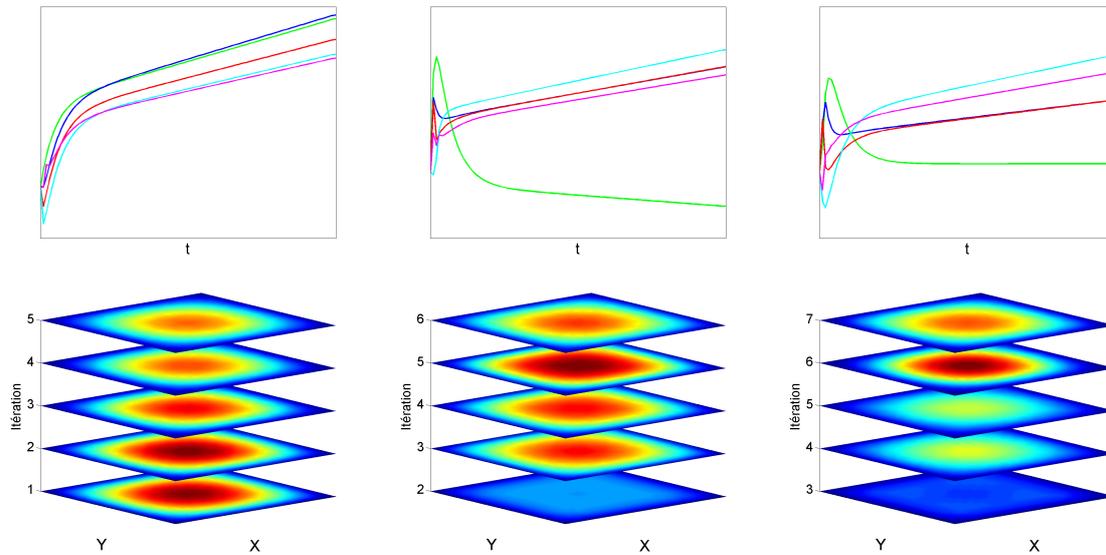


FIGURE I.11 – PGD MS - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

Puisque à chaque itération toutes les fonctions sont recalculées, nous les avons classées par ordre décroissant de coefficients de pondérations associés. On remarque que la PGD M et la PGD MS modifient de manière non négligeable leurs fonctions à chaque enrichissement. Or la PGD M ne possède pas une convergence optimale contrairement aux deux autres stratégies. A l'inverse la PGD M* ne modifie que très faiblement les fonctions à chaque itération et on obtient malgré tout un résultat équivalent à la PGD MS. En extrapolant ce résultat à la PGD Progressive pondérée, il paraît donc possible d'obtenir une base de fonctions optimale (comme la PGD M*) sans avoir à faire de mise à jour !

Influence du conditionnement : convergence du problème préconditionné

Les figures I.12 à I.19 représentent l'erreur du système défini par l'Eq. (I.88) préconditionné en fonction du conditionnement pour 4000 préconditionneurs différents générés à partir de l'équation (I.84) et (I.85). Pour toutes les figures on repère le conditionnement initial par une croix rouge. L'algorithme de la PGD Progressive pondérée non symétrisée (PGD P) et celui de la PGD Progressive pondérée Symétrisée (PGD PS) sont tour à tour utilisés et les résultats sont évalués après 5 et 10 itérations. Les figures I.12 - I.13 et I.16 - I.17 illustrent le cas du préconditionneur diagonal et les figures I.14 - I.15 et I.18 - I.19 le préconditionneur tridiagonal.

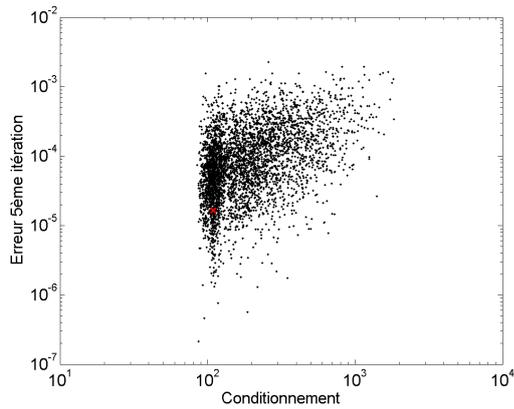


FIGURE I.12 – PGD P - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur diagonal.

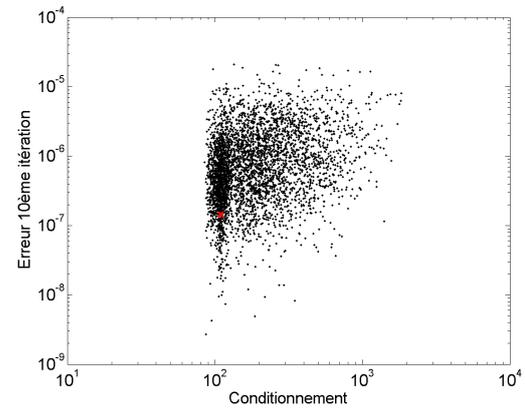


FIGURE I.13 – PGD P - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur diagonal.

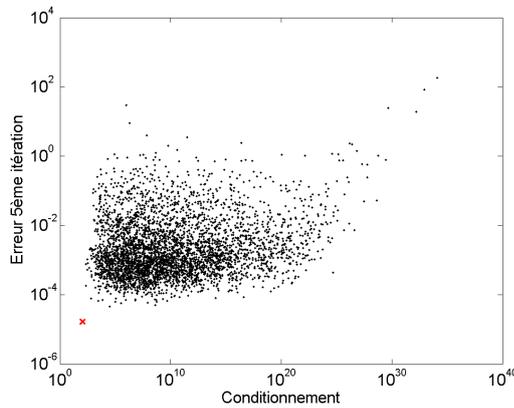


FIGURE I.14 – PGD P - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

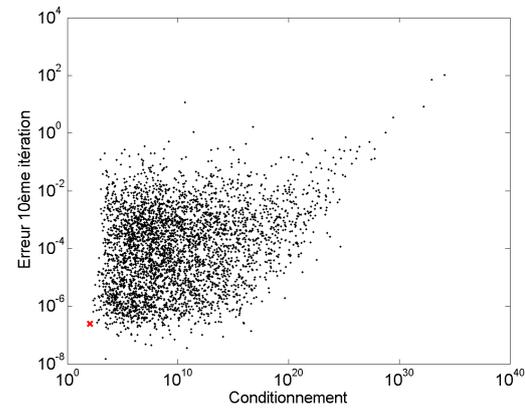


FIGURE I.15 – PGD P - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

L'opérateur de l'équation de diffusion est initialement bien conditionné puisque le conditionnement est de l'ordre de 10^2 . Le préconditionneur diagonal I.12 et I.13 n'améliore que très légèrement le conditionnement initial étant donné que les meilleurs tirages atteignent un conditionnement de l'ordre de 80. Bien qu'il y ait une légère corrélation entre l'augmentation du conditionnement et l'augmentation de l'erreur, cela n'est plus significatif pour des conditionnements proches de l'initial où on observe une large gamme d'erreur à conditionnement égal, et ce, après 5 ou 10 itérations.

Le préconditionneur tridiagonal est moins performant que le conditionneur diagonal et on observe sur les Figs. I.14 et I.15 aucune amélioration du conditionnement (par rapport à l'initial) pour les systèmes préconditionnés. Notons aussi qu'aucune corrélation liant l'erreur au conditionnement n'est observée.

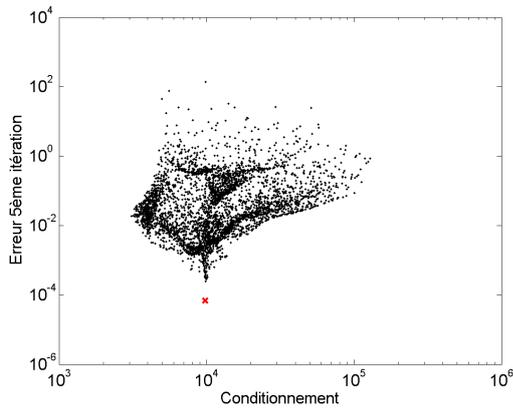


FIGURE I.16 – PGD PS - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur diagonal.

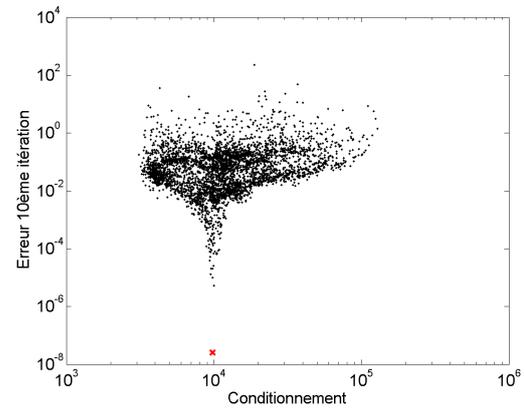


FIGURE I.17 – PGD PS - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur diagonal.

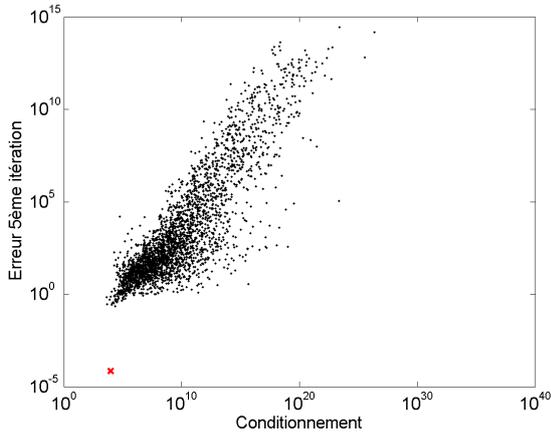


FIGURE I.18 – PGD PS - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

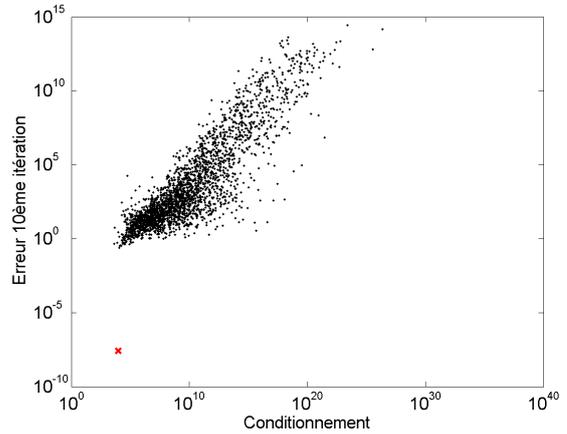


FIGURE I.19 – PGD PS - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

Avec la PGD PS, le préconditionnement diagonal permet d'obtenir des conditionnements bien inférieurs au conditionnement initial. Cependant la réduction du conditionnement de l'opérateur \mathcal{A} n'entraîne pas une meilleure vitesse convergence. De même lorsque le conditionnement augmente on observe un résidu plus élevé que ce soit après 5 ou 10 enrichissements. En fait il semble que l'erreur la plus faible soit celle obtenue sans conditionnement supplémentaire que la symétrisation. Avec le préconditionneur tridiagonal on observe au mieux un conditionnement équivalent au système initial et au pire un conditionnement supérieur de plusieurs ordres de grandeur. La corrélation entre le conditionnement et l'erreur observée n'est cependant par pertinente puisque la solution a divergé (voir l'axe des ordonnées que ce soit après 5 ou 10 itérations).

Il s'avère alors d'après les résultats précédents que l'efficacité de la méthode ne semble pas être uniquement liée au conditionnement de l'opérateur \mathcal{A} .

3.3 Équation de convection diffusion instationnaire

3.3.a Premier cas

Nous considérons le cas stationnaire de convection-diffusion suivant, défini sur $\Omega_t \times \Omega_{xy}$ avec $\Omega_t = (0, 1)$ et $\Omega_{xy} = (0, 1) \times (0, 1)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \mu \frac{\partial^2 u}{\partial \underline{x}^2} + c \cdot \frac{\partial u}{\partial \underline{x}} = f \text{ sur } \Omega_t \times \Omega_{xy} \quad (\text{I.98})$$

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega_t \quad (\text{I.99})$$

$$u = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{xy} \quad (\text{I.100})$$

avec $f = 1 + 2t$, $\mu = 1$, et $c = 10\pi(0.5 - y, x + 0.5)$.

Le domaine est maillé de façon identique au cas de diffusion pure présenté à la section précédente. En utilisant les mêmes notations que précédemment, la forme discrète de l'équation (I.98) nécessite l'introduction des matrices suivantes :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^1 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} \frac{d\mathbf{N}^T}{dt} dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^1 &= \int_{\Omega_{xy}} \mathbf{M} \mathbf{M}^T d\underline{x} \\ \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^2 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} \mathbf{N}^T dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^2 &= \mu \int_{\Omega_{xy}} \frac{d\mathbf{M}}{d\underline{x}} \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{x}} d\underline{x} \\ \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^3 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} \mathbf{N}^T dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^3 &= \int_{\Omega_{xy}} c \mathbf{M} \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{x}} + \frac{d\mathbf{M}}{d\underline{x}} \frac{\beta h}{2} \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{x}} d\underline{x} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^1 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} t dt & \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^1 &= \int_{\Omega_{xy}} 2\mathbf{M} d\underline{x} \\ \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^2 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} dt & \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^2 &= \int_{\Omega_{xy}} \mathbf{M} d\underline{x} \end{aligned}$$

Une stabilisation de type SUPG est utilisée non seulement sur Ω_t mais aussi sur Ω_{xy} , illustré par le

deuxième terme de $\underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^3$.

La forme discrète s'écrit finalement

$$\mathcal{A}\mathcal{U} = \mathcal{B} \quad (\text{I.101})$$

avec

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^3 \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^i \quad (\text{I.102})$$

et

$$\mathcal{B} = \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^1 \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^1 + \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^2 \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^2 \quad (\text{I.103})$$

La figure I.20 représente la solution recherchée sur Ω_{xy} pour différents t . Cette solution est la solution exacte du problème définie par l'équation (I.98).

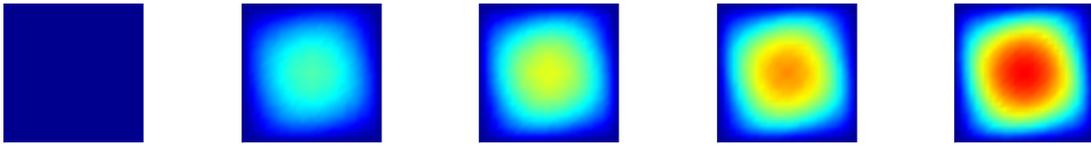


FIGURE I.20 – Solution de référence $u(t)$ aux instants $t = i/5$, pour $i = 0$ (gauche) à $i = 5$ (droite).

Nous représentons sur la figure I.21 les résultats obtenus avec les différentes stratégies. Nous observons que la PGD P est légèrement plus efficace que la PGD PS. La PGD PS* présente une très mauvaise convergence puisque l'erreur ne diminue que très faiblement, restant presque égale à celle atteinte après le premier enrichissement (le seul enrichissement qui n'est pas affecté par la condition d'orthogonalité). Malgré son coût en temps de calcul la PGD M n'est pas plus efficace que la PGD P et bien loin de la convergence de la PGD M* et la PGD MS.

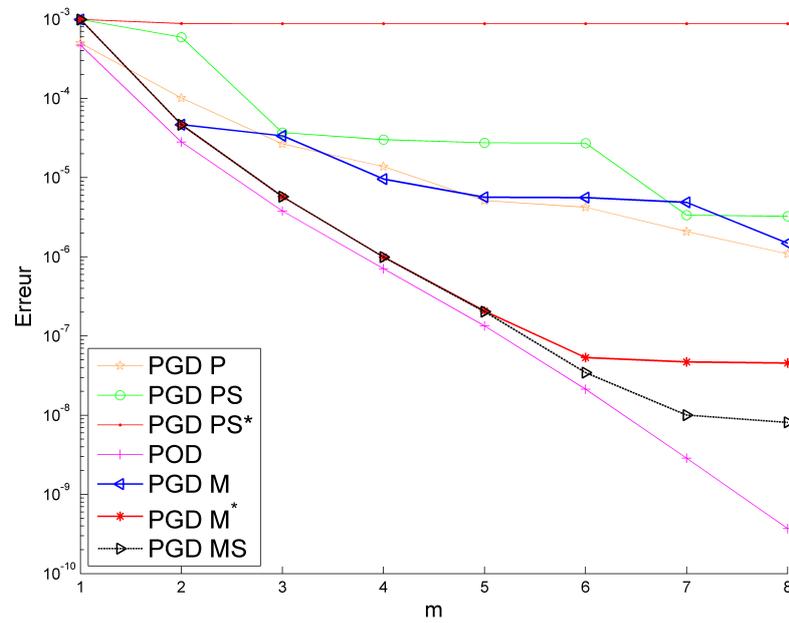


FIGURE I.21 – Convergence des différentes stratégies de la méthode PGD.

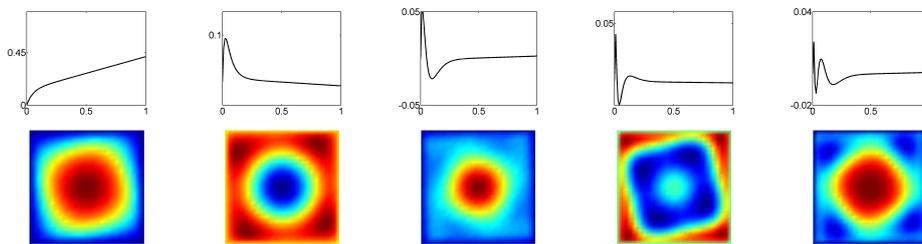


FIGURE I.22 – PGD P - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5 . L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

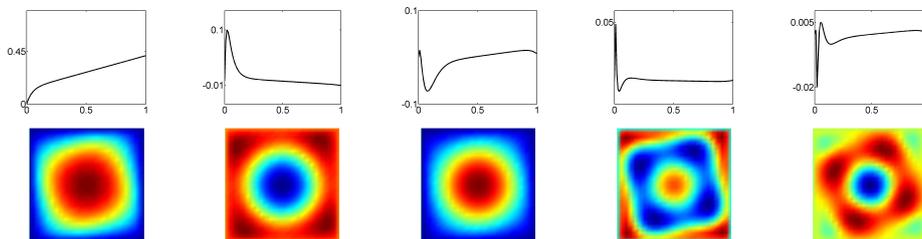


FIGURE I.23 – PGD PS - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5 . L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

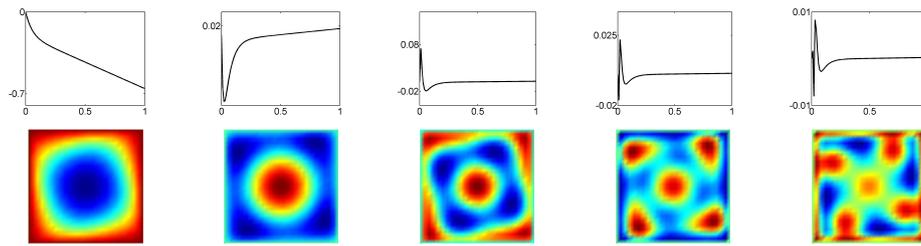


FIGURE I.24 – POD - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

Dans l'optique de connaître l'évolution des premiers produits de fonctions calculés avec les stratégies PGD avec mise à jour, on trace sur les figures suivantes l'évolution des trois premiers modes pour 5 itérations obtenus avec les méthodes PGD M, PGD M* et PGD MS. Chaque mode est tracé à l'itération à laquelle il apparaît puis pour les 5 itérations suivantes : on trace l'évolution du premier mode pour les itérations 1 à 5, celle du deuxième mode pour les itérations 2 à 6 et celle du troisième mode pour les itérations 3 à 7.

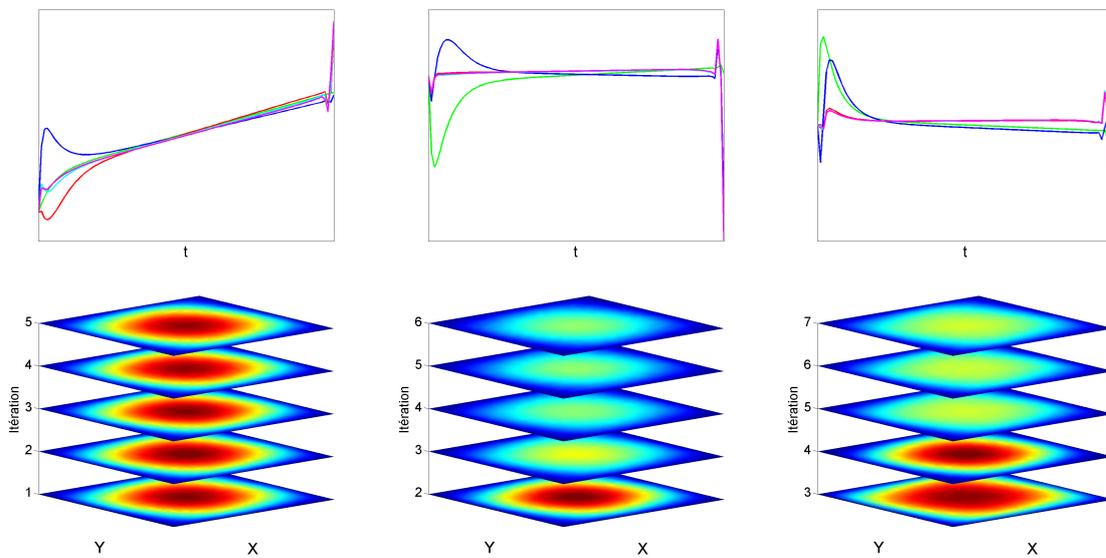


FIGURE I.25 – PGD M - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

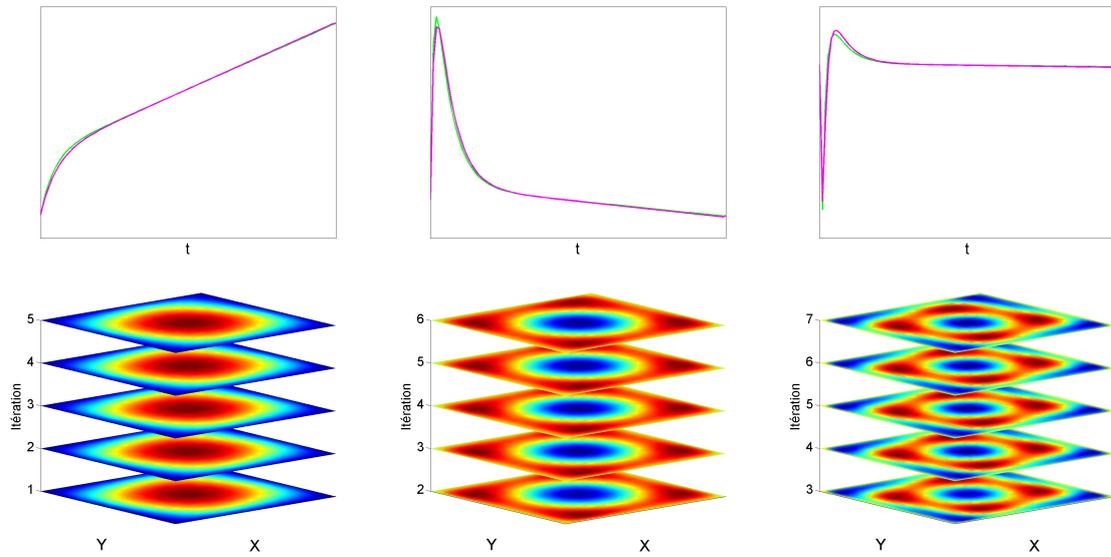


FIGURE I.26 – PGD M^* - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

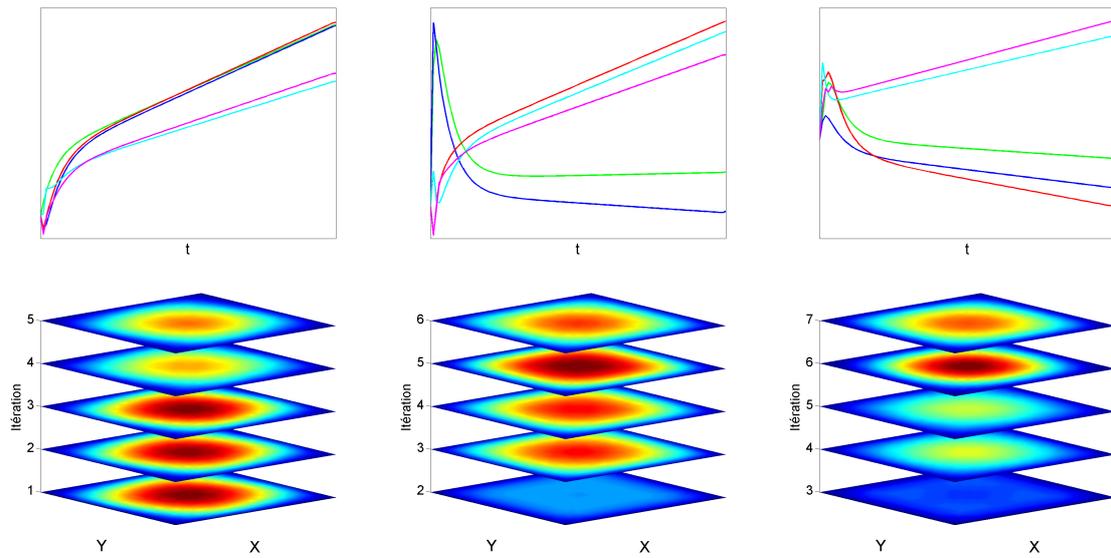


FIGURE I.27 – PGD MS - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

On note cette fois encore que la PGD M^* obtient une base optimale avec une mise à jour minimale des fonctions de la base. Les deux autres stratégies avec mise à jour modifient largement entre chaque itération la base de fonctions.

3.3.b Deuxième cas

Afin de pouvoir étudier l'influence du coefficient de diffusion sur la convergence globale des méthodes, nous traitons le même cas de convection diffusion que la section précédente pour lequel on modifie les conditions aux limites :

$$u = \frac{1}{0.1\sqrt{(2\pi)}} e^{\left(-0.5\left(\frac{y-0.5}{0.1}\right)^2\right)} \text{ pour } x = 0 \text{ et } x = 1 \quad (\text{I.104})$$

ainsi que le coefficient de diffusion $\mu = 0.1$. Les autres paramètres sont conservés. Le système à résoudre est alors identique à celui défini par l'équation (I.101) et fait intervenir les mêmes matrices $\underline{\underline{A}}_j^i$ et $\underline{\underline{B}}_j^i$. La solution du problème est donnée Fig. I.28.

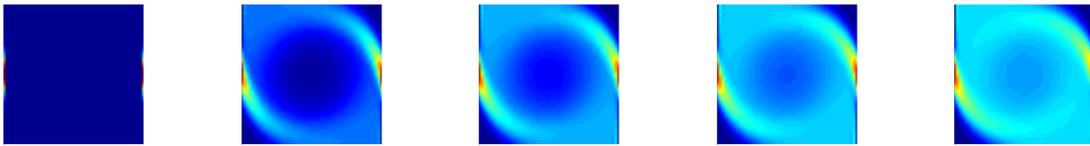


FIGURE I.28 – Solution de référence $u(t)$ aux instants $t = i/5$, pour $i = 0$ (gauche) à $i = 5$ (droite).

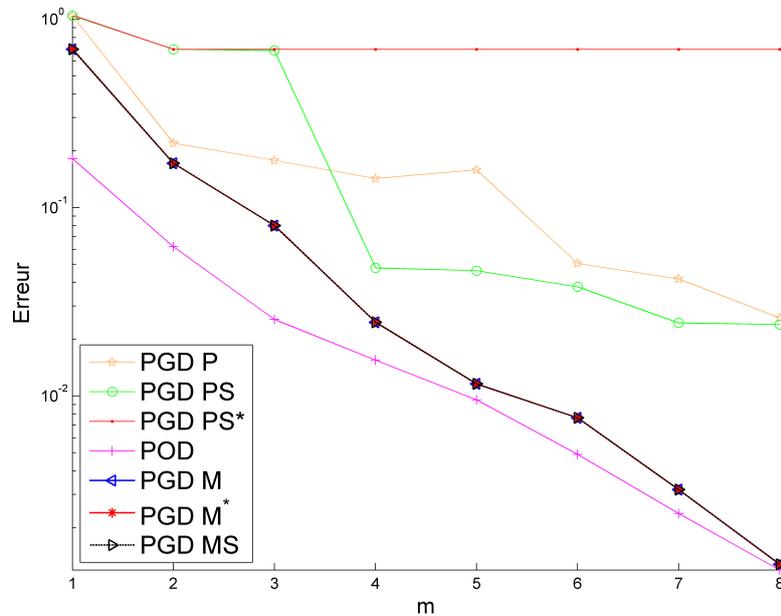


FIGURE I.29 – Convergence des différentes stratégies de la méthode PGD et de la POD.

L'ajout de conditions aux limites non nulles permet d'augmenter le coefficient de diffusion sans tendre vers zéro. Cela modifie aussi la vitesse de convergence du problème Fig. I.29. Après 8 itérations l'erreur obtenue avec la POD est encore de 10^{-3} alors que nous avons obtenu une erreur de l'ordre de 10^{-10} dans les deux cas test précédents. Toutes les stratégies avec mise à jour sont équivalentes et convergent vers les résultats POD. La stratégie PGD P est équivalente à la PGD PS après 8 itérations. Cela justifie tout à fait l'utilisation de stratégies symétrisant l'opérateur car dans les cas plus complexes (comme celui-ci) la convergence du point fixe est améliorée sans dégrader la convergence globale. Finalement la stratégie PGD PS* présente le même comportement que précédemment observé : la convergence de la méthode n'est pas significatif par rapport aux autres stratégies.

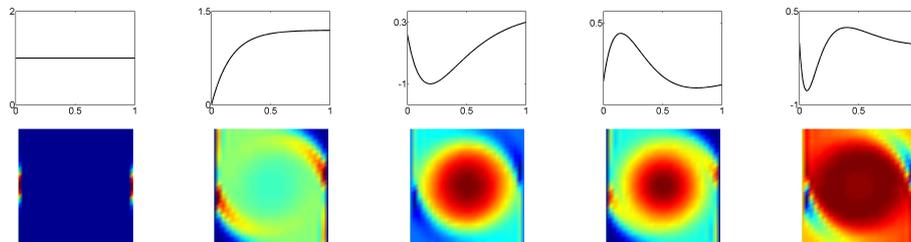


FIGURE I.30 – PGD P - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5 . L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

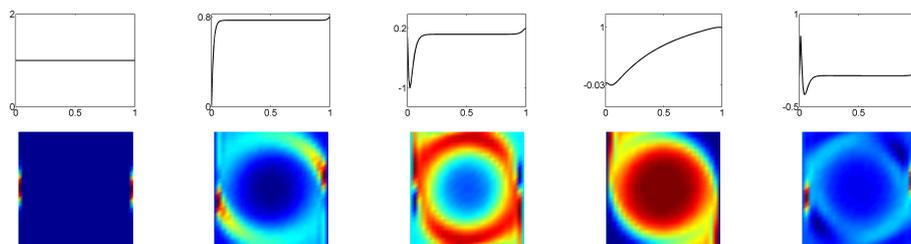


FIGURE I.31 – PGD PS - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5 . L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

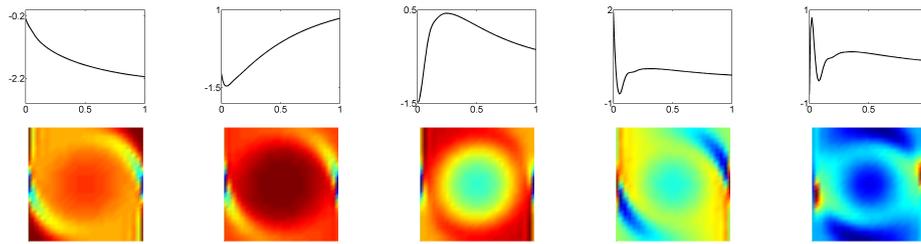


FIGURE I.32 – POD - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i=1$ à 5. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

Notons que pour ce cas la PGD M^* modifie les fonctions à chaque itération comme on peut le voir sur la Fig. I.33. Ainsi l'algorithme ne trouve pas la base optimale conservant les mêmes fonctions à chaque enrichissement. La convergence du point fixe à chaque itération, qui nécessitait seulement une dizaine d'itérations dans les sections précédentes, est bien moins aisée à atteindre puisque cela nécessite dans ce cas plusieurs centaines d'itérations (en moyenne 500 itérations par enrichissement).

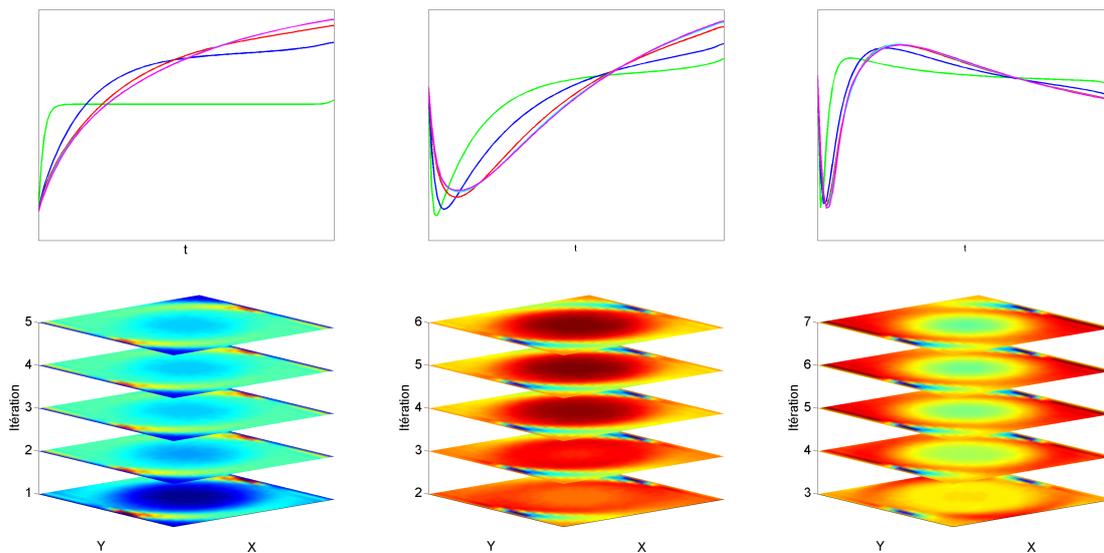


FIGURE I.33 – PGD M^* - Évolution du i ème mode pour les itérations allant de i à $i + 5$, $i = 1..3$.

Influence du coefficient de diffusion

La Fig. I.34 montre l'influence du paramètre de diffusion sur la convergence de la PGD P, PGD PS et de la POD. On observe un comportement identique pour la PGD P et la PGD PS bien que cette dernière soit légèrement moins optimale en terme de convergence. On note aussi que lorsque $\mu \rightarrow \infty$ la décomposition converge très rapidement.

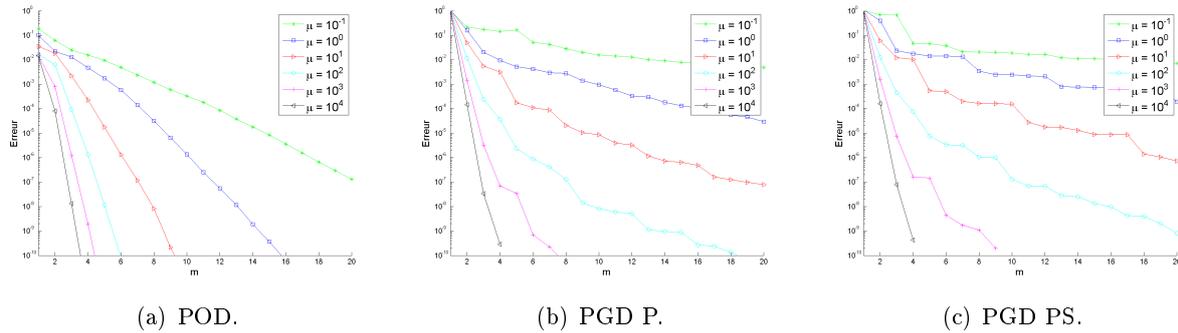


FIGURE I.34 – Influence du paramètre de diffusion sur la convergence de la PGD P, PGD PS et POD.

3.3.c Influence du conditionnement : convergence du problème préconditionné

Les figures I.35 à I.42 représentent l'erreur du système préconditionné défini par l'Eq. (I.98) en fonction du conditionnement pour 4000 préconditionneurs différents générés à partir des équations (I.84) et (I.85). Pour toutes les figures on repère le conditionnement initial par une croix rouge. L'algorithme de la PGD Progressive pondérée non symétrisée (PGD P) et celui de la PGD Progressive pondérée Symétrisée (PGD PS) sont tour à tour utilisés et les résultats sont évalués après 5 et 10 itérations. Les figures I.35 - I.36 et I.39 - I.40 illustrent le cas du préconditionneur diagonal et les figures I.37 - I.38 et I.41 - I.42 le préconditionneur tridiagonal.

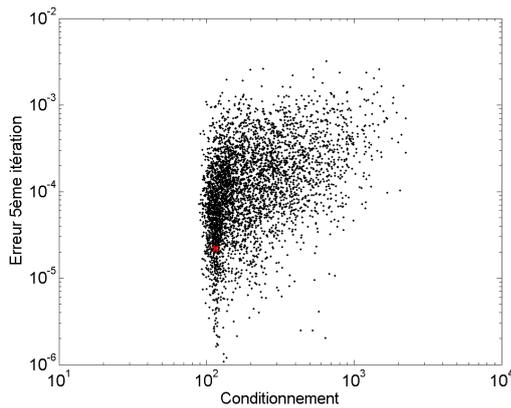


FIGURE I.35 – PGD P - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur diagonal.

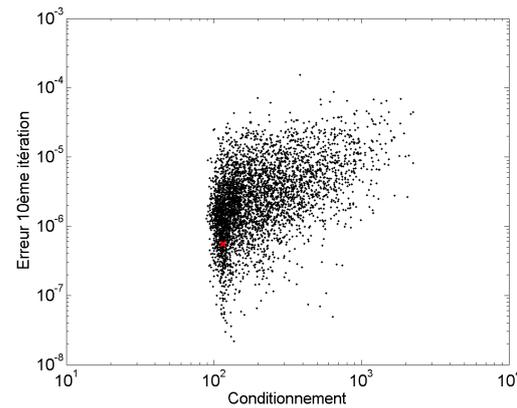


FIGURE I.36 – PGD P - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur diagonal.

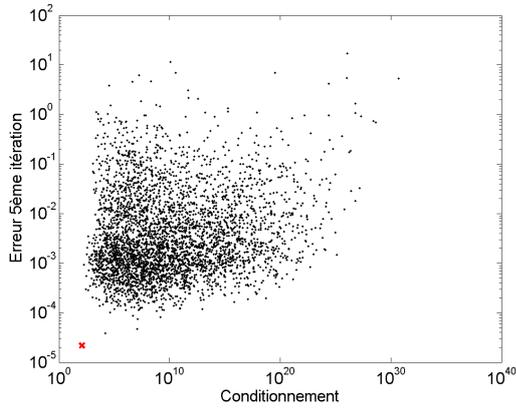


FIGURE I.37 – PGD P - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

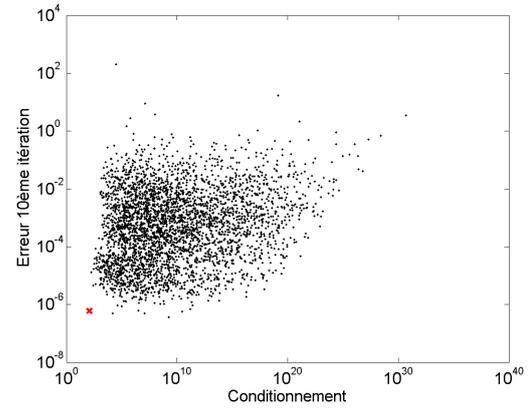


FIGURE I.38 – PGD P - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

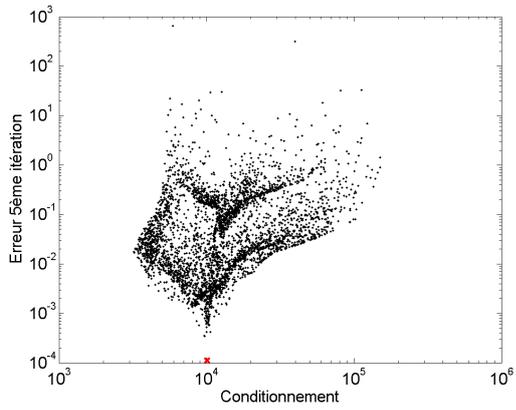


FIGURE I.39 – PGD PS - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur diagonal.

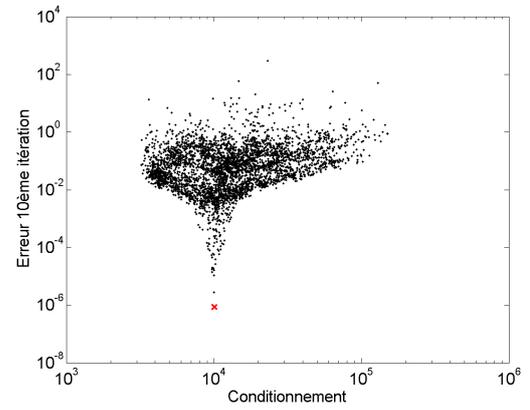


FIGURE I.40 – PGD PS - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur diagonal.

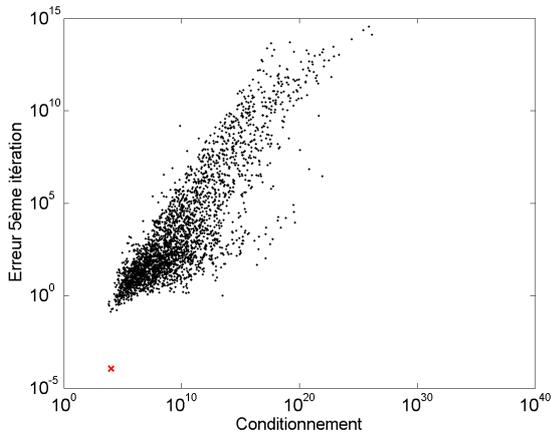


FIGURE I.41 – PGD PS - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

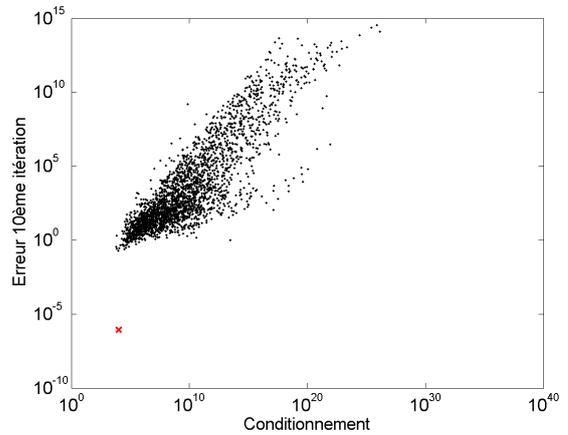


FIGURE I.42 – PGD PS - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

Les résultats obtenus en préconditionnant l'opérateur de l'équation de convection-diffusion Figs. I.35 à I.42 sont semblables à ceux obtenus Figs. I.12 à I.19 :

- Dans le cas de la PGD P Figs. I.35 à I.38 aucune corrélation de semble lier l'erreur au conditionnement : pour un même conditionnement une large gamme d'erreur est obtenue.
- Les résultats obtenus avec la PGD PS et le préconditionneur diagonal Figs. I.39 et I.40 font apparaître une large gamme de conditionnement englobant le conditionnement du système initial. L'erreur obtenue avec les système préconditionnés reste néanmoins supérieure à celle du système non préconditionné quelque soit la valeur du conditionnement.
- Le préconditionneur tridiagonal n'est pas pertinent lors d'une utilisation avec la PGD PS puisqu'il fait diverger les résultats comme on peut le voir sur les Figs. I.41 et I.42.

Finalement dans le problème de convection-diffusion étudié dans cette section, l'utilisation des deux préconditionneurs ne nous permet pas d'observer un lien direct entre conditionnement et vitesse de convergence.

3.4 Problème symplectique

Nous considérons le cas particulier d'une équation dont la solution a pour particularité d'être décomposable en somme de deux produits de fonctions. Cette équation est définie sur un espace à deux dimensions, une continue et une discrète. Le système est le suivant, défini $\forall(t, x) \in \Omega_t \times \Omega_x$ avec $\Omega_t = (0, 6]$ et $\Omega_x = \{1; 2\}$:

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \underline{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ sur } \Omega_t \times \Omega_x \quad (\text{I.105})$$

$$\underline{u} = 0 \text{ pour } t = 0 \quad (\text{I.106})$$

avec $\underline{u} = (u, v)^T$.

Ω_t est maillée à l'aide de 1000 éléments unidimensionnels linéaires à deux nœuds. L'équation précédente est alors discrétisée en utilisant une approximation élément finis sur chaque espace. Pour ce faire on introduit les vecteurs \mathbf{N} et \mathbf{M} qui contiennent les fonctions de forme associées respectivement à l'espace Ω_t et Ω_x .

La forme discrète nécessite l'introduction des matrices suivantes :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^1 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N} \frac{d\mathbf{N}^T}{dt} dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^1 &= \int_{\Omega_x} \mathbf{M}\mathbf{M}^T dx \\ \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^2 &= \int_{\Omega_t} \mathbf{N}\mathbf{N}^T dt & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

et

$$\underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^1 = \int_{\Omega_t} \mathbf{N} dt \qquad \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

La forme discrète s'écrit finalement

$$\mathcal{A}\mathcal{U} = \mathcal{B} \tag{I.107}$$

avec

$$\mathcal{A} = \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^1 \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^1 + \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^2 \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^2 \tag{I.108}$$

et

$$\mathcal{B} = \underline{\underline{\mathbb{B}}}_1^1 \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_2^1 \tag{I.109}$$

On représente sur la figure suivante la solution obtenue en résolvant le système précédent.

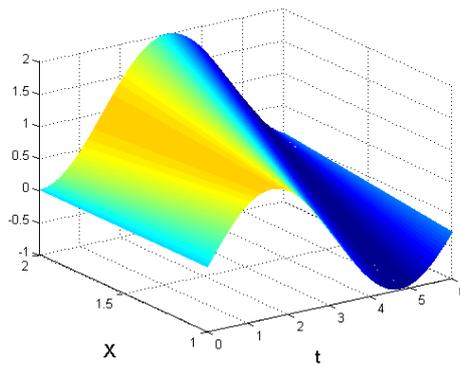


FIGURE I.43 – Résultat de l'équation (I.105).

La figure I.44 représente l'erreur en fonction du nombre d'enrichissement pour les différentes stratégies de la PGD et pour la POD.

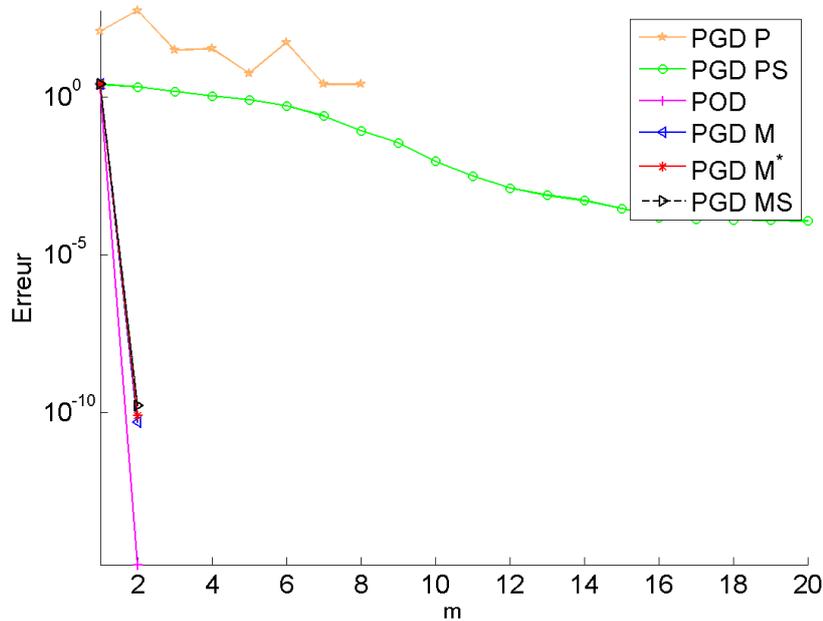


FIGURE I.44 – Courbes de convergence pour la POD ainsi que pour les différentes stratégies de la méthode PGD.

Comme on peut le voir sur la Fig. I.44 la POD ainsi que les stratégies PGD avec mise à jour convergent en seulement deux itérations. La méthode PGD PS, quant à elle, a une vitesse de convergence très faible à tel point que l'erreur après 20 enrichissements est de l'ordre de 10^{-5} . Pour la PGD P, les itérations lors du point fixe ne convergent pas rendant impossible toute convergence globale ce qui explique les résultats obtenus. Après 8 itérations de la PGD P, les résultats divergent totalement. La PGD PS* quand à elle diverge totalement.

Ce cas-test est très intéressant puisqu'il illustre un solution qui est exactement séparable en deux produits de fonctions. Or on observe que les fonctions sans mise à jour (PGD P et PGD PS) sont incapables de trouver ces deux produits de fonctions alors que les stratégies avec mise à jour, ainsi que la POD, trouvent toutes la décomposition exacte.

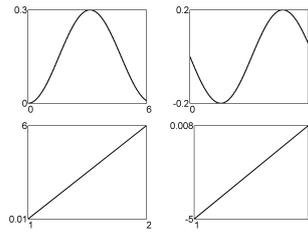


FIGURE I.45 – POD - Modes \underline{U}_1^i (à gauche) et \underline{U}_2^i (à droite) pour $i = 1..2$. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

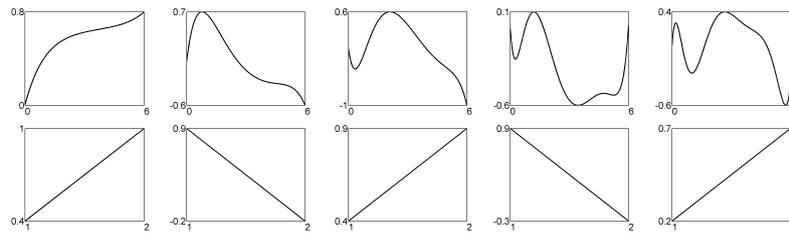


FIGURE I.46 – PGD PS- Modes \underline{U}_1^i (au dessus) et \underline{U}_2^i (en dessous) pour $i = 1..5$. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

Si l'on initialise la PGD PS et PGD PS* avec le premier produit de fonctions issu de la POD, le second produit de fonctions obtenu est alors très proche de celui retrouvé par la POD et la convergence est fortement améliorée comme on peut le voir sur la Fig. I.47.

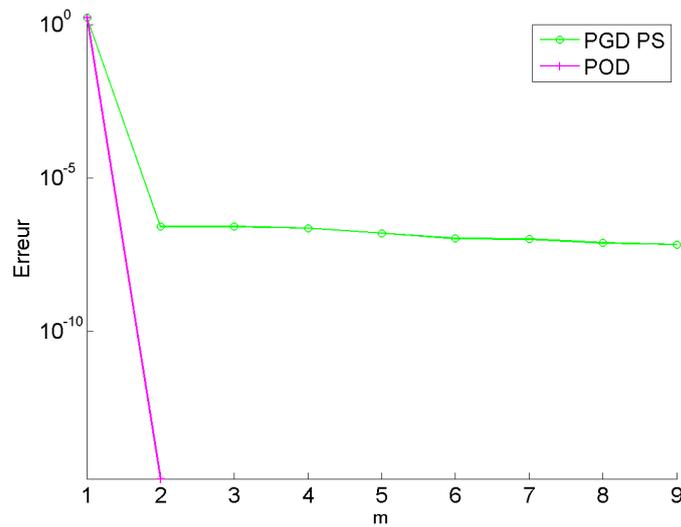


FIGURE I.47 – Courbe de convergence pour la PGD PS dont le 1^{er} produit de fonctions est issu de la POD.

Influence du conditionnement : convergence du problème préconditionné

Le système défini par l'Eq. (I.105) est préconditionné en fonction du conditionnement pour 4000 préconditionneurs différents générés à partir des équations (I.84) et (I.85). Pour toutes les figures on repère le conditionnement initial par une croix rouge. L'algorithme de la PGD Progressive pondérée non symétrisée (PGD P) et celui de la PGD Progressive pondérée Symétrisée (PGD PS) sont tour à tour utilisés et les résultats sont évalués après 5 et 10 itérations. Les figures I.48 - I.49 et I.52 - I.53 illustrent le cas du préconditionneur diagonal et les figures I.50 - I.51 et I.54 - I.55 le préconditionneur tridiagonal.

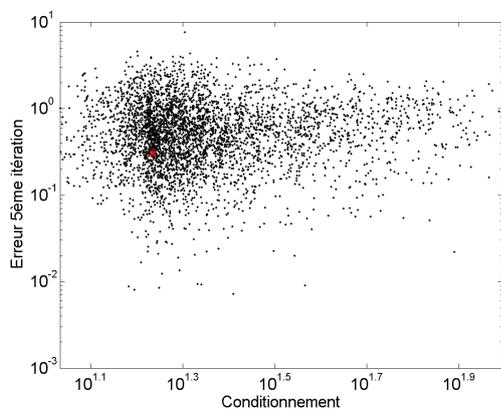


FIGURE I.48 – PGD P - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur diagonal.

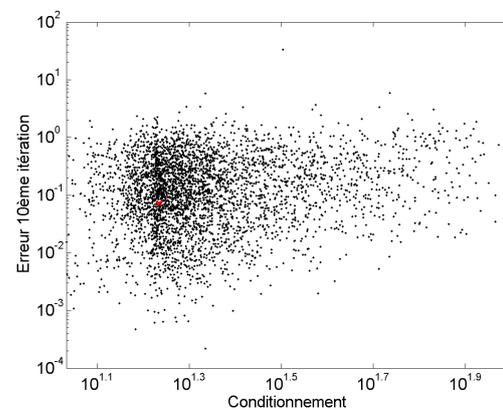


FIGURE I.49 – PGD P - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur diagonal.

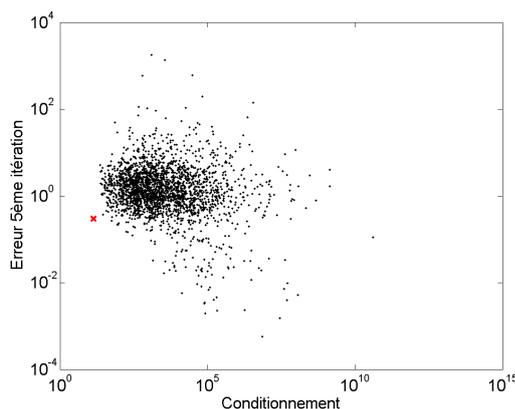


FIGURE I.50 – PGD P - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

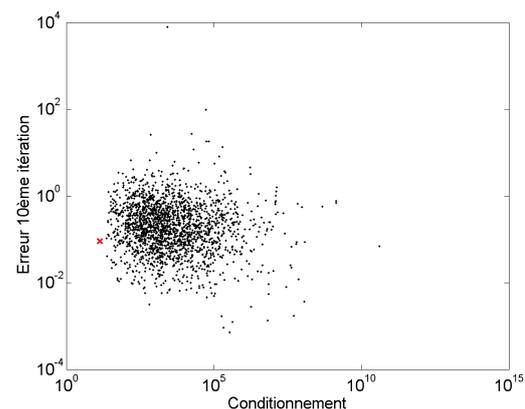


FIGURE I.51 – PGD P - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

Sur les figures précédentes on observe dans le cas du préconditionneur diagonal une diminution (respectivement augmentation) du conditionnement qui ne donne lieu à aucune diminution (respec-

tivement une augmentation) de l'erreur. Le préconditionneur tridiagonal entraîne la divergence de la méthode.

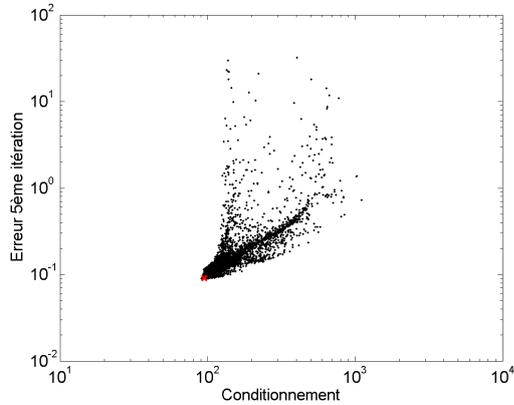


FIGURE I.52 – PGD PS - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur diagonal.

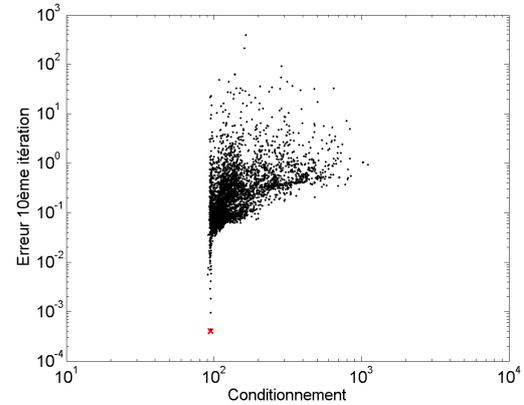


FIGURE I.53 – PGD PS - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur diagonal.

En symétrisant le système nous n'observons plus aucune diminution du conditionnement par rapport à l'initial. Comme dans les cas précédents (Figs. I.16-I.17 et I.39-I.40) l'erreur la plus faible est obtenue avec le système préconditionné.

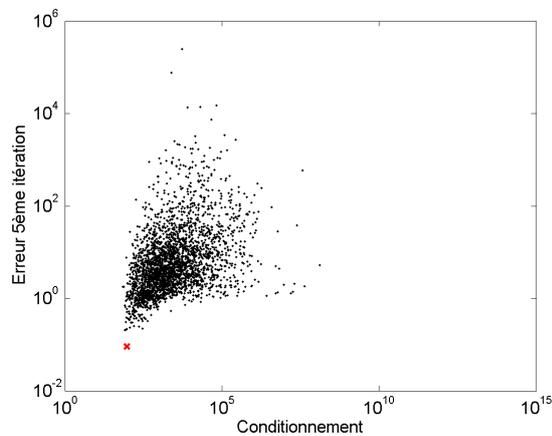


FIGURE I.54 – PGD PS - Erreur après 5 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

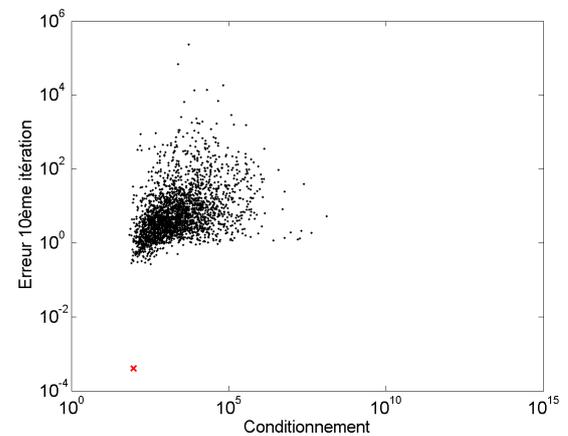


FIGURE I.55 – PGD PS - Erreur après 10 itérations. Préconditionneur tridiagonal.

Cette fois encore le conditionneur tridiagonal entraîne la divergence des résultats ce qui ne permet pas de conclure sur une quelconque corrélation erreur-conditionnement.

L'utilisation de deux types de préconditionneurs définis aléatoirement dans le cadre de la PGD P et PGD PS ne nous permet pas de d'établir un lien direct entre conditionnement de l'opérateur et

vitesse de convergence.

4 Résolution de systèmes linéaires sous forme séparée : algorithmes "standards" et PGD *a posteriori*

Dans la section précédente nous avons évalué la vitesse de convergence et l'optimalité de plusieurs algorithmes PGD pour différents problèmes types (problème de diffusion pure, de diffusion-convection, etc). Nous avons alors observé que l'algorithme de résolution "standard" de la PGD, la PGD PS, qui est l'algorithme utilisé pour la résolution de problèmes hautement multi-dimensionnels, est loin d'être optimal en termes de convergence. D'autre part, l'idée consistant à vérifier s'il existe une corrélation entre le conditionnement de l'opérateur et la vitesse de convergence n'a pas permis de dégager une stratégie améliorant l'optimalité de la méthode.

C'est pourquoi nous changeons de philosophie et présentons dans cette section l'utilisation d'algorithmes "standards" de résolution de systèmes linéaires que l'on a adapté aux systèmes de type $\mathcal{A}\mathcal{U} = \mathcal{B}$ où \mathcal{A} , \mathcal{U} et \mathcal{B} sont écrits sous forme séparée. L'utilisation de la PGD est alors semblable à l'utilisation de la SVD et permet de retrouver le rang de séparation optimal *a posteriori* des variables mises en jeu par ces algorithmes.

L'approche consistant à résoudre des problèmes écrits sous forme séparée est justifiée car la complexité de la plupart des algorithmes définis en dimension d et utilisant des variables non séparées augmente exponentiellement en d , ce que l'on appelle "la malédiction de la dimensionnalité" (de l'anglais "curse of dimensionality" [Bellman, 1966]). Dans le cas de la séparation de variables, les opérations sont effectuées sur des objets de faibles dimensions (idéalement unidimensionnels) entraînant une augmentation de la complexité des algorithmes non plus exponentielle mais linéaire. [Beylkin et Mohlenkamp, 2002] ont démontré qu'en pratique en utilisant l'écriture sous forme séparée on atteint une complexité quasi-linéaire en d pour de nombreux algorithmes. Dans ce qui suit on rappelle la complexité de quelques opérations basiques d'algèbre linéaire qui peuvent être aisément démontrées ([Kolda et Bader, 2009], [Beylkin et Mohlenkamp, 2002], [Beylkin et Mohlenkamp, 2005]). On note r le rang de séparation, d le nombre de dimensions et M le nombre de degré de liberté dans chaque dimension (qui est supposé constant à fin de simplification).

Proposition 4.1 *Algèbre linéaire basique*

- *Coût de la représentation séparée : le stockage de la représentation séparée nécessite $\mathcal{O}(d \cdot r \cdot M)$ entrées.*
- *Addition de deux vecteurs $\mathcal{F} \oplus \mathcal{G}$: le coût d'une addition de deux vecteurs \mathcal{F} et \mathcal{G} ayant un rang de séparation respectivement de r_F et r_G est quasi nul. En effet il suffit de fusionner les deux représentations. Le nouveau rang de séparation r est donné par $r = r_F + r_G$.*
- *Multiplication scalaire-vecteur ($s\mathcal{F}$) : la multiplication d'un vecteur \mathcal{F} écrits sous forme séparée par un scalaire s est donnée par*

$$\mathcal{F} = s \sum_{j=1}^{r_F} \underline{\mathbb{F}}_1^j \otimes \dots \otimes \underline{\mathbb{F}}_d^j \quad (\text{I.110})$$

soit $\mathcal{O}(r_F \cdot M)$ opérations. Le rang de séparation n'est pas modifié lors de cette opération.

- *Produit scalaire $\langle \mathcal{F}, \mathcal{G} \rangle$: Le produit scalaire de deux vecteurs écrit sous forme séparée est donné par*

$$\langle \mathcal{F}, \mathcal{G} \rangle = \sum_{i=1}^{r_F} \sum_{j=1}^{r_G} \langle \underline{\mathbb{F}}_1^i, \underline{\mathbb{G}}_1^j \rangle \dots \langle \underline{\mathbb{F}}_d^i, \underline{\mathbb{G}}_d^j \rangle \quad (\text{I.111})$$

soit $\mathcal{O}(d \cdot r_F \cdot r_G \cdot M)$ opérations.

- *Multiplication matrice-vecteur ($\mathcal{A}\mathcal{F}$) : la multiplication matrice-vecteur sous forme séparée est donnée par*

$$\mathcal{G} = \mathcal{A}\mathcal{F} = \sum_{i=1}^{r_A} \sum_{j=1}^{r_F} \left(\underline{\mathbb{A}}_1^i \underline{\mathbb{F}}_1^j \right) \otimes \dots \otimes \left(\underline{\mathbb{A}}_d^i \underline{\mathbb{F}}_d^j \right) \quad (\text{I.112})$$

soit un coût de $\mathcal{O}(d \cdot r_A \cdot r_F \cdot M^2)$ opérations. Le nouveau rang de séparation est alors $r_G = r_A \cdot r_F$.

- *Multiplication matrice-matrice ($\mathcal{A}\mathcal{B}$) : la multiplication matrice-matrice sous forme séparée est donnée par*

$$\mathcal{C} = \mathcal{A}\mathcal{B} = \sum_{i=1}^{r_A} \sum_{j=1}^{r_B} \left(\underline{\mathbb{A}}_1^i \underline{\mathbb{B}}_1^j \right) \otimes \dots \otimes \left(\underline{\mathbb{A}}_d^i \underline{\mathbb{B}}_d^j \right) \quad (\text{I.113})$$

soit un coût de $\mathcal{O}(d \cdot r_A \cdot r_B \cdot M^3)$ opérations. Le nouveau rang de séparation est alors $r_C = r_A \cdot r_B$.

La séparabilité des opérations précédemment définies nous permet d'utiliser des opérateurs unidimensionnels et de ce fait de conserver une complexité linéaire en d . Cependant certaines de ces opérations (addition, multiplication) augmentent de façon significative le rang de séparation des objets manipulés. Ainsi, lors d'algorithmes mettant en jeu un grand nombre d'opérations sur des

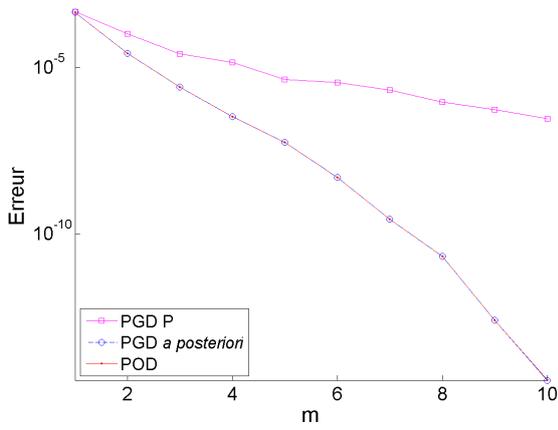
vecteurs/matrices écrits sous forme séparée, le rang de séparation peut augmenter de manière très significative ce qui réduit d'autant l'intérêt d'écrire le problème sous forme séparée. Pour s'affranchir de ce problème il est nécessaire d'obtenir l'écriture sous forme séparée des variables avec un rang de séparation optimal, c'est à dire la plus faible somme de produits de fonctions permettant d'approcher lesdites variables.

Comme nous l'avons vu dans la Sec. 1.1.a, la SVD permet d'obtenir *a posteriori* une base dont le rang de séparation est optimal. Cependant la décomposition SVD ne permet que de traiter des problèmes de dimension $d = 2$ ce qui est une limitation non acceptable dans de nombreux problèmes où le nombre de dimensions peut être très largement supérieur (comme par exemple en mécanique quantique, voir [Ammar et Chinesta, 2008]). C'est dans cette optique que nous choisissons d'utiliser la PGD qui peut être utilisée comme une méthode SVD *a posteriori* en résolvant le système

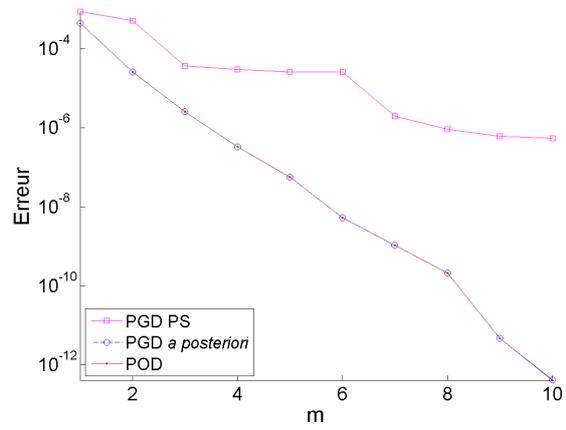
$$\mathcal{I}\mathcal{U} = \mathcal{B} \tag{I.114}$$

où $\mathcal{I} = \mathbb{I}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_D$ est le produit tensoriel d'opérateurs identités et \mathcal{B} contient l'expression séparée de la solution dont nous cherchons le rang de séparation optimal. Le nombre d'itérations maximum de la méthode PGD est fixé égal au rang de séparation de \mathcal{B} , ce qui signifie que si ce nombre maximal d'enrichissements est atteint, le rang de séparation de \mathcal{B} est déjà optimal.

Comme on peut voir sur les figures I.56, I.57 et I.58 l'utilisation de la PGD P pour résoudre l'équation (I.114) (où \mathcal{B} correspond à la solution obtenue respectivement pour le problème de diffusion pure, le problème de diffusion-convection et le problème symplectique) permet d'obtenir pour chaque cas le rang de séparation optimal puisque les résultats sont parfaitement superposés à ceux issus de la POD. Cependant, si la PGD permet d'obtenir la réduction dimensionnelle pour tout problème écrit sous forme séparée et quel que soit son nombre de dimensions, il n'y a pour le moment pas de garantie théorique quant à l'obtention du rang de séparation optimal pour des écriture sous forme séparée sur plus de deux sous espaces. Néanmoins, comme souligné dans [Beylkin et Mohlenkamp, 2005], l'obtention d'un rang de séparation quasi-optimal (appelé *suboptimal*), reste tout à fait acceptable.

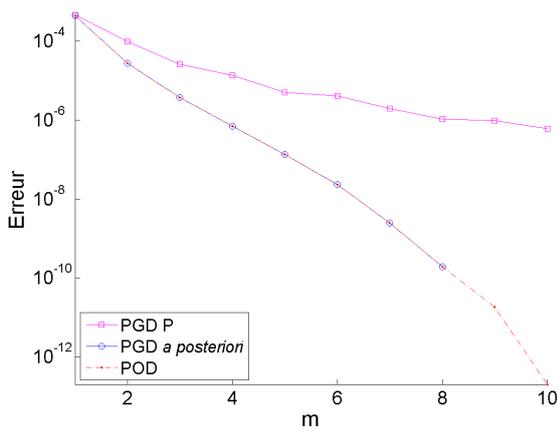


(a) Réduction de la solution issue de la PGD P.

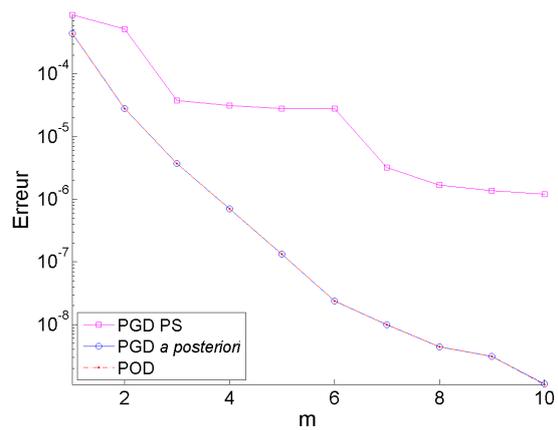


(b) Réduction de la solution issue de la PGD PS.

FIGURE I.56 – Réduction avec la PGD P du rang de séparation des solutions obtenues avec la PGD P et la PGD PS pour le problème de diffusion pure défini Eq. (I.88).



(a) Réduction de la solution issue de la PGD P.



(b) Réduction de la solution issue de la PGD PS.

FIGURE I.57 – Réduction avec la PGD P du rang de séparation des solutions obtenues avec la PGD P et la PGD PS pour le problème de convection diffusion défini Eq. (I.98).

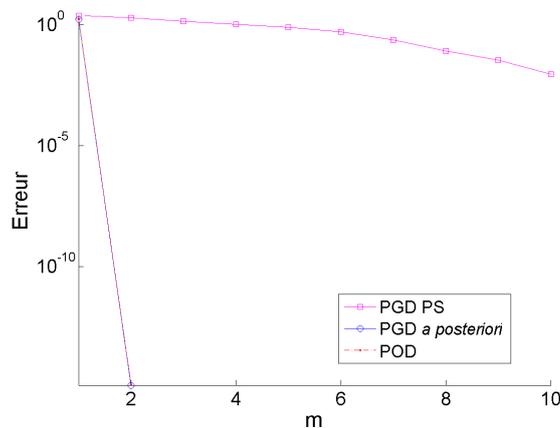


FIGURE I.58 – Réduction avec la PGD P du rang de séparation de la solution obtenue avec la PGD PS pour la résolution du problème symplectique définie Eq. (I.105).

Une autre approche pour la décomposition tensorielle de problèmes multidimensionnels est ainsi envisagée en utilisant la PGD comme outil d'optimisation *a posteriori*. Dans ce cadre l'idée est la suivante : résoudre un problème linéaire multidimensionnel écrit sous forme séparée à l'aide des algorithmes "standards" de résolution de système linéaire (méthode du gradient, du gradient bi-conjugué stabilisé, etc) et utiliser les propriétés d'optimalité de la PGD *a posteriori* pour réduire le nombre de produits de fonctions afin de prévenir une croissance trop importante du rang de séparation de la solution et des variables mises en jeu. Dans ce qui suit (et plus généralement dans le cas de séparations de variables sur deux sous-espaces), nous utilisons indifféremment la SVD ou la PGD pour la recherche du rang optimal.

Notons aussi que le but de cette section n'est pas de comparer l'efficacité des différents algorithmes présentés mais d'étendre leur utilisation à la résolution de problèmes hautement multidimensionnels. D'autre part, l'efficacité en termes de temps de calcul des différents algorithmes n'est pas comparée à celles des stratégies PGD car l'optimisation des algorithmes présentés est loin d'être optimale alors que la recherche d'algorithmes efficaces sous forme séparée est une recherche en cours comme le montre le récent article de [De Sterck, 2011] sur l'algorithme GMRES⁶ non linéaire.

6. GMRES pour Generalized Minimal Residual Method est une méthode itérative basée sur les sous-espaces de Krylov et qui a été développée par [Saad et Schultz, 1986].

4.1 Algorithmes de résolution de systèmes linéaires

Nous présentons dans cette section plusieurs algorithmes "standards" de résolution de systèmes linéaires. Ces algorithmes sont réécrits pour pouvoir être utilisés dans le cadre de l'écriture séparée afin de résoudre les problèmes définis Sec. 3.

4.1.a Méthode du Gradient à pas variable - G

La méthode du gradient à pas variable fait partie de la famille de méthodes dites *projectives*. Les méthodes de projection partent du constat que pour résoudre l'équation $\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b}$ il suffit de déterminer le minimum de la fonctionnelle

$$J(x) = \frac{1}{2} \langle \underline{x}, \underline{\underline{A}} \underline{x} \rangle - \langle \underline{b}, \underline{x} \rangle = \frac{1}{2} \underline{x}^T \underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b}^T \underline{x} \quad (\text{I.115})$$

Or lorsque A est symétrique la dérivée de la fonctionnelle se réduit à

$$J'(x) = \underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b} \quad (\text{I.116})$$

et par conséquent, lorsque $\underline{\underline{A}}$ est symétrique définie positive, $J(\underline{x})$ a pour minimum $\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b}$.

L'algorithme de la méthode du gradient est donné par l'algorithme 5, qui se réécrit lors de l'utilisation de variables séparées Alg. 6.

Données : Opérateur $\underline{\underline{A}}$, second membre \underline{b} , estimation arbitraire de \underline{x}_0 et critère d'arrêt ϵ

$\underline{x} = \underline{x}_0$

tant que $\|\underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b}\| > \epsilon$ **faire**

	$\underline{r} = \underline{b} - \underline{\underline{A}} \underline{x}$
	$\alpha = \frac{\langle \underline{r}, \underline{r} \rangle}{\langle \underline{r}, \underline{\underline{A}} \underline{r} \rangle}$
	$\underline{x} = \underline{x} + \alpha \cdot \underline{r}$

fin

Algorithme 5: Algorithme pour la méthode du Gradient à pas variable.

Données : Opérateur A , second membre \mathcal{B} , estimation arbitraire de \mathcal{X}_0 et critère d'arrêt ϵ
 $\mathcal{X} = \mathcal{X}_0$
tant que $\|A\mathcal{X} \ominus \mathcal{B}\| > \epsilon$ **faire**

$\mathcal{R} = \mathcal{B} \ominus A\mathcal{X}$
$\alpha = \frac{\langle \mathcal{R}, \mathcal{R} \rangle}{\langle \mathcal{R}, A\mathcal{R} \rangle}$
$\mathcal{X} = \mathcal{X} \oplus \alpha\mathcal{R}$

Réduction du rang de séparation : $\mathcal{X} = PGD(\mathcal{X})$

fin

Algorithme 6: Algorithme pour la méthode du Gradient à pas variable sous forme séparée.

Remarque :

L'algorithme du gradient n'est pas toujours efficace, particulièrement si A a un conditionnement élevé. Dans ce cas le résidu r évolue peu d'une itération à l'autre et la convergence est très lente [Jedrzejewski, 2005].

4.1.b Méthode du Gradient Conjugué - CG

La méthode du Gradient Conjugué est une amélioration de la méthode du gradient à pas variable dans laquelle la mise à jour de la solution x se fait le long de nouvelles directions. Elle a été mise au point dans les années 50 par [Lanczos, 1950] et [Hestenes et Stiefel, 1952]. La convergence de l'algorithme est assurée en au plus n itérations où n est le nombre de degrés de liberté du système. En théorie cette méthode est une méthode directe mais en pratique à cause des erreurs d'arrondi on la considère comme une méthode itérative.

L'algorithme de la méthode du Gradient Conjugué est donné Alg. 7.

Données : Opérateur \mathcal{A} , second membre \mathcal{B} , estimation arbitraire de \mathcal{X}_0 et critère d'arrêt ϵ

$\mathcal{X} = \mathcal{X}_0$
 $\mathcal{R}_1 = \mathcal{B} \ominus \mathcal{A}\mathcal{X}$
 $\mathcal{P} = \mathcal{R}$

tant que $\|\mathcal{A}\mathcal{X} \ominus \mathcal{B}\| > \epsilon$ **faire**

Calcul de la nouvelle solution :

$\mathcal{R}_0 = \mathcal{R}_1$
 $\alpha = \frac{\langle \mathcal{R}_0, \mathcal{R}_0 \rangle}{\langle \mathcal{P}, \mathcal{A}\mathcal{P} \rangle}$
 $\mathcal{X} = \mathcal{X} \oplus \alpha\mathcal{P}$

Calcul de la nouvelle direction :

$\mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_0 \oplus \alpha\mathcal{A}\mathcal{P}$
 $\beta = \frac{\langle \mathcal{R}_1, \mathcal{R}_1 \rangle}{\langle \mathcal{R}_0, \mathcal{A}\mathcal{R}_0 \rangle}$
 $\mathcal{P} = \mathcal{R}_1 \oplus \beta\mathcal{P}$

Réduction du rang de séparation : $\mathcal{X} = PGD(\mathcal{X})$
 Réduction du rang de séparation : $\mathcal{R}_1 = PGD(\mathcal{R}_1)$
 Réduction du rang de séparation : $\mathcal{P} = PGD(\mathcal{P})$

fin

Algorithme 7: Algorithme pour la méthode du Gradient Conjugué.

4.1.c Méthode du Gradient BiConjugué Stabilisé - BiCGStab

C'est un algorithme de la famille des méthodes du Gradient BiConjugué (BiCG) dont c'est une variante. Il a été mis au point par [Van der Vorst, 1992]. Contrairement aux deux précédentes, les méthodes de la famille BiCG ne nécessitent pas que la matrice $\underline{\underline{A}}$ soit symétrique. L'algorithme BiCG repose sur le double traitement de l'équation $\underline{\underline{A}} \underline{\underline{x}} = \underline{\underline{b}}$ et de l'équation $\underline{\underline{A}}^T \tilde{\underline{\underline{x}}} = \tilde{\underline{\underline{b}}}$.

L'algorithme de la méthode du Gradient BiConjugué Stabilisé est donné Alg. 8.

BiCGStab peut être vu comme une combinaison de BiCG et de GMRES où chaque étape BiCG est suivie par une étape GMRES(1).

Données : Opérateur \mathcal{A} , second membre \mathcal{B} , estimation arbitraire de \mathcal{X}_0 et critère d'arrêt ϵ

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}_0$$

$$\mathcal{R} = \mathcal{B} \ominus \mathcal{A}\mathcal{X}$$

$$\tilde{\mathcal{R}} = \mathcal{R}; \mathcal{V} = \mathcal{P} = 0$$

$$\rho_1 = \alpha = \omega = 1$$

$$Err_0 = 10^{10}, Err_1 = \frac{\|\mathcal{R}\|_2}{\|\mathcal{B}\|_2}$$

tant que $\|\mathcal{A}\mathcal{X} \ominus \mathcal{B}\| > \epsilon$ **et** $Err_1 < Err_0$ **faire**

$$Err_0 = Err_1$$

$$\rho_0 = \rho_1$$

$$\rho_1 = \langle \tilde{\mathcal{R}}, \mathcal{R} \rangle$$

$$\beta = \frac{\rho_1 \alpha}{\rho_0 \omega}$$

$$\mathcal{P} = \mathcal{R} \oplus \beta(\mathcal{P} \ominus \omega \mathcal{V})$$

$$\mathcal{V} = \mathcal{A}\mathcal{P}$$

$$\sigma = \langle \tilde{\mathcal{R}}, \mathcal{V} \rangle$$

$$\alpha = \frac{\rho}{\sigma}$$

$$\mathcal{S} = \mathcal{R} \ominus \alpha \mathcal{V}$$

$$\mathcal{T} = \mathcal{A}\mathcal{S}$$

$$\omega = \frac{\langle \mathcal{S}, \mathcal{T} \rangle}{\langle \mathcal{T}, \mathcal{T} \rangle}$$

$$\mathcal{X} = \mathcal{X} \oplus \alpha \mathcal{P} \oplus \omega \mathcal{S}$$

$$\mathcal{R} = \mathcal{R} \ominus \omega \mathcal{T}$$

$$Err_1 = \frac{\|\mathcal{R}\|_2}{\|\mathcal{B}\|_2}$$

Réduction du rang de séparation : $\mathcal{P} = PGD(\mathcal{P})$
Réduction du rang de séparation : $\mathcal{V} = PGD(\mathcal{V})$
Réduction du rang de séparation : $\mathcal{S} = PGD(\mathcal{S})$
Réduction du rang de séparation : $\mathcal{T} = PGD(\mathcal{T})$
Réduction du rang de séparation : $\mathcal{X} = PGD(\mathcal{X})$
Réduction du rang de séparation : $\mathcal{R} = PGD(\mathcal{R})$

fin

Algorithme 8: Algorithme pour la méthode du Gradient BiConjugué Stabilisé.

4.2 Équation de diffusion pure instationnaire

Le problème résolu dans cette section est le même problème de diffusion pure instationnaire que celui présenté Sec. 3.2. Le système est résolu à l'aide des algorithmes définis dans la section précédente, c'est à dire avec la méthode du Gradient (G), du Gradient Conjugué (CG) et du Gradient BiConjugué Stabilisé (BiCGStab). Les algorithmes G et CG nécessitent un opérateur symétrisé ce qui est effectué en résolvant le problème $\mathcal{A}^T \mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{A}^T \mathcal{B}$ à la place de $\mathcal{A} \mathcal{U} = \mathcal{B}$. BiCGStab, qui n'est pas soumis à une telle restriction, résout le problème non symétrisé ce qui évite l'augmentation

notable du conditionnement (on rappelle que $cond_2(\mathcal{A}^T \mathcal{A}) = cond_2(\mathcal{A})^2$).

Le problème est séparé en deux sous espaces que sont les espaces temporel et physique et la recherche du rang optimal est réalisé indifféremment avec l'algorithme PGD PS ou SVD.

On représente les courbes de convergence en fonction des différentes méthodes Fig. I.59 et dont la solution est initialisée pour chaque méthode à l'aide de vecteurs nuls.

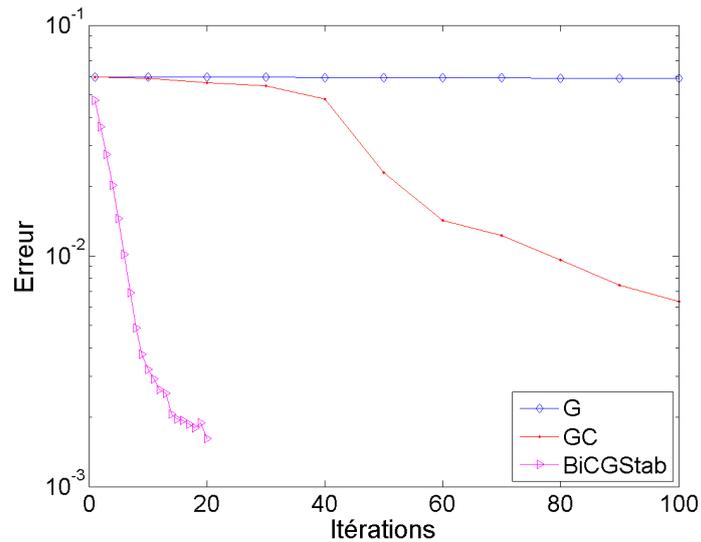


FIGURE I.59 – Courbe de convergence pour les différents algorithmes en fonction du nombre d'itérations.

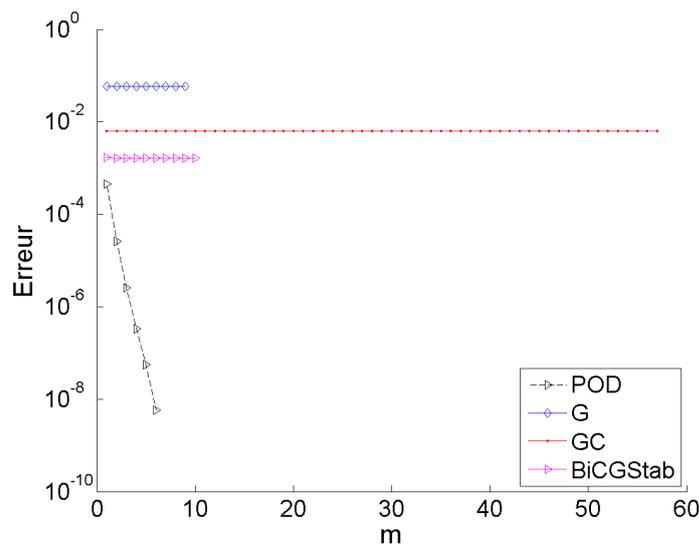


FIGURE I.60 – Courbe de convergence pour les bases de fonctions obtenues avec les différents algorithmes avec une initialisation de la solution par des vecteurs nuls.

La convergence des bases obtenues en fonction du rang de séparation est présentée Fig. I.60. On voit que le premier couple de fonctions est de loin le plus significatif quel que soit l'algorithme utilisé. La Fig. I.61 illustre les 5 premiers modes obtenus avec l'algorithme BiCGStab.

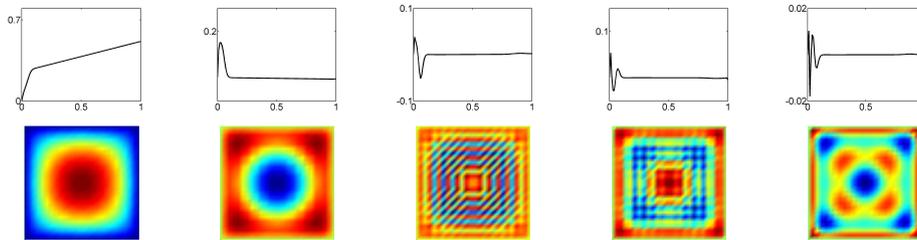


FIGURE I.61 – BiCGStab - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i = 1..5$. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

Afin d'améliorer la convergence, nous initialisons plus efficacement la solution à l'aide du premier couple de fonctions issu de la POD. Cela nous permet de comparer l'efficacité des algorithmes utilisés lorsque l'initialisation de la solution est judicieuse.

La figure I.62 représente les résultats obtenus avec cette initialisation et dont la convergence n'est particulièrement améliorée : l'utilisation du premier couple de fonctions issu de la POD permet d'obtenir une erreur initiale plus faible mais la vitesse de convergence des algorithmes n'en est pas pour autant améliorée.

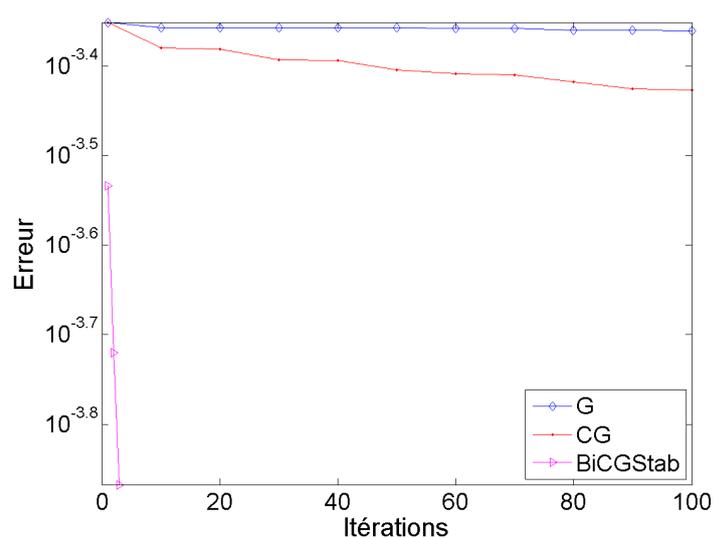


FIGURE I.62 – Courbe de convergence pour les différents algorithmes avec l'initialisation de la solution issue du premier couple de fonction de la POD.

D'autre part on remarque sur la Fig. I.63 que cette fois les deux premiers produits de fonctions sont prépondérants quant à la convergence des différentes méthodes. Les deux premiers modes obtenus avec l'algorithme BiCGStab (voir Fig. I.64) ne semblent que légèrement modifiés, bien que l'erreur de la solution décrite par ces deux premiers modes soit légèrement inférieure à celle décrite par les deux premiers modes de la Fig. I.61.

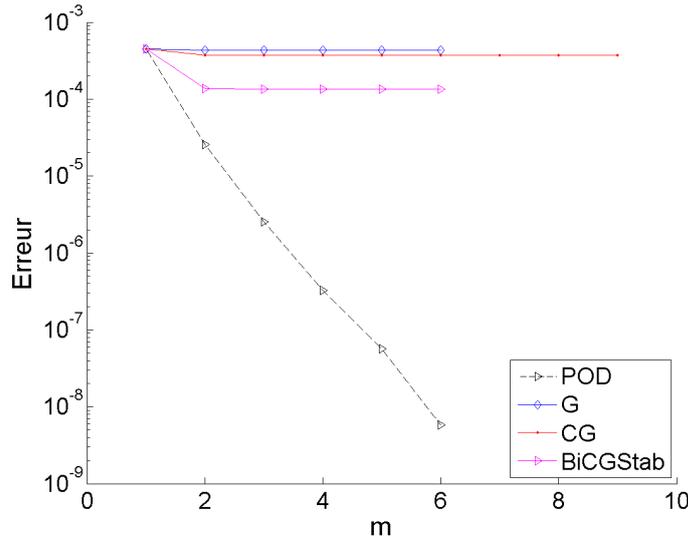


FIGURE I.63 – Courbe de convergence pour les bases de fonctions obtenues avec les différents algorithmes avec une initialisation de la solution issue du premier couple de fonction de la POD.

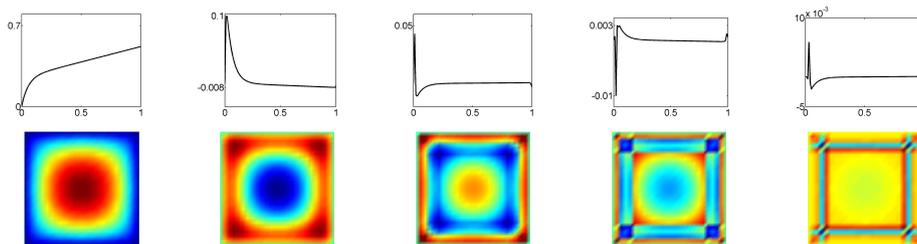


FIGURE I.64 – BiCGStab - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i = 1..5$. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

4.3 Équation de convection-diffusion instationnaire

On résout dans cette section le même problème que celui défini Sec. 3.3.a, c'est à dire une équation de convection-diffusion instationnaire avec les algorithmes de résolution de systèmes linéaires définis Sec. 4.1 et nous comparons les résultats obtenus.

Dans le premier cas, Fig. I.65 on représente les courbes de convergence en fonction des différentes méthodes. Dans ce cas on initialise grossièrement la solution pour chaque méthode par des vecteurs nuls.

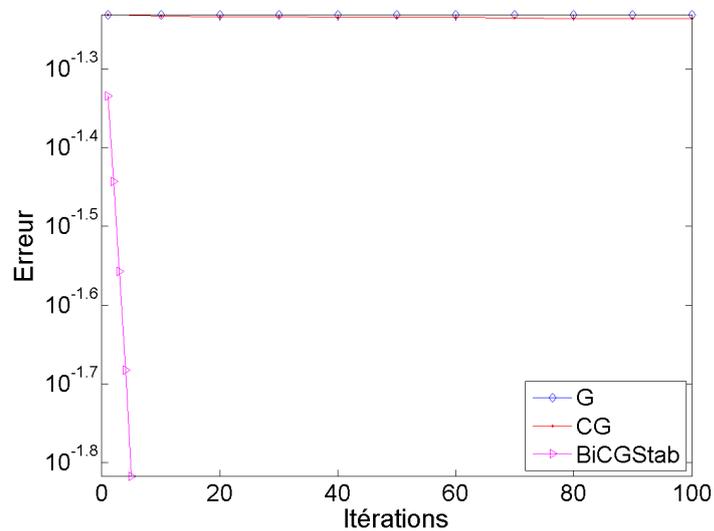


FIGURE I.65 – Courbe de convergence pour les différents algorithmes avec une initialisation de la solution par des vecteurs nuls.

La Fig. I.66 représente les 5 premières fonctions de la base obtenue avec la méthode BiCGStab.

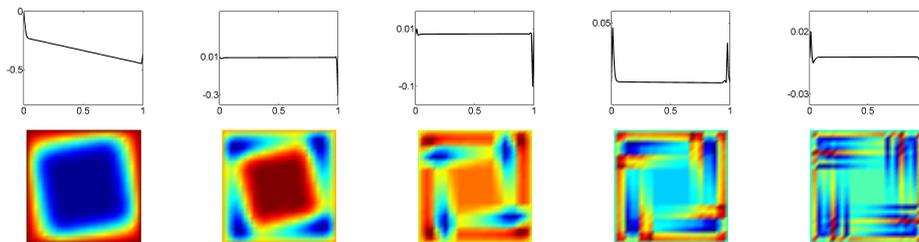


FIGURE I.66 – BiCGStab - Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i = 1..5$. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

La convergence des bases obtenues en fonction du rang de séparation est présentée Fig. I.67. On voit comme dans la section précédente que le premier couple de fonctions est de loin le plus significatif quelque soit l'algorithme utilisé.

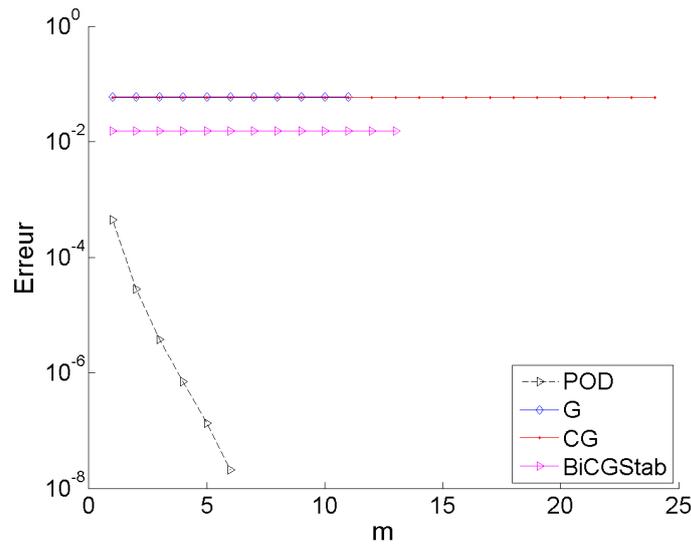


FIGURE I.67 – Courbe de convergence pour les bases de fonctions obtenues en fonction des différents algorithmes avec une initialisation de la solution par des vecteurs nuls.

Comme dans la section précédente et afin d’améliorer la convergence, nous initialisons plus efficacement la solution à l’aide du premier couple de fonctions issu de la POD. La figure I.68 représente les résultats obtenus avec cette initialisation et dont l’erreur est notablement diminuée bien que l’on observe pas d’amélioration de la vitesse de convergence.

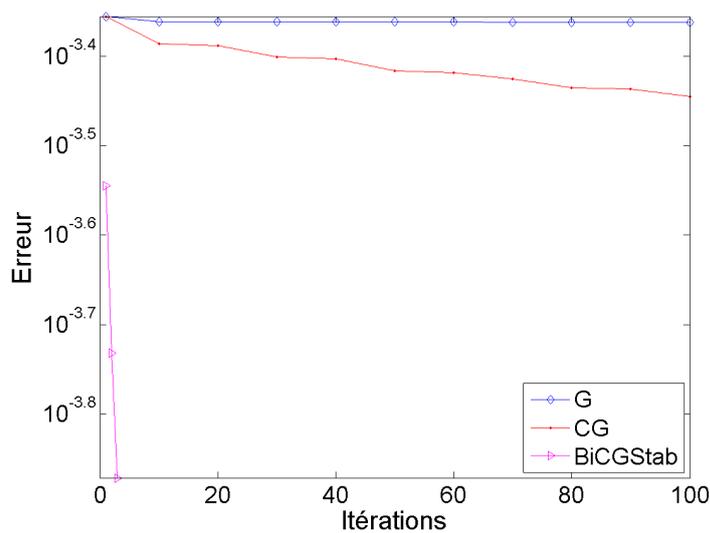


FIGURE I.68 – Courbe de convergence pour les différents algorithmes avec une initialisation de la solution issue du premier couple de fonction de la POD.

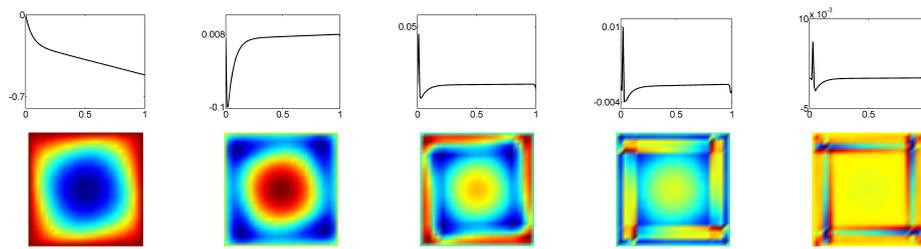


FIGURE I.69 – BiCGStab- Modes \underline{U}_1^i (au-dessus) et \underline{U}_2^i (en-dessous) pour $i = 1..5$. L'ordre des modes est décroissant de gauche à droite.

D'autre part on remarque sur la Fig. I.70 que cette fois les deux premiers produits de fonctions sont prépondérant quand à la convergence des différentes méthodes.

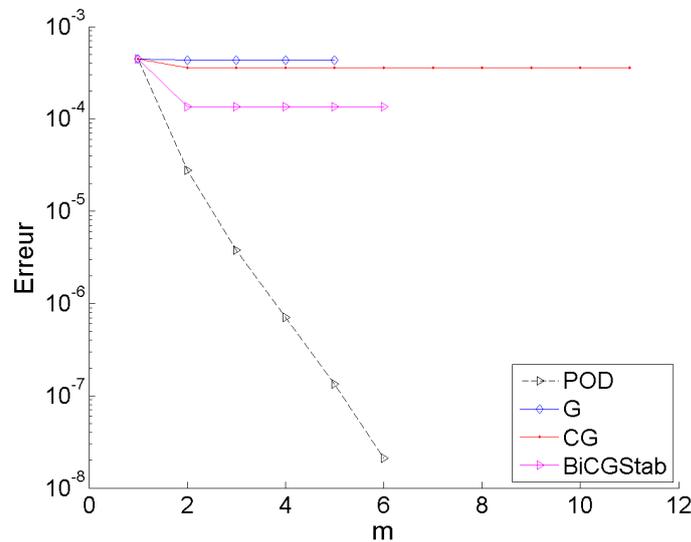


FIGURE I.70 – Courbe de convergence pour les bases de fonctions obtenues en fonction des différents algorithmes avec une initialisation de la solution issue du premier couple de fonction de la SVD.

4.4 Problème symplectique

Pour le dernier cas test illustrant l'utilisation de résolution itérative de système linéaire en écriture séparée, nous choisissons de résoudre le problème symplectique présenté Sec. 3.4. Nous initialisons les solutions avec des vecteurs nuls pour les différentes méthodes.

D'autre part pour cette équation l'opérateur résultant de la discrétisation est fortement non symétrique ce qui engendre des problèmes de convergence pour la BiCGStab et c'est pourquoi nous utilisons cet algorithme à la fois avec l'opérateur symétrisé et non symétrisé que nous appelons

respectivement BiCGStab S et BiCGStab NS.

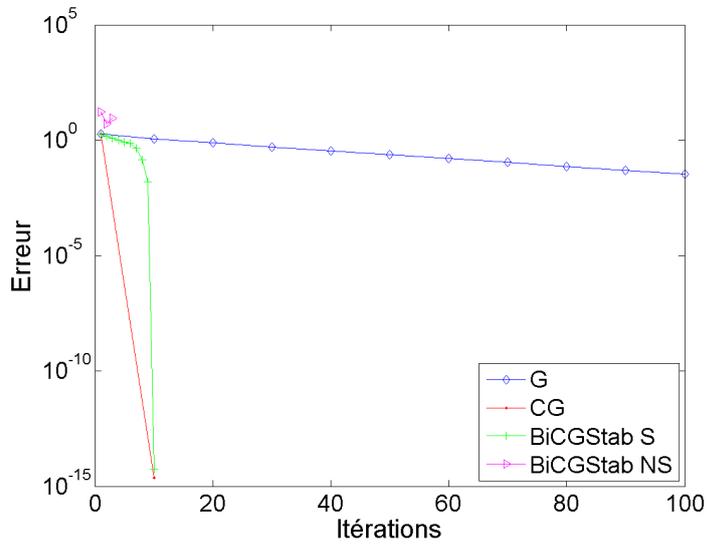


FIGURE I.71 – 10 nœuds de maillage pour Ω_x .

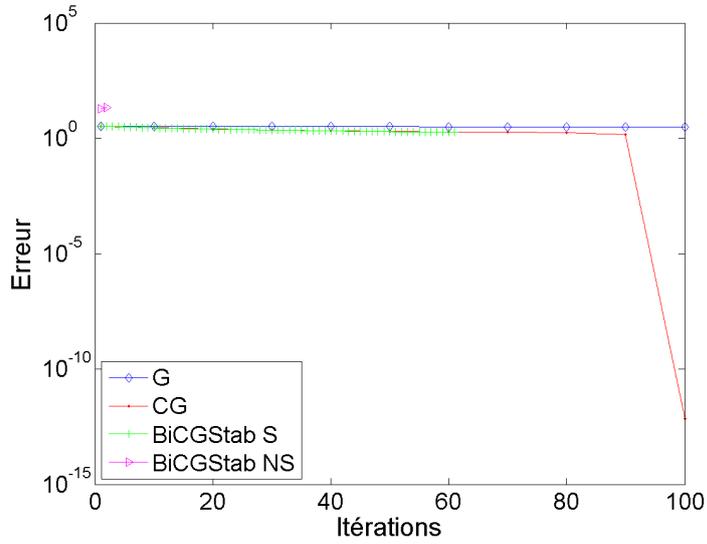


FIGURE I.72 – 100 nœuds de maillage pour Ω_x .

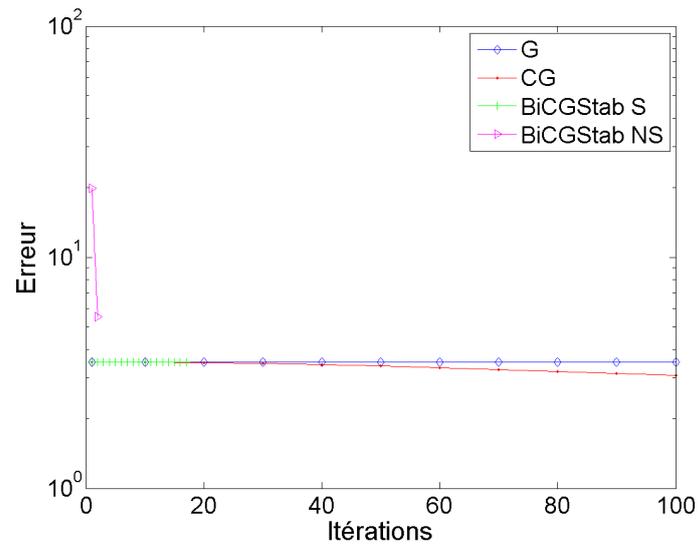


FIGURE I.73 – 1000 nœuds de maillage pour Ω_x .

La convergence des méthodes G, CG et BiCGStab est dépendante du maillage comme on peut le voir sur les Figs. I.71 à I.72 représentant les résultats obtenus pour 3 maillages différents du domaine Ω_x . En effet pour un maillage grossier les méthodes CG et BiCGStab S parviennent à converger vers la solution et l'algorithme du gradient, s'il ne parvient pas à atteindre la solution en si peu d'itérations, a une convergence bien supérieure à celle des maillages plus raffinés. Par contre la version non symétrisée de BiCGStab n'est absolument pas efficace et diverge très vite.

En augmentant le maillage à 100 nœuds les convergence des méthodes diminuent et seule la CG parvient à converger vers la solution. Finalement pour une discrétisation de Ω_x avec 1000 nœuds aucune méthode ne converge en un nombre d'itérations inférieur à 10.

Lorsque les méthodes itératives ont convergé (algorithmes BiCGStab Fig. I.74 et la CG Fig. I.75), les bases de produits de fonctions obtenues ont un rang de séparation de 2 ce qui correspond au rang de séparation optimal obtenu par la POD dans la Sec. 3.4. Seule exception du CG Fig. I.74 qui a un rang de séparation de 4 mais dont les seuls deux premiers produits de fonction sont significatifs par rapport à la convergence de la méthode.

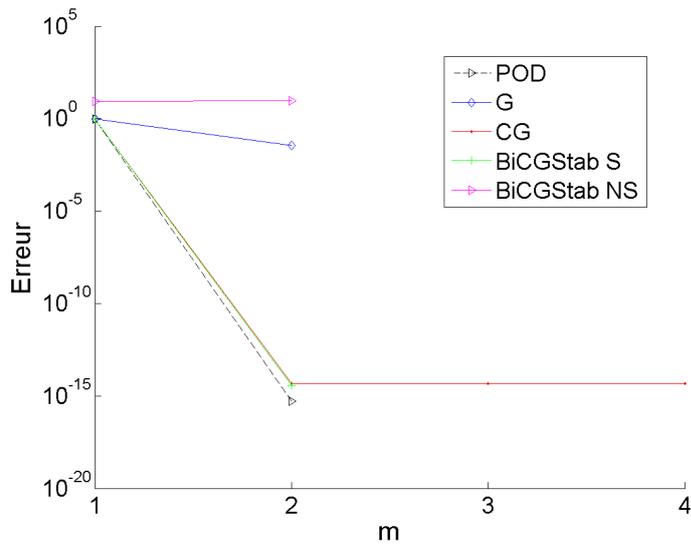


FIGURE I.74 – Courbe de convergence pour les bases de fonctions obtenues en fonction des différents algorithmes et où Ω_x est discrétisé avec 10 nœuds.

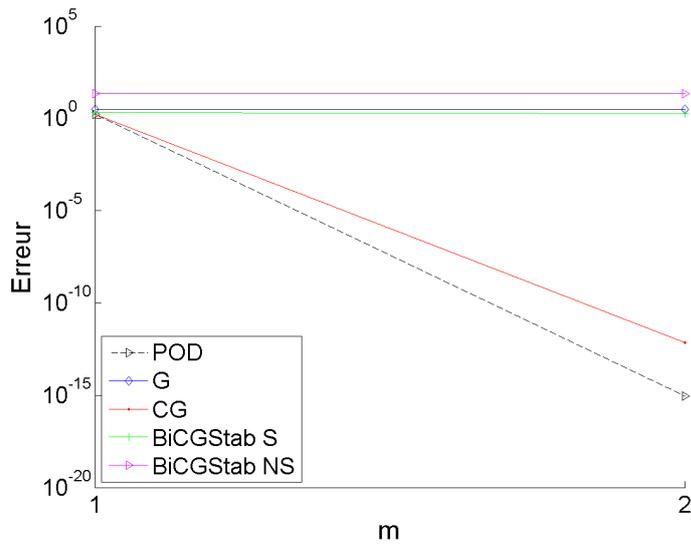


FIGURE I.75 – Courbe de convergence pour les bases de fonctions obtenues en fonction des différents algorithmes et où Ω_x est discrétisé avec 100 nœuds.

Finalement on peut voir les produits de fonctions obtenus lors du maillage grossier (discrétisation de 10 nœuds de l'espace Ω_x), Fig. I.76 sont en accord avec les résultats issus de la POD Fig. I.45

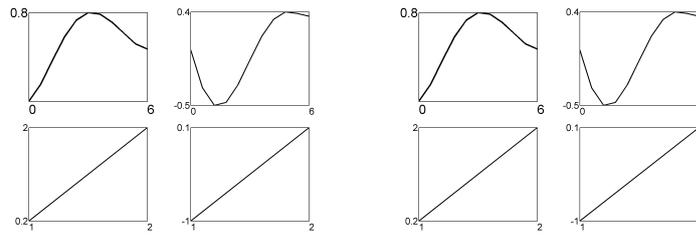


FIGURE I.76 – Base de fonctions obtenues avec CG (à gauche) et BiCGStab (à droite). Ω_x discrétisé à l'aide de 10 nœuds.

Ce qui est très intéressant dans ce cas test est que la décomposition de la solution en exactement deux produits de fonctions a été retrouvée par les algorithmes CG et BiCGStab alors que la PGD sans mise à jour n'en est pas capable. Cela démontre le potentiel de l'utilisation des algorithmes de résolution de systèmes linéaires avec séparation de variables et qui peut être utilisé dans des problèmes hautement multidimensionnels grâce à la PGD.

5 Conclusion du chapitre

L'augmentation de la complexité des modèles ainsi que la demande d'une précision accrue lors des simulations numériques entraînent une augmentation considérable des ressources matérielles nécessaires dans le cadre des techniques numériques classiques. Afin de diminuer ce coût et de plus être soumis à la "malédiction de la dimensionnalité" une stratégie consiste à écrire la problématique sous forme séparée. Cependant la résolution de système linéaire sous cette forme n'est pas triviale. Nous avons présenté dans cette section deux approches différentes et basées sur la méthode *Proper Generalized Decomposition* (PGD). Dans le premier cas le système linéaire est directement résolu de manière itérative avec la PGD et nous nous sommes intéressés à la vitesse de convergence de la méthode à travers la recherche de l'optimalité de la solution obtenue. L'étude de différents algorithmes de la PGD en fonction de plusieurs problèmes types a permis de noter que l'algorithme de la PGD le plus usité dans la littérature, la PGD PS, qui offre le meilleur compromis temps de calcul - convergence, est loin d'être optimal. Dans la recherche de cette optimalité nous avons alors préconditionné certains algorithmes dans l'optique d'établir une corrélation entre conditionnement du système complet et vitesse de convergence.

Les résultats infructueux de cette stratégie nous ont alors conduit à envisager une nouvelle approche : utiliser la PGD dans le cadre de méthodes de résolution classiques de systèmes linéaires écrits sous

forme séparée en exploitant sa capacité à trouver le rang de séparation optimal *a posteriori*. Notons cependant que si le rang de séparation optimal est bien obtenu lors de séparations de variables sur deux sous-espaces, il n'y a pour le moment pas de garantie théorique sur l'obtention du rang optimal pour des séparations d'ordre supérieur. Trois algorithmes (l'algorithme du Gradient - G, du Gradient Conjugué - CG - et du Gradient Bi-Conjugué Stabilisé -BiCGStab) ont été écrits sous forme séparée afin d'être utilisés dans le cadre de la séparation de variables. Si l'influence de l'initialisation de la solution est un problème largement étudié dans le cas de ces algorithmes sous forme non séparée, nous avons vu que dans les cas étudiés une meilleure initialisation n'entraînait pas directement une amélioration de la convergence des algorithmes. En termes de vitesse de convergence, plus l'algorithme de résolution est élaboré et plus sa convergence est importante notamment pour les problèmes de diffusion pure et de convection-diffusion où l'on obtient les meilleurs résultats avec l'algorithme BiCGStab, suivi de CG puis de la méthode G. Dans le cas très particulier du problème symplectique, ce n'est plus tout à fait vrai car le BiCGStab est moins robuste que le GC et ne converge pas toujours. Finalement dans les deux cas, la méthode offre des perspectives intéressantes même si son amélioration en termes de vitesse de convergence et d'optimalité de la représentation séparée reste un travail en cours.

Chapitre II

Approche microstructurale des suspensions fluides

Résumé

Dans ce chapitre nous nous intéressons aux mélanges de fluides immiscibles et plus particulièrement à la simulation de ces mélanges à faible nombre de Reynolds. L'impossibilité d'une simulation numérique utilisant les variables hydrodynamiques classiques est liée à l'existence de phénomènes complexes au sein de la phase discrète et dont la taille caractéristique est très inférieure à celle de l'écoulement. Afin de contourner cette difficulté nous exploitons et enrichissons un outil numérique précédemment défini, le tenseur d'aire, dont l'utilisation est sujette à l'introduction d'une relation de fermeture. Nous effectuons à l'aide d'un modèle de théorie cinétique identique et exact **une étude approfondie de l'influence des relations de fermetures** les plus utilisées. Ensuite nous présentons **l'utilisation du tenseur d'aire pour des écoulements complexes enrichi d'un modèle physique plus complet** afin de mieux prendre en compte les effets dus à la relaxation et à la tension de surface. **L'enrichissement du modèle de théorie cinétique** est alors conduit afin de comparer les résultats en écoulements complexes entre le tenseur d'aire et **l'approche micro-macro**, réalisée grâce à l'outil de **réduction dimensionnelle PGD**. Finalement nous proposons d'enrichir la description par **l'ajout d'un modèle de mélange polydisperse** qui permet de connaître l'évolution de la polydispersité de la phase discrète lors du mélange.

Sommaire

1	État de l'art	93
2	Approche microstructurale du mélange	94
2.1	Description de l'évolution de l'interface	95
2.2	Définition du tenseur d'aire	97
2.2.a	Définition	97
2.2.b	Propriétés	98
2.3	Introduction des effets physiques : terme de relaxation	100
2.4	Jeu d'équations complet : utilisation de relations de fermeture	104
2.5	Vers une modélisation microstructurale dans le cadre de la théorie cinétique	108
3	Technique de résolution en écoulement homogène	112
3.1	Fonction d'orientation d'aire	112
3.1.a	Discrétisation de la fonction d'orientation d'aire sur l'espace des configurations	112
3.1.b	Schéma temporel	116
3.2	Équation d'évolution du Tenseur d'aire	116
3.3	Forme adimensionnelle des équations du modèle	116
3.3.a	Équation du tenseur d'aire	116
3.3.b	Équations hydrodynamiques	117
3.4	Évaluation de l'efficacité des relations de fermeture	118
4	Approche microstructurale en écoulement complexe	123
4.1	Approche micro-macro avec PGD	123
4.1.a	Validation du modèle Micro-Macro	127
4.1.b	Modèle micro-macro en écoulement complexe	130
4.2	Exemple de mélange complexe avec relation de fermeture et modèle physique complet	134
4.3	Application du tenseur d'aire : caractérisation de l'efficacité d'une géométrie de mélangeur	139
5	Une modélisation Polydispense du mélange	142
5.1	Équation d'évolution de la concentration	143
5.2	Couplage avec le tenseur d'aire	146

5.3	Résultats numériques du nouveau modèle de tenseur d'aire avec polydispersité	148
5.3.a	Illustration en écoulement homogène	148
5.3.b	Illustration en écoulement complexe	152
6	Conclusion du chapitre	158

1 État de l'art

Les mélanges de fluides immiscibles sont fréquents dans nombre d'applications industrielles comme par exemple les cosmétiques, l'agroalimentaire ou encore l'industrie du plastique. La présence de deux phases fluides modifie de façon non linéaire les caractéristiques finales du mélange dont les propriétés sont fortement dépendantes de la microstructure en présence. Or cette microstructure se développe en même temps que le mélange entraînant alors une forte interaction entre l'écoulement fluide, la morphologie de la microstructure et la rhéologie du système. Ainsi la détermination de la qualité / quantité d'un mélange est un point crucial pour la détermination des propriétés du matériau final. Cependant la simulation de mélanges de fluides immiscibles est un sujet difficile car la taille de la microstructure du mélange est bien inférieure à la taille de l'écoulement fluide. De plus de nombreux phénomènes tels que la coalescence et le fractionnement de gouttes entrent en jeu dans l'évolution de la microstructure et dont l'influence ne peut être négligée. L'utilisation des variables hydrodynamiques standard dans une simulation directe pour décrire le mélange n'est alors pas possible et d'autres approches doivent être considérées.

Un des moyens pour quantifier le mélange passe par l'évaluation des taux de mélange de manière statistique. Ces taux de mélanges ont souvent été quantifiés eux-mêmes par un temps de mélange, c'est à dire le temps nécessaire pour atteindre un certain degré d'homogénéité [Rielly *et al.*, 1994]. La plupart des études ont été basées sur l'évolution de la concentration sur un faible nombre d'échantillons [K.R. Hall, 1968]. Cependant la sensibilité des résultats au nombre et à la localisation des sondes est sa principale limitation. L'utilisation des coefficients de Lyapunov est une alternative permettant de caractériser l'évolution du mélange qui a, par exemple, été utilisé dans [Loux, 2011] pour évaluer l'efficacité d'un nouveau type de mélangeur. Une autre manière de quantifier le taux de mélange peut être obtenue en considérant un seul des mécanismes du mélange : l'augmentation de l'interface matérielle due à la mécanique des fluides en l'absence de tension de surface et de diffusion moléculaire. La diffusion moléculaire entraîne un lissage du gradient de concentration le long de l'interface. Cependant ce mécanisme est important seulement lorsque l'interface augmente de façon significative. D'autre part on peut s'attendre à ce que le taux moyen de mélange soit étroitement lié au taux d'étirement mécanique de l'aire d'interface. Ce mécanisme a été largement analysé ([Ottino, 1989],[Wetzel et Tucker, 1999]). Cette approche a été revue par Mackley et Neves [Mackley et

Saraiva, 1999] en utilisant une approche numérique lagrangienne basée sur la concentration.

Les approches quantifiant le mélange en fonction de l'augmentation de l'interface ont deux inconvénients importants : (i) le premier est lié à la difficulté d'introduire d'autres mécanismes physiques, comme celui de la tension de surface, et (ii) d'autres informations liées à la microstructure (morphologie, longueur caractéristique, forme et orientation, ...) sont parfois nécessaires et ne peuvent être fournies par l'évolution de l'interface seule.

Pour cette raison, une approche microstructurale a été proposée par Doi et Ohta dans [Doi et Ohta, 1991] pour les mélanges passifs¹ de fluides incompressibles qui décrit l'évolution de l'interface (anisotropie et magnitude) à travers l'utilisation du *tenseur de surface*. Cette approche, très utilisée pour modéliser les mélanges où l'énergie d'interface est négligeable et les deux phases une viscosité quasi identique, a par la suite été légèrement modifiée par Wetzel et Tucker dans [Wetzel et Tucker, 1999] proposant la reformulation du *tenseur de surface* en *tenseur d'aire*. La principale difficulté présentée dans [Wetzel et Tucker, 1999] est l'introduction d'une relation de fermeture permettant la définition d'une équation d'évolution du tenseur d'aire de second ordre.

Dans ce chapitre nous enrichissons le tenseur d'aire par l'ajout du modèle physique initialement proposé par Lee et Park dans [Lee et Park, 1994]. Ensuite nous évaluons les erreurs relatives à l'introduction des relations de fermeture en comparant les résultats obtenus avec fermeture à ceux obtenus à l'aide de la fonction de distribution d'interface, qui est l'équivalent du tenseur d'aire dans le cadre de la théorie cinétique, et ce en écoulements homogènes et complexes. Finalement un modèle physique prenant explicitement en compte la polydispersité de la phase discrète est présenté à l'aide de simulation en écoulements homogènes et en écoulements complexes.

2 Approche microstructurale du mélange

Dans ce qui suit, nous présentons de façon formelle le tenseur d'interface, tel que défini par Doi et Ohta dans [Doi et Ohta, 1991] et où sont négligés les effets de la tension de surface. Ensuite nous présentons le tenseur d'aire ainsi que les motivations conduisant à l'évolution du tenseur de surface vers le tenseur d'aire.

Notons aussi que les approximations introduites lors de la définition du tenseur de surface et du

1. Lors de mélange passif, le champ des vitesses fluides peut être trouvé indépendamment de la morphologie et est utilisé pour faire évoluer cette dernière.

tenseur d'aire (les termes inertiels sont négligés), ceux-ci ne sont valides que pour les mélanges passifs, dont le nombre de Reynolds est faible ($Re \ll 1$) où le ratio des volumes des phases discrète et matricielle est voisin de 1.

2.1 Description de l'évolution de l'interface

Considérons Ω le domaine physique au sein duquel le problème d'écoulement est défini. Tous les points du domaine Ω sont repérés par leur vecteur \underline{x} . Le champ de vitesse macroscopique est défini par :

$$\underline{v}(\underline{x}, t) = \underline{\nabla} \underline{v}(t) \cdot \underline{x} \quad (\text{II.1})$$

où $\underline{\nabla}$ est l'opérateur différentiel gradient sur l'espace physique tel que :

$$\underline{\nabla}^T = \left(\frac{d}{dx} \quad \frac{d}{dy} \quad \frac{d}{dz} \right) \quad (\text{II.2})$$

et \underline{v} le vecteur vitesse. S'il n'y a pas de tension de surface, chaque point de Ω se déplace selon l'Eq. (II.1) tel que son vecteur position devienne :

$$\underline{x}' = \underline{E}(t) \cdot \underline{x} \quad (\text{II.3})$$

où le tenseur \underline{E} est le tenseur gradient de transformation, solution de l'équation :

$$\frac{d}{dt} \underline{E}(t) = \underline{\nabla} \underline{v} \cdot \underline{E}(t), \quad \underline{E}(0) = \underline{I} \quad (\text{II.4})$$

avec \underline{I} est la matrice identité.

Considérons à présent un volume microscopique représentatif $V(\underline{x})$ centré sur un point $\underline{x} \in \Omega$, petit par rapport à l'échelle macroscopique mais assez grand par rapport à la microstructure. Soit $S(\underline{x})$ l'interface de $V(\underline{x})$, dS un élément de surface de $S(\underline{x})$ et \underline{n} le vecteur unité normal à cet élément. Le vecteur position \underline{x} situé sur cette interface (l'origine étant au centre de l'aire) satisfait :

$$\underline{x} \cdot \underline{n} = 0 \quad (\text{II.5})$$

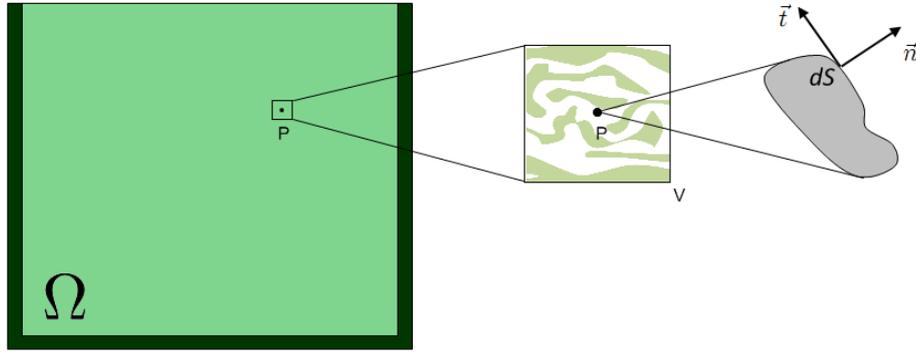


FIGURE II.1 – Domaine de définition du problème.

A partir de l'équation II.3 et de la précédente, la nouvelle interface est caractérisée par

$$(\underline{\underline{E}}^{-1} \cdot \underline{t}') \cdot \underline{n} = 0 \quad \text{ou} \quad \underline{t}' \cdot ((\underline{\underline{E}}^T)^{-1} \cdot \underline{n}) = 0 \quad (\text{II.6})$$

d'où l'évolution du vecteur normal s'écrit

$$\underline{n}' = \frac{(\underline{\underline{E}}^T)^{-1} \cdot \underline{n}}{|(\underline{\underline{E}}^T)^{-1} \cdot \underline{n}|} \quad (\text{II.7})$$

et l'inverse de cette équation

$$\underline{n} = \frac{(\underline{\underline{E}}^T) \cdot \underline{n}'}{|(\underline{\underline{E}}^T) \cdot \underline{n}'|} \quad (\text{II.8})$$

Pour tout intervalle de temps suffisamment petit, le tenseur de déformation est donné par

$$\underline{\underline{E}} = \underline{\underline{I}} + \underline{\nabla} \underline{v} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad (\text{II.9})$$

d'où l'équation II.7 devient

$$\frac{d\underline{n}}{dt} = -(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{n} + (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \underline{n} \quad (\text{II.10})$$

où le symbole \otimes dénote le produit tensoriel et $:$ le produit tensoriel doublement contracté.

Nous pouvons aussi définir l'évolution temporelle de dS tel que :

$$\frac{dS}{dt} = -(\nabla \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) dS \quad (\text{II.11})$$

Dans le cas de mélange de fluides immiscibles, le *tenseur d'interface* $\underline{q}(\underline{x}, t)$ permet d'écrire la contribution de la tension d'interface au tenseur des extra contraintes fluides $\underline{\sigma}_{ext}$ telle que :

$$\underline{\sigma}_{ext} = -\Gamma \underline{q} \quad (\text{II.12})$$

avec

$$\underline{q} = \frac{1}{V} \int_{S(\underline{x})} \left(\underline{n} \underline{n} - \frac{1}{3} \underline{I} \right) dS \quad (\text{II.13})$$

où \underline{I} est la matrice identité et $S(\underline{x})$ l'interface située en $V(\underline{x})$.

La microstructure du mélange est décrite par ce tenseur d'interface, représentant l'anisotropie du mélange ainsi que par la variable Q , l'aire d'interface par unité de volume.

2.2 Définition du tenseur d'aire

2.2.a Définition

Wetzel et Tucker ont proposé dans [Wetzel et Tucker, 1999] de réécrire le modèle de Doi-Ohta en utilisant le formalisme du *tenseur d'aire* qui consiste à regrouper dans un même tenseur les informations d'anisotropie (\underline{q}) et d'aire par unité de volume (Q). Ainsi le tenseur d'aire et d'interface sont directement liés puisque la partie déviatorique et sphérique du tenseur d'aire correspondent respectivement à \underline{q} et $\frac{Q}{3} \underline{I}$.

Soit \underline{A} le tenseur d'aire,

$$Tr(\underline{A}) = A_{ii} = Q \quad (\text{II.14})$$

$$\underline{A} = \underline{q} + \frac{1}{3} Q \underline{I} \quad (\text{II.15})$$

Notons que dans le cadre du tenseur d'aire, Q est remplacé par S_V et appelé aire spécifique bien que les deux formulations soient équivalentes. Dans ce qui suit, nous allons maintenir la notation

S_V pour la quantité d'interface par unité de volume ou aire spécifique.

Le tenseur d'aire contient à la fois les informations du tenseur d'interface et d'aire spécifique ce qui s'avère très pratique d'un point de vue morphologique. $\underline{\underline{A}}$ est défini par

$$\underline{\underline{A}} \equiv \frac{1}{V} \int_S \underline{n} \otimes \underline{n} dS \quad (\text{II.16})$$

A partir de maintenant, afin de simplifier les notations, nous omettons la dépendance des variables par rapport au temps et à l'espace tel que :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}(\underline{x}, t) &\rightarrow \underline{\underline{A}} \\ S(\underline{x}, t) &\rightarrow S \\ V(\underline{x}, t) &\rightarrow V \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

En introduisant les équations II.10 et II.11 dans la précédente, l'équation d'évolution de $\underline{\underline{A}}$ devient

$$\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} = -(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{\underline{A}} - \underline{\underline{A}} \underline{\nabla} \underline{v} + \underline{\nabla} \underline{v} : \underline{\underline{A}} \quad (\text{II.18})$$

où $\underline{\underline{\underline{A}}} \equiv \frac{1}{V} \int_S \underline{n} \otimes \underline{n} \otimes \underline{n} \otimes \underline{n} dS$ est le tenseur d'aire d'ordre quatre.

2.2.b Propriétés

Le tenseur d'aire $\underline{\underline{A}}$ précédemment défini est symétrique et présente d'intéressantes propriétés :

1. La trace (somme des composantes de la diagonale), ou encore le premier invariant, de $\underline{\underline{A}}$ correspond à l'aire d'interface par unité de volume. En effet en tenant compte de la normalité de \underline{n} , il vient

$$\begin{aligned} Tr(\underline{\underline{A}}) &= \frac{1}{V} \int_S (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) dS \\ &= \frac{1}{V} \int_S dS = \frac{S}{V} = S_V \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

Ainsi la trace du tenseur d'aire donne la surface spécifique dont la maximisation est recherchée lors du processus de mélange.

2. Si la fraction volumique de la phase dispersée est définie par ϕ , supposée uniformément dis-

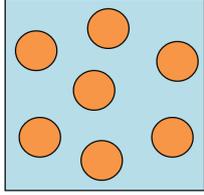
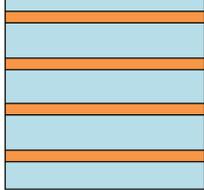
Géométrie		Expression du tenseur d'aire
Cylindrique		$\underline{\underline{A}} = S_V \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$
Lamellaire		$\underline{\underline{A}} = S_V \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$

TABLE II.1 – Exemples pédagogiques des caractéristiques des morphologies spéciales.

tribuée dans Ω , alors nous pouvons définir une longueur caractéristique $L(\underline{x}, t)$ de la microstructure au point \underline{x} et au temps t à partir du volume de la phase discrète $V_d(\underline{x}) = \phi \cdot V(\underline{x})$:

$$L(\underline{x}, t) = \frac{V_d(\underline{x})}{S(\underline{x}, t)} = \frac{\phi \cdot V(\underline{x})}{S(\underline{x}, t)} = \frac{\phi}{S_V(\underline{x}, t)} = \frac{\phi}{Tr(\underline{\underline{A}}(\underline{x}, t))} \quad (\text{II.20})$$

3. Lors de mélange passif, le taux de déformation varie linéairement à l'échelle de $V(\underline{x})$, tel qu'un domaine discret initialement sphérique se déformera en une ellipsoïde pour tout taux de déformation. Cet ellipsoïde caractéristique permet la représentation et l'interprétation du tenseur d'aire. La forme et l'orientation peuvent aisément être déduites du tenseur normalisé $\underline{\underline{A}}^*$ défini par :

$$\underline{\underline{A}}^* = \frac{\underline{\underline{A}}}{Tr(\underline{\underline{A}})} \quad (\text{II.21})$$

où les valeurs propres correspondent à la longueur des semi-axes dont l'orientation est donnée par les vecteurs propres associés. Voir [Wetzel et Tucker, 1999] pour plus de détails concernant la relation entre le tenseur d'aire et la représentation ellipsoïdale.

Le tenseur d'aire exprime ainsi par ses éléments propres l'anisotropie du mélange. Dans les cas des morphologies spéciales (présence de la phase discrète sous forme lamellaire, cylindrique ou sphérique) le tenseur d'aire est aisément défini comme on peut le voir dans le tableau II.1 qui représente le tenseur d'aire en fonction de la microstructure dans un cas 2D.

2.3 Introduction des effets physiques : terme de relaxation

Dans ce qui précède la tension de surface a été supposée négligeable. Cependant on peut s'attendre à ce qu'en l'absence d'écoulement la microstructure évolue vers un état isotrope, c'est à dire vers une forme sphérique des gouttes de la phase discrète comme on peut le voir sur la figure II.2 qui présente les résultats expérimentaux d'un mélange 50-50 de PB et PDMS obtenus par Iza et Bousmina dans [Iza et Bousmina, 2000] : on observe sur la Fig. II.2(c) l'évolution de la phase discrète après un étirement illustré Fig. II.2(b).

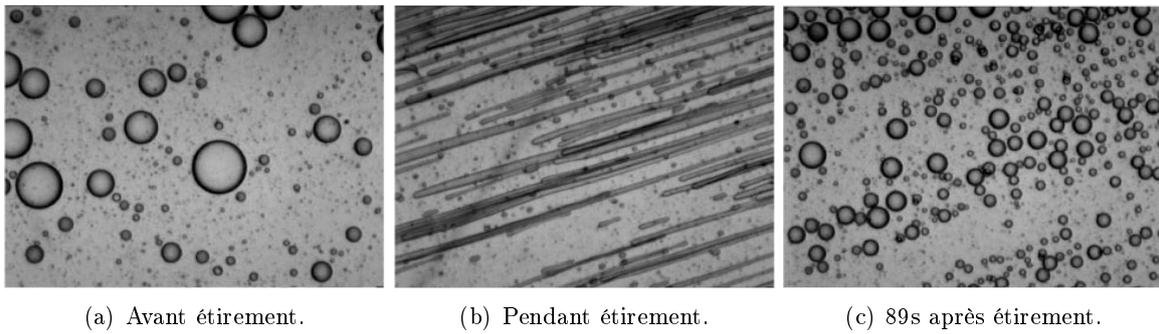


FIGURE II.2 – Évolution de la phase discrète d'un mélange 50-50 de PB-PDMS présenté dans [Iza et Bousmina, 2000].

Le modèle de Doi et Ohta est enrichi avec deux effets dus à la tension de surface sur les gouttes en l'absence d'écoulement :

1. La diminution de l'aire d'interface : la relaxation de taille.
2. L'évolution de la forme vers un état isotrope (soit $\underline{\underline{A}} - \frac{1}{3}Tr(\underline{\underline{A}}) = 0$) : la relaxation de forme.

Or, comme l'aire d'interface est représentée par S_V et le degré d'anisotropie par $\underline{\underline{q}}/S_V$, le modèle le plus simple représentant les effets de la relaxation s'écrit :

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} S_V \right|_{relaxation} = -r_1 S_V \quad (\text{II.22})$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\underline{\underline{q}}}{S_V} \right) \right|_{relaxation} = -r_2 \left(\frac{\underline{\underline{q}}}{S_V} \right) \quad (\text{II.23})$$

où r_1 et r_2 sont les taux de relaxation représentant respectivement la relaxation de taille et de forme. Ces taux sont principalement définis par la viscosité matricielle η , la tension d'interface Γ et la configuration d'interface. Or il est supposé dans [Doi et Ohta, 1991] que la configuration

d'interface est seulement caractérisée par S_V . Ainsi les taux de relaxation sont déterminés par η , Γ et S_V .

$$[\Gamma] = [N][m^{-1}] = MLT^{-2}L^{-1} = MT^{-2}$$

$$[S_V] = [S][V^{-1}] = L^{-1}$$

$$[\eta] = [Pa][s] = MLT^{-2}L^{-2}T = ML^{-1}T^{-1}$$

TABLE II.2 – Analyse dimensionnelle des termes avec M est la masse, L la longueur et T le temps

L'analyse dimensionnelle de ces termes, résumée tableau II.2, donne

$$r_1 = c_1 \frac{\Gamma S_V}{\eta} \quad (\text{II.24})$$

$$r_2 = c_2 \frac{\Gamma S_V}{\eta} \quad (\text{II.25})$$

où c_1 et c_2 sont des nombres positifs sans dimension qui dépendent de la fraction volumique Φ .

En effet

$$[r_1] = \frac{[\Gamma][S_V]}{[\eta]} = \frac{MT^{-2}L^{-1}}{ML^{-1}T^{-1}} = T^{-1}$$

$$[r_2] = \frac{[\Gamma][S_V]}{[\eta]} = \frac{MT^{-2}L^{-1}}{ML^{-1}T^{-1}} = T^{-1}$$

Le modèle physique proposé par Doi et Ohta nécessite plusieurs commentaires :

- Premièrement l'équation (II.22) suppose que la relaxation de l'aire spécifique S_V n'est caractérisée que par un seul taux de relaxation. Or deux mécanismes entrent en jeu lors de la relaxation de S_V : la relaxation de forme (l'aire spécifique d'une goutte étirée diminue alors qu'elle redevient sphérique) et la coalescence (deux gouttes coalescent afin de former une goutte de volume plus important). Et les taux de relaxation de ces procédés sont généralement différents l'un de l'autre : dans le cas de mélange dilué, le taux de relaxation de forme est bien supérieur au taux de coalescence qui peut être un temps infiniment long. Inversement dans le cas de mélange très concentré c'est le phénomène de coalescence (et donc la relaxation associée) qui est prépondérant. Doi et Ohta justifient néanmoins l'utilisation d'un seul taux de relaxation par la présence d'une seule longueur caractéristique, ce qui a été vérifié expérimentalement dans [Ohta *et al.*, 1982] et

[Gunton *et al.*, 1983] ainsi que par le choix d'utiliser la forme la plus simple.

- L'équation (II.22) prédit une aire spécifique nulle pour un temps infini ce qui correspond à l'état où les deux phases (discrète et matricielle) sont entièrement séparées et continues. Cela apparaît dans le cas où le ratio entre les deux phases est proche de 1. Dans le cas contraire où les volumes des phases est très différent, les gouttes de la phase discrète redeviennent sphériques mais ne coalescent pas toutes entre elles, et donc dans ce cas $S_V \neq 0$. Il est alors nécessaire de modifier l'équation (II.22) par

$$r_1 = c_1 \frac{\Gamma}{\eta} \left(\sum q_{\alpha\beta}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.26})$$

qui garantit que la relaxation cesse dès lors que les gouttes sont sphériques.

De nombreux auteurs ([Lee et Park, 1994], [Grmela *et al.*, 1998], [Grmela et Ait-Kadi, 1998], [Lacroix *et al.*, 1998], [Wagner *et al.*, 1999], [Gu et Grmela, 2008], [El Afif et El Omari, 2009]) ont par la suite modifié le modèle proposé par Doi et Ohta afin d'en améliorer les prédictions. Dans la suite nous nous sommes basés sur les travaux de [Lee et Park, 1994]. Ils présentent un modèle enrichi prenant en compte trois types de relaxation de gouttes (voir Fig.II.3) :

- Coalescence des gouttes Fig.II.3(a),
- Relaxation de forme Fig.II.3(b),
- Fractionnement des gouttes Fig.II.3(c).

Les prédictions de ce modèle ont été comparées dans [Lee et Park, 1994] aux résultats obtenus à partir d'un mélange diphasique expérimental de polymères immiscibles en écoulements oscillatoires. Les modules complexes et élastiques prédits à l'aide du modèle proposé ont été largement validés par les résultats expérimentaux, et cela sur une importante plage de fréquences de sollicitation.

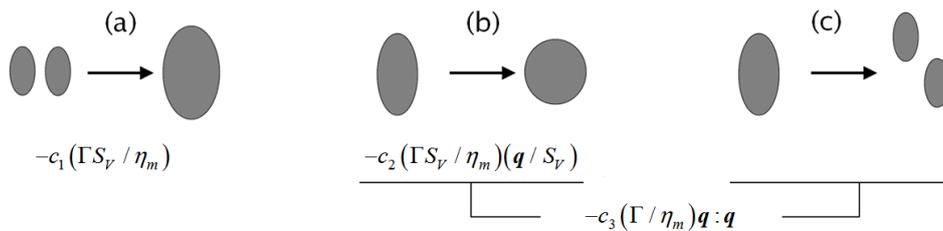


FIGURE II.3 – Effets physiques des mécanismes de relaxation.

Ce modèle enrichi diffère du modèle précédent par l'ajout d'un troisième mécanisme de fractionnement de gouttes. Les deux autres mécanismes, définissant la relaxation de forme et de taille, sont strictement identiques à ceux introduits par [Doi et Ohta, 1991]. Le nouveau mécanisme introduit s'écrit :

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} S_V \right|_{relaxation} = -c_3 \frac{\Gamma}{\eta} \underline{\underline{q}} : \underline{\underline{q}} \quad (\text{II.27})$$

Ce terme prend en compte à la fois la relaxation de forme et la relaxation due au fractionnement comme illustré sur la Fig. II.3 et dont c_3 est le paramètre adimensionnel gérant l'évolution.

Finalement les effets de la tension de surface sur l'évolution du mélange s'écrivent dans le cadre du tenseur de surface

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} S_V \right|_{relaxation} = -c_1 \frac{\Gamma S_V^2}{\eta} - c_3 \frac{\Gamma}{\eta} \underline{\underline{q}} : \underline{\underline{q}} \quad (\text{II.28})$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\underline{\underline{q}}}{S_V} \right) \right|_{relaxation} = -c_2 \frac{\Gamma}{\eta} \underline{\underline{q}} \quad (\text{II.29})$$

où c_1 et c_2 sont les nombres adimensionnels utilisés précédemment. Le terme c_1 est lié à la coalescence des gouttes qui se produit dans un système concentré, c_2 décrit la relaxation de forme et c_3 contient des informations concernant à la fois la relaxation de forme et le fractionnement des gouttes. Afin de réécrire le modèle dans le cadre du tenseur d'aire, on définit les nouveaux paramètres

$$\begin{aligned} \lambda &= c_1 + c_2 \\ \mu &= \frac{c_1}{c_1 + c_2} \\ \nu &= \frac{c_3}{c_1 + c_2} \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

Lorsque ce modèle de relaxation est appliqué au tenseur d'aire, l'équation d'évolution temporelle de $\underline{\underline{A}}$ est

$$\frac{d \underline{\underline{A}}}{dt} = \left. \frac{d \underline{\underline{A}}}{dt} \right|_{convection} + \left. \frac{d \underline{\underline{A}}}{dt} \right|_{relaxation} \quad (\text{II.31})$$

où le terme de relaxation contient les contributions du modèle physique et s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \Big|_{relaxation} &= -\lambda \frac{\Gamma}{\eta} S_V \left(\underline{\underline{A}} - \frac{S_V}{3} \underline{\underline{I}} \right) - \lambda \mu \frac{\Gamma}{\eta} S_V^2 \frac{\underline{\underline{I}}}{3} \\ &\quad - \lambda \nu \frac{\Gamma}{\eta} \left(\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{A}} - \frac{S_V^2}{3} \right) \left(\frac{\underline{\underline{A}}}{S_V} - \frac{\underline{\underline{I}}}{3} + \frac{\underline{\underline{I}}}{3} \right). \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

Il vient alors l'équation d'évolution du tenseur $\underline{\underline{A}}$:

$$\begin{aligned} \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} &= -(\nabla \underline{v})^T \underline{\underline{A}} - \underline{\underline{A}} \nabla \underline{v} + \nabla \underline{v} : \underline{\underline{A}} \\ &\quad - \lambda \frac{\Gamma}{\eta} S_V \left(\underline{\underline{A}} - \frac{S_V}{3} \underline{\underline{I}} \right) - \lambda \mu \frac{\Gamma}{\eta} S_V^2 \frac{\underline{\underline{I}}}{3} \\ &\quad - \lambda \nu \frac{\Gamma}{\eta} \left(\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{A}} - \frac{S_V^2}{3} \right) \frac{\underline{\underline{A}}}{S_V} \end{aligned} \quad (\text{II.33})$$

2.4 Jeu d'équations complet : utilisation de relations de fermeture

L'équation d'évolution du tenseur de second ordre $\underline{\underline{A}}$ contient l'expression du tenseur de quatrième ordre $\underline{\underline{\underline{A}}}$, qui fait intervenir à son tour le tenseur du sixième ordre et ainsi de suite. Ainsi une relation de fermeture permettant d'exprimer $\underline{\underline{\underline{A}}}$ en fonction de $\underline{\underline{A}}$ est nécessaire pour obtenir un jeu fermé d'équations. Nous analysons dans la suite deux relations de fermeture : la fermeture quadratique et la fermeture orthotrope.

Fermeture quadratique

La *fermeture quadratique* a été proposée par [Doi et Ohta, 1991] et est la plus simple des relations de fermeture. Elle s'écrit

$$\underline{\underline{\underline{A}}} = \frac{1}{S_V} (\underline{\underline{A}} \otimes \underline{\underline{A}}) \quad (\text{II.34})$$

ou encore de façon indicielle

$$A_{ijkl} = \frac{1}{A_{ll}} A_{ij} A_{kl} \quad (\text{II.35})$$

Fermeture orthotrope

Cintra et Tucker ont développé dans [Cintra et Tucker, 1995] une relation appelée *fermeture or-*

thotrope. Dans cette fermeture, il est supposé que le tenseur d'aire du quatrième ordre est exprimé uniquement en fonction du tenseur d'aire du second ordre. En effet les fermetures peuvent dépendre d'autres quantités, (taux de déformation, etc). Cependant de telles fermetures ne sont pas appropriées lorsque l'écoulement est nul et ainsi ne sont pas utiles pour prédire l'influence de la microstructure sur les propriétés finales du matériau.

Afin de faciliter les calculs, nous travaillons dans cette section avec des tenseurs d'aires normalisés tel que

$$A^*_{ij} = \frac{A_{ij}}{A_{ii}} \quad (\text{II.36})$$

$$A^*_{ijkl} = \frac{A_{ijkl}}{A_{ii}} \quad (\text{II.37})$$

Le tenseur d'aire du second ordre est symétrique ($A^*_{ij} = A^*_{ji}$) et possède donc trois vecteurs propres et trois valeurs propres réelles associées notées $A_{(1)}$, $A_{(2)}$ et $A_{(3)}$ tel que $A_{(1)} > A_{(2)} > A_{(3)}$. Les vecteurs propres définissent les axes principaux du tenseur et ses valeurs propres sont les valeurs principales. Si le tenseur A^*_{ij} est exprimé dans le système des axes principaux, dans laquelle ses composantes sont notées \bar{A}^*_{ij} , celui-ci est diagonal :

$$\bar{A}^*_{ij} = \begin{pmatrix} \bar{A}^*_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{A}^*_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{A}^*_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & A_{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & A_{(3)} \end{pmatrix} \quad (\text{II.38})$$

et

$$A_{(1)} + A_{(2)} + A_{(3)} = 1 \quad (\text{II.39})$$

Pour être valide, la relation cherchée doit être objective, c'est à dire qu'elle doit être indifférente au choix du système de coordonnées. [Cintra et Tucker, 1995] ont montré qu'une relation basée seulement sur le tenseur du second ordre est objective si et seulement si la microstructure est orthotrope, c'est à dire qu'elle possède trois plans orthogonaux de symétrie. Pour les structures orthotropes, les axes principaux du tenseur du second ordre doivent être les axes de symétrie du tenseur du quatrième ordre. L'intérêt de cette formulation réside dans le fait que de nombreuses composantes d'un tenseur orthotrope sont nulles lorsque que le tenseur est exprimé dans base des

axes principaux. Pour exprimer les composantes, nous adoptons la notation contractée utilisée dans l'analyse structurale des matériaux composites (voir [Jones, 1975]). Le tenseur du quatrième ordre est symétrique tel que

$$A^*_{ijkl} = A^*_{kjil} = A^*_{ljki} = A^*_{ikjl} = A^*_{ilkj} \quad (\text{II.40})$$

et il peut être noté sous la forme d'une matrice 6×6 utilisant la notation contractée définie dans [Jones, 1975]. Chaque paire d'indice de A^*_{ijkl} est remplacée par un seul indice allant de 1 à 6. En notant \mathfrak{A}_{mn} les composantes de A^*_{ijkl} dans la notation contractée, alors cette contraction s'effectue en assignant

$$\mathfrak{A}_{mn} = A^*_{ijkl} \quad (\text{II.41})$$

où m et n correspondent respectivement à ij et kl comme résumé dans le tableau II.3. Il y a évidemment moins de composantes dans \mathfrak{A}_{mn} que dans A^*_{ijkl} mais les composantes manquantes sont redondantes grâce à la symétrie de A^*_{ijkl} .

Notation Contractée	Notation tensorielle
m ou n	ij ou kl
1	11
2	22
3	33
4	23 ou 32
5	31 ou 13
6	12 ou 21

TABLE II.3 – Relation entre les indices de la notation tensorielle et ceux de la notation contractée.

D'autre part le tenseur A^*_{ijkl} est symétrique tel que

$$A^*_{ijkl} = A^*_{klij} \quad (\text{II.42})$$

ce qui entraîne que la matrice des composantes contractée est symétrique

$$\mathfrak{A}_{mn} = \mathfrak{A}_{nm} \quad (\text{II.43})$$

et dans ce cadre le tenseur \mathfrak{A}_{mn} a 21 composantes indépendantes et non nulles. Soit $\bar{\mathfrak{A}}_{mn}$ les composantes contractées lorsque le tenseur du quatrième ordre est exprimé dans les axes principaux.

Dans ce cas un tenseur orthotrope, vérifiant l'équation (II.42), a la forme

$$\bar{\mathfrak{A}}_{mn} = \begin{pmatrix} \bar{\mathfrak{A}}_{11} & \bar{\mathfrak{A}}_{12} & \bar{\mathfrak{A}}_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{\mathfrak{A}}_{12} & \bar{\mathfrak{A}}_{22} & \bar{\mathfrak{A}}_{23} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{\mathfrak{A}}_{13} & \bar{\mathfrak{A}}_{23} & \bar{\mathfrak{A}}_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \bar{\mathfrak{A}}_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{\mathfrak{A}}_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \bar{\mathfrak{A}}_{66} \end{pmatrix} \quad (\text{II.44})$$

avec

$$\bar{\mathfrak{A}}_{12} = \bar{\mathfrak{A}}_{66}, \quad \bar{\mathfrak{A}}_{23} = \bar{\mathfrak{A}}_{44}, \quad \bar{\mathfrak{A}}_{13} = \bar{\mathfrak{A}}_{55} \quad (\text{II.45})$$

Réduisant à 6 le nombre de composantes non nulles de $\bar{\mathfrak{A}}_{mn}$. D'autre part la propriété de normalisation définie équation (II.37), ainsi que les équations (II.40) et (II.45), entraîne

$$\bar{\mathfrak{A}}_{11} + \bar{\mathfrak{A}}_{66} + \bar{\mathfrak{A}}_{55} = A_{(1)} \quad (\text{II.46})$$

$$\bar{\mathfrak{A}}_{66} + \bar{\mathfrak{A}}_{22} + \bar{\mathfrak{A}}_{44} = A_{(2)} \quad (\text{II.47})$$

$$\bar{\mathfrak{A}}_{55} + \bar{\mathfrak{A}}_{44} + \bar{\mathfrak{A}}_{33} = A_{(3)} \quad (\text{II.48})$$

réduisant à 3 le nombre de composantes non nulles du tenseur contracté.

Ainsi seules 3 composantes restent à exprimer en fonction des valeurs principales $A_{(1)}$ et $A_{(2)}$ soit

$$\bar{A}^*_{11} = f_1(A_{(1)}, A_{(2)}) \quad (\text{II.49})$$

$$\bar{A}^*_{22} = f_2(A_{(1)}, A_{(2)}) \quad (\text{II.50})$$

$$\bar{A}^*_{33} = f_3(A_{(1)}, A_{(2)}) \quad (\text{II.51})$$

L'implémentation précise des fonctions $f(m)$, $m = 1..3$ présentée dans [Wetzel et Tucker, 1999] est :

$$f(m) = \frac{P(A_{(1)}, A_{(2)})}{Q(A_{(1)}, A_{(2)})} \quad (\text{II.52})$$

avec

$$\begin{aligned}
 P(A_{(1)}, A_{(2)}) &= c_{m1} + c_{m2}A_{(1)} + c_{m3}A_{(2)} + c_{m4}A_{(1)}A_{(2)} + c_{m5}A_{(1)}^2 \\
 &+ c_{m6}A_{(2)}^2 + c_{m7}A_{(1)}^2A_{(2)} + c_{m8}A_{(1)}A_{(2)}^2 + c_{m9}A_{(1)}^3 + c_{m10}A_{(2)}^3 \quad (\text{II.53})
 \end{aligned}$$

$$Q(A_{(1)}, A_{(2)}) = 1 + c_{m11}A_{(1)} + c_{m12}A_{(2)} + c_{m13}A_{(1)}A_{(2)} + c_{m14}A_{(1)}^2 + c_{m15}A_{(2)}^2 \quad (\text{II.54})$$

et dont les coefficients c_m sont donnés Tableau II.4.

n	$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
1	0.1433751825	0.1433751825	0.9685744898
2	-0.6566650339	-0.5209453949	-2.5526857671
3	-0.5106016916	-0.6463213306	-2.5756669706
4	4.4349137241	2.3303190917	4.4520903005
5	3.5295952199	0.6031924921	2.2044050704
6	0.1229618909	5.1539592511	2.2485545147
7	-5.5556896198	-1.6481269200	-1.8811803355
8	-2.8284365891	-5.4494528976	-1.9023485762
9	-2.9144388828	-0.2256222796	-0.6202937932
10	0.2292109036	-3.7461520908	-0.6414620339
11	0.7257989503	0.6916858207	-1.2134964928
12	3.0941511876	3.1282643172	-1.2128608265
13	-4.7303686308	-4.7303686308	0.6004510415
14	-1.6239324646	-1.5898193351	0.2393747647
15	-3.1742364608	-3.2083495904	0.2162486576

TABLE II.4 – Coefficients pour la fermeture orthotrope apparaissant dans les équations (II.53) et (II.54).

Les relations de fermeture quadratique et orthotrope, feront par la suite l'objet d'une étude plus approfondie notamment en ce qui concerne leur efficacité en terme d'erreur introduite, et ce dans le cas d'écoulements homogènes et complexes.

2.5 Vers une modélisation microstructurale dans le cadre de la théorie cinétique

Comme nous l'avons vu l'utilisation du tenseur d'aire est sujet à l'utilisation d'une relation de fermeture. Cette relation introduit des erreurs qui ne sont pas quantifiables *a priori*. Lors de la proposition de la relation orthotrope, Wetzel et Tucker dans [Wetzel et Tucker, 1999] ont alors comparé leurs résultats avec ceux de la relation de fermeture quadratique par rapport à des résultats analytiques exacts. Plus récemment dans [Chinesta et Mackley, 2008] la relation quadratique a été

comparée à des résultats issus de la théorie cinétique et pouvant être considérés comme exacts. En effet la formulation du tenseur d'aire dans le cadre de la théorie cinétique introduit une fonction de distribution d'aire permettant de donner exactement $\underline{\underline{A}}$ et $\underline{\underline{A}}$. Nous nous proposons dans la section qui suit d'enrichir la formulation en théorie cinétique ainsi que le tenseur d'aire avec tous les termes de relaxation issus du modèle physique proposé par Lee et Park [Lee et Park, 1994] afin d'évaluer l'erreur introduite par les relations quadratique et orthotropes en écoulements homogènes et complexes.

Dans le cadre de la théorie cinétique, introduisons tout d'abord la fonction de distribution d'aire $\Psi(\underline{x}, t, \underline{n})$ qui à chaque point du domaine physique $\underline{x} \in \Omega$ et pour tout temps t associe la surface spécifique orientée dans la direction \underline{n} . Le tenseur d'aire peut être obtenu à partir de la fonction de distribution d'aire selon :

$$\underline{\underline{A}}(\underline{x}, t) = \int_{\mathcal{S}} \underline{n} \otimes \underline{n} \Psi(\underline{x}, t, \underline{n}) d\underline{n}, \quad (\text{II.55})$$

où \mathcal{S} représente la surface de la sphère unité centrée à l'origine. L'aire spécifique S_V associée est alors définie par :

$$\begin{aligned} S_V(\underline{x}, t) &= \text{Tr}(\underline{\underline{A}}(\underline{x}, t)) = \int_{\mathcal{S}} \text{Tr}(\underline{n} \otimes \underline{n}) \Psi(\underline{x}, t, \underline{n}) d\underline{n} \\ &= \int_{\mathcal{S}} \Psi(\underline{x}, t, \underline{n}) d\underline{n} \end{aligned} \quad (\text{II.56})$$

L'équation gouvernant l'évolution du tenseur d'aire comme défini dans l'équation II.55 implique la dérivée temporelle de vecteur d'orientation d'aire \underline{n} donnée par l'Eq. (II.10) ainsi que la dérivée temporelle de la fonction de distribution $\Psi(\underline{x}, t, \underline{n})$. L'expression de la dérivée temporelle de $\Psi(\underline{x}, t, \underline{n})$ devrait permettre de déduire l'Eq. (II.18) (équation d'évolution sans les effets de relaxation). En considérant le tenseur d'aire pour un seul point matériel sa dérivée s'écrit :

$$\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} = \int_{\mathcal{S}} \frac{d\underline{n}}{dt} \otimes \underline{n} \Psi d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \underline{n} \otimes \frac{d\underline{n}}{dt} \Psi d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \underline{n} \otimes \underline{n} \frac{D\Psi}{Dt} d\underline{n} \quad (\text{II.57})$$

où $\frac{D\Psi}{Dt}$ est la dérivée totale de Ψ .

En injectant l'équation (II.10) dans la première intégrale de l'équation précédente, celle-ci se réécrit :

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{S}} \frac{d\underline{n}}{dt} \otimes \underline{n} \Psi d\underline{n} &= \int_{\mathcal{S}} (-(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{n} + (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \underline{n}) \otimes \underline{n} \Psi d\underline{n} \\
&= \int_{\mathcal{S}} (-(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{n} \otimes \underline{n} + (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \underline{n} \otimes \underline{n}) \Psi d\underline{n} \\
&= -(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{\underline{A}} + (\underline{\nabla} \underline{v}) : \underline{\underline{\underline{A}}}
\end{aligned} \tag{II.58}$$

En suivant le même raisonnement, il vient pour la seconde intégrale de l'Eq. (II.57) :

$$\begin{aligned}
\int_{\mathcal{S}} \underline{n} \otimes \frac{d\underline{n}}{dt} \Psi d\underline{n} &= \int_{\mathcal{S}} \underline{n} \otimes (-(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{n} + (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \underline{n}) \Psi d\underline{n} \\
&= \int_{\mathcal{S}} (\underline{n} \otimes -(\underline{\nabla} \underline{v})^T \underline{n} + \underline{n} \otimes (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \underline{n}) \Psi d\underline{n} \\
&= -\underline{\underline{A}} \underline{\nabla} \underline{v} + \int_{\mathcal{S}} \underline{n} \otimes (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \underline{n} \Psi d\underline{n}
\end{aligned} \tag{II.59}$$

En injectant l'équation (II.18) ainsi que les deux équations précédentes dans (II.57), et après réagencement, il vient

$$\frac{D\Psi}{Dt} = -(\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \Psi \tag{II.60}$$

or

$$\frac{D\Psi}{Dt} = \frac{d\Psi}{dt} + \frac{\partial}{\partial \underline{n}} \left(\frac{d\underline{n}}{dt} \Psi \right) \tag{II.61}$$

soit finalement

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right|_{convection} = -\frac{\partial}{\partial \underline{n}} \cdot \left(\frac{d\underline{n}}{dt} \Psi \right) - (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \Psi \tag{II.62}$$

qui est relativement similaire à l'équation de Fokker-Planck habituellement utilisée pour décrire la microstructure de suspensions de particules rigides ellipsoïdales. Cependant dans ce cas, comme la fonction Ψ n'est pas sujette à une condition de normalité, il apparaît dans le membre de droite l'Eq.II.62 un terme additionnel prenant en compte l'augmentation d'aire d'interface induite par l'étirement dû au fluide. Si les Eqs. (II.62) et (II.55) sont résolues plutôt que l'équation d'évolution du tenseur d'aire (définie l'Eq. (II.18)) avec une relation de fermeture associée, le tenseur d'aire peut être calculé sans introduire une quelconque relation de fermeture dont l'impact est potentiellement non négligeable.

Introduction des effets de relaxation dans le cadre de la théorie cinétique

Comme précédemment nous considérons l'expression de la dérivée temporelle du tenseur d'aire (qui est donnée dans le cadre de la théorie cinétique par l'Eq. II.55), afin d'obtenir l'équation de $\Psi(\underline{x}, t, \underline{n})$ équivalente à l'Eq. II.33.

De la même façon que dans [Bird *et al.*, 1987], on peut combiner le modèle physique proposé avec l'équation l'Eq.II.55, permettant d'obtenir le modèle de théorie cinétique associé :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \underline{n}} \cdot \left(\frac{d\underline{n}}{dt} \Psi \right) - (\underline{\nabla} \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \Psi - \frac{\partial}{\partial \underline{n}} \left(D(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} \right) + F(\Psi) \quad (\text{II.63})$$

où le coefficient de diffusion et le terme source sont :

$$D(\Psi) = \lambda \frac{\Gamma}{\eta} \frac{1}{6} \left(S_V + \frac{\nu}{S_V} \left(\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{A}} - \frac{S_V^2}{3} \right) \right) \quad (\text{II.64})$$

et

$$F(\Psi) = -\lambda \frac{\Gamma}{\eta} \frac{1}{4\pi} \left(\mu S_V^2 + \nu \left(\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{A}} - \frac{S_V^2}{3} \right) \right) \quad (\text{II.65})$$

L'équation II.63 est une équation d'advection - diffusion qui peut être résolue à l'aide de diverses stratégies de discrétisation. Cependant il faut noter que dans le cas d'écoulements complexes cette équation est définie sur un espace de haute dimension impliquant l'espace physique et l'espace des configurations représenté par la surface de la sphère unité (dont les coordonnées sont respectivement \underline{x} et \underline{n}) ainsi que le temps. Le nombre de dimensions peut alors être égal à 6 (3 dimensions pour l'espace physique, 2 pour l'espace de configuration et un pour le schéma temporel) et il devient très délicat de résoudre l'équation du tenseur d'aire à l'aide des techniques numériques classiques (éléments finis, ...) sans disposer d'importantes ressources en temps de calcul et en espace de stockage.

3 Technique de résolution en écoulement homogène

3.1 Fonction d'orientation d'aire

3.1.a Discrétisation de la fonction d'orientation d'aire sur l'espace des configurations

Une discrétisation naturelle de ce problème défini sur la surface de la sphère unité \mathcal{S} est basée sur l'utilisation des angles polaire et azimutal sphériques (φ, θ) :

$$\underline{n} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) \cdot \sin(\theta) \\ \sin(\varphi) \cdot \sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (\text{II.66})$$

où les deux coordonnées angulaires sont définies sur : $\varphi, \theta \in [0, 2\pi[\times [0, \pi[$. Cependant des singularités apparaissent à la fin de l'intervalle de définition de θ , à cause du terme $\frac{D}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2}$ dans l'expression polaire de l'équation de Fokker-Plank. C'est pourquoi nous préférons travailler en coordonnées cartésiennes, où la surface de la sphère unité est approchée par un jeu de facettes planes triangulaires. Les coordonnées nodales des sommets de ces triangles sont données par :

$$\underline{n}_i = \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \\ w_i \end{pmatrix} \quad (\text{II.67})$$

qui satisfont

$$\sqrt{u_i^2 + v_i^2 + w_i^2} = 1 \quad (\text{II.68})$$

et où la périodicité naturelle est implicitement vérifiée. A partir de maintenant, pour alléger l'écriture, nous considérons un taux de déformation homogène (un écoulement complexe sera étudié par la suite), et de ce fait, aucune discrétisation dans l'espace physique n'est requise. L'équation de Fokker-Planck peut ainsi être réécrite de la façon suivante qui n'implique que les coordonnées d'orientation et le temps :

$$\frac{d\Psi}{dt} + E_0(\underline{n})\Psi + \underline{E}_1^T(\underline{n}) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} - D(\Psi) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{n}^2} + F(\Psi) = 0 \quad (\text{II.69})$$

où la fonction scalaire $E_0(\underline{n})$ ainsi que le champ de vectoriel $\underline{E}_1(\underline{n})$ peut être aisément déduit de l'Eq. II.63 soit :

$$\begin{aligned} E_0(\underline{n}) &= -\frac{\partial}{\partial \underline{n}} \cdot \dot{\underline{n}} - (\nabla \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n})) \\ \underline{E}_1(\underline{n}) &= \dot{\underline{n}} \end{aligned} \quad (\text{II.70})$$

Nous définissons par \mathcal{S} le domaine dans l'espace des configurations où l'Eq. II.69 est définie, c'est à dire la surface de la sphère unité. Tout d'abord, le problème est formulé dans le cadre de la méthode des éléments finis utilisant la fonction test Ψ^* :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \frac{d\Psi}{dt} d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \Psi^* E_0(\underline{n}) \Psi d\underline{n} \\ + \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \underline{E}_1^T(\underline{n}) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} d\underline{n} - \int_{\mathcal{S}} \Psi^* D(\Psi) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{n}^2} d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \Psi^* F(\Psi) d\underline{n} = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.71})$$

Le domaine de calcul Ω est partitionné en une collection d'éléments finis ne se recouvrant pas (les facettes triangulaires couvrant la surface de la sphère unité). Une interpolation linéaire de la distribution de fonction est alors construite dans chaque triangle, à partir de laquelle s'écrit :

$$\Psi^e(\underline{n}) = \sum_{i=1}^3 N_i(\underline{n}) \Psi_i^e \quad (\text{II.72})$$

et

$$\Psi^{e*}(\underline{n}) = \sum_{i=1}^3 N_i(\underline{n}) \Psi_i^{e*} \quad (\text{II.73})$$

où Ψ^e et Ψ^{e*} sont les valeurs au nœud i de Ψ et Ψ^* respectivement, et $N_i(\underline{n})$ est la fonction de forme associée qui a pour valeur 1 au nœud i et s'annule aux autres nœuds.

En intégrant l'Eq. II.71 par parties et en prenant en compte que l'espace des configurations pour \underline{n} n'est pas borné, il vient :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \frac{d\Psi}{dt} d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \Psi^* E_0(\underline{n}) \Psi d\underline{n} \\ + \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \underline{E}_1^T(\underline{n}) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \frac{\partial \Psi^*}{\partial \underline{n}} D(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} d\underline{n} + \int_{\mathcal{S}} \Psi^* F(\Psi) d\underline{n} = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.74})$$

Le caractère d'advection-diffusion de l'équation précédente nécessite une stabilisation appropriée du schéma Éléments Finis afin de s'affranchir des instabilités numériques dues au terme de convection.

La stabilisation est réalisée par une formulation SUPG classique qui modifie les fonctions de forme liées au terme d'advection $\bar{\Psi}^*$ comme décrit ci-dessous. La formulation variationnelle stabilisée s'écrit :

$$\int_S \Psi^* \frac{d\Psi}{dt} d\underline{n} + \int_S \bar{\Psi}^* E_0(\underline{n}) \Psi d\underline{n} + \int_S \bar{\Psi}^* \underline{E}_1^T(\underline{n}) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} d\underline{n} + \int_S \frac{\partial \bar{\Psi}^*}{\partial \underline{n}} D(\Psi) \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} d\underline{n} + \int_S \bar{\Psi}^* F(\Psi) d\underline{n} = 0 \quad (\text{II.75})$$

où dans chaque élément

$$\bar{\Psi}^{e^\bullet}(\underline{n}) = \sum_{i=1}^3 \bar{N}_i(\underline{n}) \Psi^{e^\bullet} \quad (\text{II.76})$$

avec

$$\bar{N}_i(\underline{n}) = N_i(\underline{n}) + \frac{\beta h}{2} \frac{\partial N_i(\underline{n})}{\partial \underline{n}} \quad (\text{II.77})$$

où h est la taille caractéristique de l'élément et β est le paramètre de décentrement donné par

$$\beta = \coth(Pe) - \frac{1}{Pe} \quad (\text{II.78})$$

où le nombre de Péclet Pe est donné par

$$Pe = \frac{\|\underline{E}_1(\underline{n})\| h}{2D} \quad (\text{II.79})$$

Afin de construire $E_0(\underline{n})$ les opérateurs différentiels doivent être projetés sur le plan tangent à la sphère unité. La projection du gradient se fait comme suit : si on considère la facette triangle définie par ses trois sommets, (u_1, v_1, w_1) , (u_2, v_2, w_2) , (u_3, v_3, w_3) les coordonnées de référence (ξ, η) peuvent être définies en utilisant une interpolation géométrique isoparamétrique :

$$\begin{aligned} u &= \sum_{i=1}^3 N_i(\xi, \eta) u_i \\ v &= \sum_{i=1}^3 N_i(\xi, \eta) v_i \\ w &= \sum_{i=1}^3 N_i(\xi, \eta) w_i \end{aligned} \quad (\text{II.80})$$

Soit \underline{e}_1 et \underline{e}_2 deux vecteurs définis dans le plan contenant le triangle, qui peuvent s'écrire :

$$\underline{e}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial \xi} \\ \frac{\partial v}{\partial \xi} \\ \frac{\partial w}{\partial \xi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^3 N_i u_i \right)}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^3 N_i v_i \right)}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^3 N_i w_i \right)}{\partial \xi} \end{pmatrix} \quad (\text{II.81})$$

$$\underline{e}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial \eta} \\ \frac{\partial v}{\partial \eta} \\ \frac{\partial w}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^3 N_i u_i \right)}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^3 N_i v_i \right)}{\partial \eta} \\ \frac{\partial \left(\sum_{i=1}^3 N_i w_i \right)}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (\text{II.82})$$

Maintenant la relation entre le gradient en coordonnées cartésiennes et celui exprimé sur le plan tangent à la sphère unité est donné par [Lipschutz, 1970] :

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi^e}{\partial u} \\ \frac{\partial \Psi^e}{\partial v} \\ \frac{\partial \Psi^e}{\partial w} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \underline{e}_1 & \underline{e}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \underline{e}_1^T \underline{e}_1 & \underline{e}_1^T \underline{e}_2 \\ \underline{e}_2^T \underline{e}_1 & \underline{e}_2^T \underline{e}_2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial \Psi^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \Psi^e}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (\text{II.83})$$

où

$$\Psi^e = \sum_{i=1}^3 N_i(\xi, \eta) \Psi_i^e \quad (\text{II.84})$$

et la matrice

$$\begin{pmatrix} \underline{e}_1^T \underline{e}_1 & \underline{e}_1^T \underline{e}_2 \\ \underline{e}_2^T \underline{e}_1 & \underline{e}_2^T \underline{e}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.85})$$

contient les éléments du tenseur métrique \underline{g} correspondant à une facette triangle donnée. Notons que les propriétés nécessaires de différentiabilité, de symétrie, de non singularité et de positivité sont satisfaites par construction dans les coordonnées cartésiennes.

3.1.b Schéma temporel

Après l'intégration et l'assemblage de la contribution des éléments, le système non linéaire suivant est obtenu :

$$\underline{\underline{M}} \frac{\partial \underline{\Psi}}{\partial t} + D(\underline{\Psi}) \underline{\underline{G}} \underline{\Psi} = \underline{\underline{F}}(\underline{\Psi}) \quad (\text{II.86})$$

où $\underline{\Psi}$ correspond au vecteur contenant les valeur nodales de la distribution de fonction.

La non linéarité vient de la dépendance des termes de diffusion et de force en fonction de la fonction de distribution elle-même sur la sphère unité. En utilisant un schéma d'Euler d'ordre 1 le système devient

$$\underline{\Psi}^{t+1} = \underline{\Psi}^t + \underline{\underline{M}}^{-1} \left(\underline{\underline{F}}(\underline{\Psi}^t) - D(\underline{\Psi}^t) \underline{\underline{G}} \underline{\Psi}^t \right) \quad (\text{II.87})$$

où la $\underline{\Psi}^t$ est la solution au temps t , supposée connue. Le système non linéaire est ainsi linéarisé en considérant la fonction de distribution d'aire calculée au pas de temps précédent.

3.2 Équation d'évolution du Tenseur d'aire

Lors de la résolution du tenseur avec l'aide d'une relation de fermeture, aucune discrétisation particulière n'est nécessaire. Le schéma temporel utilisé est un schéma explicite.

3.3 Forme adimensionnelle des équations du modèle

Afin de simplifier la manipulation du tenseur d'aire du second ordre nous supprimons la dépendance dimensionnelle de chaque terme de l'équation constitutive de $\underline{\underline{A}}$ et du modèle de théorie cinétique associé. Ainsi un paramètre de référence adimensionnel gouvernant à la fois $\underline{\underline{A}}$ et les équations hydrodynamiques pour le champ des vitesse fluides est défini dans la section suivante.

3.3.a Équation du tenseur d'aire

Les termes $\underline{\underline{A}}$ et S_V sont aisément adimensionnalisés en les divisant par une longueur caractéristique. Comme noté dans [Doi et Ohta, 1991], il n'y a pas de longueur caractéristique intrinsèque dans le problème présent, et nous définissons comme longueur caractéristique $1/S_V^{init}$ avec $S_V^{init} = S_V|_{t=0}$.

Cela peut être considéré comme une longueur de référence que le tenseur d'aire soit ou non relaxé, c'est à dire qu'il ait une trace unitaire ou non.

Le temps est, quant à lui, adimensionnalisé par le second invariant de la matrice des gradients de vitesse défini par :

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\nabla \underline{v} : \nabla \underline{v}}. \quad (\text{II.88})$$

Les autres termes apparaissant dans le modèle de Lee et Park, λ , ν , μ , sont des paramètres adimensionnels.

Finalement, nous introduisons le nombre capillaire adimensionnel Ca :

$$\text{Ca} = \frac{\eta \dot{\gamma}}{\Gamma S_V^{init}}. \quad (\text{II.89})$$

L'équation du tenseur d'aire s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} = & - (\nabla \underline{v})^T \underline{\underline{A}} - \underline{\underline{A}} \nabla \underline{v} + \nabla \underline{v} : \underline{\underline{A}} \\ & - \lambda \frac{1}{\text{Ca}} S_V \left(\underline{\underline{A}} - \frac{S_V}{3} \underline{\underline{I}} \right) - \lambda \mu \frac{1}{\text{Ca}} S_V^2 \frac{\underline{\underline{I}}}{3} \\ & - \lambda \nu \frac{1}{\text{Ca}} \left(\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{A}} - \frac{S_V^2}{3} \right) \frac{\underline{\underline{A}}}{S_V} \end{aligned} \quad (\text{II.90})$$

avec le tenseur d'aire adimensionnel $\underline{\underline{A}} \rightarrow \underline{\underline{A}}/S_V^{init}$ et le temps adimensionnel $t \rightarrow t \cdot \dot{\gamma}$.

Les termes sources et de diffusion du modèle cinétique associé s'écrivent :

$$D(\Psi) = \lambda \frac{1}{\text{Ca}} \frac{1}{6} \left(S_V + \nu \left(\underline{\underline{A}}_\Psi : \underline{\underline{A}}_\Psi - \frac{S_V^2}{3} \right) \right) \quad (\text{II.91})$$

et

$$F(\Psi) = -\lambda \frac{1}{\text{Ca}} \frac{1}{4\pi} \left(\mu S_V^2 + \frac{\nu}{S_V} \left(\underline{\underline{A}}_\Psi : \underline{\underline{A}}_\Psi - \frac{S_V^2}{3} \right) \right) \quad (\text{II.92})$$

3.3.b Équations hydrodynamiques

Soit p la pression et D le tenseur des taux de déformation écrits sous forme adimensionnelle tel que

$$p \rightarrow \frac{p}{\eta \dot{\gamma}} \quad \text{et} \quad D \rightarrow \frac{D}{\dot{\gamma}} .$$

Alors on peut écrire le tenseur de contraintes fluides adimensionnel $\underline{\sigma}$ tel que :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + 2\underline{\underline{D}} - \frac{1}{Ca} \left(\underline{\underline{A}} - \frac{I}{3} Tr(\underline{\underline{A}}) \right) \quad (\text{II.93})$$

3.4 Évaluation de l'efficacité des relations de fermeture

Dans cette section nous comparons les résultats obtenus lors de l'utilisation des relations de fermeture quadratique et orthotrope par rapport aux résultats issus de la théorie cinétique appliquée aux mélanges et qui peuvent être considérés comme exacts. On suppose que la discrétisation de l'espace des configurations (voir Section 3.1.a) de cette méthode n'engendre que peu d'erreur au regard des relations de fermeture et les équations sont adimensionnalisées en faisant intervenir le nombre capillaire Ca comme défini dans la Section 3.3. La comparaison entre les différents résultats est illustrée pour deux types d'écoulements, avec la prise en compte du modèle physique proposé par Lee et Park (voir section 2.3 et 2.5), par :

- un écoulement élongationnel bi-axial,
- et un écoulement en cisaillement simple.

respectivement définis par

$$\underline{\underline{\nabla v}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.94})$$

et

$$\underline{\underline{\nabla v}} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 \end{pmatrix} \quad (\text{II.95})$$

Pour chacun de ces écoulements nous analysons l'évolution de la surface spécifique S_V pour deux nombres capillaires différents, $Ca = 1$ et $Ca = 10$.

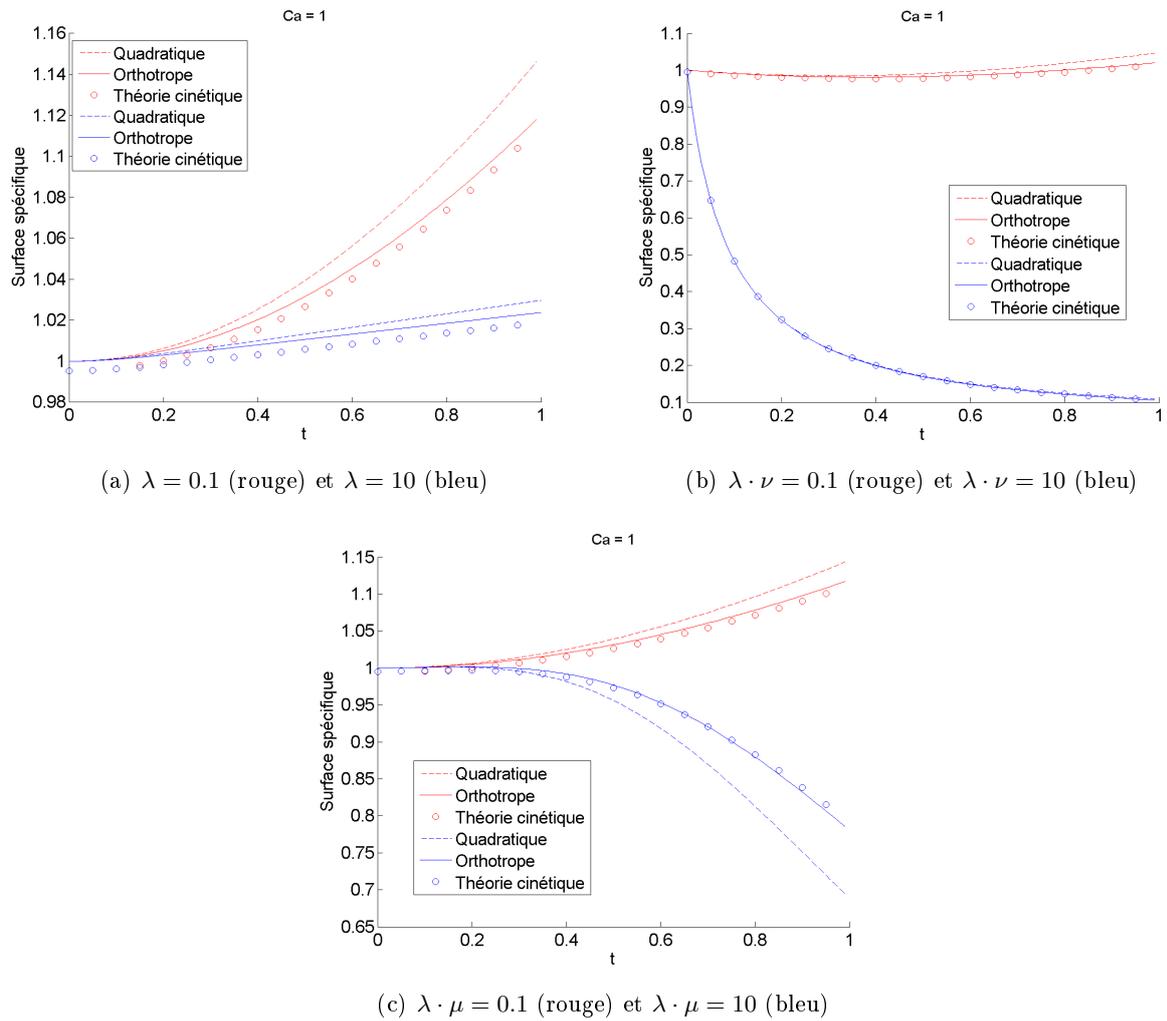


FIGURE II.4 – Évolution de la surface spécifique en cisaillement simple avec $Ca = 1$.

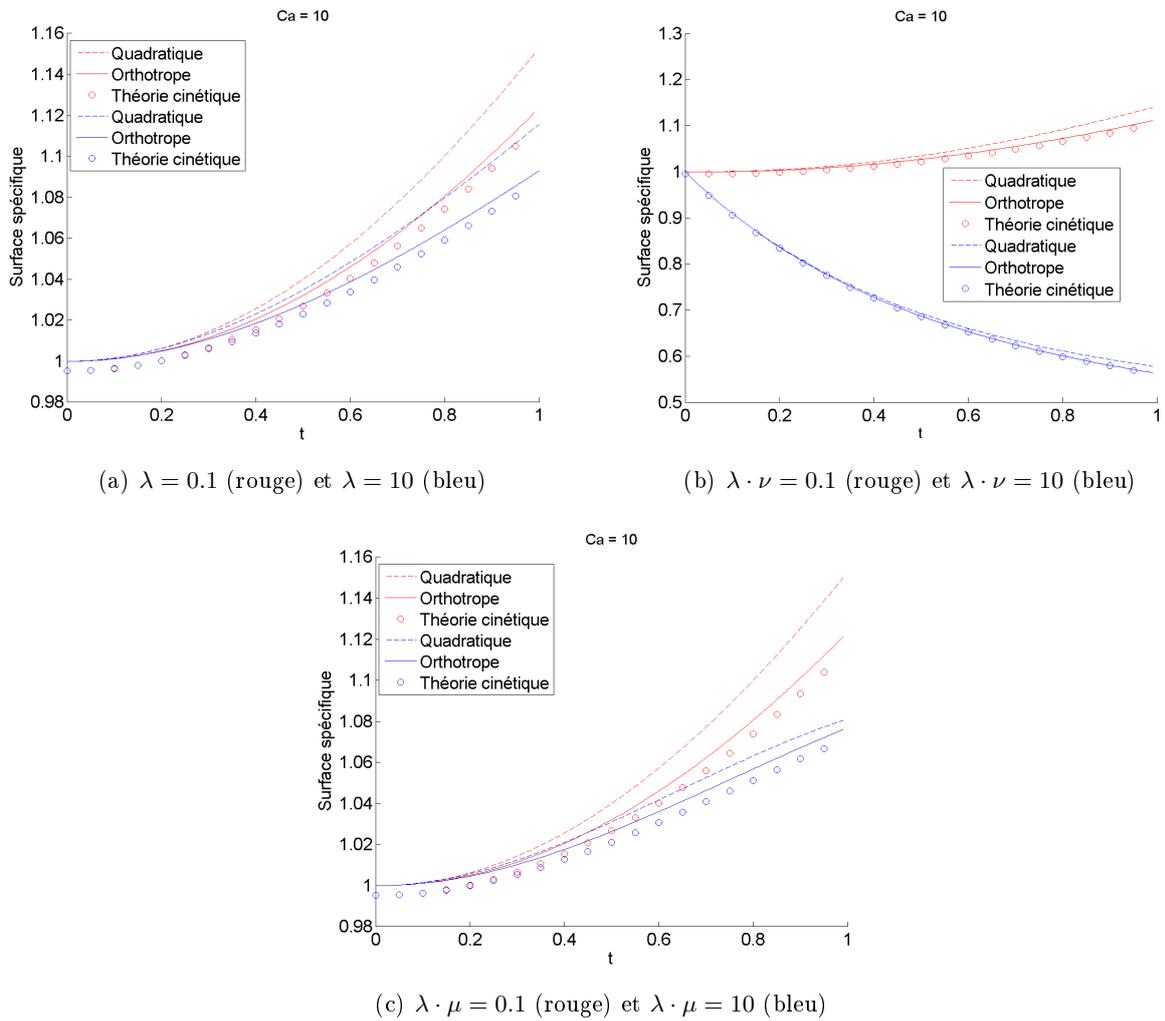
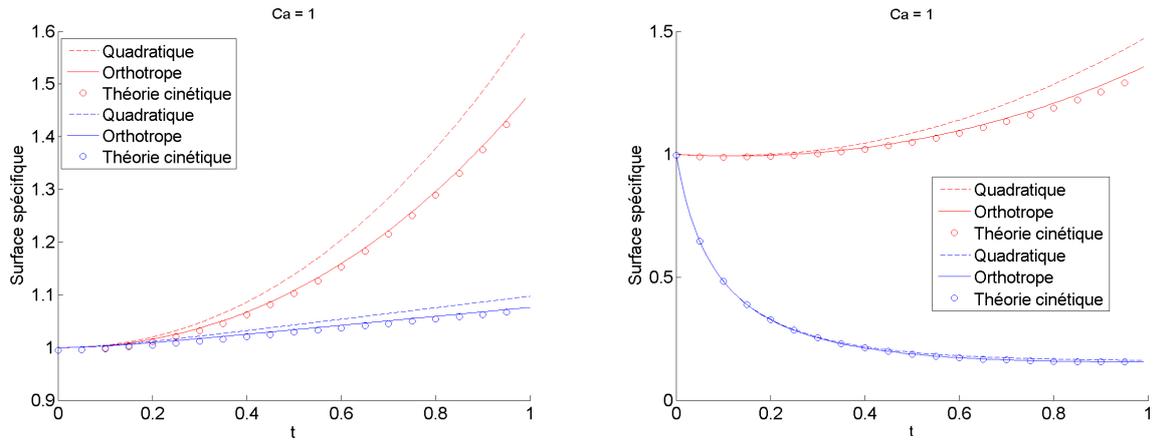
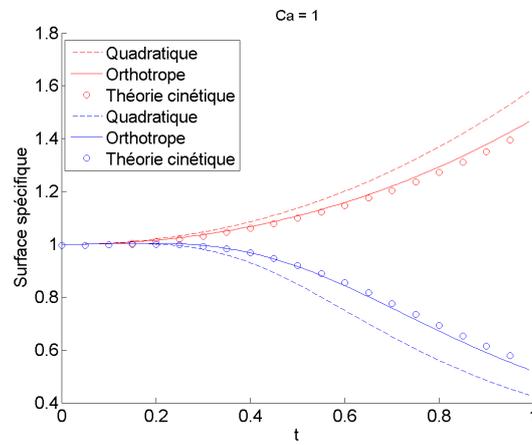


FIGURE II.5 – Évolution de la surface spécifique en cisaillement simple avec $Ca = 10$.



(a) $\lambda = 0.1$ (rouge) et $\lambda = 10$ (bleu)

(b) $\lambda \cdot \nu = 0.1$ (rouge) et $\lambda \cdot \nu = 10$ (bleu)



(c) $\lambda \cdot \mu = 0.1$ (rouge) et $\lambda \cdot \mu = 10$ (bleu)

FIGURE II.6 – Évolution de la surface spécifique en écoulement bi-élongationnel avec $Ca = 1$.

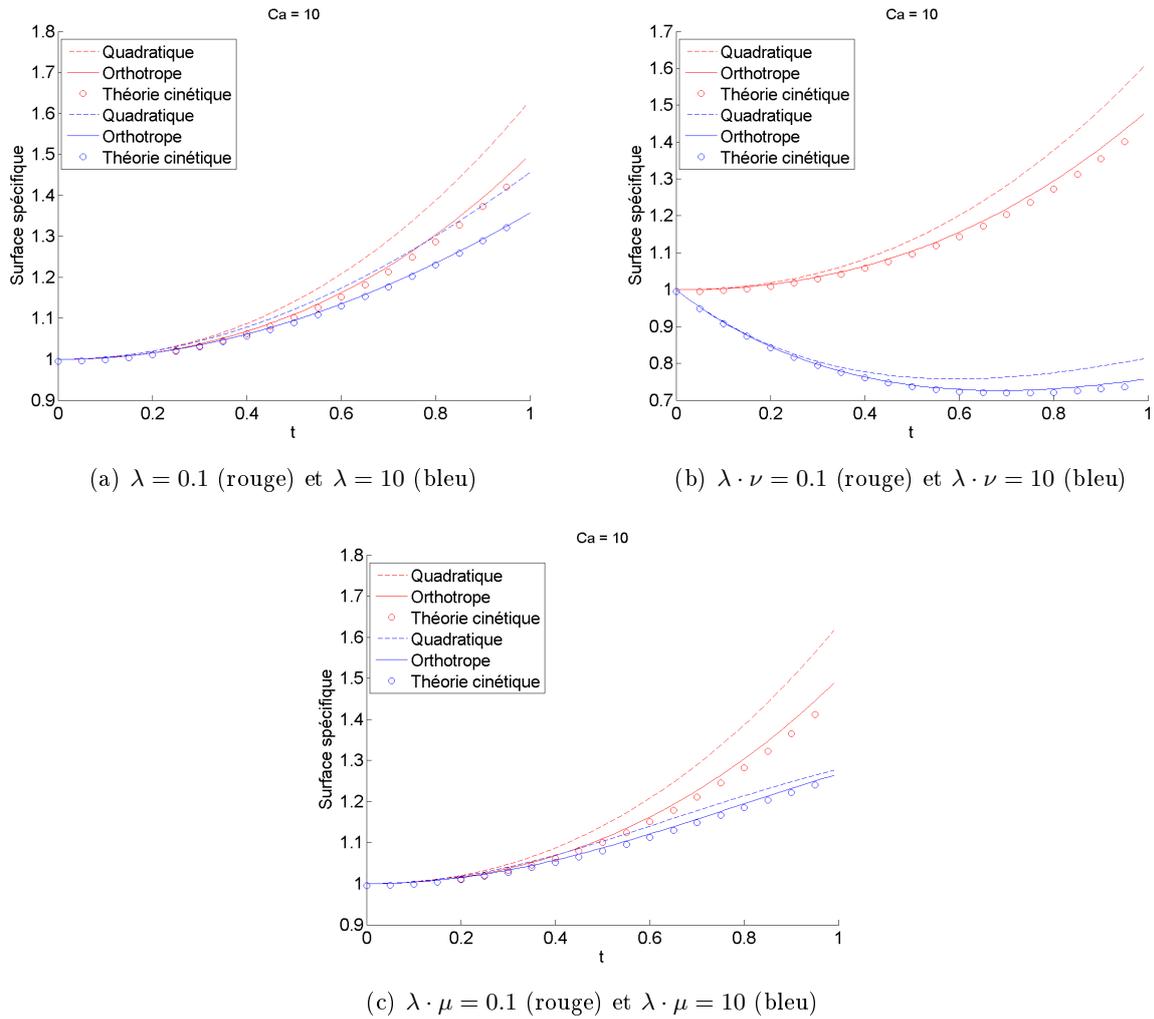


FIGURE II.7 – Évolution de la surface spécifique en écoulement bi-élongationnel avec $Ca = 10$.

Les figures II.4 et II.5 représentent l'évolution de la surface spécifique dans un écoulement de cisaillement simple respectivement pour $Ca = 1$ et $Ca = 10$. Les figures II.6 et II.7 représentent les mêmes résultats pour un écoulement bi-élongationnel. Pour chaque écoulement et valeur de Ca on présente l'influence des paramètres sur l'évolution du mélange en fonction de la méthode de calcul (relation de fermeture ou théorie cinétique). Notons que les termes du modèle physique ne dépendent pas seulement des paramètres λ , μ et ν mais respectivement de λ et des rapports $\lambda \cdot \mu$ et $\lambda \cdot \nu$. C'est pourquoi dans les figures précédentes on impose une valeur au paramètre λ et aux rapports $\lambda \cdot \mu$ et $\lambda \cdot \nu$.

D'autre part on peut noter que les mécanismes portés par les paramètres λ , μ et ν , qui sont respectivement la relaxation de forme et la coalescence (λ), la coalescence ($\lambda \cdot \mu$) et le fractionnement

et la relaxation de forme ($\lambda \cdot \nu$), ont pour effet de diminuer l'influence du cisaillement fluide sur la microstructure. En effet, lorsque $Ca = 1$, pour les deux écoulements, les rapports $\lambda \cdot \mu$ et $\lambda \cdot \nu$ entraînent une importante diminution de la surface spécifique qui est atténuée lorsque le nombre capillaire augmente ($Ca = 10$), correspondant à l'augmentation des effets du cisaillement fluide. Si l'influence de λ et $\lambda \cdot \mu$ (correspondant à la diminution de la surface spécifique) est évidente puisqu'ils ne représentent que des mécanismes augmentant l'aire d'interface, cela n'est pas le cas pour $\lambda \cdot \nu$. En effet ce dernier prend en compte deux mécanismes dont l'action sur la surface spécifique est contraire. Ainsi le mécanisme de réduction d'aire d'interface (la relaxation de forme) est prépondérant par rapport au fractionnement et à l'augmentation d'aire d'interface associée. Cela correspond alors à une forte relaxation de forme des gouttes du mélange lorsque celle-ci se fractionnement.

On peut aussi noter que le paramètre λ a une influence bien inférieure, à valeurs égales, sur l'évolution du mélange que $\lambda \cdot \mu$ et $\lambda \cdot \nu$. En effet pour les deux valeurs testées du paramètre λ , on remarque qu'il y a toujours une augmentation de la surface spécifique et ce quel que soit le nombre capillaire ou l'écoulement.

Finalement dans ces figures on peut voir l'impact des relations de fermeture : alors que la relation quadratique introduit une erreur non négligeable. Les résultats de la relation orthotrope sont, quant à eux, presque toujours superposés aux résultats issus de la théorie cinétique. Finalement, l'utilisation de la fermeture quadratique peut être motivée dans le cas d'écoulement complexe par sa simplicité d'implémentation et surtout par le gain en termes de temps de calcul.

4 Approche microstructurale en écoulement complexe

4.1 Approche micro-macro avec PGD

Nous proposons ici d'évaluer la précision des relations de fermeture quadratique et orthotrope pour un écoulement complexe en prenant en compte l'influence de la tension de surface à travers un terme de relaxation. Pour ce faire nous comparons les résultats obtenus à partir des relations de fermeture avec ceux issus de la formulation en théorie cinétique. Cette dernière est une approche micro-macro et, bien qu'ayant une formulation pouvant être considérée comme exacte, a comme inconvénient majeur d'être un problème à haute dimension. Afin de s'affranchir du problème de dimensionnalité nous utilisons la stratégie de réduction dimensionnelle Proper Generalized Decomposition (PGD)

définie Chap. I et plus précisément l'algorithme PGD PS (voir Sec. 2.2.a) pour l'approche micro-macro.

Afin de s'affranchir de la difficulté qu'entraînent la non linéarité des termes du modèle physique liés à la coalescence et au fractionnement, seul le phénomène de relaxation de forme est pris en compte dans le modèle complexe de telle sorte que l'équation d'évolution du tenseur d'aire s'écrit sous forme adimensionnelle :

$$\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} = \frac{\partial \underline{\underline{A}}}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \underline{\underline{A}} = -(\nabla \underline{v})^T \underline{\underline{A}} - \underline{\underline{A}} \nabla \underline{v} + \nabla \underline{v} : \underline{\underline{A}} - \lambda \frac{1}{Ca} S_V \left(\underline{\underline{A}} - \frac{S_V}{3} \underline{\underline{I}} \right) \quad (\text{II.96})$$

Le modèle micro-macro associé s'écrit

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \underline{v} \cdot \nabla \Psi = -E_0 \Psi - \frac{\partial}{\partial \underline{n}} (\underline{E}_1 \Psi) - \frac{\partial}{\partial \underline{n}} \left(\underline{E}_2 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} \right) \quad (\text{II.97})$$

où

$$\begin{aligned} E_0 &= \nabla \underline{v} : (\underline{n} \otimes \underline{n}) \\ \underline{E}_1 &= \frac{d\underline{n}}{dt} \\ \underline{E}_2 &= \lambda \frac{1}{6Ca} S_V \end{aligned}$$

Si le calcul de l'équation d'évolution du tenseur d'aire ne pose aucun problème par rapport aux sections précédentes, il est nécessaire de réécrire l'équation précédente sous forme séparée afin de pouvoir utiliser l'algorithme PGD.

Comme présenté dans le Chap. I, de nombreuses stratégies de séparation sont possibles :

- On peut par exemple écrire la solution comme un produit de fonctions lesquelles sont définies sur des sous-espaces de dimension 1 tel que

$$\Psi = \sum_{i=1}^n \mathbb{F}_x^i \otimes \mathbb{F}_y^i \otimes \mathbb{F}_z^i \otimes \mathbb{F}_u^i \otimes \mathbb{F}_v^i \otimes \mathbb{F}_w^i \otimes \mathbb{F}_t^i \quad (\text{II.98})$$

où l'espace temporel est repéré par t , l'espace physique par $\underline{x} = (x, y, z)^T$ et l'espace des configurations par $\underline{n} = (u, v, w)^T$.

– séparer en sous-espaces de "nature" différente tel que

$$\Psi = \sum_{i=1}^n \mathbb{F}_{\underline{x}}^i \otimes \mathbb{F}_{\underline{n}}^i \otimes \mathbb{F}_t^i \quad (\text{II.99})$$

– ou encore séparer l'espace physique de l'espace des configurations en utilisant une discrétisation temporelle classique

$$\Psi^t = \sum_{i=1}^n \mathbb{F}_{\underline{x}}^i \otimes \mathbb{F}_{\underline{n}}^i \quad (\text{II.100})$$

où Ψ^t correspond la solution Ψ au pas de temps t .

Parmi toutes les possibilités d'écriture sous forme séparée, nous choisissons une approche incrémentale en temps afin de n'effectuer une séparation à chaque pas de temps de l'Eq. (II.97) que sur les variables de l'espace physique et de l'espace des configurations, ce qui permet de linéariser aisément le coefficient $\underline{\underline{E}}_2$ en posant :

$$\underline{\underline{E}}_2^{t+1} = \lambda \frac{1}{6Ca} S_V^t = \lambda \frac{1}{6Ca} \int_S \Psi^t d\underline{n} \quad (\text{II.101})$$

avec $\underline{\underline{E}}_2^{t+1}$ le coefficient $\underline{\underline{E}}_2$ au pas de temps $t + 1$.

Concernant la séparation de l'équation (II.97) seul le coefficient E_0 est défini à la fois sur l'espace physique et l'espace des configurations. Or s'il n'est pas trivial d'écrire ce coefficient sous forme analytique séparée, la dépendance sur l'espace physique **ne se fait qu'à travers le gradient de vitesse**. Ainsi pour réécrire le coefficient E_0 sous forme séparée, nous choisissons d'exprimer sa contribution dans la base canonique du gradient de vitesse. Dans cette base ce dernier s'écrit (pour un espace physique bi-dimensionnel) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \underline{v}}{\partial \underline{x}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} & \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial v_2}{\partial x_1} & \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\partial v_1}{\partial x_2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\partial v_2}{\partial x_1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\partial v_2}{\partial x_2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{II.102})$$

Afin de réécrire sous forme séparée le coefficient $E_0(\underline{x}, \underline{n})$, on évalue numériquement sa contribution

pour chaque élément de la base. Une fois toutes les contributions déterminées, $E_0(\underline{x}, \underline{R})$ se réécrit

$$\begin{aligned} E_0(\underline{x}, \underline{R}) &= \frac{\partial v_1}{\partial x_1}(\underline{x})E_0^{11}(\underline{R}) + \frac{\partial v_1}{\partial x_2}(\underline{x})E_0^{12}(\underline{R}) + \frac{\partial v_2}{\partial x_1}(\underline{x})E_0^{21}(\underline{R}) + \frac{\partial v_2}{\partial x_2}(\underline{x})E_0^{22}(\underline{R}) \\ &= \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial v_i}{\partial x_j}(\underline{x})E_0^{ij}(\underline{R}) \end{aligned} \quad (\text{II.103})$$

Le coefficient \underline{E}_1 n'est défini que sur l'espace des configurations et \underline{E}_2 fait, quant à lui, intervenir Ψ à travers $S_V = Tr(\Psi)$ qui est déjà écrit sous forme séparée.

La forme faible associée à l'équation (II.97) s'écrit :

$$\int_{\Omega} \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \left(\frac{\delta \Psi}{\delta t} + \underline{v} \cdot \nabla \Psi \right) d\underline{x} d\underline{n} = \int_{\Omega} \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \left(-E_0 \Psi - \frac{\partial}{\partial \underline{n}} (\underline{E}_1 \Psi) - \frac{\partial}{\partial \underline{n}} \left(\underline{E}_2 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} \right) \right) d\underline{x} d\underline{n} \quad (\text{II.104})$$

L'équation précédente est linéarisée en exprimant E_1 et E_2 en fonction de Ψ obtenu à l'itération précédente. Après discrétisation du terme temporel selon le schéma d'Euler implicite, il vient :

$$\int_{\Omega} \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \left(1 + \Delta t \left(\underline{v} \cdot \nabla + E_0 + \underline{E}_1 \frac{\partial \Psi}{\partial \underline{n}} - \underline{E}_2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \underline{n}^2} \right) \right) \Psi^{t+1} d\underline{x} d\underline{n} = \int_{\Omega} \int_{\mathcal{S}} \Psi^* \Psi^t d\underline{x} d\underline{n} \quad (\text{II.105})$$

où Δt est le pas de temps et Ψ^{t+1} la solution à l'itération suivante.

Cette équation est discrétisée en utilisant une approximation par éléments finis sur chaque espace. Pour ce faire on introduit les vecteurs \mathbf{N} et \mathbf{M} qui contiennent les fonctions de forme associées respectivement à l'espace de coordonnées \underline{x} et \underline{n} .

Remarque :

La dérivée matérielle sur l'espace physique fait intervenir un terme de convection nécessitant une stabilisation afin d'éviter que des perturbations apparaissent dans le résultat. Cette stabilisation est effectuée en utilisant un schéma SUPG. Sur l'espace des configurations le terme de convection est en pratique plus faible que le terme de diffusion et ne nécessite pas une telle stabilisation.

La forme discrète nécessite l'introduction des matrices suivantes :

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^1 &= \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\mathbf{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^1 &= \int_S \mathbf{M} \mathbf{M}^T d\mathbf{n} \\
\underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^2 &= \Delta t \int_{\Omega} \mathbf{N} v \frac{d\mathbf{N}^T}{d\mathbf{x}} d\mathbf{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^2 &= \int_S \mathbf{M} \mathbf{M}^T d\mathbf{n} \\
\underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^3 &= \Delta t \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\mathbf{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^3 &= \int_S \mathbf{M} \underline{\underline{E}}_1 \frac{d\mathbf{M}^T}{d\mathbf{n}} d\mathbf{n} \\
\underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^4 &= \Delta t \int_{\Omega} \mathbf{N} \Psi_x^t \mathbf{N}^T d\mathbf{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^4 &= \int_S \frac{d\mathbf{M}}{d\mathbf{n}} \left(\lambda \frac{1}{6Ca} \int_S \Psi_n^t d\mathbf{n} \right) \frac{d\mathbf{M}^T}{d\mathbf{n}} d\mathbf{n} \\
\underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^{3(i-1)+j+4} &= \Delta t \int_{\Omega} \mathbf{N} \frac{dv_i}{dx_j} \mathbf{N}^T d\mathbf{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^{3(i-1)+j+4} &= \int_S \mathbf{M} \underline{\underline{E}}_0^{ij} \mathbf{M}^T d\mathbf{n}
\end{aligned}$$

et

$$\mathbb{B}_1^1 = \int_{\Omega} \mathbf{N} \Psi_x^t d\mathbf{x} \qquad \mathbb{B}_2^1 = \int_S \mathbf{M} \Psi_n^t d\mathbf{n}$$

avec $i, j = 1..3$ et Ψ_x^t, Ψ_n^t les décompositions de la fonction Ψ au temps t respectivement sur l'espace physique et l'espace des configurations.

Ainsi la forme discrète s'écrit :

$$\mathcal{A} \Psi = \mathcal{B} \tag{II.106}$$

avec

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^{13} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_1^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_2^i \tag{II.107}$$

et

$$\mathcal{B} = \mathbb{B}_1^1 \otimes \mathbb{B}_2^1 \tag{II.108}$$

4.1.a Validation du modèle Micro-Macro

Nous nous intéressons tout d'abord aux résultats de la PGD pour des écoulements simples puisque dans ce cas l'espace physique se réduit à un point et le problème est de dimension 3 (1 pour le temps et 2 pour l'espace des configurations) ce qui peut être aisément traité par la méthode des éléments

finis. Dans ce cas l'opérateur défini dans (II.107) devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} = & 1 \otimes \int_S \mathbf{M} \mathbf{M}^T d\underline{n} + 1 \otimes \Delta t \int_S \mathbf{M} \underline{E}_1 \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{n}} d\underline{n} \\ & + 1 \otimes \Delta t \int_S \frac{d\mathbf{M}}{d\underline{n}} \left(\lambda \frac{1}{6Ca} \int_S \Psi_n^t d\underline{n} \right) \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{n}} d\underline{n} + \Delta t \sum_{i=1}^9 \sum_{j=1}^9 \frac{dv_i}{dx_j} \otimes \int_S \mathbf{M} E_0^{ij} \mathbf{M}^T d\underline{n} \end{aligned} \quad (\text{II.109})$$

Et le second membre :

$$\mathcal{B} = 1 \otimes \int_S \mathbf{M} \Psi_n^t d\underline{n}. \quad (\text{II.110})$$

Nous comparons pour chaque méthode l'évolution au cours du temps de la surface spécifique S_V (trace du tenseur $\underline{\underline{A}}$) pour un cisaillement simple et une élongation bi-axiale. Initialement la phase discrète du mélange est sous forme de gouttes sphériques ce qui signifie que le tenseur d'aire s'écrit :

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad (\text{II.111})$$

Le gradient de cisaillement est défini pour l'écoulement de cisaillement par

$$\underline{\nabla} \underline{v} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.112})$$

et pour l'élongation bi-axiale

$$\underline{\nabla} \underline{v} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{II.113})$$

L'espace des configurations, représenté par la sphère unité, est discrétisé à l'aide plus de 5000 éléments triangles à trois nœuds pour un total de près de 2500 nœuds. Pour les deux méthodes le schéma temporel est identique (schéma d'Euler implicite).

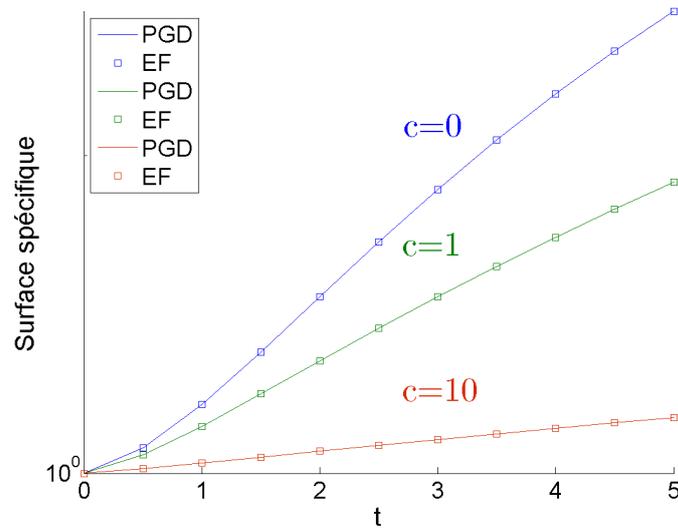


FIGURE II.8 – Comparaison de l'évolution de la surface spécifique S_V en fonction du temps et de trois valeurs du paramètre $c = \frac{\lambda}{Ca}$, pour un écoulement de cisaillement simple.

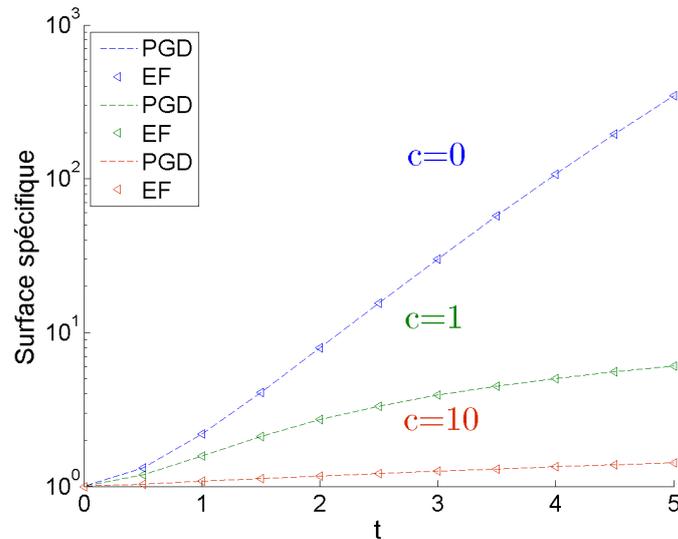


FIGURE II.9 – Comparaison de l'évolution de la surface spécifique S_V en fonction du temps et de trois valeurs du paramètre $c = \frac{\lambda}{Ca}$, pour un écoulement d'élongation bi-axiale.

On trace sur les figures II.8 et II.9 l'évolution de la surface spécifique au cours du temps pour trois paramètres de relaxation différents. Les résultats sont identiques entre les deux méthodes de calcul. La méthode PGD est une méthode itérative dont la précision dépend du nombre de fonctions de base (définies par \mathbb{F}_x^i et \mathbb{G}_n^i dans la section précédente). Pour les écoulements simples, la conver-

gence de la méthode est très forte et est atteinte avec l'ajout d'un seul produit de fonctions à chaque itération. D'autre part, le terme de relaxation introduit dans le modèle influence l'évolution de S_V comme on pouvait s'y attendre : plus le paramètre $c = \frac{\lambda}{Ca}$ est important et plus l'évolution de la surface spécifique est affectée et sa croissance faible.

Remarque :

Dans le cas où c est faible une stabilisation sur l'espace des configurations du type SUPG a été ajoutée afin de prévenir toute oscillation de la solution.

4.1.b Modèle micro-macro en écoulement complexe

Dans la section précédente nous avons montré que les résultats issus de la PGD pour des écoulements simples étaient en tout point comparables avec ceux issus de la méthode EF. Or dans ce cadre, nous n'introduisons pas de relation de fermeture et pouvons ainsi considérer les résultats comme exacts. C'est pourquoi nous prenons les résultats PGD en écoulement complexe comme référence par rapport aux relations de fermetures quadratique et orthotrope.

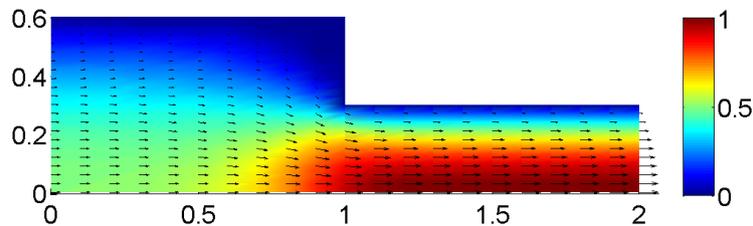


FIGURE II.10 – Champ de vitesse fluide pour l'écoulement complexe. Noter que seule une moitié de la contraction est représentée : le bord inférieur est un axe de symétrie.

L'écoulement est une contraction 2 :1 telle que présentée dans la Fig. II.10, de largeur maximum 2 et de hauteur maximum 0,6, et dont le bord inférieur représente un axe de symétrie. On impose en entrée $x = 0$ un écoulement de Poiseuille défini par

$$\underline{v} = \begin{pmatrix} 0.5 \left(1 - \frac{y^2}{y_{max}^2} \right) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.114})$$

Les fluides sont incompressibles, newtoniens, de même densité, equi-visqueux et immiscibles. Les contraintes induites par le mélange ne sont pas prises en compte ce qui signifie que le champ de vitesse reste identique tout au long de la simulation et son état stationnaire est obtenu par résolution de l'équation de Navier-Stokes. De plus on résout l'équation (II.96) avec les relations de fermeture ainsi que le système tel que définit dans (II.106) pour la résolution PGD. Celles-ci prennent en compte l'effet de la tension de surface à travers le terme de relaxation de forme où $c = 3$.

Deux conditions aux limites sont imposées : la microstructure est imposée sphérique en entrée et sur le bord supérieur, c'est-à-dire que le tenseur d'aire s'écrit sous la forme donnée par l'équation (II.111). Ces conditions correspondent à un fluide qui n'a subi aucun mélange avant d'entrer dans la contraction et dont la phase discrète est présente sous forme parfaitement sphérique au contact de la paroi. On simule l'évolution du mélange pour les trois méthodes jusqu'à atteindre l'état stationnaire.

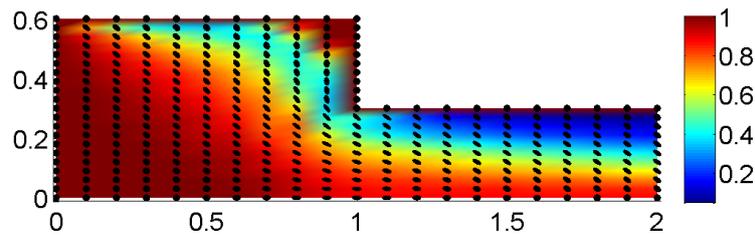


FIGURE II.11 – Résultats obtenus avec la relation de fermeture quadratique. L'orientation de la microstructure est donnée par les ellipsoïdes et les isocouleurs représentent $1/S_V$.

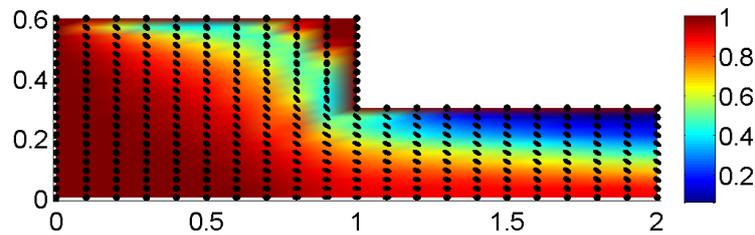


FIGURE II.12 – Résultats obtenus avec la relation de fermeture orthotrope.

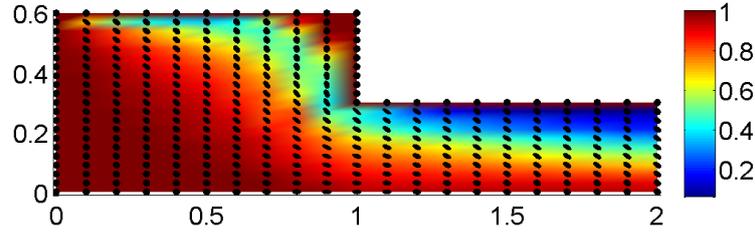


FIGURE II.13 – Résultats obtenus sans relation de fermeture (théorie cinétique).

Nous choisissons de représenter dans les figures II.11-II.13 l'orientation de la microstructure du mélange à l'aide d'ellipsoïdes dont les semi-axes sont les valeurs propres et dont les axes principaux sont les vecteurs propres (section 2.2.b). Par définition le tenseur d'aire est porté par la normale \underline{n} à l'interface dS (Eq. II.16). Or il est plus judicieux de représenter son orientation en fonction de la tangente \underline{t} de cette interface (vecteurs \underline{n} et \underline{t} illustrés Fig. II.1 en début de ce chapitre Sec. 2.1) et donc d'effectuer une rotation au tenseur d'aire. Ainsi, soit $\underline{\underline{C}}$ le tenseur d'aire du second ordre orienté selon \underline{t} :

$$\underline{\underline{C}} = \frac{1}{V} \int_S \underline{t} \otimes \underline{t} dS = \frac{1}{V} \int_S \underline{\underline{R}} \underline{n} \otimes \underline{\underline{R}} \underline{n} dS = \underline{\underline{R}} \underline{\underline{A}} \underline{\underline{R}}^T \quad (\text{II.115})$$

où $\underline{\underline{R}}$ est la matrice rotation telle que

$$\underline{\underline{R}}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \quad (\text{II.116})$$

Il est évident que cette représentation n'est possible qu'en 2D car la tangente n'est pas unique dans le cas 3D. Cette représentation correspond à celle choisie dans [Wetzel et Tucker, 1999] mais avec une rotation de $\pi/2$. Le mélange est quantifié en fonction de la surface spécifique et plus exactement du rapport $1/S_V$.

Afin de pouvoir comparer les résultats obtenus entre les différentes simulations, nous résumons Tab. II.5 la surface spécifique totale dans la géométrie, ainsi que les maxima atteints.

	Quadratique	Orthotrope	Théorie cinétique
S_V Totale	1.73	1.55	1.58
S_V Minimale	1	1	1
S_V Maximale	20.06	15.75	18.30

TABLE II.5 – Comparaison des résultats issus en écoulement complexe en fonction de la méthode de résolution.

Les figures II.11-II.13 présentent les résultats obtenus en état stationnaire pour les trois simulations différentes. Ces résultats obtenus sont relativement proches. En effet la surface spécifique totale, qui correspond à l'intégration de la surface spécifique sur toute la géométrie (voir Tab. II.5), est du même ordre. Cependant l'erreur relative de la relation orthotrope est bien inférieure à celle de la relation quadratique, puisqu'elle est de l'ordre de 2% contre 9% respectivement pour la relation orthotrope et la relation quadratique. Cela est tout à fait en accord avec les résultats de [Wetzel et Tucker, 1999]-[Maîtrejean *et al.*, 2010] où est mise en avant la plus grande précision de la fermeture proposée par Wetzel et Tucker (la fermeture orthotrope).

D'un point de vue numérique, les simulations avec relation de fermeture correspondent à un problème défini par près de 1000 degrés de liberté, alors que la définition dans le cadre de la théorie cinétique entraîne 2500 fois plus d'inconnues : à chaque point de l'espace physique est associé un espace de configuration. Or l'utilisation de la PGD permet de s'affranchir des difficultés qu'aurait engendrée la résolution EF d'un tel problème. En effet la résolution d'un problème de plus de 2500000 degrés de liberté dans le cadre de méthodes numériques classiques nécessite le stockage et l'inversion d'une matrice composées de 2500000×2500000 termes ce qui pose d'importants problèmes de mémoire et de temps de calcul (et cela même lors de l'utilisation de matrices creuse et de résolutions itératives). Il a ainsi été possible de résoudre le problème couplé micro-macro sur un PC équipé d'un processeur Intel Core i7 en deux heures dans le cadre de la méthode PGD.

Les simulations avec relations de fermeture restent néanmoins bien plus efficaces en termes de temps de calcul (mais au détriment d'une perte de précision) puisque ces temps ne dépassent pas quelques minutes. Dans les cas où une grande précision n'est pas requise, l'erreur introduite par les relations de fermeture peut être acceptable. Ainsi la fermeture quadratique, qui est 5 fois plus rapide que la fermeture orthotrope, a une utilisation tout à fait justifiée dans le cadre d'écoulements complexes

[Maîtrejean *et al.*, 2010].

4.2 Exemple de mélange complexe avec relation de fermeture et modèle physique complet

Dans cette section nous présentons l'utilisation du tenseur d'aire avec la relation de fermeture quadratique en écoulement complexe. Le modèle physique complet est pris en compte ainsi que l'influence de la présence du mélange sur l'évolution du champ des vitesses fluides. Le problème est instationnaire et, comme le nombre de Reynolds est faible, la conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad (\text{II.117})$$

où

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{\underline{I}} + 2\eta \underline{\underline{D}} - \underline{\underline{\tau}}$$

avec $\underline{\underline{\sigma}}$ le tenseur des contraintes fluides, p la pression, $\underline{\underline{I}}$ la matrice identité, $\underline{\underline{D}}$ le tenseur des taux de déformation et $\underline{\underline{\tau}}$ le tenseur des extra-contraintes fluides correspondant à l'action du mélange sur le fluide. $\underline{\underline{\tau}}$ est défini par :

$$\underline{\underline{\tau}} = \frac{1}{Ca} (\underline{\underline{A}} - \frac{1}{3} Tr(\underline{\underline{A}})) \quad (\text{II.118})$$

et Ca paramètre adimensionnel (voir Section 3.3.a). Les fluides sont considérés incompressibles, d'où l'équation de conservation de la masse :

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{v}} = 0 \quad (\text{II.119})$$

avec $\underline{\underline{v}}$ la vitesse fluide.

Finalement la dérivée matérielle du tenseur $\underline{\underline{A}}$ s'écrit :

$$\frac{d \underline{\underline{A}}}{dt} = \frac{\partial \underline{\underline{A}}}{\partial t} + \underline{\underline{v}} \cdot \underline{\nabla} \underline{\underline{A}} \quad (\text{II.120})$$

ou $\frac{d \underline{\underline{A}}}{dt}$ est donné par l'équation II.33.

Le champ des vitesses fluides initial est représenté Fig. II.14.

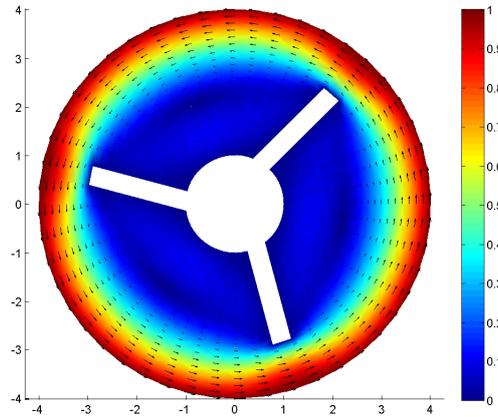


FIGURE II.14 – Champ des vitesses fluides initial.

La qualité du mélange est représentée par $\alpha = \frac{1}{S_V}$. Nous choisissons de définir initialement l'aire spécifique comme unitaire (et ainsi $\alpha = 1$) et de considérer la microstructure initiale comme sphérique (soit sous forme de disque en 2D), c'est à dire avec un tenseur d'aire initial diagonal tel que :

$$\underline{\underline{A}}|_{t=0} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad (\text{II.121})$$

Dans cette section le calcul du tenseur d'aire est réalisé à l'aire de l'équation (II.33) utilisant la relation de fermeture quadratique. L'approche micro-macro présentée prend en compte la contribution du mélange sur l'évolution de champ cinématique fluide à travers le terme des contraintes fluides. L'algorithme de résolution est donné Alg .9

```

Initialisation  $\underline{\underline{A}}$ 
pour  $t = 1$  à nombre d'itérations faire
    |  $\underline{v}^{t+1} \leftarrow$  calcul macro ( $\underline{\underline{A}}^t$ )
    |  $\underline{\underline{A}}^{t+1} \leftarrow$  calcul micro ( $\underline{v}^{t+1}$ )
fin

```

Algorithme 9: Algorithme pour le cas du mélangeur.

Sur la Fig.II.15 est représenté le tenseur d'aire à $t = 0$. Comme nous avons vu dans la section précédente, la fermeture quadratique est un bon compromis entre la précision et le temps de calcul pour l'évaluation de $\underline{\underline{A}}$. C'est donc cette fermeture qui est retenue dans ce cas. Les paramètres du

modèle sont définis par : $Ca = 1$, $\lambda = 0.1$, $\mu = 0.1$ et $\nu = 0.15$.

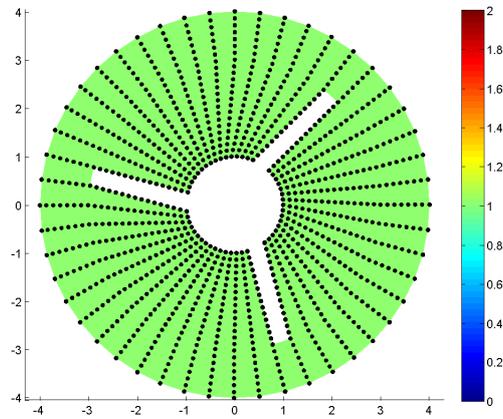
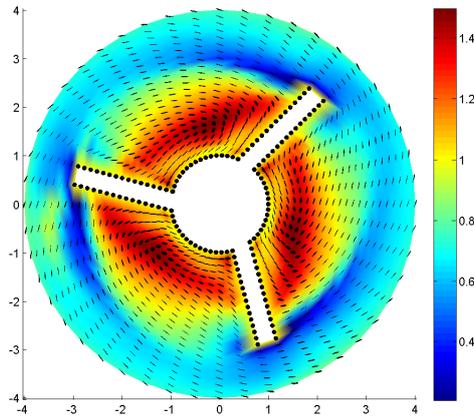
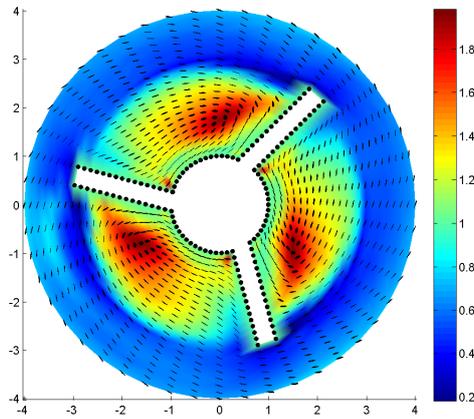
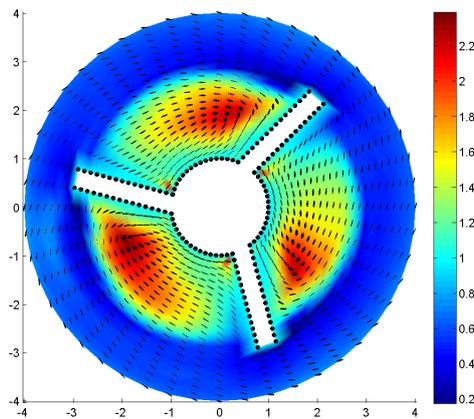


FIGURE II.15 – Représentation ellipsoïdale du tenseur d’aire. Les iso-couleurs représentent $\alpha = \frac{1}{S_V}$.

(a) $\varphi = \frac{2\pi}{3}$.(b) $\varphi = \frac{4\pi}{3}$.(c) $\varphi = \frac{6\pi}{3}$.FIGURE II.16 – Évolution du tenseur d'aire lors d'une rotation complète ($\varphi = [0, 2\pi]$) des pales du mélangeur.

Les figures II.16.(a-c) représentent un tour complet du mélangeur et l'état du mélange pour chaque rotation de $2\pi/3$. Les zones les mieux mélangées (bleues) et moins bien mélangées (rouges) sont très facilement identifiables ainsi que l'orientation de la microstructure. On peut noter que les zones les moins mélangées ont vu leur ratio $1/S_V$ augmenter lors du mélange. Puisque la forme initialement sphérique est le meilleur rapport aire d'interface par unité de volume, cela indique que les gouttes du mélanges ont coalescé.

Enfin l'influence du mélange sur l'écoulement fluide n'est pas, dans ce cas, très important : comme on peut le voir sur les figures II.17 et II.18 représentant les lignes de courant dans le mélangeur, leur modification n'est pas significative.

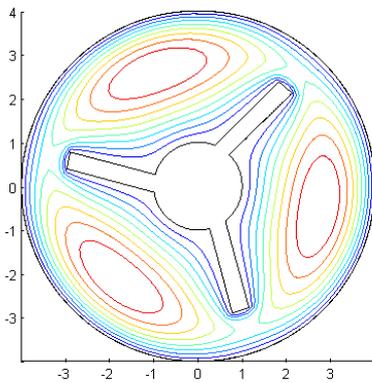


FIGURE II.17 – Lignes de courant avec un fluide newtonien sans mélange.

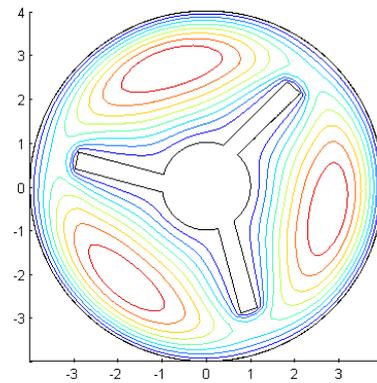
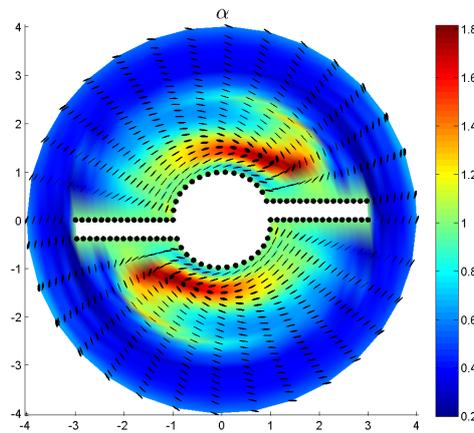


FIGURE II.18 – Lignes de courant après une rotation en présence du mélange.

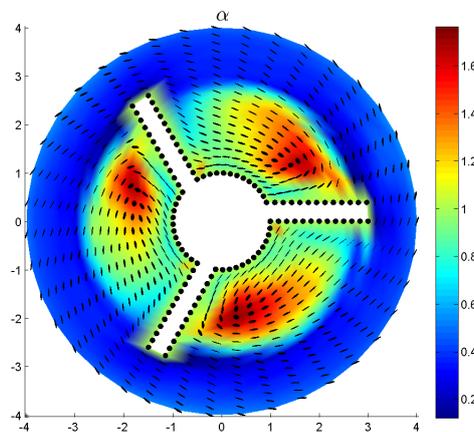
4.3 Application du tenseur d'aire : caractérisation de l'efficacité d'une géométrie de mélangeur

L'utilisation du tenseur d'aire pour évaluer l'efficacité d'une géométrie de mélangeur peut se faire grâce aux informations qu'il contient et plus précisément à la surface spécifique S_V . En effet en intégrant cette grandeur sur l'ensemble de la géométrie et en la rapportant à sa valeur initiale, il est possible de déterminer avec précision l'augmentation proportionnelle du mélange pour différentes géométries. Afin d'illustrer cet utilisation on reprend la même géométrie que dans la section précédente en faisant varier le nombre de pales. Les paramètres des simulations sont identiques et définis tels que :

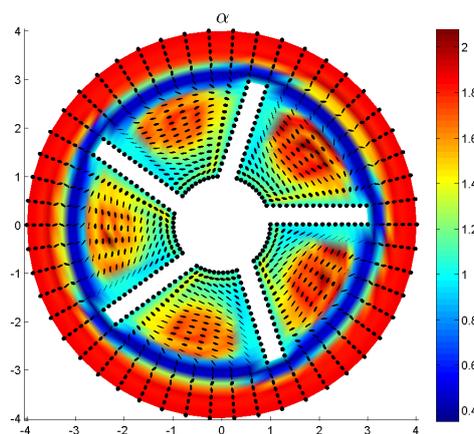
- La phase discrète est présente initialement sous forme sphérique.
- Les paramètres du modèle sont définis arbitrairement tels que $Ca = 1$, $\lambda = 0.1$, $\mu = 0.1$ et $\nu = 0.2$.
- La microstructure en contact avec les pales reste sphérique.
- Aucune influence du mélange sur le champ des vitesses fluides n'est considérée.



(a) Mélangeur à 2 pales.



(b) Mélangeur à 3 pales.



(c) Mélangeur à 5 pales.

FIGURE II.19 – État du mélange après une rotation du mélangeur.

Les géométries testées ont deux, trois et cinq pales. L'état du mélange après une rotation du mélangeur est présenté Fig. II.19(a-c).

	2 pales	3 pales	5 pales
S_V initiale	1	1	1
S_V finale	1.89	2.16	0.91

TABLE II.6 – Évaluation de la surface spécifique initiale et finale normalisées pour chaque géométrie.

En intégrant sur tout le domaine la surface spécifique à la fin d'une rotation et en la comparant avec la surface spécifique initiale il est ainsi possible d'évaluer l'efficacité de chaque géométrie (voir Table II.6). Ainsi entre les trois géométries proposées, c'est celle à trois pales qui est la plus efficace : l'aire d'interface par unité de volume est multipliée par deux après une rotation. Au contraire la géométrie à cinq pales n'est pas du tout adaptée aux mélanges de ce type : les effets dus à la relaxation (relaxation de forme, coalescence, ...) sont plus importants que l'effet du mélangeur et l'aire d'interface décroît après une rotation.

5 Une modélisation Polydisperse du mélange

Dans les sections précédentes les effets de la tension de surface ont été intégrés au modèle du tenseur d'aire à travers le modèle physique proposé par [Lee et Park, 1994]. Nous avons alors montré que l'utilisation du tenseur d'aire avec relation de fermeture est alors un excellent outil pour quantifier le mélange. Cependant si nous nous intéressons aux problématiques de mélanges dont la phase discrète est présente sous forme de gouttes, on peut s'attendre à ce que la taille de ces gouttes ne soit pas homogène, c'est à dire que nous soyons en présence de mélange polydisperse. Or dans le modèle de Lee et Park, tout comme dans les autres modèles physiques proposés pour le tenseur d'aire, aucune information sur la polydispersité du système n'est donnée bien que la taille de la microstructure joue un rôle capital dans la détermination des propriétés rhéologiques (voir par exemple [Pal, 1996] qui montre l'influence de la taille des gouttes de la phase disperse sur les émulsions huile-eau et eau-huile) et peut aussi servir d'indicateur pour la qualité du mélange. Pour cette raison nous souhaitons définir un modèle qui prenne en compte la polydispersité des gouttes du mélanges en intégrant les effets polydisperses sur l'évolution du tenseur d'aire avec relation de fermeture.

Afin de définir un modèle simple nous émettons quelques hypothèses. Ces dernières présentent des simplifications qui pourront être améliorées et enrichies afin d'obtenir un modèle plus réaliste au point de vue physique :

1. La phase discrète est présente sous forme de goutte ayant une forme parfaitement sphérique au repos.
2. Chaque goutte qui se fractionne engendre deux gouttes de taille identique dont le volume de chacune est égale à la moitié de celui de la goutte parent.
3. Chaque goutte peut coalescer avec une autre goutte (de taille différente ou identique) afin d'engendrer une nouvelle goutte de volume égal à la somme de celui des gouttes parents.
4. Après coalescence ou fractionnement, les gouttes perdent leur anisotropie, c'est à dire qu'elles redeviennent parfaitement sphériques.

Le problème est alors formulé en terme d'évolution de la concentration de gouttes ayant le même volume ϕ et comme les gouttes sont parfaitement sphériques au repos, il est aisé de décrire la population en fonction du volume de chaque volume. Ainsi soit $\mathcal{V}_{\text{Discrète}}$ et $\mathcal{V}_{\text{Total}}$ le volume de

la phase discrète et le volume total du mélange respectivement, la concentration $C(\phi)$ normalisée d'une population de gouttes ayant un volume ϕ s'écrit :

$$C(\phi) = \frac{\sum \phi}{\mathcal{V}_{\text{Discrète}}} \quad (\text{II.122})$$

où $\sum \phi$ est le volume correspondant à la somme des volumes de gouttes appartenant à la même population. Cette définition de la concentration $C(\phi)$ permet alors d'écrire

$$\int_{\phi} C(\phi) d\phi = 1 \quad (\text{II.123})$$

D'autre part nous définissons ϕ_{max} qui correspond au volume maximum que peut atteindre une goutte de la phase discrète et qui correspond au volume total de cette dernière. Dans ce qui suit les volumes sont adimensionnalisés par $\mathcal{V}_{\text{Discrète}}$, entraînant ainsi $\phi_{max} = 1$.

5.1 Équation d'évolution de la concentration

L'évolution de la concentration $C(\phi)$, c'est à dire de la population de goutte ayant le même volume, est gérée par les mécanismes de coalescence et de fractionnement.

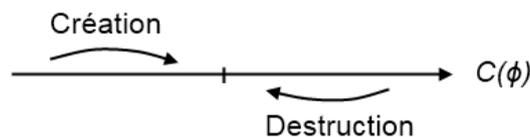


FIGURE II.20 – Schéma d'évolution de la concentration.

Nous définissons alors un terme de "création" et un terme de "destruction" correspondant pour chaque population, respectivement à l'augmentation et à la diminution des gouttes de la population considérée :

$$\frac{dC(\phi)}{dt} = \left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{création}} - \left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{destruction}} \quad (\text{II.124})$$

Ainsi, si l'on considère l'ensemble des populations, l'évolution doit être conservatrice et on peut écrire :

$$\int_0^1 \frac{dC(\phi)}{dt} d\phi = 0 \quad (\text{II.125})$$

En se référant aux simplifications énoncées section 5, la création de gouttes pour un volume considéré est due soit à la coalescence de deux gouttes de taille inférieure, soit au fractionnement d'une goutte de volume deux fois supérieur. On peut supposer que ces deux mécanismes (coalescence / fractionnement) sont indépendants et nécessitent l'introduction de paramètres gérant leurs évolutions. Ces deux paramètres que nous appellerons V_c et V_d respectivement pour la coalescence et le fractionnement peuvent être considérés comme des taux adimensionnels qu'il faut identifier pour chaque type de mélange. Ainsi le terme de création s'écrit :

$$\left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{création}} = \underbrace{V_c \int_0^\phi C(\phi') C(\phi - \phi') d\phi'}_{\text{coalescence}} + \underbrace{2V_d C(2\phi)}_{\text{fractionnement}} \quad (\text{II.126})$$

De même pour le terme de destruction :

$$\left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{destruction}} = \underbrace{V_d C(\phi)}_{\text{fractionnement}} + \underbrace{\frac{1}{\int C(\phi)} V_c \int_0^{\phi_{max}-\phi} C(\phi') C(\phi) d\phi'}_{\text{coalescence}} \quad (\text{II.127})$$

Sur la Fig. II.21 on trace l'évolution au bout d'un temps infini d'une concentration initialement répartie selon une loi normale centrée en 0.5 et avec un écart-type de 0.1. On considère les cas où seul le mécanisme de coalescence (en bleu) ou de fractionnement (en rouge) ont lieu.

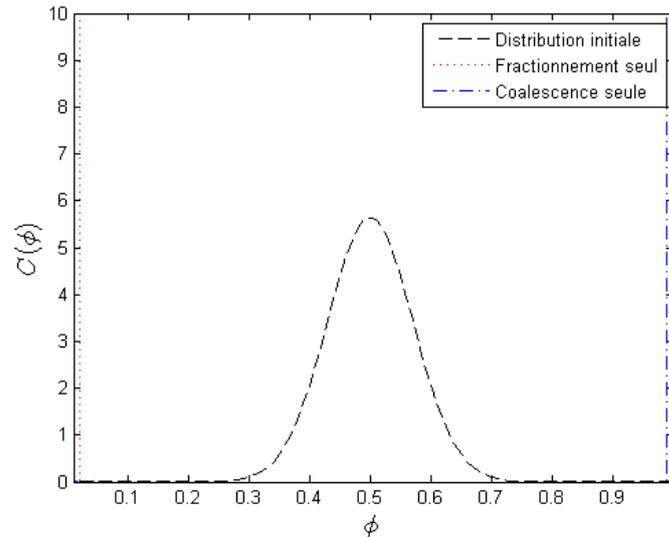


FIGURE II.21 – Distribution de la polydispersité en régime stationnaire lorsque seuls les mécanismes de fractionnement (en bleu) ou de coalescence (en rouge) sont pris en compte.

Comme on peut s'y attendre, dans le cas où seul le mécanisme de coalescence a lieu, il n'y a plus qu'une seule population de gouttes ce qui correspond à une coalescence complète de la phase discrète. Inversement si seul le fractionnement est considéré, la population restante correspond à la population de taille minimale. Notons que dans ce cas, cette dernière correspond à la plus petite maille de l'espace des concentrations. Si on met en concurrence les deux mécanismes (coalescence et fractionnement), l'évolution de la concentration pour un temps normalisé est géré par β , qui s'exprime :

$$\beta = \frac{V_c}{V_d} \quad (\text{II.128})$$

Dans les figures II.22 et II.23 sont représentées les évolutions de la concentration pour un temps final (normalisé par V_c) respectivement de $t = 1$ et $t = 1000$. Les évolutions observées sont en accord avec le comportement attendu : plus le coefficient β est petit (respectivement grand) plus le volume des nouvelles populations diminue (respectivement augmente). De plus quand V_c est prédominant, nous voyons apparaître des discontinuités dans la distribution des populations. Cela est dû au modèle de fractionnement qui ne permet que l'apparition de deux gouttes de volume identique.

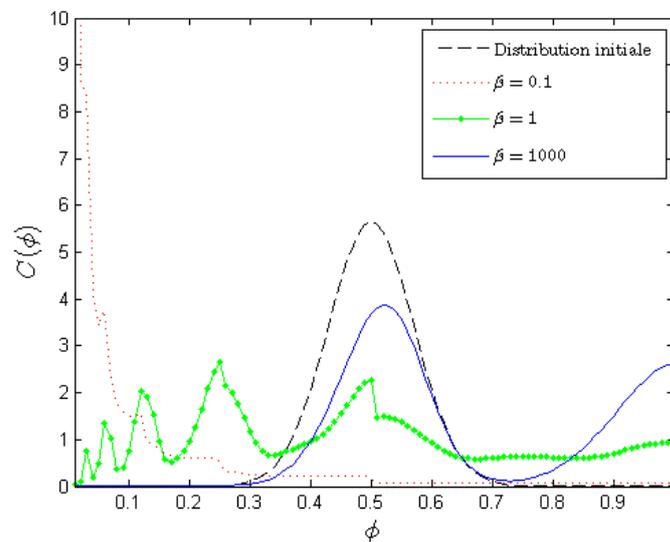
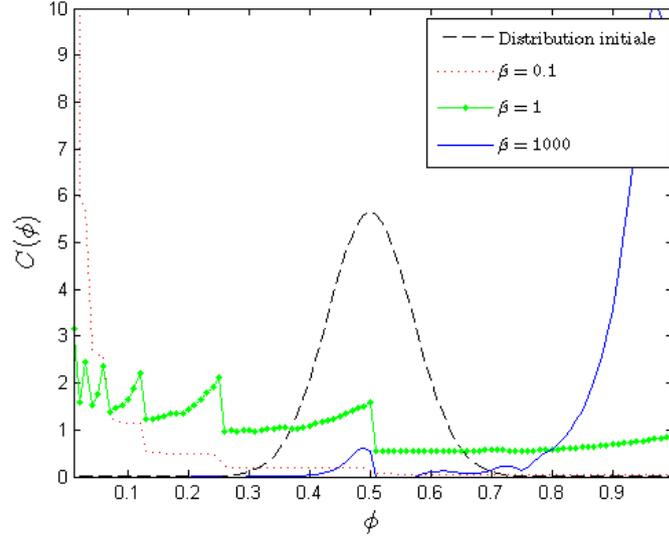


FIGURE II.22 – Solution à $t = 1$ pour différentes valeurs de β .

FIGURE II.23 – Solution à $t = 1$ pour différentes valeurs de β .

5.2 Couplage avec le tenseur d'aire

Maintenant que l'on a défini un modèle prenant en compte la polydispersité, il est nécessaire d'intégrer ses effets à l'évolution du tenseur d'aire. Un tel modèle doit prendre en compte les mêmes mécanismes que ceux présents dans le modèle de [Lee et Park, 1994] pour chaque population de goutte considérée : coalescence, fractionnement ainsi que relaxation de la forme des gouttes. Ainsi si nous introduisons ϕ , une taille de goutte, l'équation d'évolution du tenseur $\underline{\underline{A}}$ pour cette population de goutte doit s'écrire :

$$\frac{d\underline{\underline{A}}(\phi)}{dt} = \underbrace{-\left(\nabla \underline{v}\right)^T \underline{\underline{A}}(\phi) - \underline{\underline{A}}(\phi) \nabla \underline{v} + \nabla \underline{v} : \underline{\underline{A}}(\phi)}_{\text{étirement fluide}} - \underbrace{\left.\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt}\right|_R}_{\text{relaxation de forme}} + \underbrace{\left.\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt}\right|_C}_{\text{aire créée}} - \underbrace{\left.\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt}\right|_D}_{\text{aire détruite}} \quad (\text{II.129})$$

Le terme de relaxation $\left.\frac{\partial \underline{\underline{A}}}{\partial t}\right|_R$ correspond à la réduction de l'anisotropie de $\underline{\underline{A}}$ au cours du temps et est en tout point identique au terme de relaxation de forme introduit par [Doi et Ohta, 1991] puis repris dans [Lee et Park, 1994] :

$$\left.\frac{d\underline{\underline{A}}}{dt}\right|_R = \zeta \frac{\Gamma}{\eta} S_V(\phi) \left(\underline{\underline{A}}(\phi) - S_V(\phi) \frac{\underline{I}}{3} \right)$$

$\left. \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \right|_R$ est le seul terme identique au modèle de la littérature. Les deux autres termes $\left. \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \right|_C$ et $\left. \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \right|_D$ correspondent respectivement à la création et à la destruction d'aire par volume caractéristique lors des phénomènes de coalescence et fractionnement et sont issus du modèle polydisperse. Ainsi $\underline{\underline{A}}_C$ est l'aire créée et est parfaitement isotrope, c'est à dire correspond à un tenseur d'aire diagonal dont tous les coefficients sont identiques. Puisque la trace du tenseur d'aire correspond à l'aire d'interface par volume unitaire, la trace de $\underline{\underline{A}}_C$ correspond au ratio de la surface de la sphère par son volume et pondéré par la variation de la concentration. D'où l'expression :

$$\left. \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \right|_C = \frac{4\pi R(\phi)^2}{\phi} \frac{I}{3} \left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{création}}$$

Pour déterminer le terme de destruction $\left. \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \right|_D$ nous avons suivi le raisonnement suivant : $\left. \frac{d\underline{\underline{A}}}{dt} \right|_D$ doit soustraire du tenseur d'aire une certaine quantité correspondant à la surface spécifique de la population disparue, tout en conservant l'anisotropie de cette aire supprimée. De plus, si à chaque population de goutte on associe une surface spécifique, alors à l'évolution de cette population on peut associer l'évolution de S_V soit :

$$\begin{aligned} C(\phi) &\rightarrow S_V(\phi) \\ \left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{destruction}} &\rightarrow \left. \frac{d}{dt} (S_V(\phi)) \right|_{\text{destruction}} \end{aligned}$$

Ce qui peut être réécrit sous la forme :

$$\left. \frac{d}{dt} (S_V(\phi)) \right|_{\text{destruction}} \approx \frac{S_V(\phi)}{C(\phi)} \left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{destruction}} \quad (\text{II.130})$$

Finalement l'aire d'interface est supprimée en conservant l'anisotropie du tenseur d'aire, c'est à dire dans la direction du tenseur normalisé $\frac{\underline{\underline{A}}(\phi)}{S_V(\phi)}$, et le terme $\underline{\underline{A}}_D$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_D &= \frac{\underline{\underline{A}}(\phi)}{S_V(\phi)} \left. \frac{d}{dt} (S_V(\phi)) \right|_{\text{destruction}} \\ &= \frac{\underline{\underline{A}}(\phi)}{C(\phi)} \left. \frac{dC(\phi)}{dt} \right|_{\text{destruction}} \end{aligned}$$

5.3 Résultats numériques du nouveau modèle de tenseur d'aire avec polydispersité

5.3.a Illustration en écoulement homogène

La figure II.24 présente l'évolution de la surface spécifique S_V lorsque l'effet relatif au gradient de vitesse n'est pas pris en compte : on suppose que la relaxation de forme \underline{A}_R est exactement égale à l'effet du cisaillement. Dans ce cas, si aucun effet de coalescence ou de fractionnement n'est pris en compte, la trace du tenseur d'aire reste constante. Initialement, la dispersité des gouttes de la phase discrète est répartie comme sur la figure II.21 et les gouttes sont supposées parfaitement sphériques. Ainsi le tenseur d'aire initial est défini en fonction de la surface spécifique initiale qui est $S_V^{init} = 6.12$.

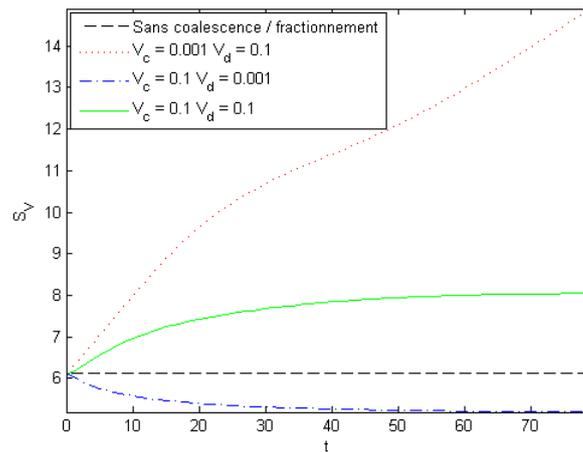


FIGURE II.24 – Évolution de S_V dans un écoulement polydisperse, où l'effet du cisaillement est compensé par celui de la relaxation de forme et pour trois couples de valeurs V_c et V_d .

L'évolution de la surface spécifique sur la figure II.24 est ainsi entièrement dépendante des valeurs des paramètres V_c et V_d . Or le paramètre de fractionnement, à valeur égale avec celui de coalescence, est prépondérant comme on peut le voir dans les équations II.126 et II.127. Ainsi la surface spécifique augmente lorsque les deux paramètres sont égaux (courbe verte) car le phénomène de fractionnement est plus important que celui de coalescence. D'autre part, pour les deux autres cas l'évolution de S_V est tout à fait en accord avec ce à quoi on pouvait s'attendre : lorsque le fractionnement est plus important, la surface spécifique augmente car des gouttes de volumes plus faibles

apparaissent et inversement lorsque la coalescence est le mécanisme principal.

De plus on représente sur la figure II.25 l'état polydisperse final des évolutions présenté figure II.24. Comme évoqué précédemment, à valeur égale, le paramètre de fractionnement V_c est plus influent que V_d ce qui est illustré par la courbe verte.

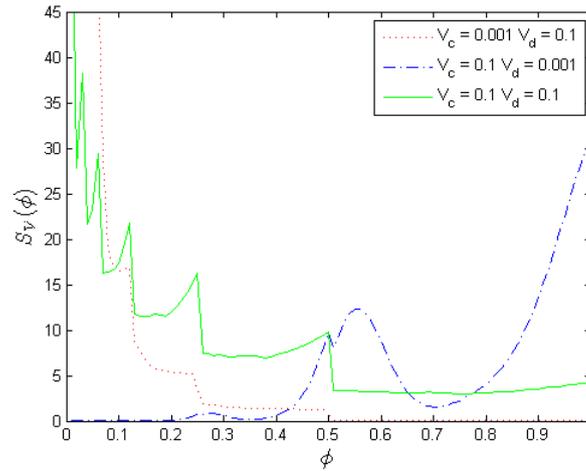


FIGURE II.25 – Distributions relatives aux surfaces spécifiques $S_V(\phi)$ finales obtenues figure II.24.

L'évolution de la surface spécifique est aussi illustrée dans le cas d'un écoulement élongationnel uniaxial (figure II.26) défini par :

$$\underline{\nabla} \underline{v} = \begin{bmatrix} 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & -0.1 & 0 \\ 0 & 0 & -0.1 \end{bmatrix} \quad (\text{II.131})$$

Il est intéressant de noter que le postulat selon lequel les gouttes deviennent parfaitement sphériques après fractionnement ou coalescence a un impact non négligeable sur l'évolution de la surface spécifique. Ainsi même dans le cas où le fractionnement est le mécanisme principal (courbe rouge), l'augmentation de la surface spécifique est moindre que l'écoulement témoin (courbe noire, sans prise en compte de la tension de surface). La surface spécifique est même inférieure sur la courbe rouge que sur la courbe bleue, car pour cette dernière l'évolution des populations de gouttes est plus lente et elle conserve ainsi l'augmentation de l'aire d'interface dû au cisaillement fluide.

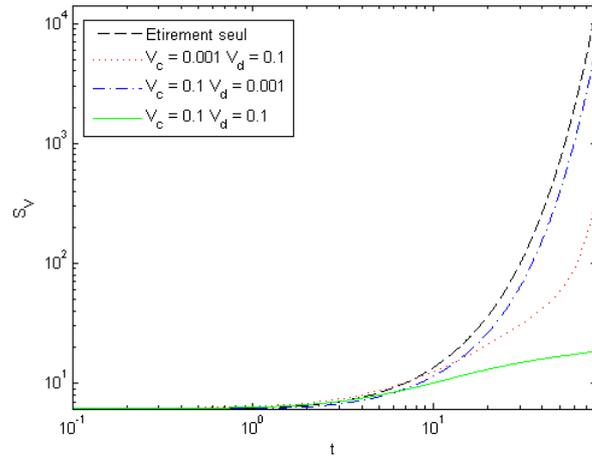


FIGURE II.26 – Evolution de S_V dans un écoulement polydisperse, sans relaxation de forme et pour trois couples de valeurs V_c et V_d .

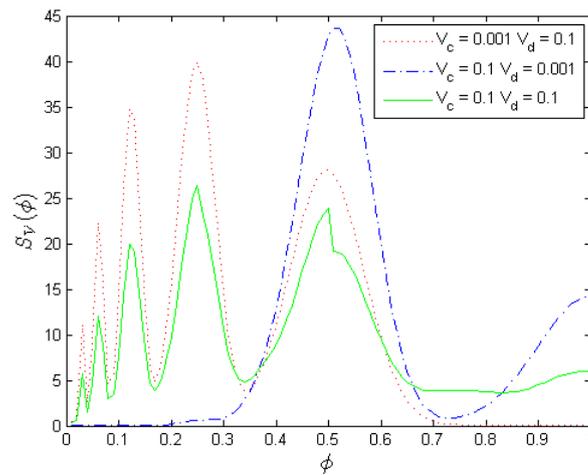


FIGURE II.27 – Distribution de la surface spécifique $S_V(\phi)$ finale pour l'écoulement défini en figure II.26.

Enfin il à noter que le modèle polydisperse ne prend pas en compte "l'histoire" de l'évolution de la concentration, et que seul le rapport des coefficients V_c et V_d a une influence sur l'état stationnaire. Ainsi pour deux jeux de coefficients, si ceux-ci sont proportionnels, on atteindra le même état stationnaire, l'état transitoire étant lui par contre influencé par la magnitude des coefficients en jeu. C'est pourquoi, si l'on ne s'intéresse qu'à l'état stationnaire, on peut ne définir comme paramètre que le rapport $\frac{V_c}{V_d}$. Pour illustrer cela on pose :

$$V_c = 0.45 \cdot a$$

$$V_d = 0.3 \cdot a$$

$$V_r = 0$$

et on trace sur la figure II.28 la concentration pour $a = 1$ et $a = 10$ après un temps $t = 0.1$ et $t = 20$.

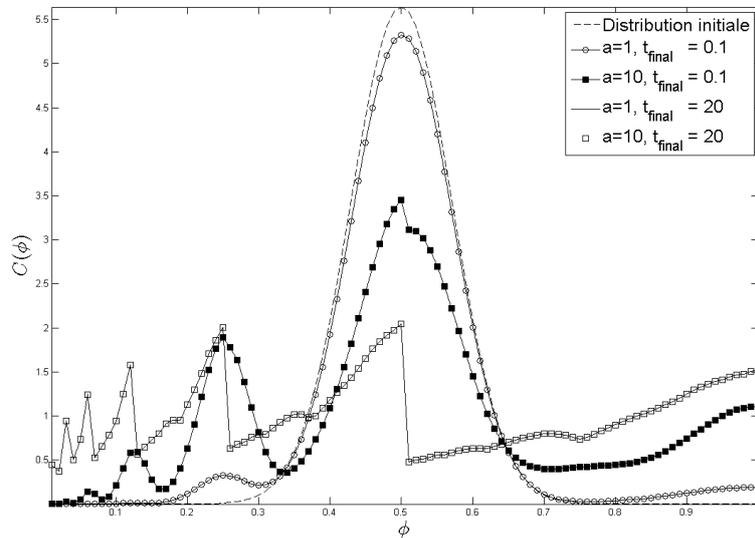


FIGURE II.28 – Concentration pour différents a à deux temps finaux différents, $t = 0.1$ et $t = 20$.

Ainsi sur la figure II.28 on voit bien que si la vitesse d'évolution dépend de la magnitude des coefficients du modèle, l'état polydisperse stationnaire est, quant à lui, identique puisque le rapport $\frac{V_c}{V_d}$ est identique pour les deux jeux de paramètres.

5.3.b Illustration en écoulement complexe

Écoulement de Poiseuille

On illustre maintenant l'utilisation du modèle polydisperse en écoulement complexe. Pour ce faire on représente l'écoulement complexe à l'aide d'un écoulement de Poiseuille et d'un écoulement de contraction, avec dans les deux cas la moitié seulement de la géométrie représentée et des écoulements plans. De plus dans les deux cas on ne prend pas en compte l'influence du mélange sur l'écoulement fluide. Ainsi le champ des vitesses fluides est défini dans le cas du Poiseuille par la Fig. II.29.

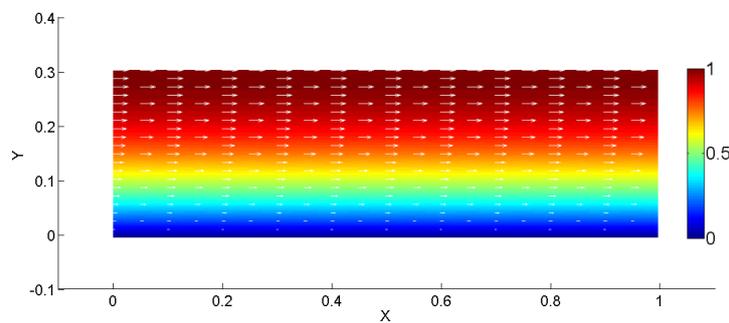


FIGURE II.29 – Distribution des vitesses fluides dans le cas de l'écoulement de Poiseuille. L'axe de symétrie est sur le bord supérieur ($y = 0.3$).

Une fois le régime stationnaire atteint on représente le tenseur d'aire dans la géométrie ainsi que le ratio $\alpha = 1/S_V$ sous forme d'iso-couleurs. Initialement les gouttes du mélanges sont considérées comme sphériques et pour les mêmes raisons que dans la section précédente, $S_V|_{t=0} = 6.12$ soit $\alpha|_{t=0} = 0.163$ (la surface spécifique est liée à la distribution initiale de la concentration $C(\phi)$). Dans cette géométrie les lignes de courant sont parallèles à l'axe de symétrie et l'évolution de la concentration est illustrée pour les lignes de courant situées à $y = 0.03$ (proche du bord inférieur), $y = 0.15$ (centre) et $y = 0.3$ (axe de symétrie supérieur). A l'entrée (bord gauche) on impose que la phase discrète reste inchangée.

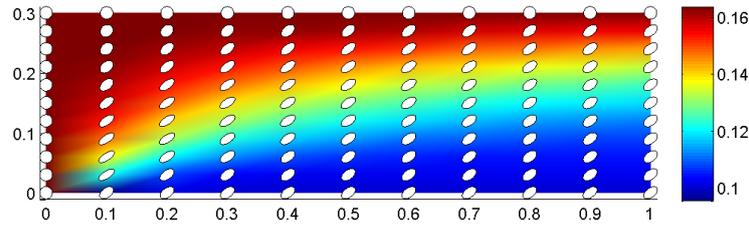


FIGURE II.30 – Représentation du tenseur d'aire sous formes d'ellipsoïdes une fois le régime stationnaire atteint. Les iso-couleurs représentent le rapport $\alpha = 1/S_V$ avec $S_V|_{t=0} = 6.12$ soit $\alpha|_{t=0} = 0.163$.

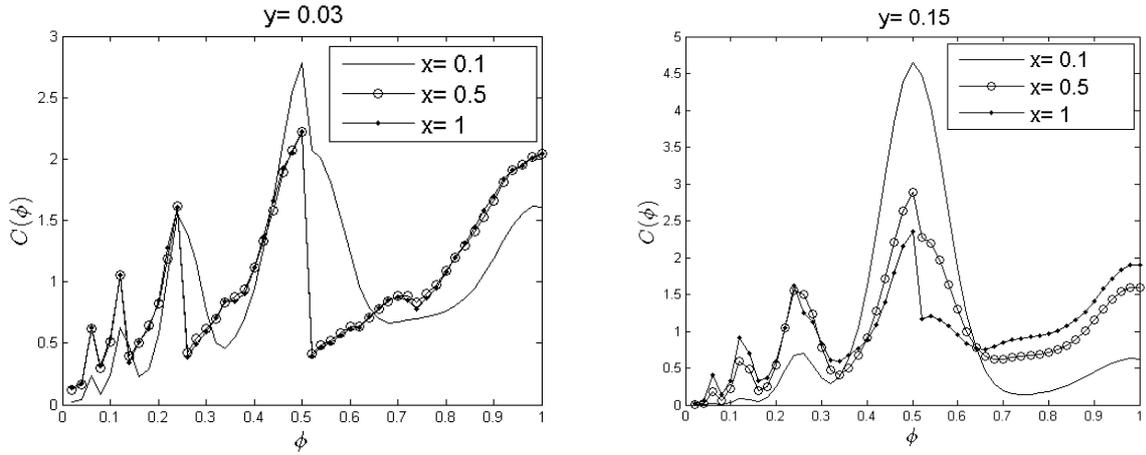
L'espace des concentrations est discrétisée par 50 nœuds et les coefficients du modèle physique sont arbitrairement définis tels que :

$$V_c = 0.45 \cdot \dot{\gamma}$$

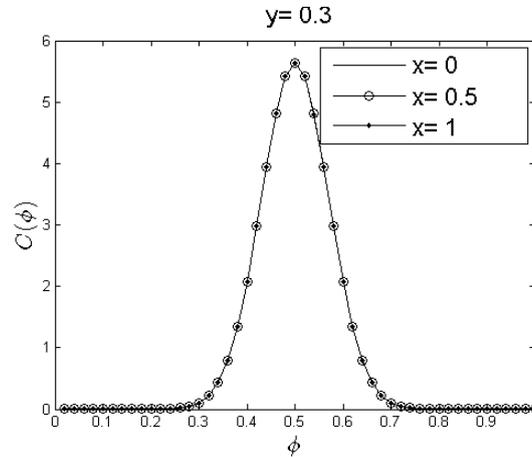
$$V_d = 0.3 \cdot \dot{\gamma}$$

$$V_r = 0.5 \cdot (S_V - S_V|_{t=0})$$

avec $\dot{\gamma}$ le deuxième invariant de gradients de vitesse adimensionnel défini Eq. II.88. Dans cette géométrie la surface spécifique est toujours supérieure ou égale à la surface spécifique initiale et donc le coefficient V_r reste positif ou nul.



(a) Évolution de la concentration sur la ligne de courant $y = 0.03$. (b) Évolution de la concentration sur la ligne de courant $y = 0.15$.



(c) Évolution de la concentration sur la ligne de courant $y = 0.3$.

FIGURE II.31 – Évolution de la concentration dans l'écoulement de Poiseuille sur trois lignes de courant et pour trois abscisses.

Comme on pouvait s'y attendre, il n'y a pas d'évolution de la concentration sur la ligne de courant située en $y = 0.3$ puisqu'il n'y a pas de gradient de vitesse (axe de symétrie). A l'inverse la polydispersité évolue fortement sur les deux autres lignes de courant et il est intéressant de noter que sur la ligne de courant proche de la paroi inférieure Fig. II.31(a), l'état stationnaire est atteint dès $x = 0.5$ du fait des forts gradients de vitesse en présence.

Écoulement de contraction

La figure II.32 illustre la géométrie de contraction et son champ de vitesses fluides. Les lignes de

courant ne sont pas parallèles à l'axe de symétrie est on se propose d'observer l'évolution de la concentration sur trois lignes définies figure II.33.

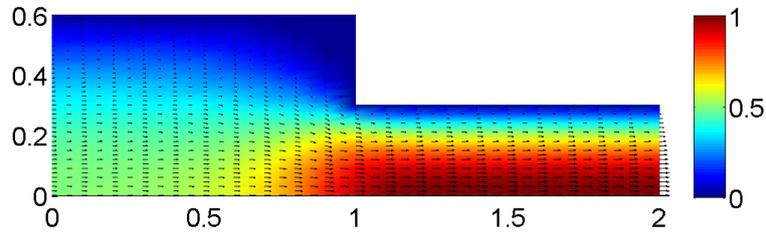


FIGURE II.32 – Distribution des vitesses fluides dans le cas de la contraction. L'axe de symétrie est sur le bord inférieur ($y = 0$).

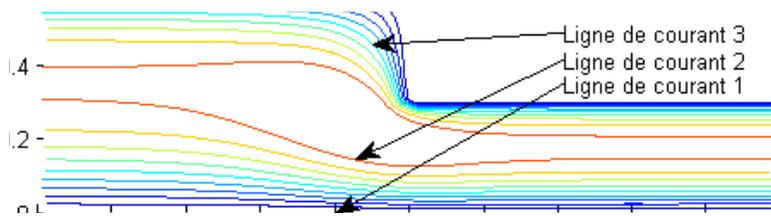


FIGURE II.33 – Lignes de courant dans la contraction.

Les conditions aux limites sont les mêmes que dans l'écoulement précédent. De même les paramètres du modèle physique sont identiques excepté que V_r peut être négatif (sur certain nœuds S_V devient inférieur à $S_V|_{t=0}$). Dans ce cas on pose $V_r = 0$. Une fois le régime établi, le mélange est représenté figure II.34.

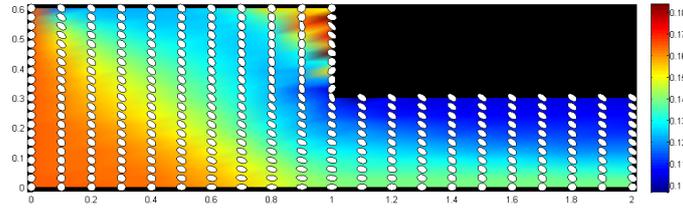
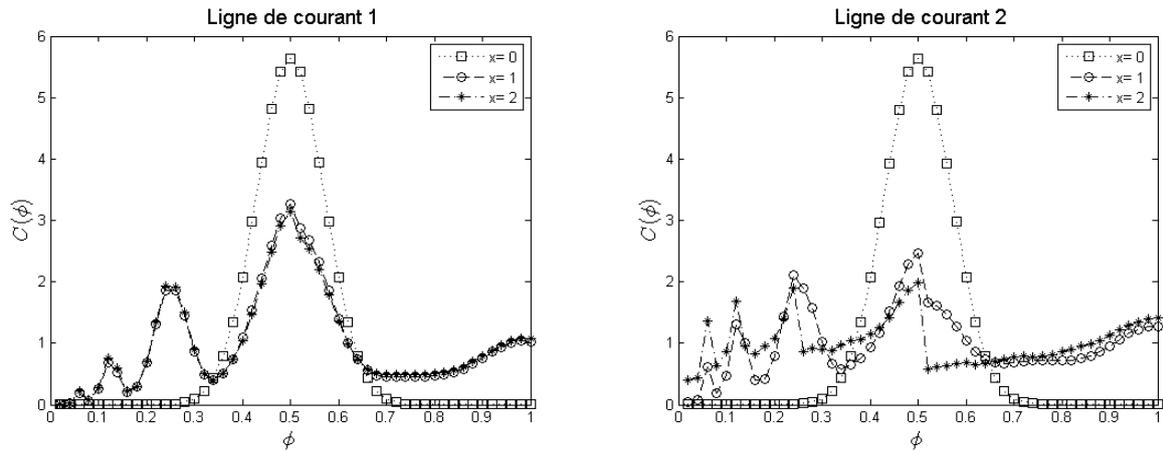
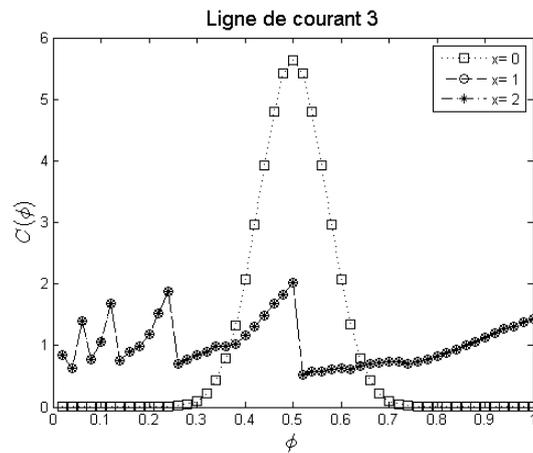


FIGURE II.34 – Représentation du tenseur d'aire sous formes d'ellipsoïdes une fois le régime stationnaire atteint. Les iso-couleurs représentent le rapport $\alpha = 1/S_V$ avec $S_V|_{t=0} = 6.12$ soit $\alpha|_{t=0} = 0.163$.

La représentation du tenseur d'aire sous forme d'ellipsoïdes permet d'avoir un aperçu sur l'anisotropie. En effet on peut voir facilement que sur l'axe de symétrie ($y = 0$), la microstructure du mélange s'est orientée dans le sens de l'écoulement puis une fois la contraction passée s'est relaxée. Ce qui signifie que le paramètre de relaxation de forme (V_r) a été prépondérant lors de cette phase.



(a) Évolution de la concentration sur la ligne de courant 1 (proche de l'axe). (b) Évolution de la concentration sur la ligne de courant 2.



(c) Évolution de la concentration sur la ligne de courant 3.

FIGURE II.35 – Évolution de la concentration dans la contraction sur trois lignes de courant et pour trois abscisses.

Sur la première ligne de courant (Fig. II.35(a)), une fois la contraction passée, la concentration évolue peu car les gradients de vitesse sont très faibles. Sur la deuxième ligne de courant, Fig. II.35(b), la dispersité évolue tout au long de la contraction pour atteindre un l'état stationnaire que l'on retrouve sur la ligne de courant 3 (Fig. II.35(c)) dès $x = 1$. En effet sur cette dernière ligne de courant les forts gradients de vitesse entraînent l'évolution rapide vers l'état stationnaire avant $x = 1$.

6 Conclusion du chapitre

L'approche du tenseur d'aire permet de décrire la morphologie du processus de mélange à l'échelle microscopique et permet d'obtenir les informations essentielles par rapport à son évolution : surface spécifique, forme, orientation, etc. Mais l'utilisation du tenseur d'aire est sujette à une l'introduction d'une relation de fermeture dont l'impact peut être significatif et ne peut être en général évalué *a priori*. Dans ce chapitre nous avons évalué l'erreur introduite par les deux principales relations de fermeture utilisées dans cette description par rapport à la formulation théorie cinétique équivalente et exacte : le tenseur d'aire a été reformulé à partir d'une fonction d'orientation d'aire dont l'évolution est gouvernée par une équation d'advection-diffusion, permettant de résoudre le problème sans introduire de relation de fermeture. De plus nous avons proposé de compléter la description microstructurale du processus de mélange en incorporant une description plus détaillée des effets de la tension de surface. Dans cette optique nous avons réécrit le modèle proposé par Lee et Park dans [Lee et Park, 1994], initialement pour le tenseur d'interface, dans le cadre du tenseur d'aire. Ce modèle peut être intégré à la formulation théorie cinétique permettant ainsi de comparer les relations de fermeture pour des solutions avec ou sans effets de tension d'interface. De plus l'utilisation de la méthode de réduction dimensionnelle Proper Generalized Decomposition a permis la résolution de la formulation théorie cinétique en écoulement complexe en allégeant la difficulté liée à la haute dimensionnalité du problème. La PGD a en outre permis d'évaluer les résultats des relations de fermeture en écoulement complexe.

Finalement nous avons enrichi le modèle en prenant en compte la polydispersité et nous avons alors proposé une cinétique de fractionnement et coalescence de la phase discrète pour les mélanges biphasiques. Ce modèle permet de connaître explicitement l'état polydisperse du mélange, ce qui est une information particulièrement intéressante lorsque couplée au tenseur d'aire.

Chapitre III

Description continue de systèmes de suspensions colloïdales

Résumé :

Dans ce chapitre nous nous focalisons sur la simulation de systèmes de suspensions colloïdales. L'évolution de ces systèmes est complexe et étroitement liée à la présence de particules dont la taille est de plusieurs ordres de grandeur inférieure à l'écoulement fluide. Nous optons pour **une description micro-macro du système** à l'aide de **l'équation de Smoluchowski**, dont la haute dimensionnalité du domaine de définition nécessite l'utilisation d'une stratégie de réduction de modèle, la PGD. Nous montrons que **l'utilisation de la méthode PGD permet de résoudre le modèle complet de Smoluchowski** sans recourir à la réduction au moment du second ordre de l'équation et qui implique inévitablement l'utilisation d'une relation de fermeture. De plus, l'évaluation des résultats du modèle en écoulement simple par rapport aux prédictions théoriques, ainsi que la **comparaison avec les résultats issus de simulations discrètes** du type Stokesian Dynamics, illustrent les capacités du modèle de Smoluchowski, mais aussi ses limites. D'autre part, en vue de valider l'approche micro-macro en écoulement complexe, nous étudions l'efficacité de la méthode PGD en résolvant un problème équivalent à la fois par la méthode des éléments finis et par la méthode PGD. **La précision des résultats obtenus** en séparation de variable ainsi que **la réduction drastique du temps de calcul** soulignent l'efficacité de la stratégie PGD. Finalement, **un cas d'écoulement complexe micro-macro est illustré.**

Sommaire

1	État de l'art	162
2	Équations du modèle	165
2.1	Fonction de corrélation de paire	165
2.2	Conditions aux limites du problème de théorie cinétique	167
2.3	Expression du tenseur des extra-contraintes fluides	170
3	Fonction de corrélation de paire en écoulement homogène	171
3.1	Approche par la méthode des Éléments Finis	171
3.1.a	Formulation variationnelle	172
3.1.b	Application des conditions aux limites sur l'espace des configurations	172
3.2	Discrétisation de l'espace des configurations	174
3.3	Résultats numériques en écoulement homogène stationnaire	175
3.3.a	Fonction de corrélation définie sur un espace 2D	175
3.3.b	Fonction de corrélation définie sur un espace 3D	177
4	Approche micro-macro en écoulement complexe : description macro-	
	scopique ou technique de réduction dimensionnelle ?	180
4.1	Description macroscopique de la fonction de corrélation de paire	180
4.1.a	Réduction au moment d'ordre deux	180
4.1.b	Formulation avec relation de fermeture	182
4.1.c	Erreur de la relation de fermeture	183
4.2	Technique de réduction dimensionnelle	186
4.3	Approche micro-macro pour un écoulement recirculant simple	188
4.3.a	Méthode des Éléments Finis : obtention d'un solution de référence	188
4.3.b	Méthode PGD	189
4.3.c	Résultats numériques	190
4.4	Approche micro-macro pour un écoulement de cavité	194
4.4.a	Cavité recirculante 2D-2D	195
4.4.b	Cavité recirculante 3D-2D	204
5	Conclusion du chapitre	206

1 État de l'art

Les écoulements multiphasiques sont présents dans de nombreux processus industriels et naturels tels que les fluides biologiques [MacMECCAN *et al.*, 2009], les mélanges de polymères, de peintures [Yziquel *et al.*, 1999], etc. De même que les mélanges de fluides immiscibles (voir Chapitre II), les systèmes de suspensions colloïdales sont des systèmes complexes où la présence des particules modifie de façon non linéaire les propriétés de l'écoulement [Russel *et al.*, 1992] [Larson, 1999]. En effet les particules sont soumises à de nombreuses forces (forces particules-particules, solvant-particules, etc) qui sont prépondérantes dans la détermination de l'évolution du système (voir Fig III.1).

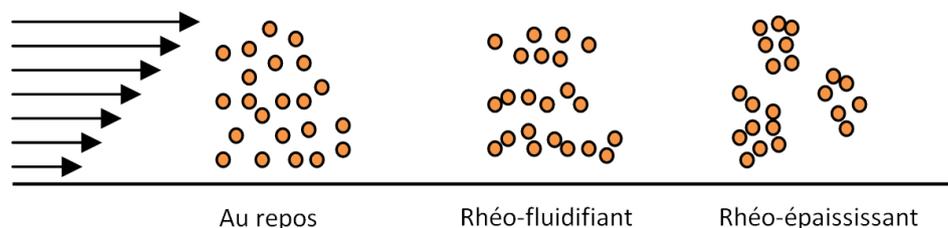


FIGURE III.1 – A gauche, les particules en suspension sont au repos. Lorsque les forces interparticulaires sont inférieures aux forces hydrodynamiques, les particules s'alignent dans le sens de l'écoulement (centre). Inversement elles s'opposent à ce dernier si elles sont plus importantes (droite).

La problématique centrale est de comprendre et prédire comment ces écoulements microstructurés répondent à une sollicitation donnée. Cela est d'autant plus difficile que la microstructure dépend de l'écoulement et qu'à son tour, l'écoulement dépend de la microstructure de telle sorte que les deux interactions sont intimement couplées. La simulation numérique est alors un outil parfaitement adapté à l'étude de ce couplage en complément de l'analyse théorique et de l'approche expérimentale [Parsi et Gadala-Maria, 1987] [Rampall *et al.*, 1997]. L'étude analytique de la fonction de corrélation de paire a été initiée par [Batchelor et Green, 1972a] puis s'est largement développée par la suite avec [Batchelor, 1977], [Brady et Vicic, 1995] ou encore [Brady et Morris, 1997].

Mais l'approche numérique de l'évolution de systèmes colloïdaux n'est pas chose aisée. La manière la plus simple de procéder est de considérer toutes les particules du système, c'est à dire les particules appartenant au solvant et les particules colloïdales, et de suivre leur évolution au cours du temps.

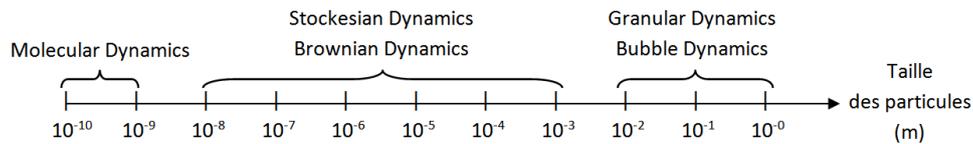


FIGURE III.2 – Types de simulations en fonction de la taille des particules à simuler.

Le coût numérique de telles approches dépend de la taille de la particule colloïdale par rapport à celle du solvant. Selon [Brady, 2001] ce coût peut être estimé en fonction du ratio (*taille des particules colloïdales / tailles des particules du solvant*) à la puissance 6, ce qui n'est bien évidemment pas acceptable dès que le ratio taille augmente. Aussi, de nombreuses techniques de simulation numérique se sont développées en fonction de la taille des particules comme on peut le voir sur la figure III.2. Ainsi, pour les simulations discrètes de type Brownian Dynamics (BD), correspondant au type de simulation utilisées pour les systèmes colloïdaux, le solvant est considéré comme un milieu continu simplifiant alors considérablement les calculs (voir Fig. III.3-centre).

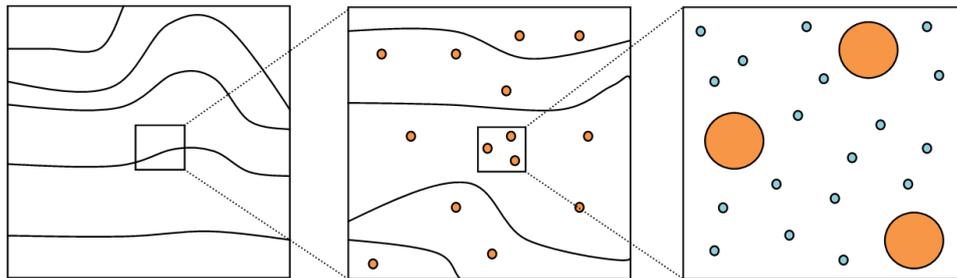


FIGURE III.3 – Représentation du système colloïdal en fonction du niveau de détails : parfaitement continu (à gauche), avec les suspensions colloïdales et le solvant continu (au centre) et avec les suspensions et le solvant sous forme de particules (à droite). Les simulations BD et SD correspondent au système représenté par la figure centrale.

Cela permet ainsi de simuler l'évolution de particules soumises à de nombreuses forces telles que les forces Browniennes, les forces de trainée fluide, les potentiels inter-particulaires, etc. Cependant lorsqu'une particule se trouve dans un écoulement, elle perturbe ce dernier et cette perturbation est transmise aux autres particules du système à travers l'écoulement modifié. Cette interaction indirecte portée par le fluide est appelée force hydrodynamique et n'est pas prise en compte par les simulation BD mais par un autre type de simulation discrète appelée Stokesian Dynamics (SD) [Brady et Bossis, 1988] [Foss et Brady, 2000]. Si, dans ce dernier cas, tous les effets physiques peuvent être modélisés, le nombre de particules nécessaires pour s'affranchir du bruit statistique reste très

élevé et le pas de temps très faible entraînant ainsi un effort de calcul très important : pour simuler l'évolution d'un système de 124 particules sur une durée de 50s (avec un pas de temps de $10^{-5}s$) il a fallu à [Morris et Katyal, 2002] 900 heures CPU sur une station de travail DEC 600. Néanmoins cette technique est largement utilisée pour simuler les systèmes denses comme le prouve l'abondante littérature utilisant l'approche SD (voir par exemple [Phung *et al.*, 1996], [Morris et Katyal, 2002], [Yurkovetsky et Morris, 2008] ou encore [Gao *et al.*, 2010]).

Une alternative aux simulations BD et SD réside dans une description continue des suspensions colloïdales. Cette formulation dans le cadre de la théorie cinétique mène à une équation dite de Fokker-Planck qui caractérise la microstructure à travers la fonction de distribution d'espace de phase $\Psi(\underline{x}, \underline{R}, \underline{v})$. D'un point de vue plus macroscopique, la description de Smoluchowski peut remplacer celle de Fokker-Planck à l'aide de la fonction de corrélation de paire $g(\underline{x}, \underline{R})$, liée à $\Psi(\underline{x}, \underline{R}, \underline{v})$ par

$$g(\underline{x}, \underline{R}) = \int d\underline{v} \Psi(\underline{x}, \underline{R}, \underline{v}) \quad (\text{III.1})$$

où \underline{x} est le vecteur position, \underline{R} le vecteur connectant deux particules et \underline{v} leur vitesse relative. La différence entre la formulation de Fokker-Planck et celle de Smoluchowski réside dans l'élimination des processus rapides dus à l'inertie (lors du déplacement des particules dans le fluide). La présence des suspensions colloïdales dans le solvant est ainsi décrite de façon continue à l'aide de la fonction de corrélation de paire.

La fonction de corrélation de paire est définie à la fois sur l'espace physique (l'espace où a lieu l'écoulement fluide) et sur l'espace des configurations : à chaque point de l'espace physique est associé un espace des configurations sur lequel est défini la fonction de corrélation de paire et pour lequel les grandeurs cinématiques peuvent être supposées constantes. Or ces deux espaces doivent être gérés simultanément ce qui pose problème en terme de calcul numérique : chaque espace peut être de dimension trois et si l'on prend en compte le temps, le problème peut atteindre sept dimensions. Il est alors nécessaire d'utiliser soit une approche réduisant la fonction de corrélation de paire à un moment d'ordre supérieur, permettant de diminuer le nombre de dimensions mais nécessitant l'introduction d'une relation de fermeture, soit une technique de résolution spécifique pour s'affranchir, ou tout du moins diminuer, la difficulté liée à la haute dimensionnalité du domaine de définition. Il est à noter qu'en aucun cas nous ne souhaitons améliorer les équations précédemment

établies mais seulement étudier la possibilité d'une description continue d'un système colloïdal et ses implications en terme de coût de calcul et de techniques numériques associées.

2 Équations du modèle

2.1 Fonction de corrélation de paire

Suivant Smoluchowski [Smoluchowski, 1915], la fonction de corrélation de paire est utilisée pour représenter l'évolution de la microstructure et ainsi son influence sur l'écoulement macroscopique. Cette description est liée à la probabilité de trouver le centre d'une particule à une distance donnée du centre d'une autre particule. Sur de faibles distances cela décrit donc comment les particules sont agencées. Dans le cas présent, les particules sont considérées comme des sphères dures dont la distance minimale entre deux sphères ne peut être inférieure au diamètre de ces sphères, supposées toutes de même taille. Lorsqu'on s'éloigne du centre de la particule considérée, la probabilité de trouver d'autres particules, c'est à dire le centre d'une autre sphère, devient constante. Cette constante est liée à la densité de particules : un système plus dense contient un nombre plus important de sphères et il est donc probable d'en trouver plus à une distance donnée.

Afin d'écrire l'équation d'évolution de la fonction de corrélation de paire (voir [Batchelor, 1976], [Batchelor, 1977]), on sélectionne une particule, on analyse les forces auxquelles elle est soumise ce qui nous permet d'écrire les équations de Newton en négligeant l'inertie. Finalement on écrit l'équation de Liouville correspondante. Les simplifications adoptées dans les processus précédents mènent à considérer les suspensions comme des sphères plutôt diluées¹, isothermes, monodisperses, homogènes et incompressibles plongées dans un solvant newtonien. Les sphères sont toutes identiques et leur rayon a est bien inférieur à la taille caractéristique L de l'écoulement macroscopique du fluide. Notons que la concentration des suspensions est principalement limitée par la prise en compte binaire des interactions hydrodynamiques. Une des façons de connaître cette limite de concentration maximale est la comparaison avec l'expérience.

1. Seules les interactions hydrodynamiques binaires sont prises en compte ce qui signifie que si le système est trop concentré cette simplification est erronée.

Remarque :

Nous considérons les suspensions non homogènes dans le sens où la fonction de corrélation de paire g est fonction de \underline{R} et aussi de \underline{x} mais nous supposons que la densité n_p de particules reste constante et indépendante de \underline{x} et du temps t . Il est néanmoins connu (voir par exemple [Morris, 2009], [Miller *et al.*, 2009]) que dans les écoulements complexes les suspensions migrent rendant alors n_p fonction de \underline{x} et t . Pour reproduire un tel phénomène il est cependant nécessaire d'adopter $n_p(\underline{x}, t)$ comme nouvelle variable d'état au même titre que la vitesse $\underline{v}(\underline{x}, t)$ ou que la fonction de corrélation de paire $g(\underline{x}, \underline{R}, t)$.

Dans ce chapitre nous considérons des écoulements avec des taux de cisaillement constants (voir Sec. 3.3) ne nécessitant pas la prise en compte de la variation de n_p , mais aussi des écoulements complexes (voir Sec. 4) où l'approximation $n_p = \text{const}$ ne constitue qu'un modèle approximatif dans lequel la migration des sphères est ignorée. L'impact d'une telle migration dans l'évolution des systèmes comme ceux présentés Sec. 4.3 et 4.4, reste ainsi un problème ouvert.

L'équation gouvernant l'évolution temporelle de l'équation de Smoluchowski s'écrit [Zmievski *et al.*, 2005] :

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (g v_\alpha) - \frac{\partial}{\partial R_\alpha} \left(g R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right) + \frac{\partial}{\partial R_\gamma} (g \lambda_{\gamma\alpha\beta} D_{\alpha\beta}) \\ & + \frac{\partial}{\partial R_\alpha} \left(g \Lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial R_\beta} (U + k_B T \ln g) \right) \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

Dans ce qui suit, l'utilisation des indices est soumise à la convention de la notation d'Einstein (somme des indices se répétant).

De plus $\underline{v}(\underline{x})$ est la vitesse moyenne des suspensions, $\underline{D}(\underline{x})$ le tenseur des taux de déformation tel que

$$D_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} \right) \quad (\text{III.3})$$

et les tenseurs $\underline{\Lambda}$ et $\underline{\lambda}$ sont coefficients cinétiques qui sont fonctions de \underline{R} , du rayon des particules a , et de la densité de particules n_p (ou de façon équivalente de la fraction volumique $\phi = (4/3)\pi n_p a^3$). Ces coefficients cinétiques dérivent du problème de Stokes (mouvement de sphère dure dans un

fluide newtonien). Ils sont définis dans [Zmievski *et al.*, 2005] par :

$$\Lambda_{\alpha\beta} = \frac{k_B T}{3\pi\eta_0 a} \left[\sigma_1(R/a) \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} + \sigma_2(R/a) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} \right) \right] \quad (\text{III.4})$$

$$\lambda_{\alpha\beta\gamma} = \left[\mu_1(R/a) \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} + \mu_2(R/a) \left(\delta_{\alpha\beta} - \frac{R_\alpha R_\beta}{R^2} \right) \right] R_\gamma \quad (\text{III.5})$$

Les particules sont soumises à plusieurs forces et notamment aux forces provenant des interactions particule-particules directes correspondant à la contribution du terme $U(R)$ dans III.2

$$U(R) = U_{HC}(R) + U_{nl}(R) \quad (\text{III.6})$$

et qui est une somme du potentiel de sphère dure $U_{HC}(R)$ ("Hard Core"),

$$U_{HC}(R) = \begin{cases} 0, & \text{for } R > 2a \\ \infty, & \text{for } R \leq 2a \end{cases} \quad (\text{III.7})$$

et d'un potentiel non-local $U_{nl}(R)$ dû aux interactions longue-portée (c'est à dire au delà de l'échelle intramoléculaire) tel que les forces électrostatiques. Dans le cas présent la prise en compte du potentiel de sphère dure U_{HC} se fera directement par l'intégration de conditions aux limites adéquates, et U_{nl} est choisi pour être la partie répulsive du potentiel de Lennard-Jones

$$U_{nl}(R) = \frac{\epsilon}{R^{12}}, \quad \text{pour } R \geq 2a \quad (\text{III.8})$$

où ϵ est une constante positive.

Les particules sont aussi soumises aux forces browniennes, exprimées par $k_B T \ln g$ ainsi qu'aux forces hydrodynamiques contenues dans les termes $\underline{\underline{\Lambda}}$ et $\underline{\underline{\lambda}}$ de l'Eq. (III.2).

2.2 Conditions aux limites du problème de théorie cinétique

Comme nous l'avons vu précédemment, l'équation d'évolution de g est soumise à des conditions aux limites. Puisque nous sommes en présence de sphères dures, il faut appliquer une condition aux frontières de l'espace des configurations telle que les particules ne puissent pas se chevaucher ou se

pénétrer. Ainsi pour $R = 2$ le flux à travers la frontière et perpendiculaire à celle-ci est nul soit

$$n_\alpha J_\alpha \Big|_{R=2a} = 0 \quad (\text{III.9})$$

avec $n_\alpha = R_\alpha/R$ et

$$J_\alpha = \left(-g R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + g \lambda_{\alpha\beta\gamma} D_{\beta\gamma} \right) + g_{eq} \Lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial R_\beta} \frac{g}{g_{eq}} \quad (\text{III.10})$$

g_{eq} est la fonction de corrélation à l'équilibre définie par :

$$g_{eq} = \exp\left(-\frac{U_{nl}}{k_B T}\right) \quad (\text{III.11})$$

D'autre part lorsque la distance inter-particulaire augmente ($R \rightarrow \infty$) les suspensions ne sont plus corrélées et g tend vers une constante qui est liée à la densité de particules en suspension, qu'on suppose égale à n_p^2

$$g(R \rightarrow \infty) \rightarrow n_p^2 \quad (\text{III.12})$$

Forme adimensionnelle :

Pour mettre l'équation de Smoluchowski (III.2) sous forme adimensionnelle nous suivons la même procédure que [Zmievski *et al.*, 2005]. Introduisons tout d'abord le temps adimensionnel $t \rightarrow t/\tau_S$ où τ_S est le temps caractéristique de relaxation associé avec l'équation de Smoluchowski :

$$\tau_S = \frac{6\pi\eta_0 a^3}{k_B T} \quad (\text{III.13})$$

où η_0 est la viscosité du solvant.

Il vient naturellement un autre temps caractéristique τ_{hyd} issu de l'écoulement macroscopique et qui est lié au taux de déformation caractéristique moyen $\dot{\gamma}$ par

$$\tau_{hyd} = \dot{\gamma}^{-1} = \left((D_{\alpha\beta} D_{\beta\alpha})^{1/2} \right)^{-1} \quad (\text{III.14})$$

A partir de ces temps caractéristiques il est possible de définir le nombre adimensionnel de Péclet qui est le rapport entre le temps de relaxation associé à l'équation de Smoluchowski et le temps

hydrodynamique

$$Pe = \frac{\tau_S}{\tau_{hyd}} = \dot{\gamma} \frac{6\pi\eta_0 a^3}{k_B T} \quad (\text{III.15})$$

ainsi que le nombre adimensionnel de Reynolds

$$Re = \frac{\rho a^2 \dot{\gamma}}{\eta_0} \quad (\text{III.16})$$

La forme adimensionnelle des autres variables est donnée par

$$\begin{aligned} \underline{x} &\rightarrow \underline{x}/a, & \underline{R} &\rightarrow \underline{R}/a \\ g &\rightarrow \frac{g}{n_p^2}, & U_{nl} &\rightarrow \frac{1}{k_B T} U_{nl} \end{aligned}$$

et celle des coefficients cinétiques $\underline{\Lambda}$ et $\underline{\lambda}$ s'écrit

$$\Lambda_{\alpha\beta} \rightarrow \frac{3\pi\eta_0 a}{k_B T} \Lambda_{\alpha\beta} \text{ et } \lambda_{\alpha\beta\gamma} \rightarrow \frac{1}{a} \lambda_{\alpha\beta\gamma}$$

On peut ainsi écrire la fonction de corrélation de paire sous une forme adimensionnelle

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial t} &= -Pe \frac{\partial}{\partial x_\gamma} (v_\gamma g) - Pe \frac{\partial}{\partial R_\alpha} \left(R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \Delta g \right) \\ &+ Pe \frac{\partial}{\partial R_\gamma} (g \lambda_{\gamma\alpha\beta} D_{\alpha\beta}) + \frac{\partial}{\partial R_\alpha} \left(g_{eq} \Lambda_{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial R_\beta} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) \right) \end{aligned} \quad (\text{III.17})$$

Dans la suite nous suivons strictement l'approximation des coefficients proposée par Zmievski et al. dans [Zmievski *et al.*, 2005] pour le calcul de σ_i et μ_i , d'après [Batchelor, 1977] et [Batchelor et Green, 1972b] on a :

$$\sigma_1 \approx 1 - \frac{3}{2} \frac{1}{R} + \frac{1^3}{R^3} - \frac{15}{4} \frac{1^4}{R^4} + 109.0 \frac{1^6}{R^6} - 236.0 \frac{1^7}{R^7} \quad (\text{III.18})$$

$$\sigma_2 \approx 1 - \frac{3}{4} \frac{1}{R} - \frac{1}{2} \frac{1^3}{R^3} - 10.336 \frac{1^6}{R^6} \quad (\text{III.19})$$

$$\mu_1 \approx 5 \frac{1^3}{R^3} - 8 \frac{1^5}{R^5} + 25 \frac{1^6}{R^6} - 423.712 \frac{1^7}{R^7} + 907.424 \frac{1^8}{R^8} \quad (\text{III.20})$$

$$\mu_2 \approx -\frac{16}{3} \frac{1^5}{R^5} - 15.317 \frac{1^6}{R^6} \quad (\text{III.21})$$

Enfin par le symbole $\Delta g = g - g_{eq}$ nous décrivons la déviation à partir de l'état d'équilibre de la fonction de corrélation de paire.

2.3 Expression du tenseur des extra-contraintes fluides

Comme nous l'avons vu précédemment, il y a un couplage entre les particules et l'écoulement macroscopique du fluide. Ainsi la contribution de la microstructure sur le champ de vitesses fluides est exprimée par le tenseur des extra contraintes fluides $\underline{\underline{\sigma}}$, qui est une somme de trois termes :

$$\underline{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{\sigma}}^{hydro} + \underline{\underline{\sigma}}^{DI} + \underline{\underline{\sigma}}^{HI}. \quad (\text{III.22})$$

$\underline{\underline{\sigma}}^{hydro}$ est la contribution du fluide newtonien dans lequel sont présentes des suspensions et qui s'exprime sous forme adimensionnelle par

$$\underline{\underline{\sigma}}^{hydro} = - \left(1 + \frac{2}{5} \phi \right) \underline{\underline{D}} \quad (\text{III.23})$$

$\underline{\underline{\sigma}}^{DI}$ sont les contraintes générées par les interactions directes (potentiel de sphère dure) et longue-portée (potentiel de Lennard-Jones) :

$$\underline{\underline{\sigma}}^{DI} = \frac{27}{8\pi} \frac{\phi^2}{Pe} \left\{ 2 \int_{S_2} d\underline{n} \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \Delta g(2\underline{n}) - \int d\underline{R} R \frac{\partial U_{nl}}{\partial \underline{R}} \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \Delta g(\underline{R}) \right\} \quad (\text{III.24})$$

Enfin $\underline{\underline{\sigma}}^{HI}$ est la contribution adimensionnelle issue des interactions hydrodynamiques :

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\sigma}}^{HI} = & - \frac{27}{8\pi} \frac{\phi^2}{Pe} \left\{ 2\mu_1(2) \int_{S_2} d\underline{n} \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \Delta g(2\underline{n}) \right. \\ & \left. + \int d\underline{R} \left[3(\mu_1 - \mu_2) + R \frac{\partial \mu_1}{\partial \underline{R}} + \mu_1 R \frac{\partial U_{nl}}{\partial \underline{R}} \right] \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \Delta g(\underline{R}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

La forme adimensionnelle finale du tenseur des extra-contraintes est donnée par

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\beta} = & - \left(1 + \frac{2}{5}\phi\right) D_{\alpha\beta} - \frac{27}{8\pi} \frac{\phi^2}{Pe} \left\{ 2 \int_{S_2} d\underline{n} \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \times [1 - \mu_1(2)] \Delta g(2\underline{n}) \right. \\ & \left. - \int d\underline{R} \left[3(\mu_1 - \mu_2) + R \frac{\partial \mu_1}{\partial \underline{R}} + (1 - \mu_1) R \frac{\partial U_{nl}}{\partial \underline{R}} \right] \left(n_\alpha n_\beta - \frac{1}{3} \delta_{\alpha\beta} \right) \Delta g(\underline{R}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.26})$$

où $\phi = (4/3)n_p\pi a^3$ est la fraction volumique des particules et \int_{S_2} correspond à l'intégration sur la surface de la sphère de rayon unitaire (ensemble d'extrémités du vecteur \underline{n}) S_2 .

3 Fonction de corrélation de paire en écoulement homogène

Dans le cas des écoulements homogènes la fonction de corrélation de paire Eq. (III.17) est définie seulement sur l'espace des configurations repéré par $\Omega_{\underline{R}}$ et sur l'espace temporel t puisque l'espace physique se réduit à un point. Dans ce cas, le nombre de dimensions restant peu élevé, il est possible de résoudre cette équation grâce à la méthode des Éléments Finis sans recourir à une technique spécifique de réduction dimensionnelle.

3.1 Approche par la méthode des Éléments Finis

Nous présentons dans cette section la discrétisation par Éléments Finis (EF) de la fonction de corrélation de paire $g(\underline{x}, \underline{R}, t)$. Dans un souci de généralité on considère ici la discrétisation de la fonction à la fois sur l'espace physique et l'espace des configurations, repérés respectivement par $\underline{x} \in \Omega_{\underline{x}}$, $\underline{R} \in \Omega_{\underline{R}}$, et où la dimension temporelle repérée par $t \in \Omega_t$ est discrétisée à l'aide d'un schéma classique du type Euler explicite ou implicite.

L'équation d'évolution de la fonction de corrélation de paire (Eq. III.17) peut être réécrite sous la forme :

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \underline{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \underline{x}} + E_0 g + \frac{\partial}{\partial \underline{R}} (\underline{E}_1 g) - \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\underline{E}_2 \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) \right) = F \quad (\text{III.27})$$

où

$$\begin{aligned}
E_0(\underline{x}, \underline{R}) &= Pe \left(\frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial R_\beta}{\partial R_\alpha} \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right) - Pe \left(\frac{\partial \lambda_{\gamma\alpha\beta}}{\partial R_\gamma} D_{\alpha\beta} + \lambda_{\gamma\alpha\beta} \frac{\partial D_{\alpha\beta}}{\partial R_\gamma} \right) \\
\underline{E}_1(\underline{x}, \underline{R}) &= Pe R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} - Pe (\lambda_{\gamma\alpha\beta} D_{\alpha\beta}) \\
\underline{E}_2(\underline{x}) &= g_{eq} \lambda_{\alpha\beta} \\
F(\underline{x}, \underline{R}) &= Pe \left(\frac{\partial R_\beta}{\partial R_\alpha} \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} g_{eq} + R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial g_{eq}}{\partial R_\alpha} \right)
\end{aligned}$$

3.1.a Formulation variationnelle

La forme faible de l'équation III.27 s'écrit :

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} g^* \left(\frac{\partial g}{\partial t} + \underline{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \underline{x}} + E_0 g + \frac{\partial}{\partial \underline{R}} (\underline{E}_1 g) - \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\underline{E}_2 \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) \right) \right) d\underline{x} d\underline{R} \\
= \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} g^* F d\underline{x} d\underline{R}
\end{aligned} \tag{III.28}$$

où g^* est la fonction test.

Dans cette équation, le terme de dérivée seconde se réécrit après intégration par parties :

$$\begin{aligned}
\int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} g^* \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\underline{E}_2 \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) \right) d\underline{x} d\underline{R} = \\
\int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Gamma_{\underline{R}}} g^* \underline{E}_2 \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) d\underline{x} d\underline{R} - \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} \frac{\partial g^*}{\partial \underline{R}} \underline{E}_2 \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) d\underline{x} d\underline{R}
\end{aligned} \tag{III.29}$$

où $\Gamma_{\underline{R}}$ est l'intégration sur la frontière de $\Omega_{\underline{R}}$.

3.1.b Application des conditions aux limites sur l'espace des configurations

Le problème est soumis à deux conditions aux frontières, pour $R \rightarrow 2$ et $R \rightarrow \infty$. Dans le cas où $R \rightarrow \infty$, nous supposons que la fonction de corrélation de paire tend vers la distribution uniforme, c'est à dire $g = 1$. A la surface de la particule ($R \rightarrow 2$), nous adoptons la condition de flux nul introduite par [Batchelor, 1977]. Cela signifie que le flux disparaît pour $R = 2$:

$$n_\alpha \left[Pe \left(-R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \lambda_{\gamma\alpha\beta} D_{\alpha\beta} \right) g + \underline{E}_2 \frac{\partial}{\partial R_\beta} \left(\frac{g}{g_{eq}} \right) \right] = 0 \tag{III.30}$$

avec $n_\alpha = R_\alpha/R$.

Ainsi à la surface de la particule

$$n_\alpha \left[\underline{\underline{E}}_2 \frac{\partial}{\partial R_\beta} \left(\frac{g}{g_{eq}} \right) \right] = n_\alpha \left[\underbrace{Pe \left(R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} - \lambda_{\gamma\alpha\beta} D_{\alpha\beta} \right)}_{\underline{\underline{E}}_1} g \right] \quad (\text{III.31})$$

En remplaçant l'égalité précédente dans l'expression du terme de dérivée seconde, l'équation (III.29) se réécrit

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} g^* \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\underline{\underline{E}}_2 \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial g}{\partial g_{eq}} \right) \right) d\underline{x} d\underline{R} = \\ \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Gamma_{\underline{R}}} g^* (\underline{n} \cdot \underline{\underline{E}}_1) g d\underline{x} d\underline{R} - \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} \frac{\partial g^*}{\partial \underline{R}} \underline{\underline{E}}_2 \left(\frac{\partial 1}{\partial g_{eq}} \frac{\partial g}{\partial \underline{R}} + g \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{\partial 1}{\partial g_{eq}} \right) \right) d\underline{x} d\underline{R} \end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

La forme faible de l'équation (III.27) prenant en compte la condition de flux nul à la frontière est finalement donnée par

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} \left(g^* \frac{\partial g}{\partial t} + g^* \underline{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \underline{x}} + g^* \underline{\underline{E}}_0 g + g^* \underline{\underline{E}}_1 \frac{\partial g}{\partial \underline{R}} + \frac{\partial g^*}{\partial \underline{R}} \underline{\underline{E}}_2 \frac{\partial g}{\partial \underline{R}} + \frac{\partial g^*}{\partial \underline{R}} \underline{\underline{E}}_3 g \right) d\underline{x} d\underline{R} \\ - \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Gamma_{\underline{R}}} g^* (\underline{n} \cdot \underline{\underline{E}}_1) g d\underline{x} d\underline{R} = \int_{\Omega_{\underline{x}} \times \Omega_{\underline{R}}} g^* F d\underline{x} d\underline{R} \end{aligned} \quad (\text{III.33})$$

avec

$$\underline{\underline{E}}_0(\underline{x}, \underline{R}) = Pe \left(\frac{\partial v_\gamma}{\partial x_\gamma} + \frac{\partial R_\beta}{\partial R_\alpha} \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right) - Pe \left(\frac{\partial \lambda_{\gamma\alpha\beta}}{\partial R_\gamma} D_{\alpha\beta} + \lambda_{\gamma\alpha\beta} \frac{\partial D_{\alpha\beta}}{\partial R_\gamma} \right) \quad (\text{III.34})$$

$$\underline{\underline{E}}_1(\underline{x}, \underline{R}) = Pe \left(R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} - \lambda_{\gamma\alpha\beta} D_{\alpha\beta} \right) \quad (\text{III.35})$$

$$\underline{\underline{E}}_2(\underline{R}) = \Lambda_{\alpha\beta} \quad (\text{III.36})$$

$$\underline{\underline{E}}_3(\underline{R}) = \Lambda_{\alpha\beta} g_{eq} \frac{\partial}{\partial \underline{R}} \left(\frac{1}{g_{eq}} \right) \quad (\text{III.37})$$

$$F(\underline{x}, \underline{R}) = Pe \left(\frac{\partial R_\beta}{\partial R_\alpha} \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} g_{eq} + R_\beta \frac{\partial}{\partial R_\alpha} \left(\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \right) g_{eq} + R_\beta \frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} \frac{\partial g_{eq}}{\partial R_\alpha} \right) \quad (\text{III.38})$$

et \underline{v} le champ des vitesses fluides.

3.2 Discrétisation de l'espace des configurations

L'espace des configurations représente la distance entre les centres des particules et est repéré par le vecteur de séparation de paire $\underline{R} \in \Omega_{\underline{R}}$. La taille de l'espace est donnée par la distance adimensionnelle minimale $R_{min} = 2$ correspondant à la distance minimale entre les centres de deux particules de rayon 1, et maximale $R_{max} = +\infty$. Cependant, comme la corrélation entre les particules diminue lorsque la distance entre elles augmente, il est possible de borner R_{max} et d'appliquer une condition à la limite sur cette frontière (voir section précédente). On peut voir dans [Zmievski *et al.*, 2005] que la fonction de corrélation de paire tend vers une distribution presque uniforme pour $R_{max} > 5$ et c'est pourquoi on pose $R \in [2, 5]$.

L'approche par la méthode des EF présentée dans la section précédente peut être effectuée sur un espace des configurations à 1, 2 ou 3 dimensions. Si la discrétisation unidimensionnelle de l'espace des configurations ne semble pas pertinente, la discrétisation sur un espace bi-dimensionnel peut être justifiée lors d'un écoulement plan. Dans ce cas l'espace des configurations correspond à un disque de rayon $R \in [2, 5]$.

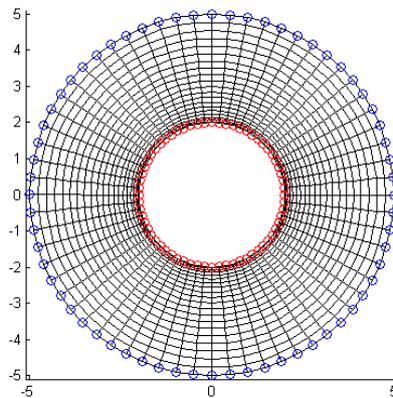


FIGURE III.4 – Maillage de l'espace des configurations 2D. Les frontières intérieure et extérieure sont respectivement repérées en rouge et bleu.

L'espace des configurations à deux dimensions, présenté Fig. III.4 est maillé à l'aide de 1280 éléments à 4 nœuds à interpolation linéaire. Dans le cas d'un espace de dimension 3, celui-ci est représenté par une sphère creuse de rayon $R \in [2, 5]$. La figure III.5 représente la moitié du domaine 3D maillé à l'aide d'éléments linéaires à 8 nœuds.

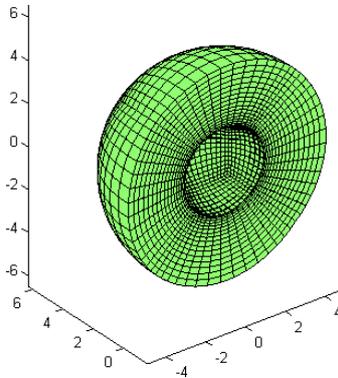


FIGURE III.5 – Maillage de l'espace des configurations 3D.

3.3 Résultats numériques en écoulement homogène stationnaire

Nous présentons dans cette section les résultats issus de la fonction de corrélation de paire en écoulement simple et obtenus à l'aide de la méthode EF. Les résultats sont présentés pour un espace de configurations à 2 et 3 dimensions et pour un écoulement de cisaillement simple.

3.3.a Fonction de corrélation définie sur un espace 2D

L'écoulement de cisaillement est défini par :

$$\underline{\nabla} \underline{v} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.39})$$

La fonction de corrélation de paire présentée Fig. III.8 correspond schématiquement à la répartition des particules initialement distribuées Fig. III.6 et soumises à un cisaillement : les particules migrent dans le sens de l'écoulement. Comme on peut le voir sur les figures suivantes, il en résulte un rapprochement des particules dans la direction associée au second vecteur propre des déformations fluides et un éloignement dans la direction associée au premier vecteur propre .

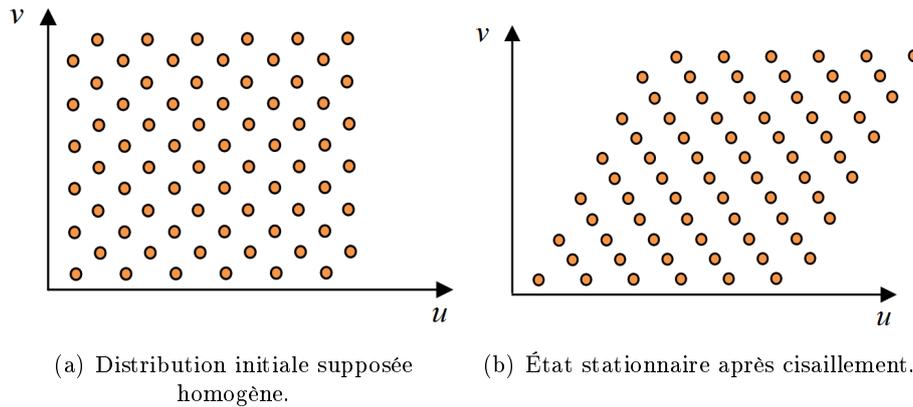


FIGURE III.6 – Influence schématique du gradient de vitesse sur des particules en cisaillement simple, dont la distribution initiale est supposée homogène.

Notons que dans la littérature (voir par exemple le récent article de [Morris, 2009]) les quarts de cercle dans lesquels on observe un rapprochement de particule du cisaillement simple sont dénommés *quadrant de compression fluide* et à l'inverse les quarts de cercle où l'on observe un éloignement des particules sont appelés *quadrant d'extension fluide*, bien que, d'un point de vue strictement mécanique, il n'y ait ni compression ni extension. Ainsi, lorsqu'on observe une particule d'un système colloïdal située en un point O du domaine et soumise à un écoulement de cisaillement homogène, l'évolution des particules autour de celle-ci peut être schématisée tel que sur la Fig. III.7.

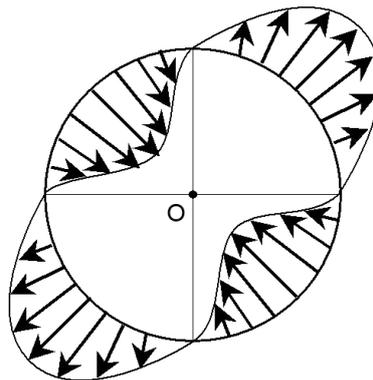


FIGURE III.7 – Fonction densité sur les frontières du rayon lors d'un cisaillement simple. Les quadrants de compression sont repérés par les flèches en direction du centre et les quadrants d'extensions ont les flèches dans le sens inverse.

La Fig. III.8 représente l'état stationnaire de la fonction de corrélation de paire dans un écoulement de cisaillement simple avec $Pe = 1$ et $\epsilon = 0$.

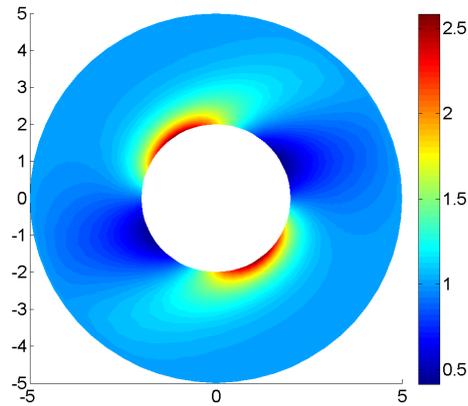


FIGURE III.8 – État stationnaire de la fonction de corrélation de paire dans un écoulement de cisaillement simple.

Nous observons sur la Fig. III.6 que l'anisotropie diminue lorsque que R augmente, c'est à dire que g tend vers 1, ce qui correspond bien à la condition à la limite prescrite : $g(R)|_{R=5} = 1$ et qui, d'un point de vue mécanique, signifie que les particules distantes de 5 fois le rayon (et plus) n'ont qu'une très faible interaction avec la particule considérée. D'un autre coté, pour les faibles R , l'anisotropie de la microstructure devient significative et est orientée dans la direction du gradient de vitesse, ce qui est tout à fait en accord avec les résultats de la littérature [Batchelor et Green, 1972b], [Batchelor, 1977], [Brady et Morris, 1997] ou encore [Zmievski *et al.*, 2005].

3.3.b Fonction de corrélation définie sur un espace 3D

Dans le cas où l'espace des configurations est représenté en 3 dimensions, l'écoulement de cisaillement est défini par

$$\underline{\nabla} \underline{v} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.40})$$

Les figures III.9(a)-(d) représentent la répartition de la fonction de corrélation de paire en 3D (a) ainsi que sur les différents plans de coupe, $w = 0$ (b), $v = 0$ (c) et $u = 0$ (d).

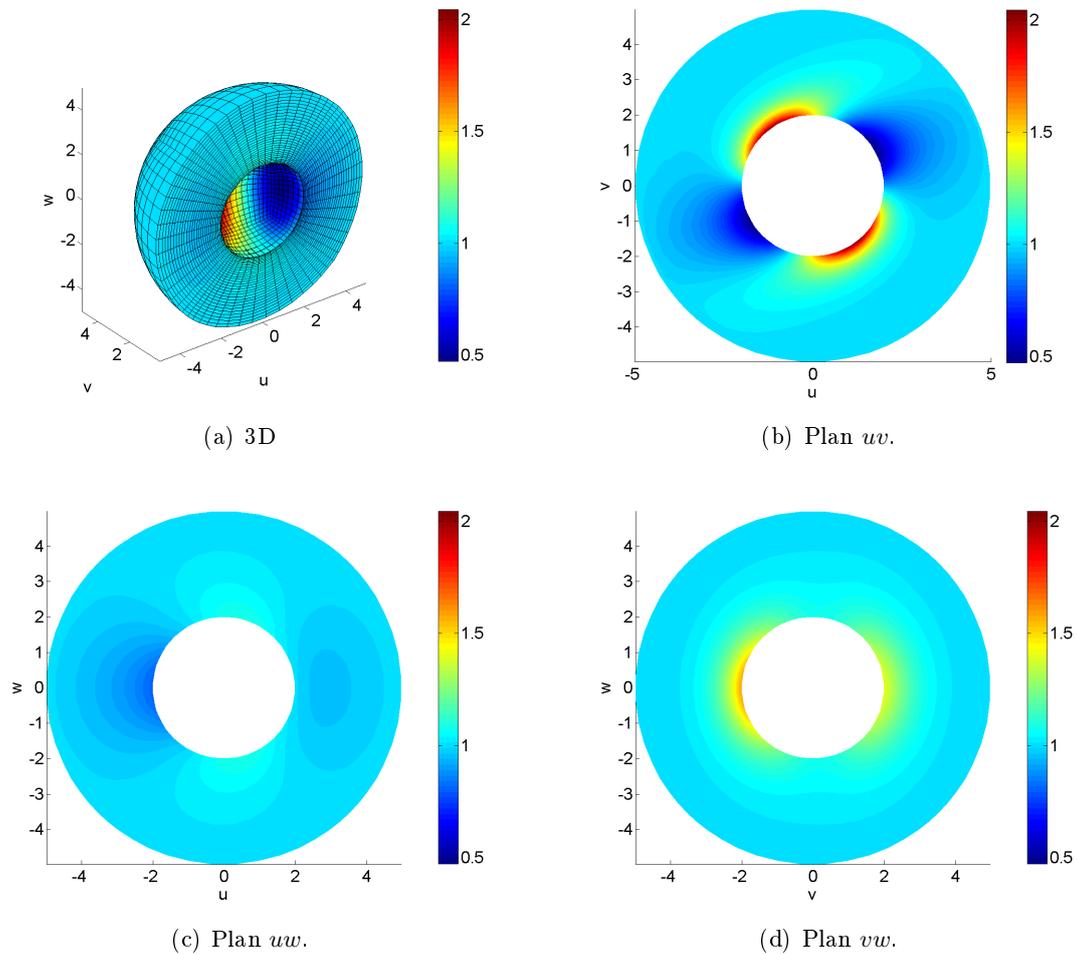


FIGURE III.9 – État stationnaire de la fonction de corrélation de paire en écoulement de cisaillement simple dans un espace de configurations 3D. Le nombre de Péclet est défini à 1 et $\epsilon = 0$. Représentation de la moitié de l'espace des configurations (a), et sur les plans $w = 0$ (b), $v = 0$ (c) et $u = 0$ (d).

On peut noter que la valeur maximale de l'anisotropie prédite est assez différente selon la dimension de l'espace des configurations puisque nous passons d'un maximum de 2.5 dans le cas 2D à 2 dans le cas 3D bien que l'orientation dans le plan de cisaillement fluide soit identique. Nous observons dans les deux cas une augmentation significative de la distribution dans le quadrant de compression fluide et une diminution dans le quadrant d'extension.

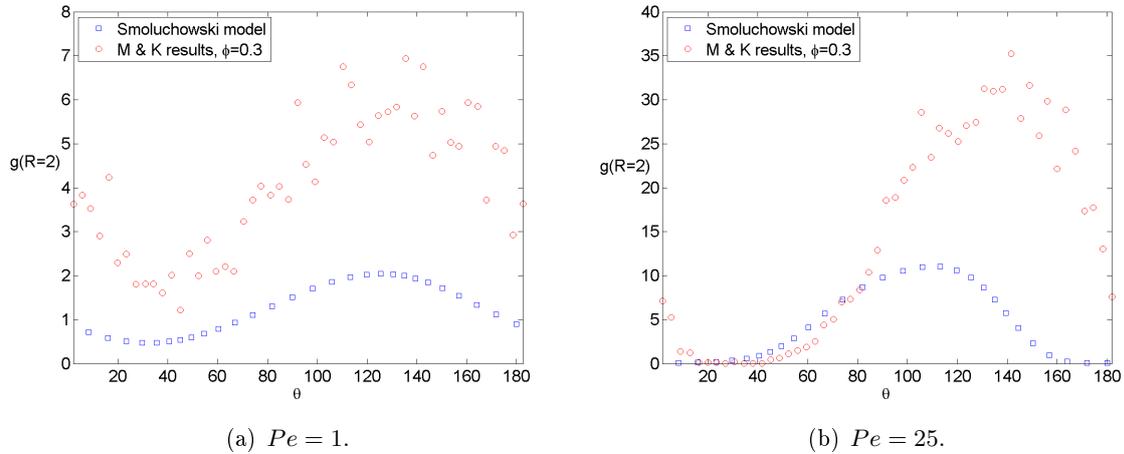


FIGURE III.10 – Fonction de corrélation de paire pour $R = 2$ en fonction de l’angle dans le plan de cisaillement. Comparaison entre les résultats obtenus par [Morris et Katyal, 2002] utilisant une approche SD, pour $\phi = 0.3$ et $Pe = 1$ et $Pe = 25$, et ceux issus du modèle de Smoluchowski avec $\epsilon = 0$ et un espace des configurations 3D.

Les figures III.10(a) et III.10(b) illustrent les valeurs prises par la fonction de corrélation de paire en écoulement de cisaillement simple dans le plan de cisaillement ($w = 0$). On repère le plan en coordonnées cylindriques et on trace $g(2, \theta)$ pour $Pe = 1$ et $Pe = 25$, ce qui permet de comparer les résultats du modèle de Smoluchowski à ceux obtenus par [Morris et Katyal, 2002] (noté M&K) à l’aide de simulations SD.

Pour les deux valeurs de Pe les résultats obtenus sont symétriquement distribués. Pour $Pe = 1$ le maximum est atteint pour les angles $\theta = 135^\circ$ et le minimum pour $\theta = 45^\circ$, qui correspondent respectivement aux axes de compression et d’extension de l’écoulement de cisaillement. En outre cela correspond bien aux résultats théoriques de [Batchelor, 1977] et est identique en terme d’orientation aux résultats de M&K. Pour $Pe = 25$ le maximum se décale légèrement et est atteint pour $\theta = 120^\circ$, ce qui reste toujours dans le quart de cercle de compression mais qui diffère légèrement de M&K. L’amplitude maximale atteinte pour $Pe = 1$ et $Pe = 25$, respectivement $g(2) \approx 2$ et $g(2) \approx 11$, diffère singulièrement des résultats de M&K mais reste en accord avec la théorie. En effet l’amplitude maximale théorique, donnée dans [Brady et Morris, 1997] pour des suspensions de sphères dures diluées, est de l’ordre de $\mathcal{O}(Pe^{0.78})$.

Finalement les différences observées entre les résultats SD et du modèle de Smoluchowski sont conformes à ce à quoi on pouvait s’attendre : en négligeant des corrélations d’ordre supérieur dans le modèle de Smoluchowski (comme, par exemple, les fonctions de corrélation de paire impliquant

des triplets, des quadruplets, etc) nous ne pouvons pas reproduire les résultats de systèmes denses tels que ceux présentés par M&K Figs. III.10(a) et III.10(b) ($\phi = 0.3$ ou supérieur) mais représentons fidèlement les systèmes dilués.

4 Approche micro-macro en écoulement complexe : description macroscopique ou technique de réduction dimensionnelle ?

Si l'équation III.2 régissant l'évolution de la fonction de corrélation de paire a pour avantage de décrire de façon continue la présence des suspensions de particules, elle comporte néanmoins une redoutable difficulté puisqu'elle est définie sur un espace à haute dimension. La résolution de l'équation III.2 sur ces deux domaines simultanément pose un problème majeur pour les techniques numériques classiques, type EF, qui souffrent de la terrible *malédiction de la dimensionnalité* : la complexité des algorithmes, et donc le coût du calcul numérique, augmente de façon exponentielle en fonction du nombre de dimensions. Dans le cas d'écoulements homogènes, comme présentés dans la section précédente, l'espace physique est de dimension 0, permettant un traitement EF sans difficulté majeure. Mais en écoulement complexe une telle simplification n'est pas possible et la présence des deux espaces, chacun pouvant être de dimension 3, et de la dimension temporelle, engendre un problème de dimension 7. Or, dans ce cas, si chaque dimension est discrétisée à l'aide de 100 nœuds, le nombre total de degrés de liberté du problème, $100^7 = 10^{14}$, et devient tout à fait prohibitif dans des approches numériques classiques.

4.1 Description macroscopique de la fonction de corrélation de paire

4.1.a Réduction au moment d'ordre deux

Pour éviter d'avoir à gérer un tel nombre de dimensions, dont le coût en terme de calcul et d'espace de stockage est problématique, on peut reformuler le problème à l'aide d'une description plus macroscopique, où $g(\underline{x}, \underline{R}, t)$ est remplacée par son moment du deuxième ordre $\underline{m}(\underline{x}, \underline{R}, t)$ comme l'a suggéré [Phan-Thien, 1995]. Cela revient à réduire l'espace des configurations de 3 à 1 dimension. Dans la suite et pour une plus grande lisibilité on omettra la dépendance de \underline{m} en \underline{x} , \underline{R} et t . Le

moment du second ordre $\underline{\underline{m}}$ s'écrit :

$$m_{\alpha\beta} = \frac{R^2}{4\pi} \int_{\Omega_R} (n_\alpha n_\beta g) d\underline{n} \quad (\text{III.41})$$

où $R = |\underline{R}|$ et \underline{n} le vecteur normal unitaire défini par

$$\underline{n} = \frac{\underline{R}}{R} \quad (\text{III.42})$$

Il permet de remplacer avantageusement g en tant que variable d'état et s'écrit [Zmievski *et al.*, 2005] :

$$\begin{aligned} \frac{d\underline{\underline{m}}}{dt} = Pe \left\{ \underline{\underline{\omega}} \cdot \underline{\underline{m}} - \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{\omega}} + \frac{\partial}{\partial R} R(\mu_1 - 1) \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{D}} + (1 - \mu_2) \times \left(\underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}} + \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} - 2 \underline{\underline{M}} : \underline{\underline{D}} \right) \right\} \\ + \frac{\partial}{\partial R} \left(\sigma_1 g_{eq}^* \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{\underline{\underline{m}}}{g_{eq}^*} \right) \right) - 6 \frac{\sigma_2}{R^2} \left(\underline{\underline{m}} - \frac{1}{3} \delta tr \underline{\underline{m}} \right) \end{aligned} \quad (\text{III.43})$$

La réduction de la fonction de corrélation de paire à son moment du deuxième ordre réduit l'espace des configurations à une seule dimension radiale. Dans le cas d'écoulement complexe, l'espace de définition de $\underline{\underline{m}}$ peut donc atteindre cinq dimensions au maximum : 3 pour l'espace physique, une pour l'espace des configurations et une pour le temps. Lors d'une telle réduction, on peut s'attendre à une perte importante d'informations concernant la microstructure. Cependant, de manière analogue au tenseur d'aire, le tenseur $\underline{\underline{m}}$ conserve plusieurs informations pertinentes au sujet de la microstructure :

- La trace du tenseur normalisé $\underline{\underline{m}}^*(R) = \frac{1}{R^2} \underline{\underline{m}}(R)$ est directement liée à la fonction de corrélation de paire par $\underline{\underline{m}}^* = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_R} (\underline{n} \underline{n} g) d\underline{n}$ et correspond à la moyenne de g en fonction de R . Cela permet d'obtenir la dépendance radiale de g à moindre coût.
- L'orientation de la microstructure est néanmoins accessible en traçant l'ellipsoïde dont les directions et l'amplitudes des axes sont données respectivement par les vecteurs propres et les valeurs propres de $\underline{\underline{m}}^*$.
- Le tenseur des extra contraintes fluides peut être exprimé d'après [Zmievski *et al.*, 2005] seulement

en fonction de $\underline{\underline{m}}$ et dont la forme adimensionnelle s'écrit :

$$\underline{\underline{\sigma}} = - \left(1 + \frac{5}{2}\phi \right) \underline{\underline{D}} - \frac{27}{2} \frac{\phi^2}{Pe} \left\{ 2[1 - \mu_1(2)] \underline{\underline{\dot{m}}}(2) - \int_2^\infty \left(R \frac{\partial U_{nl}}{\partial R} (1 - \mu_1) + 3(\mu_1 - \mu_2) + R \frac{\partial}{\partial R} \mu_1 \right) \underline{\underline{\dot{m}}} dR \right\} \quad (\text{III.44})$$

$$\text{où } \underline{\underline{\dot{m}}} = \underline{\underline{m}} - \frac{1}{3} \underline{\underline{I}} Tr(\underline{\underline{m}}).$$

4.1.b Formulation avec relation de fermeture

Il est important de noter que l'équation qui gouverne l'évolution du moment du second ordre implique le moment du quatrième ordre (noté $\underline{\underline{\underline{M}}}$ dans l'équation III.43), que l'expression du moment du quatrième ordre implique le sixième et ainsi de suite. Il est donc nécessaire d'exprimer le moment du quatrième ordre comme une fonction du moment du second ordre afin d'obtenir un jeu fermé d'équations. Dans [Zmievski *et al.*, 2005] une relation de fermeture a été proposée répondant à certains critères (symétrie, normalisation, résultats exacts pour $Pe \ll 1$ et $Pe \rightarrow \infty$, etc). Avec cette fermeture le terme $\underline{\underline{\underline{M}}} : \underline{\underline{D}}$ de l'équation (III.43) s'écrit :

$$\underline{\underline{\underline{M}}} : \underline{\underline{D}} = \sum_{i=0}^4 \underline{\underline{\underline{M}}}_i : \underline{\underline{D}}$$

$$\underline{\underline{\underline{M}}}_0 : \underline{\underline{D}} = \frac{2}{15} \underline{\underline{D}}$$

$$\underline{\underline{\underline{M}}}_1 : \underline{\underline{D}} = \frac{2}{15} Tr(\underline{\underline{m}} - \underline{\underline{m}}_{eq}) \underline{\underline{D}} + \frac{1}{7} [\delta \underline{\underline{\dot{m}}} : \underline{\underline{D}} + 2(\underline{\underline{\dot{m}}} \cdot \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{\dot{m}}})]$$

$$\underline{\underline{\underline{M}}}_2 : \underline{\underline{D}} = \frac{1}{Tr(\underline{\underline{m}})} \left(\frac{4}{105} I_2 \underline{\underline{D}} - \frac{2}{21} [\delta(\underline{\underline{\dot{m}}} \cdot \underline{\underline{\dot{m}}}) : \underline{\underline{D}} + 2(\underline{\underline{\dot{m}}} \cdot \underline{\underline{\dot{m}}} \cdot \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{\dot{m}}} \cdot \underline{\underline{\dot{m}}})] + \frac{1}{3} (\underline{\underline{\dot{m}}} \underline{\underline{\dot{m}}} : \underline{\underline{D}} + 2 \underline{\underline{\dot{m}}} \cdot \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{\dot{m}}}) \right)$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{M}}_3 : \underline{\underline{D}} = \frac{1}{(Tr(\underline{\underline{m}}))^2} & \left(\frac{8}{45} I_3 \underline{\underline{D}} + \frac{1}{7} I_2 [\delta \underline{\underline{m}} : \underline{\underline{D}} + 2(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}})] \right. \\ & - \frac{1}{3} [\underline{\underline{m}}(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{D}} + (\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}) \underline{\underline{m}} : \underline{\underline{D}} \\ & \left. + 2(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}} + \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}}) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \underline{\underline{M}}_4 : \underline{\underline{D}} = \frac{1}{(Tr(\underline{\underline{m}}))^3} & \left(-\frac{4}{21} I_3 [\delta \underline{\underline{m}} : \underline{\underline{D}} + 2(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}})] \right. \\ & - \frac{4}{7} I_2 [\delta(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{D}} + 2(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}})] \\ & \left. + 2[\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}) : \underline{\underline{D}} + 2\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{D}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}] \right) \end{aligned}$$

où I_2 et I_3 sont respectivement le deuxième et le troisième invariant de $\underline{\underline{m}}$ définis par :

$$I_2 = Tr(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}) \text{ et } I_3 = Tr(\underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \underline{\underline{m}}) \quad (\text{III.45})$$

4.1.c Erreur de la relation de fermeture

Dans l'absence de résultats analytiques exacts, il est très difficile d'évaluer *a priori* l'impact de la relation de fermeture sur le résultat final. Cependant, en comparant les résultats obtenus avec l'approche micro-macro en écoulement simple, on peut efficacement évaluer l'erreur de la relation de fermeture.

Nous choisissons d'évaluer l'influence de la relation de fermeture proposée par [Zmievski *et al.*, 2005] en écoulement de cisaillement simple. Comme l'expression du tenseur $\underline{\underline{m}}$ est proposée pour un espace de configurations de dimension 3, le gradient de vitesse est défini par

$$\underline{\underline{\nabla}} \underline{\underline{v}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III.46})$$

Pour l'approche micro-macro nous sommes dans un cas identique à celui présenté Sec. 3.3.b qui est traité par la méthode des éléments finis.

Lorsqu'on extrait le tenseur du moment d'ordre deux \underline{m} de la fonction de corrélation de paire g et qu'on le compare aux résultats de [Zmiewski *et al.*, 2005] (Fig. III.11 et III.12), on voit que l'introduction de la relation de fermeture influence fortement la solution dans un écoulement de cisaillement simple (avec $Pe = 10$ et $\epsilon = 0$).

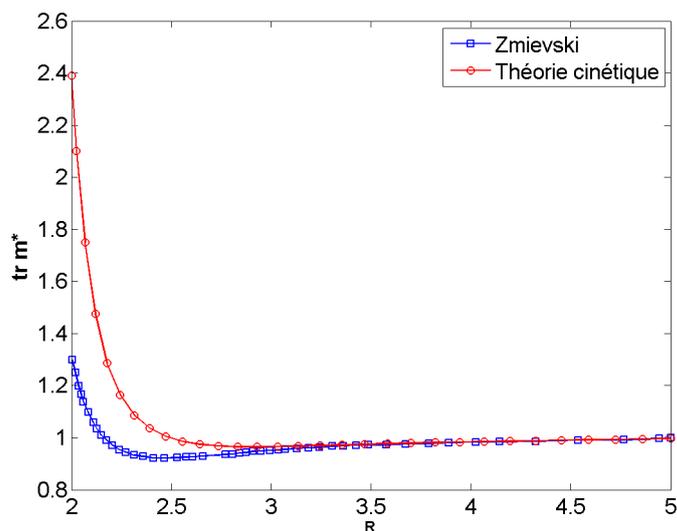


FIGURE III.11 – Tenseur de microstructure adimensionnel, $tr \underline{m}^*$, pour un écoulement de cisaillement simple stationnaire, $Pe = 10$ et $\epsilon = 0$, avec interactions hydrodynamiques.

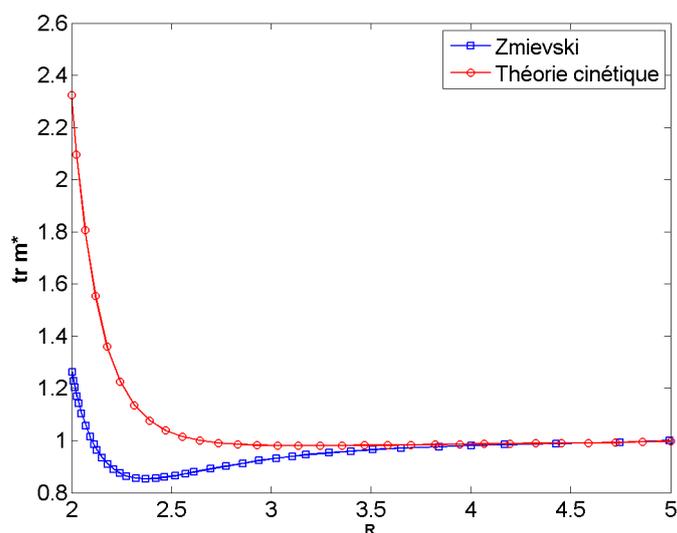


FIGURE III.12 – Tenseur de microstructure adimensionnel, $tr \underline{m}^*$, pour un écoulement de cisaillement simple stationnaire, $Pe = 10$ et $\epsilon = 0$, sans interactions hydrodynamiques.

On peut aussi comparer l'influence de la fermeture sur les extra contraintes fluides en comparant la

première et seconde différence de contraintes normales adimensionnelles :

$$N_1 = Pe^{-1}(\sigma_{22} - \sigma_{11}) \quad (\text{III.47})$$

et

$$N_2 = Pe^{-1}(\sigma_{33} - \sigma_{22}) \quad (\text{III.48})$$

avec $\sigma_{\alpha\beta}$ la composante du tenseur des extra-contraintes adimensionnel. On note sur la Fig. III.13 l'erreur introduite par la relation de fermeture.

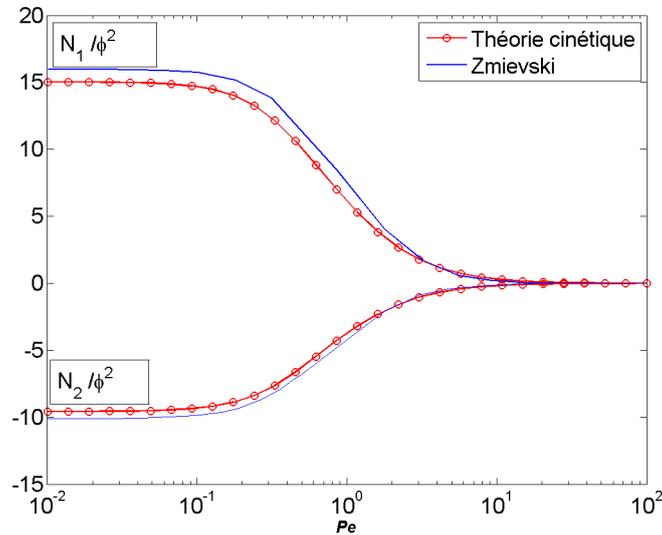


FIGURE III.13 – Première (N_1) et seconde (N_2) différence des contraintes normales en fonction du nombre de Péclet dans un écoulement de cisaillement simple stationnaire avec $\epsilon = 0$.

D'un point de vue purement physique, le comportement rhéofluidifiant observé pour la première différence de contraintes normales est en accord avec les résultats expérimentaux ([Kolli *et al.*, 2002], [So *et al.*, 2001] et [Ohl et Gleissle, 1993]) tout comme la valeur négative de la seconde différence des contraintes normales. Cependant, pour les grands nombres de Péclet, le comportement rhéoépaississant qui a été observé expérimentalement ([Kolli *et al.*, 2002], [So *et al.*, 2001] et [Ohl et Gleissle, 1993]) et numériquement ([Brady, 2001]) dans les suspensions concentrées, ne peut pas être reproduit par le modèle considéré. Deux raisons peuvent en être la cause :

1. les sphères dures sont considérées parfaitement lisses ;
2. la simplification du modèle avec la prise en compte des seules interactions binaires.

4.2 Technique de réduction dimensionnelle

Afin de s'affranchir de l'utilisation d'une relation de fermeture, et des problèmes d'erreur qu'elle peut engendrer, nous choisissons de ne pas réduire la fonction de corrélation de paire à son moment du deuxième ordre et donc de ne pas utiliser de relation de fermeture. Outre le fait qu'aucune erreur n'est introduite dans les équations du modèle, la fonction de corrélation de paire est bien plus riche en termes d'informations. En effet en utilisant le tenseur \underline{m} , toute dépendance angulaire est perdue (l'espace de configurations 3D est alors réduit à un espace 1D, dépendant seulement de R). D'autre part, la réduction de g en \underline{m} ne réduit que l'espace des configurations de 2 dimensions et le problème global peut encore être défini sur un espace de dimension 5. Dans ce cas, les techniques de résolution classiques ne peuvent être envisagées qu'à condition de posséder une puissance de calcul relativement importante et un espace de stockage adapté.

Aussi, afin de pouvoir réaliser les calculs dans un temps raisonnable et avec des moyens matériels accessibles, il est nécessaire d'utiliser une technique de résolution numérique spécifique permettant de traiter les problèmes à grands nombres de dimensions. Nous choisissons d'utiliser la *Proper Generalized Decomposition* (PGD) définie en détails au chapitre I ainsi que dans la littérature (voir [Ammar *et al.*, 2006a], [Ammar *et al.*, 2007], [Ammar *et al.*, 2009]) et dont l'idée principale est de résoudre un système linéaire

$$\mathcal{A}\mathcal{G} = \mathcal{B}$$

où l'opérateur \mathcal{A} et le second membre \mathcal{B} sont écrits sous forme séparée comme une somme de produits de fonctions définies sur un sous-espace du domaine initial.

Application à l'approche micro-macro

La séparabilité de la fonction de corrélation de paire n'est pas immédiate puisque les coefficients de l'équation (III.17) mêlent les dépendances de l'espace physique et des configurations de façon non linéaire à travers le tenseur des taux de déformations et les coefficients cinétiques. Nous choisissons de séparer l'équation (III.17) sur deux sous-espaces définis par l'espace physique et l'espace des configurations, et à traiter l'espace temporel de manière classique (c'est à dire schéma d'Euler explicite ou implicite). Or, s'il n'est pas trivial d'écrire les coefficients de l'équation (III.17) sous forme analytique séparée, la dépendance sur l'espace physique **ne se fait qu'à travers le gradient**

de vitesse. Ainsi pour réécrire les coefficients sous forme séparée, nous choisissons d'exprimer leurs contributions dans la base canonique du gradient de vitesse en suivant la même stratégie que dans Chap. II Sec. 4.1.

La même procédure est répétée pour les coefficients $E_1(\underline{x}, \underline{R})$ et $F(\underline{x}, \underline{R})$.

L'équation III.33 est discrétisée selon chaque coordonnée du modèle par une approximation éléments finis standard. Pour ce faire nous introduisons \mathbf{N} et \mathbf{M} qui représentent les vecteurs contenant les fonctions de forme associées respectivement aux espaces \underline{x} et \underline{R} .

En définissant les matrices

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{\mathbb{A}}}_x^1 &= \int_{\Omega_x} \mathbf{N} v \frac{d\mathbf{N}^T}{d\underline{x}} d\underline{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_R^1 &= \int_{\Omega_R} \mathbf{M} \mathbf{M}^T d\underline{R} \\
 \underline{\underline{\mathbb{A}}}_x^2 &= \int_{\Omega_x} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\underline{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_R^2 &= \int_{\Omega_R} \frac{d\mathbf{M}}{d\underline{R}} \underline{\underline{E}}_2 \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{R}} d\underline{R} \\
 \underline{\underline{\mathbb{A}}}_x^3 &= \int_{\Omega_x} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\underline{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_R^3 &= \int_{\Omega_R} \frac{d\mathbf{M}}{d\underline{R}} \underline{\underline{E}}_3 \mathbf{M}^T d\underline{R} \\
 \underline{\underline{\mathbb{A}}}_x^{3(\alpha-1)+\beta+3} &= \int_{\Omega_x} \mathbf{N} \frac{dv_\alpha}{dx_\beta} \mathbf{N}^T d\underline{x} & \underline{\underline{\mathbb{A}}}_R^{3(\alpha-1)+\beta+3} &= \int_{\Omega_R} \mathbf{M} \underline{\underline{E}}_0^{\alpha\beta} \mathbf{M}^T + \mathbf{M} \underline{\underline{E}}_1^{\alpha\beta} \frac{d\mathbf{M}^T}{d\underline{R}} d\underline{R} \\
 & & & - \int_{\Gamma_R} \mathbf{M} \left(\underline{n} \cdot \underline{\underline{E}}_1^{\alpha\beta} \right) \mathbf{M}^T d\underline{R} \\
 \underline{\underline{\mathbb{B}}}_x^{3(\alpha-1)+\beta} &= \int_{\Omega_x} \frac{dv_\alpha}{dx_\beta} \mathbf{N} d\underline{x} & \underline{\underline{\mathbb{B}}}_R^{3(\alpha-1)+\beta} &= \int_{\Omega_R} F^{\alpha\beta} \mathbf{M} d\underline{R}
 \end{aligned}$$

la forme discrète du problème s'écrit :

$$\underline{\underline{\mathcal{A}}}\underline{\underline{\mathcal{G}}} = \underline{\underline{\mathcal{B}}} \quad (\text{III.49})$$

avec

$$\underline{\underline{\mathcal{A}}} = \sum_{i=1}^{12} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_x^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_R^i \quad (\text{III.50})$$

et

$$\underline{\underline{\mathcal{B}}} = \sum_{i=1}^9 \underline{\underline{\mathbb{B}}}_x^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_R^i \quad (\text{III.51})$$

qui est une équation tensorielle dont les inconnues du champ $\underline{\underline{\mathcal{G}}}$ contiennent le produit tensoriel des fonctions dépendant de \underline{x} et \underline{R} .

4.3 Approche micro-macro pour un écoulement recirculant simple

On souhaite comparer les résultats issus de la PGD avec ceux calculés par la méthode des éléments finis classiques afin de valider l'approche de la réduction dimensionnelle. Pour ce faire on choisit de calculer l'état stationnaire de la fonction de corrélation de paire dans un écoulement recirculant simple présenté sur la Fig. III.14, à la fois par la méthodes des éléments finis et la méthode PGD.

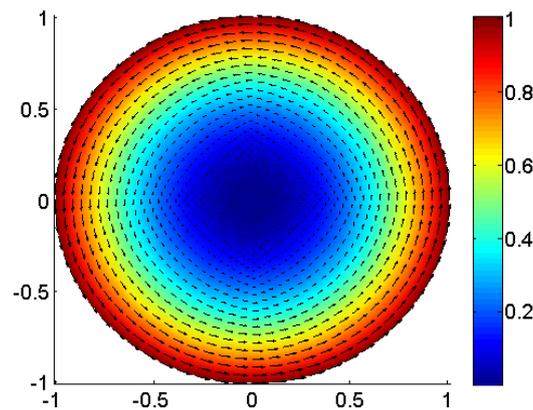


FIGURE III.14 – Géométrie et champ des vitesses fluides dans l'espace physique.

L'écoulement stationnaire est défini par le champ des vitesses fluides \underline{v} tel que :

$$\underline{v} = \begin{pmatrix} -y\sqrt{x^2 + y^2} \\ x\sqrt{x^2 + y^2} \end{pmatrix} \quad (\text{III.52})$$

L'espace de configurations est de dimension 2.

4.3.a Méthode des Éléments Finis : obtention d'une solution de référence

Bien que l'espace physique soit de dimension 2 et que seul l'état stationnaire soit recherché, le calcul éléments finis d'un tel problème reste très délicat. En effet le problème est discrétisé à l'aide de 3905 et 1680 degrés de liberté respectivement pour l'espace physique (2D) et l'espace des configurations (2D), soit près de 6,5 millions de degrés de liberté. Afin de s'affranchir de la difficulté posée par une résolution éléments finis sur tout le domaine, on suit la stratégie suivante : la fonction g est calculée seulement sur une ligne de courant (qui est un cercle parfait dans l'écoulement considéré) en prenant en compte que l'équation gouvernant l'évolution de la fonction de corrélation de paire est

purement advective dans l'espace physique. L'état stationnaire est alors calculé à partir d'un état isotrope en suivant l'évolution de g pendant plusieurs rotations, jusqu'à atteindre la convergence entre deux itérations (Fig. III.15).

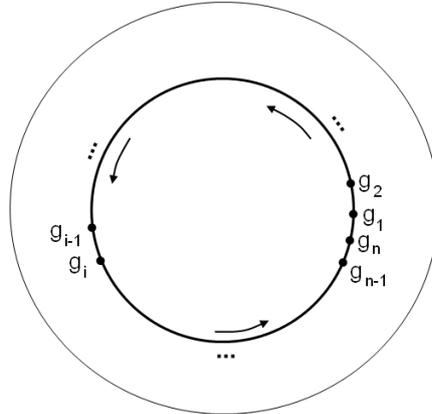


FIGURE III.15 – Evolution de g le long d'une trajectoire pour le calcul par éléments finis.

Ainsi l'algorithme général pour le calcul par éléments finis s'écrit :

```

Initialisation de  $g$ 
Angle  $\alpha = \frac{2\pi R}{\text{nombre de pas}}$ 
 $\underline{C}(\alpha)$  matrice de rotation
tant que  $Erreur > 10^{-8}$  faire
    pour  $pas = 1$  à  $\text{nombre de pas}$  faire
         $\underline{x}_{nouveau} = \underline{C}(\alpha) \cdot \underline{x}_{precedent}$ 
        Résolution de Eq. III.27 pour obtenir  $g(\underline{x}_{nouveau}, \underline{R})$ 
    fin
     $Erreur = \|\underline{g} - \underline{g}_{ancien}\|$ 
     $\underline{g}_{ancien} \leftarrow \underline{g}$ 
fin
    
```

Algorithme 10: Algorithme général pour le calcul par éléments finis.

4.3.b Méthode PGD

Comme défini précédemment, on choisit d'écrire la solution sous forme séparée telle que

$$\mathcal{G} = \sum_{i=1}^N \mathbb{G}_{\underline{x}}^i \otimes \mathbb{G}_{\underline{R}}^i \tag{III.53}$$

et d'utiliser l'algorithme PGD P défini I.

Le système à résoudre est alors donné par

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^{12} \underline{\underline{\mathbb{A}}}_x^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{A}}}_R^i \quad (\text{III.54})$$

Le second terme quant à lui s'écrit

$$\mathcal{B} = \sum_{i=1}^9 \underline{\underline{\mathbb{B}}}_x^i \otimes \underline{\underline{\mathbb{B}}}_R^i \quad (\text{III.55})$$

Remarque :

Bien que la contrainte induite par la présence des suspensions ne soit pas prise en compte dans le calcul du champ des vitesses fluides (qui reste inchangé), ce cas test nous permet d'avoir une comparaison fiable des deux méthodes - PGD et EF - en écoulement complexe : en utilisant les lignes de courant pour le calcul EF nous pouvons résoudre sans stratégie particulière l'approche micro-macro. Le coût à payer en EF d'une telle méthode est la résolution d'un problème équivalent instationnaire alors que nous cherchons la solution d'un problème initialement stationnaire. Notons de plus que la solution EF n'est calculée qu'en un seul nœud de l'espace physique alors que la solution PGD est calculée sur tout le domaine physique.

4.3.c Résultats numériques

La solution du problème EF est considérée comme ayant convergée pour 256 pas de calcul à chaque rotation et nécessite 8 rotations. On représente sur les figures III.16 et III.17 les résultats obtenus pour le nœud de l'espace physique considéré respectivement avec la méthode des éléments finis et la méthode PGD après 50 enrichissements dont les 5 premiers sont présentés Fig. III.18.

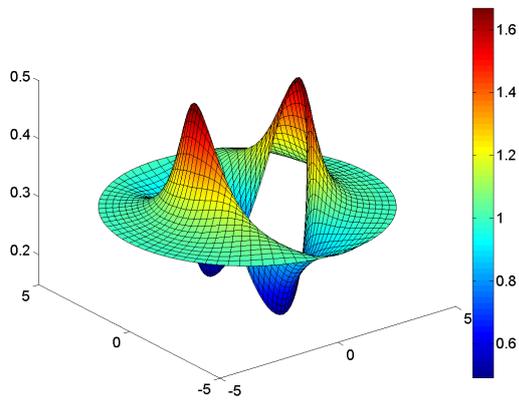


FIGURE III.16 – Espace de configurations obtenu avec la méthode EF.

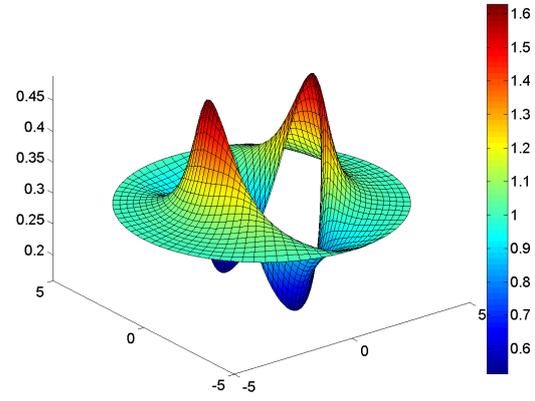


FIGURE III.17 – Espace de configurations obtenu avec la méthode PGD après 50 enrichissements itérations.

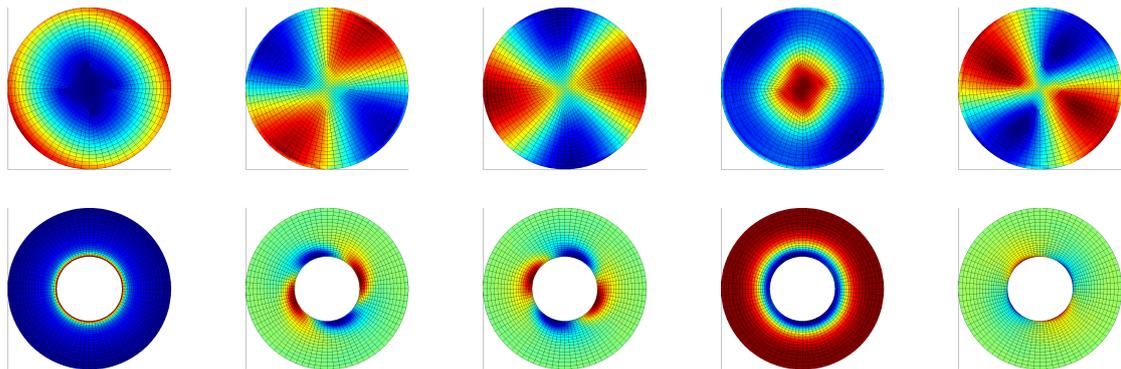


FIGURE III.18 – PGD - Exemple des 5 premiers modes sur l'espace physique (au-dessus) et l'espace des configurations(en-dessous), décroissants de gauche à droite

Comme on peut le voir, les résultats obtenus sont très proches et afin de mieux observer les différences on trace sur la Fig. III.19 la trace de \underline{m}^* en fonction de R . La PGD étant une méthode itérative on choisit de tracer les résultats PGD en fonction du nombre d'enrichissement.

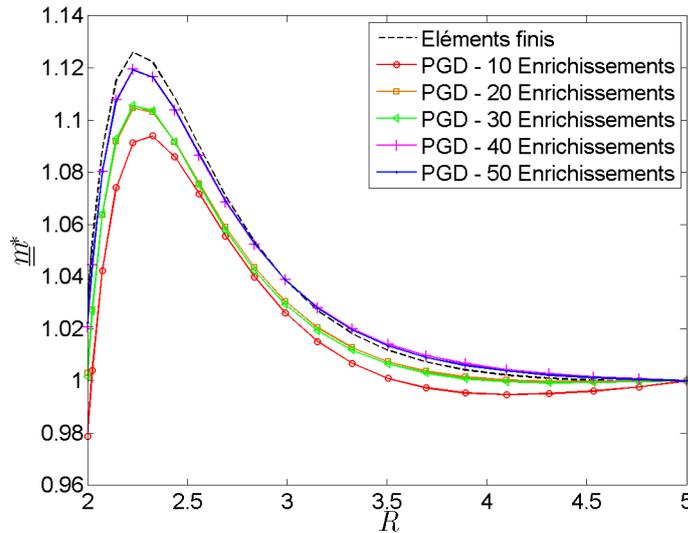


FIGURE III.19 – Trace du moment du second ordre normalisé $\underline{m}^*(R)$ de la fonction de corrélation de paire obtenu par la méthode EF et en fonction du nombre de termes impliqués dans la représentation séparée pour la méthode PGD.

On remarque que la différence entre les résultats PGD et EF dépend fortement du nombre d'enrichissements. De plus la convergence de la PGD n'est pas monotone en fonction du nombre d'itérations de la méthode : alors que la différence de résultat est pratiquement nulle entre 20 et 30 enrichissements, elle devient très significative entre 30 et 40. Notons aussi que les deux méthodes, EF et PGD, ne résolvent pas strictement le même problème puisque la discrétisation n'est pas la même dans les deux cas. On peut néanmoins s'attendre à voir les deux résultats converger vers des solutions proches et dans ce cadre les résultats obtenus par la PGD dès 40 itérations sont tout à fait concluant quant à la précision de la méthode.

Dans cette géométrie, où le champ des vitesses fluides est supposé connu, nous choisissons d'illustrer les capacités de la PGD en présentant tout d'abord l'influence du maillage de l'espace des configurations sur la convergence globale de la méthode puis en comparant les temps de calcul nécessaires pour résoudre le même problème avec la méthode EF et PGD.

Influence de l'espace des configurations sur la convergence globale de la méthode

Nous présentons tous d'abord sur la Fig. III.20 l'erreur² de la solution PGD en fonction du nombre

2. L'erreur est obtenue en comparant la solution obtenue avec la solution EF du même problème.

d'enrichissements m pour trois maillages différents de l'espace des configurations.

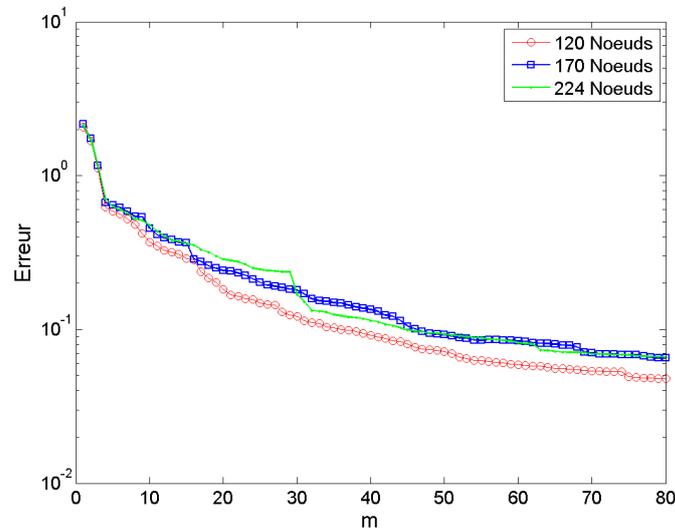


FIGURE III.20 – Erreur de la méthode PGD en fonction du nombre d'enrichissements m utilisés lors de la représentation séparée de la fonction de corrélation de paire, et ce, pour trois maillages différents de l'espace des configurations.

L'influence du raffinement du maillage sur la convergence globale n'est pas significatif puisque l'erreur atteinte après 80 enrichissements est presque identique pour les trois simulations, bien que le maillage le plus fin contienne presque deux fois plus de nœuds que le maillage le plus grossier.

Temps de calcul : illustration de l'efficacité de la PGD

Nous traçons le temps de calcul des méthodes EF et PGD en fonction du nombre total de degrés de liberté du problème Fig. III.21. Chaque calcul PGD est arrêté au bout de 80 enrichissements, ce qui, comme on l'a vu précédemment, offre un très bon degré de précision.

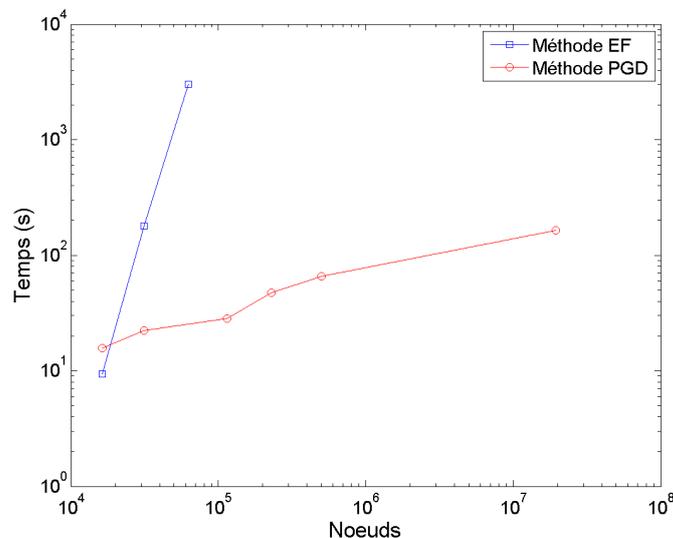


FIGURE III.21 – Temps de calcul pour les méthodes EF et PGD en fonction du nombre total de degrés de liberté du problème.

On peut noter à la fois l'efficacité de la PGD pour traiter des problèmes hautement multidimensionnels et l'effet de la malédiction de la dimensionnalité sur le calcul EF qui atteint alors très vite les limites matérielles. Ces résultats ont été obtenus sur un ordinateur portable standard équipé d'un processeur Intel Core i7 @ 2GHz avec 6Go de RAM. Par ailleurs, dans le cas EF, c'est la quantité de mémoire vive disponible qui a provoqué l'impossibilité de résoudre les problèmes de plus de 10^5 degrés de liberté.

4.4 Approche micro-macro pour un écoulement de cavité

Pour illustrer les performances de la PGD dans le cas d'écoulements complexes, nous considérons dans ce qui suit le problème de la cavité recirculante. Ce cas d'écoulement est fréquent dans de nombreux procédés industriels et est induit par l'écoulement d'un fluide (voir schéma Fig. III.22). Dans notre cas, seule la cavité, de section carrée et de côté $h = 1$, est représentée. En posant $\underline{x} = (x, y)^T$ et en considérant l'écoulement plan avec $\underline{v} = (u, v, 0)$, le champ de vitesse sur la paroi supérieure est imposé sous la forme suivante :

$$v(x) = \frac{16}{h^4} v_{max} x^2 (h - x)^2 \quad (\text{III.56})$$

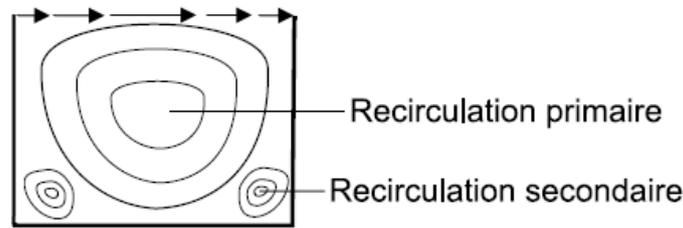


FIGURE III.22 – Recirculation induite par l'écoulement d'un fluide

Ce profil est choisi pour satisfaire les conditions de continuité et de continuité des dérivées aux extrémités.

Dans la suite de la section deux cas sont illustrés :

- Un cas instationnaire et stationnaire défini sur un espace des configurations de dimension 2.
- Un cas stationnaire défini sur un espace des configurations est de dimension 3.

4.4.a Cavité recirculante 2D-2D

Cas instationnaire :

Dans le cas instationnaire l'écoulement fluide est gouverné par l'équation

$$\frac{\partial v_\alpha}{\partial t} = -Pe \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(v_\beta \underline{u}_\alpha + I_{\alpha\beta} p + \frac{1}{Re} \sigma_{\alpha\beta} \right) \quad (\text{III.57})$$

où $\underline{u} = \underline{v} / \rho$, avec ρ la densité moyenne de masse des suspensions, \underline{I} est la matrice identité et p la pression.

$\underline{\sigma}$ est donné par l'équation (III.26) et Re est le nombre adimensionnel de Reynolds défini par :

$$Re = \frac{\rho a^2 \dot{\gamma}}{\eta_0} \quad (\text{III.58})$$

La résolution de l'équation non linéaire (III.57) se fait à l'aide de l'algorithme de résolution itératif de Newton-Raphson. Dans le cas d'écoulement complexe instationnaire, le terme d'évolution temporelle $\frac{\partial g}{\partial t}$ est discrétisé classiquement par un schéma d'Euler implicite. Le système résolu à chaque itération est

$$\mathcal{A}\mathcal{G}^{t+1} = \mathcal{B} \quad (\text{III.59})$$

avec l'opérateur \mathcal{A} défini par

$$\mathcal{A} = \sum_{i=1}^{12} \Delta t (\underline{\mathbb{A}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{A}}_{\underline{R}}^i) + \int_{\Omega_{\underline{x}}} \mathbf{N}\mathbf{N}^T d\underline{x} \otimes \int_{\Omega_{\underline{R}}} \mathbf{M}\mathbf{M}^T d\underline{R} \quad (\text{III.60})$$

et le second membre \mathcal{B}

$$\mathcal{B} = \int_{\Omega_{\underline{x}}} \mathbf{N}\mathcal{G}_{\underline{x}}^t d\underline{x} \otimes \int_{\Omega_{\underline{R}}} \mathbf{M}\mathcal{G}_{\underline{R}}^t d\underline{R} + \sum_{i=1}^9 \Delta t (\underline{\mathbb{B}}_{\underline{x}}^i \otimes \underline{\mathbb{B}}_{\underline{R}}^i) \quad (\text{III.61})$$

où $\mathcal{G}_{\underline{x}}^t$ et $\mathcal{G}_{\underline{R}}^t$ correspondent respectivement à la solution \mathcal{G} au pas de temps t décomposée respectivement sur l'espace physique et l'espace des configurations. L'algorithme correspondant au calcul de la cavité recirculante instationnaire est donné Alg. 11.

```

Initialisation  $g$  isotrope
Initialisation de  $\underline{v}^{t=0} = \underline{0}$ 
pour  $t = 1$  à nombre d'itérations faire
  |  $\underline{v}^{t+1} \leftarrow$  calcul macro ( $g^t$ )
  |  $g^{t+1} \leftarrow$  calcul micro ( $\underline{v}^{t+1}$ )
fin

```

Algorithme 11: Algorithme pour la cavité recirculante instationnaire.

La fonction de corrélation de paire est initialisée telle qu'en tout point de l'espace physique et de l'espace des configurations $g = 1$. Pour $t < 0$, la vitesse est initialement définie nulle pour tout point de l'espace physique et à $t = 0$ le profil de vitesse défini Eq. (III.56) est appliqué sur la paroi supérieure. Les nombres de Péclet et de Reynolds sont définis à 1 et on prend en compte les différentes interactions entre les particules : interactions hydrodynamiques et action longue portée à travers le potentiel répulsif de Lennard-Jones avec $\epsilon = 10^6$.

On choisit d'effectuer 10 itérations avec $\Delta t = 0.01$ dont les figures III.23, III.24 et III.25 représentent le champ des vitesses fluides et les lignes de courant associées respectivement à l'itération 1, 5 et 10. L'algorithme PGD effectuée à chaque itération temporelle 40 enrichissements.

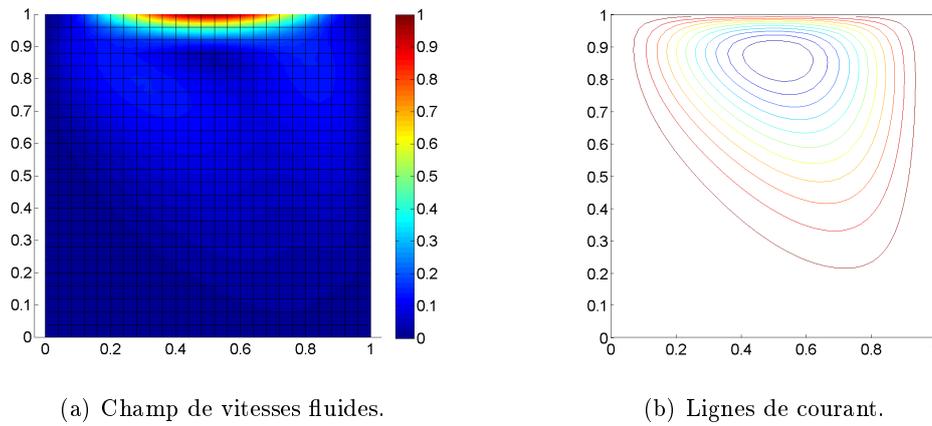


FIGURE III.23 – Champ de vitesses fluides et lignes de courant associées après 1 itération.

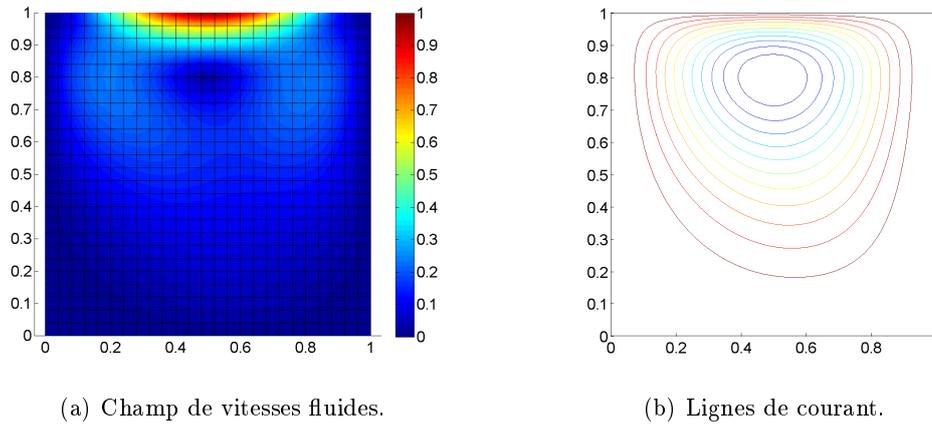


FIGURE III.24 – Champ de vitesses fluides et lignes de courant associées après 5 itérations.

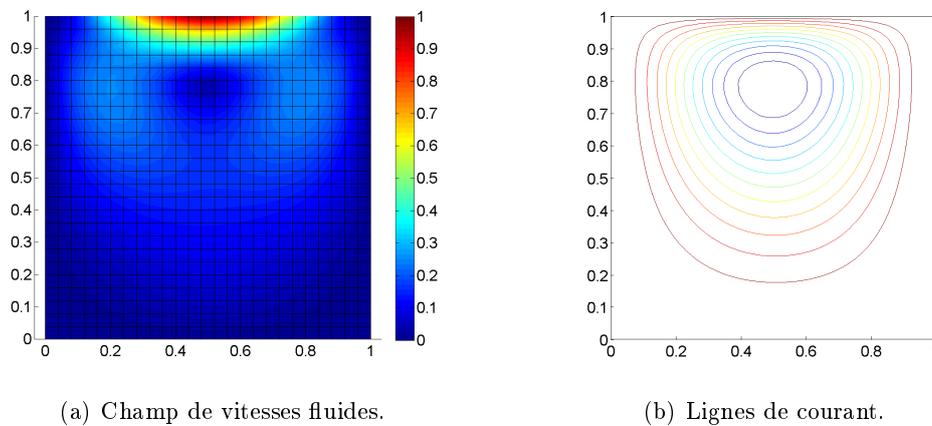


FIGURE III.25 – Champ de vitesses fluides et lignes de courant associées après 10 itérations.

La Fig. III.26 représente les 5 premiers produits de fonctions obtenus pour décrire la solution $\mathcal{G}^{t=10\Delta t}$.

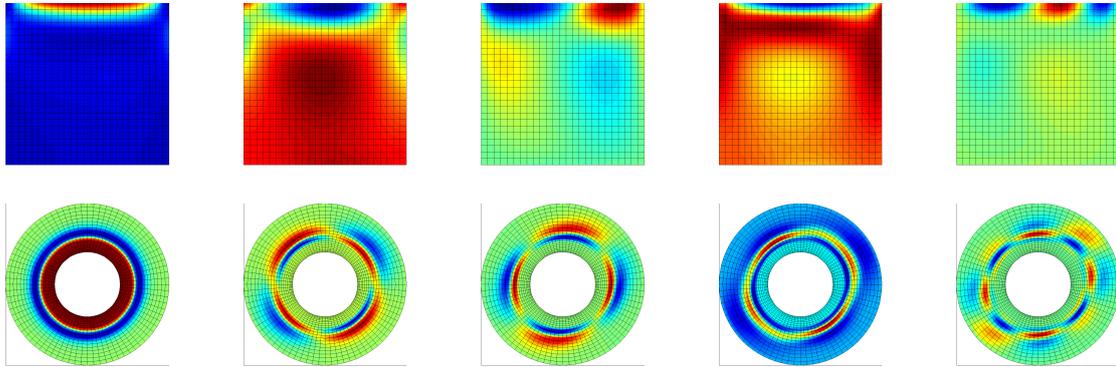


FIGURE III.26 – PGD - Exemple des 5 premiers modes sur l'espace physique (au-dessus) et l'espace des configurations(en-dessous), décroissants de gauche à droite.

On choisit d'évaluer l'évolution de la fonction de corrélation de paire pour trois nœuds de l'espace physique, localisés sur la Fig. III.27.

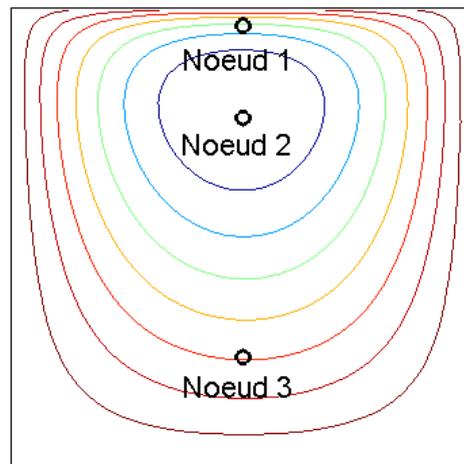


FIGURE III.27 – Localisation des nœuds utilisés pour évaluer l'évolution de la fonction de corrélation de paire.

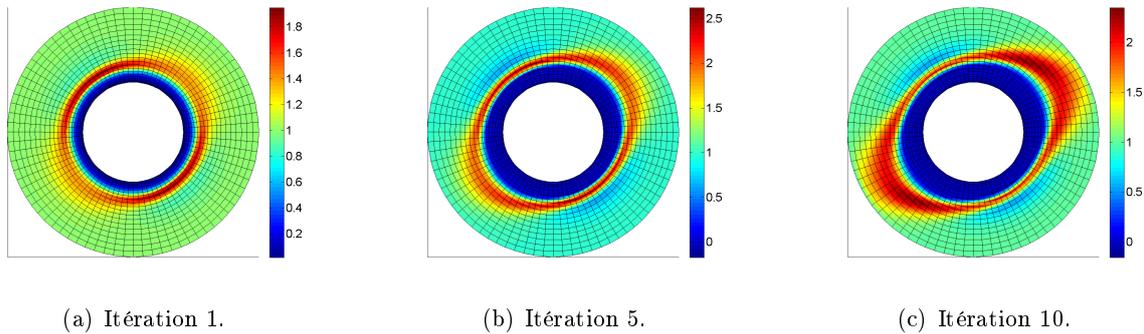


FIGURE III.28 – Espace de configurations du nœud 1 pour l’itération 1, 5 et 10.

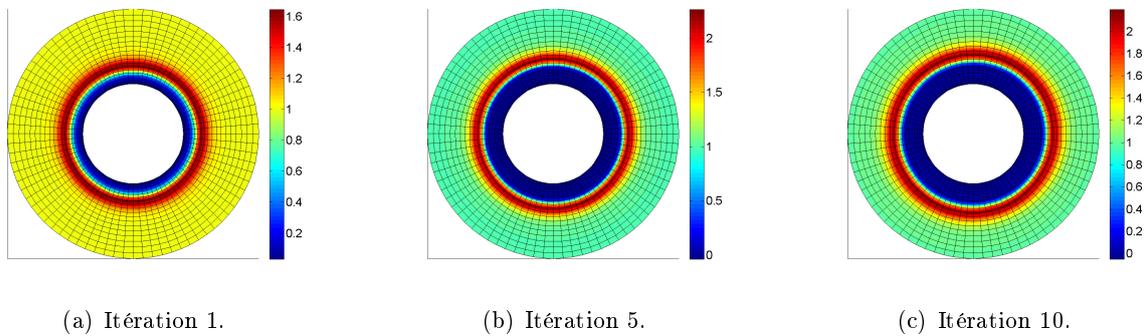


FIGURE III.29 – Espace de configurations du nœud 2 pour l’itération 1, 5 et 10.

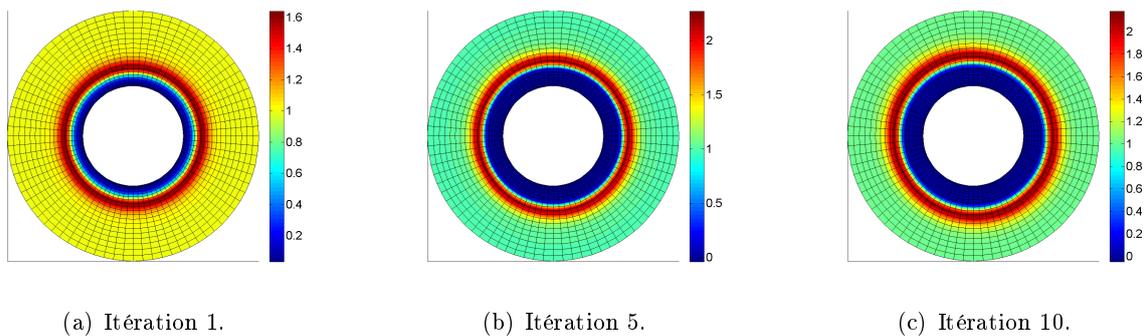


FIGURE III.30 – Espace de configurations du nœud 3 pour l’itération 1, 5 et 10.

Comme on peut le voir sur les figures précédentes, plus le gradients de vitesse fluide augmente et plus l’anisotropie de la microstructure est importante. Ainsi le nœud 1 qui est dans une zone très cisailée, est rapidement anisotrope (dès la première itération) alors que pour les deux autres nœuds la fonction de corrélation de paire reste isotrope. On peut noter aussi l’influence des interactions longue portée, dues au potentiel répulsif de Lennard-Jones, qui génère une zone de distribution nulle

autour des suspensions que l'on peut observer pour les 3 nœuds.

Les figures III.31 et III.32 présentent respectivement l'évolution de la première différence de contraintes $N_1 = \sigma_{22} - \sigma_{11}$ et de σ_{12} aux itérations 1,5 et 10.

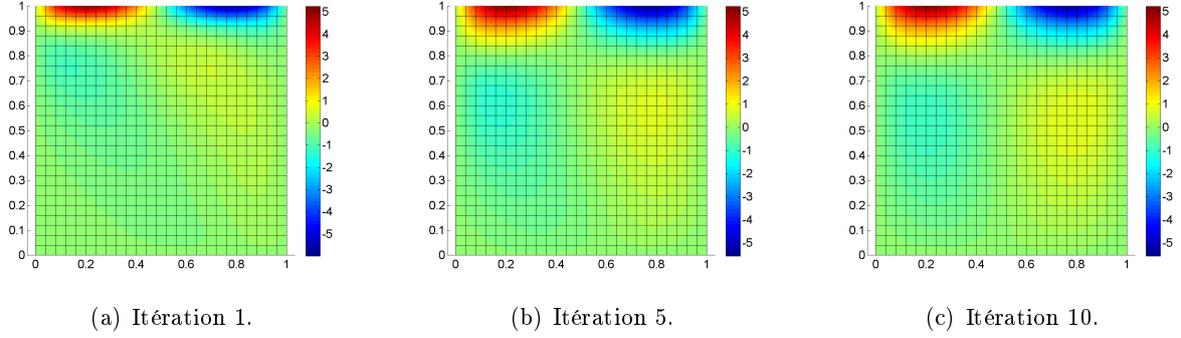


FIGURE III.31 – $(\sigma_{22} - \sigma_{11})$ aux itérations 1, 5 et 10.

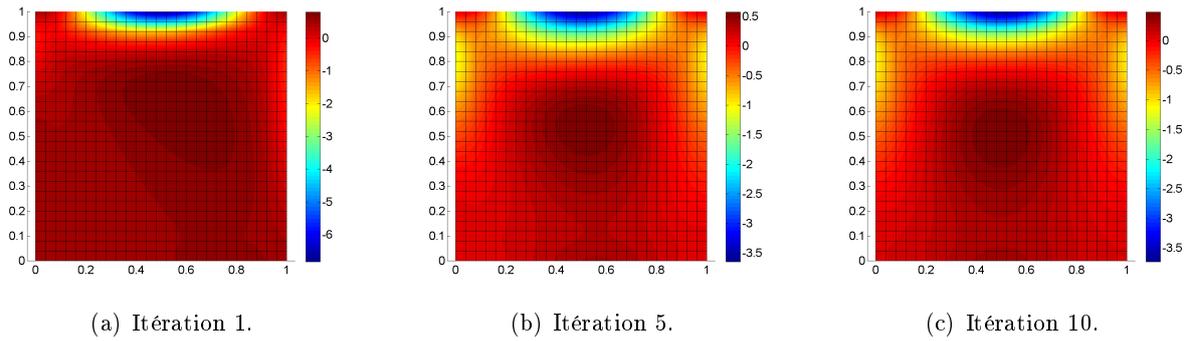


FIGURE III.32 – σ_{12} aux itérations 1, 5 et 10.

Cas instationnaire :

Nous illustrons maintenant le cas de la cavité recirculante en écoulement stationnaire. L'espace des configurations est identique au cas instationnaire et les contraintes induites par la présence de particules sont prises en compte.

En l'absence de suspensions dans le fluide, l'état stationnaire du profil de vitesse fluide pour la cavité complète est donné par la résolution éléments finis de l'équation de conservation de la masse

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \quad (\text{III.62})$$

et de la conservation du moment

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad (\text{III.63})$$

Si le fluide est considéré comme newtonien, le tenseur des contraintes fluides s'écrit

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p\underline{\underline{I}} + 2\eta\underline{\underline{D}} \quad (\text{III.64})$$

Dans le cas de présence de suspensions dans le fluide, la conservation du moment s'écrit

$$\nabla \cdot \left(-p\underline{\underline{I}} - \frac{1}{Re} \underline{\underline{\sigma}} \right) = 0 \quad (\text{III.65})$$

Dans ce cas l'état stationnaire ne peut être trouvé directement car la fonction de corrélation de paire nécessite de connaître le champ de vitesse et réciproquement. Ainsi un algorithme de point fixe est utilisé pour connaître l'état stationnaire de la fonction de corrélation de paire et du champ de vitesse en présence de suspensions. L'algorithme général s'écrit :

```

Initialisation  $g$ 
tant que  $Erreur > 10^{-5}$  faire
     $\underline{v} \leftarrow$  calcul macro ( $g$ )
     $\underline{v} \leftarrow \omega \underline{v} + (1 - \omega) \underline{v}_{ancien}$ 
     $g \leftarrow$  calcul micro ( $\underline{v}$ )
     $Erreur = \|\underline{v} - \underline{v}_{ancien}\|$ 
     $\underline{v}_{ancien} \leftarrow \underline{v}$ 
fin
    
```

Algorithme 12: Algorithme pour la cavité recirculante stationnaire.

ω est la paramètre de relaxation du point fixe. Si $\omega = 1$ on obtient une méthode de point fixe sans relaxation. Pour chaque itération de l'algorithme de point fixe, la fonction de corrélation de paire g est résolue à l'aide de la PGD avec 40 enrichissements. Le système est semi dilué $\phi = 0.05$ et et caractérisé par $Pe = 1$, $Re = 1$ et $\epsilon = 10^6$.

Comme on peut le voir sur la Fig. III.33, représentant la différence absolue entre les vitesses fluides d'un système avec et sans suspensions, l'influence des suspensions sur le champ des vitesses fluides est négligeable.

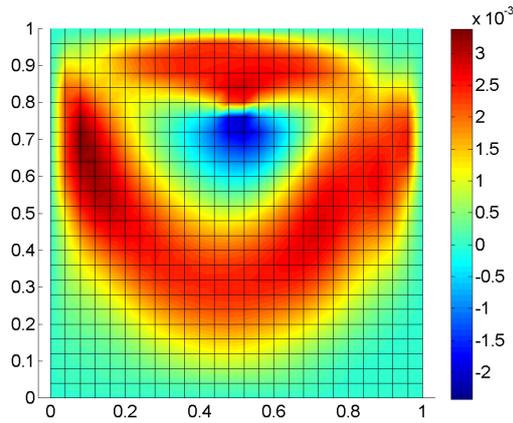


FIGURE III.33 – Différence absolue entre le champ de vitesse stationnaire lors d'un écoulement newtonien sans suspensions et avec présence de suspensions colloïdales, caractérisées par $Pe = 1$, $Re = 1$, $\phi = 0.05$ et $\epsilon = 10^6$.

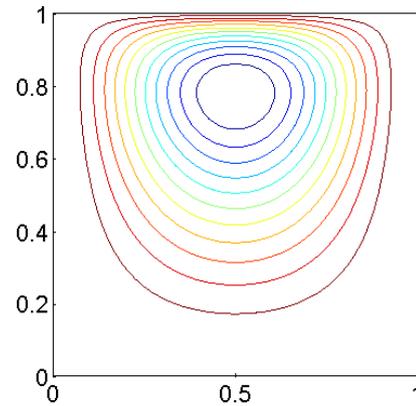


FIGURE III.34 – Lignes de courant du champ des vitesses fluides une fois la convergence du point fixe atteinte.

La Fig. III.35 illustre les 5 premiers produits de fonctions obtenus pour décrire la solution de g .

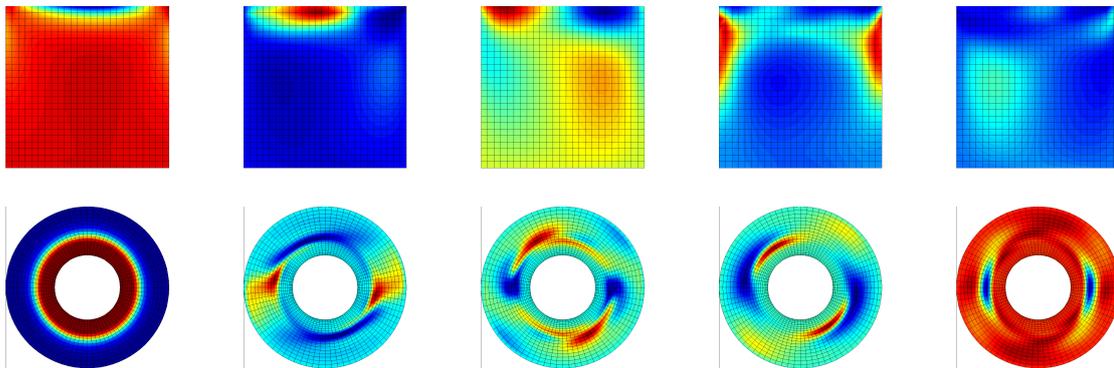


FIGURE III.35 – PGD - Exemple des 5 premiers modes sur l'espace physique (au-dessus) et l'espace des configurations(en-dessous), décroissants de gauche à droite.

Dans ce cas la convergence de la méthode PGD est forte et le résidu normalisé³ après une seule itération est $Res = 10^{-3}$ comme on peut le voir sur la Fig. III.36. Cela signifie que le premier couple de fonctions est significatif par rapport à la description de la solution et cela est aussi illustré Fig. III.37 par la valeur des coefficients α_i issus de l'étape de projection lors de l'enregistrement : le premier coefficient ($\alpha_1 = 5.3$) est de loin le plus important ($\alpha_i < 5 \cdot 10^{-3}$, $i = 2..40$).

3. Le résidu est normalisé tel qu'avant le calcul le résidu soit unitaire.

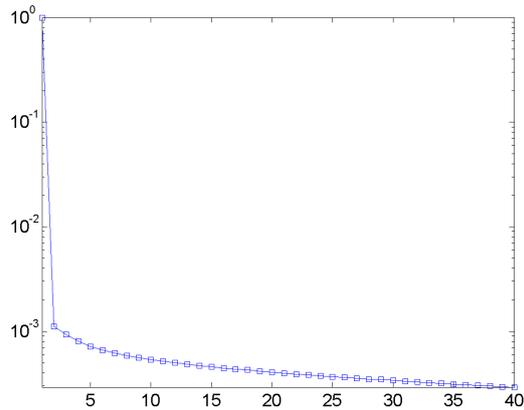


FIGURE III.36 – Résidu normalisé du problème à chaque itération.

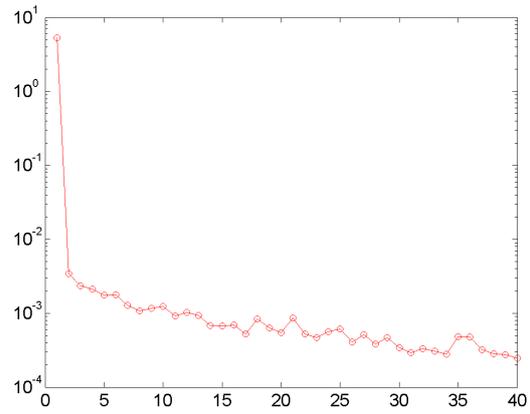


FIGURE III.37 – Coefficients α_i obtenus après l'étape de projection lors du calcul de la solution par la méthode PGD.

Or il est intéressant de noter que le premier mode défini sur l'espace des configurations représente l'influence du potentiel de répulsion sur les suspensions alors que les autres modes décrivent l'influence du cisaillement. On peut donc s'attendre à ce que le mécanisme dominant lors de l'état stationnaire soit dû au potentiel de répulsion.

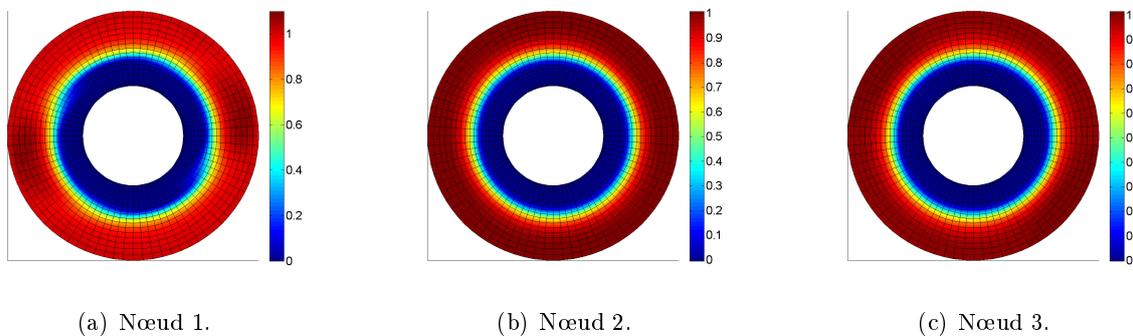


FIGURE III.38 – Espace des configurations pour les nœuds 1 à 3 repérés sur la Fig. III.27.

Lorsqu'on illustre Fig. III.38 l'espace des configurations des 3 nœuds repérés Fig. III.27, on observe que le nœud 1, bien que soumis à un cisaillement fluide relativement important, est très faiblement anisotrope. On observe ainsi pour les trois nœuds une forte influence du potentiel de répulsion qui crée une zone de distribution nulle autour de la particule considérée.

4.4.b Cavité recirculante 3D-2D

Dans cette section on souhaite illustrer l'état de la fonction de corrélation de paire dans un écoulement de cavité recirculante stationnaire lorsque l'espace des configurations est défini sur 3 dimensions. L'influence des suspensions sur le champ des vitesses fluides n'est pas pris en compte et le fluide est considéré comme newtonien. Le champ des vitesses fluides est déterminé à l'aide des équations de conservation de la masse

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \quad (\text{III.66})$$

et de conservation du moment

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{\underline{\sigma}} = 0 \quad (\text{III.67})$$

La fonction de corrélation de paire (définie Eq. (III.17)) est résolue avec $\underline{v} = (\underline{v}_\alpha, \underline{v}_\beta, 0)$ et le système est caractérisé par $Pe = 1$, $Re = 1$, $\phi = 0.05$ et $\epsilon = 10^6$.

Les domaines physique (2 dimensions) et de configuration (3 dimensions) sont respectivement discrétisés à l'aide de 1976 et 21632 nœuds, soit plus de $4 \cdot 10^7$ degrés de liberté. L'algorithme PGD est utilisé pour traiter ce problème en séparant la solution sur l'espace physique et l'espace des configurations et on arrête le processus d'enrichissement après 50 itérations.

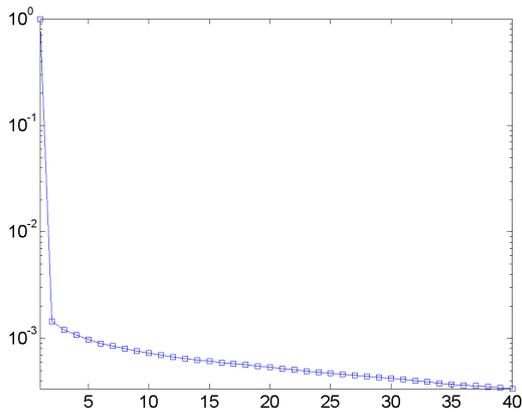


FIGURE III.39 – Résidu normalisé du problème à chaque itération.

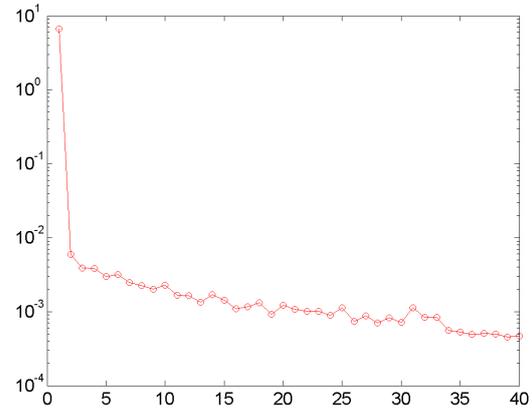


FIGURE III.40 – Coefficients α_i obtenus après l'étape de projection lors du calcul de la solution par la méthode PGD.

Comme on peut le voir sur la Fig. III.39, le premier produit de fonctions (voir Fig. III.41 où seule la moitié de l'espace des configurations est représentée) est prépondérant dans la réduction du résidu

du problème.

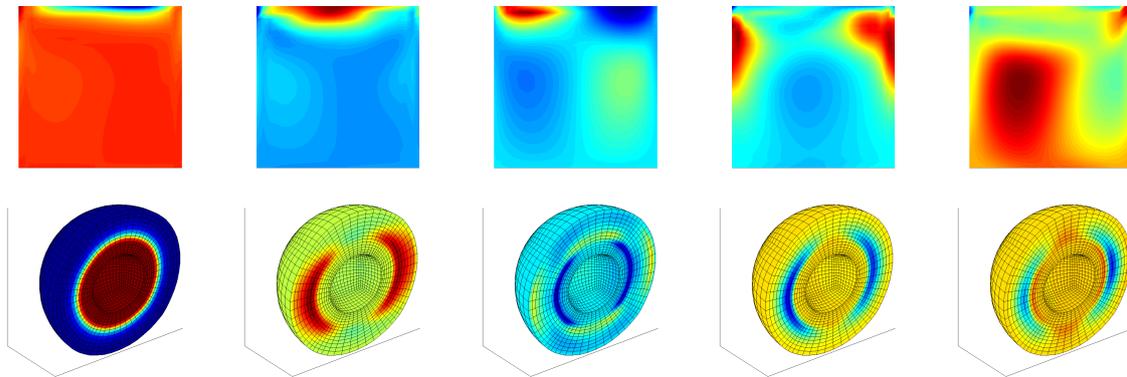


FIGURE III.41 – PGD - Exemple des 5 premiers modes sur l'espace physique (au-dessus) et l'espace des configurations(en-dessous), décroissants de gauche à droite.

De façon analogue au cas 2D-2D précédent, où le premier mode a une influence majeure, dans le cas 3D-2D, le coefficient de pondération α_1 est très largement supérieur à α_2 (Fig. III.40) et de la même manière le premier mode de l'espace des configurations décrit l'influence du potentiel de répulsion.

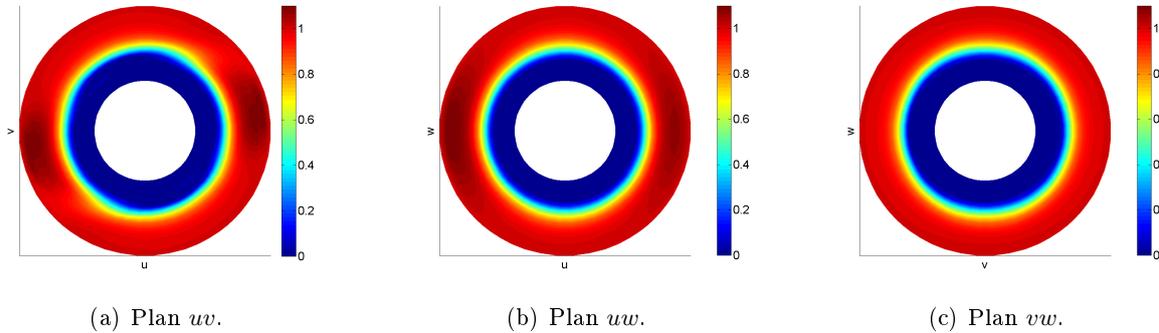


FIGURE III.42 – Espace des configurations pour le nœud 1 selon les différents plans de coupe : $w = 0$ (a), $v = 0$ (b), et $u = 0$ (c).

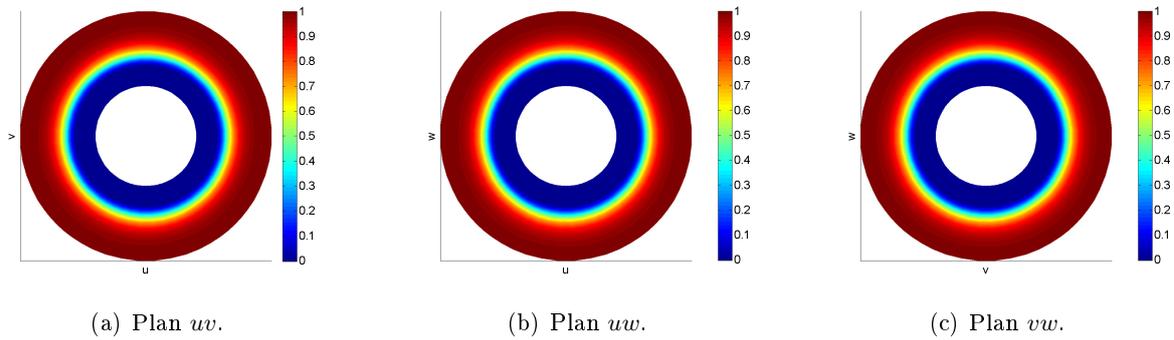


FIGURE III.43 – Espace des configurations pour le nœud 2 selon les différents plans de coupe : $w = 0$ (a), $v = 0$ (b), et $u = 0$ (c).

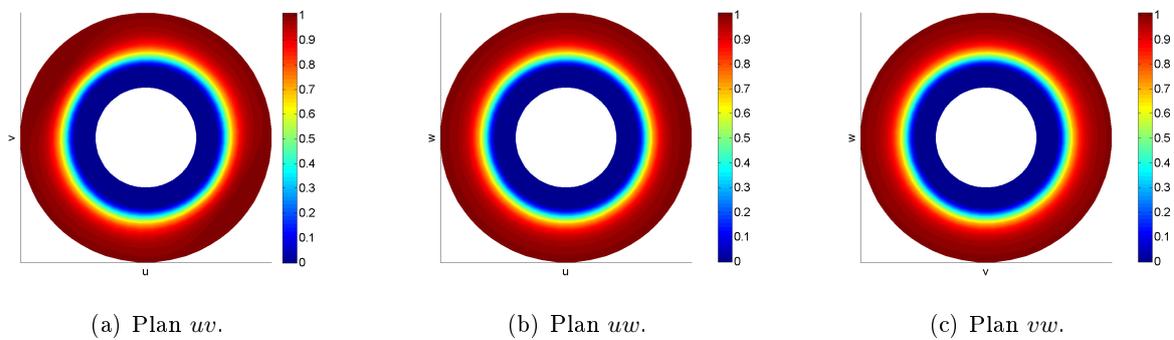


FIGURE III.44 – Espace des configurations pour le nœud 3 selon les différents plans de coupe : $w = 0$ (a), $v = 0$ (b), et $u = 0$ (c).

On observe ainsi sur les Figs. III.42 - III.44 l'influence prépondérante des forces répulsives interparticulaires qui créent une zone de distribution nulle autour de la particule considérée. L'influence du cisaillement est illustré Fig. III.42 où l'on observe une légère anisotropie. Finalement pour les 3 nœuds les résultats dans le plan de cisaillement fluide (plan uv) sont similaires à ceux du problème 2D-2D.

5 Conclusion du chapitre

L'approche la plus directe dans la représentation de système colloïdaux réside dans celle adoptée par les simulation stochastiques. La description de Smoluchowski est une approche alternative où la microstructure est caractérisée par la fonction de corrélation de paire. Cependant, le principal inconvénient réside dans l'espace à haute dimension sur lequel est défini le modèle de théorie cinétique

décrit par l'équation Smoluchowski, qui met en jeu l'espace physique et l'espace des configurations. Cependant l'utilisation de la représentation séparée à l'aide de l'algorithme PGD permet, si ce n'est de s'affranchir, du moins d'alléger considérablement le coût d'une telle approche.

La solution du modèle de théorie cinétique permet alors de prendre en compte efficacement le couplage entre l'évolution de la microstructure et de la cinématique fluide. Il est de plus possible d'évaluer l'efficacité des relations de fermeture traditionnellement introduites pour obtenir l'évolution des différents moments de la fonction de corrélation de paire. Finalement, même si le modèle de Smoluchowski nécessite d'être enrichi par la prise en compte de la migration des particules ainsi que d'autres effets rencontrés principalement dans les systèmes denses, nous avons montré dans ce chapitre une approche continue de la description de systèmes colloïdaux semi-dilués.

Conclusion et perspectives

La principale difficulté de l'étude de systèmes de suspensions par des approches micro-macro est celle du caractère hautement multidimensionnel du problème. Cette difficulté est particulièrement allégée avec l'utilisation de la technique de réduction dimensionnelle qu'est la Proper Generalized Decomposition.

Cependant l'algorithme principal de résolution de la méthode est loin d'être optimal entraînant une augmentation significative du nombre d'enrichissements nécessaires afin d'atteindre la précision désirée. L'amélioration de la vitesse de convergence de cet algorithme n'est pas triviale et la stratégie consistant à un préconditionnement de l'opérateur n'a pas été concluante. Une alternative réside alors dans l'utilisation de la PGD non plus comme une méthode *a priori* de résolution de systèmes linéaires mais comme une méthode permettant d'obtenir le rang de séparation optimal de variables séparées, *a posteriori*. L'efficacité de cette approche repose alors autant sur la qualité des algorithmes de résolution mis en jeu que sur la capacité de la PGD *a posteriori* à obtenir un rang de séparation si ce n'est optimal, au moins quasi-optimal. Cette dernière condition est aisément vérifiable lors de problèmes à deux dimensions puisque les résultats sont comparables à ceux issus de la SVD, elle-même étant optimale. Cependant lorsque le nombre de dimensions augmente, aucune garantie théorique n'est donnée sur l'optimalité de la PGD *a posteriori* et des développements supplémentaires prouvant l'optimalité pour d dimensions, $d \gg 1$ restent nécessaires.

Néanmoins l'utilisation de la PGD, bien que non-optimale, permet de résoudre des problèmes jusque là peu étudiés car difficiles à appréhender numériquement au vue du nombre de dimensions élevé. Cela est tout particulièrement vrai pour les approches en théorie cinétique des suspensions qui permettent de décrire de manière continue et exacte (d'un point de vue mathématique) l'évolution de ces systèmes définis à la fois à l'échelle microscopique et à l'échelle macroscopique.

Dans le cas des suspensions fluides, le tenseur d'aire peut être considéré comme une approche micro-macro dont le domaine de définition est moins élevé que celui de l'approche équivalente en théorie cinétique, et permet ainsi un traitement numérique qui ne nécessite pas de techniques particulières. Cependant son utilisation est sujette à l'introduction d'une relation de fermeture, dont l'erreur n'est pas quantifiable *a priori*. La comparaison avec l'approche en théorie cinétique a illustré cette erreur mais a aussi permis de justifier l'utilisation de ces relations dans certains cas.

D'un point de vue plus physique, l'ajout d'un modèle d'évolution de la polydispersité de la phase discrète enrichit la formulation du tenseur d'aire d'informations pertinentes sur l'état du mélange. Il reste cependant à préciser plus en détail les paramètres de ce modèle à l'aide, notamment, de comparaisons expérimentales.

Concernant les suspensions solides, l'approche en théorie cinétique présentée à travers l'équation de Smoluchowski est tout à fait originale puisqu'elle est une alternative aux simulations discrètes traditionnellement utilisées pour simuler l'évolution des systèmes de suspensions colloïdales. Or, si les descriptions discrètes permettent aisément d'obtenir les informations du système à l'échelle microscopique, elles souffrent de ne pouvoir lier ces phénomènes à l'échelle macroscopique qu'avec un coût numérique extrêmement élevé. Le modèle de Smoluchowski devient alors une alternative pertinente puisqu'il peut être résolu avec la technique de réduction PGD. Les résultats sont tout à fait prometteurs bien qu'il soit nécessaire d'enrichir ce modèle afin de pouvoir décrire plus exactement (d'un point de vue mécanique) l'évolution de systèmes de suspensions (notamment la simulation de systèmes denses et l'effet associé de migration des particules).

Finalement l'approche continue de la description de systèmes de suspensions dans les fluides est une alternative tout à fait pertinente car elle assure la prise en compte des phénomènes complexes apparaissant à l'échelle microscopique tout en permettant de les exploiter à l'échelle macroscopique. De nombreux développements restent néanmoins nécessaires afin d'enrichir ces modèles.

Bibliographie

- [Allaire, 2007] ALLAIRE, G. (2007). *Analyse numérique et optimisation*. Editions de l'école Polytechnique.
- [Ammar, 2010] AMMAR, A. (2010). The proper generalized decomposition : a powerful tool for model reduction. *International Journal of Material Forming*, 3:89–102. 10.1007/s12289-009-0647-x.
- [Ammar et Chinesta, 2008] AMMAR, A. et CHINESTA, F. (2008). Circumventing curse of dimensionality in the solution of highly multidimensional models encountered in quantum mechanics using meshfree finite sums decomposition. *Meshfree Methods for Partial Differential Equations IV*, pages 1–17.
- [Ammar *et al.*, 2010a] AMMAR, A., CHINESTA, F., DIEZ, P. et HUERTA, A. (2010a). An error estimator for separated representations of highly multidimensional models. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(25-28):1872–1880.
- [Ammar *et al.*, 2010b] AMMAR, A., CHINESTA, F. et FALCÓ, A. (2010b). On the convergence of a greedy rank-one update algorithm for a class of linear systems. *Archives of Computational Methods in Engineering*, pages 1–14.
- [Ammar *et al.*, 2006a] AMMAR, A., MOKDAD, B., CHINESTA, F. et KEUNINGS, R. (2006a). A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139(3):153 – 176.
- [Ammar *et al.*, 2007] AMMAR, A., MOKDAD, B., CHINESTA, F. et KEUNINGS, R. (2007). A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered

- in kinetic theory modelling of complex fluids : Part ii : Transient simulation using space-time separated representations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144(2-3):98 – 121.
- [Ammar *et al.*, 2010c] AMMAR, A., NORMANDIN, M., DAIM, F., GONZALEZ, D., CUETO, E. et CHINESTA, F. (2010c). Non-incremental strategies based on separated representations : Applications in computational rheology. *Communications in Mathematical Sciences*, 8(3):671–695.
- [Ammar *et al.*, 2009] AMMAR, A., PRULIERE, E., CHINESTA, F. et LASO, M. (2009). Reduced numerical modeling of flows involving liquid-crystalline polymers. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 160(2-3):140 – 156.
- [Ammar *et al.*, 2006b] AMMAR, A., RYCKELYNCK, D., CHINESTA, F. et KEUNINGS, R. (2006b). On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 134(1-3):136–147.
- [Batchelor, 1976] BATCHELOR, G. (1976). *Journal of Fluid Mechanics*, 74(Nov):1.
- [Batchelor, 1977] BATCHELOR, G. (1977). Effect of Brownian-motion on bulk stress in a suspension of spherical-particles. *Journal of Fluid Mechanics*, 83(Nov):97–117.
- [Batchelor et Green, 1972a] BATCHELOR, G. et GREEN, J. (1972a). The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2 . *Journal of Fluid Mechanics*, 56(03):401–427.
- [Batchelor et Green, 1972b] BATCHELOR, G. K. et GREEN, J. T. (1972b). The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field. *Journal of Fluid Mechanics*, 56:375–400.
- [Beckmann et Smith, 2005] BECKMANN, C. et SMITH, S. (2005). Tensorial extensions of independent component analysis for multisubject fmri analysis. *Neuroimage*, 25(1):294–311.
- [Bellman, 1966] BELLMAN, R. (1966). *Adaptive Control Processes : A Guided Tour*. Princeton University Press.
- [Beylkin et Mohlenkamp, 2002] BEYLKIN, G. et MOHLENKAMP, M. (2002). Numerical operator calculus in higher dimensions. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 99(16):10246.
- [Beylkin et Mohlenkamp, 2005] BEYLKIN, G. et MOHLENKAMP, M. (2005). Algorithms for numerical analysis in high dimensions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(6):2133–2159.

- [Bird *et al.*, 1987] BIRD, R., ARMSTRONG, R. et HASSAGER, O. (1987). Dynamics of polymeric liquids. volume 2 : Kinetic theory. *A Wiley-Interscience Publication, John Wiley & Sons.*
- [Brady et Morris, 1997] BRADY, J. et MORRIS, J. (1997). Microstructure of strongly sheared suspensions and its impact on rheology and diffusion. *Journal of Fluid Mechanics*, 348:103–139.
- [Brady et Vicic, 1995] BRADY, J. et VICIC, M. (1995). Normal stresses in colloidal dispersions. *Journal of rheology*, 39:545.
- [Brady, 2001] BRADY, J. F. (2001). Computer simulation of viscous suspensions. *Chemical Engineering Science*, 56(9):2921 – 2926.
- [Brady et Bossis, 1988] BRADY, J. F. et BOSSIS, G. (1988). Stokesian dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 20:111–157.
- [Brooks et Hughes, 1982] BROOKS, A. N. et HUGHES, T. J. (1982). Streamline upwind/petrov-galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navier-stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32(1-3):199 – 259.
- [Chatterjee, 2000] CHATTERJEE, A. (2000). An introduction to the proper orthogonal decomposition.
- [Chinesta *et al.*, 2010a] CHINESTA, F., AMMAR, A. et CUETO, E. (2010a). On the use of proper generalized decompositions for solving the multidimensional chemical master equation. *European Journal of Computational Mechanics*, 19:53–64.
- [Chinesta *et al.*, 2010b] CHINESTA, F., AMMAR, A. et CUETO, E. (2010b). Recent advances and new challenges in the use of the proper generalized decomposition for solving multidimensional models. *Archives of Computational Methods in Engineering*, pages 1–24.
- [Chinesta et Mackley, 2008] CHINESTA, F. et MACKLEY, M. R. (2008). Microstructure evolution during liquid-liquid laminar mixing : A kinetic theory approach. *International Journal of Material Forming*, 1:47 – 55.
- [Cintra et Tucker, 1995] CINTRA, J. S. et TUCKER, C. L. (1995). Orthotropic closure approximations for flow-induced fiber orientation. *Journal of Rheology*, 39(6):1095–1122.

- [De Lathauwer et de Baynast, 2008] DE LATHAUWER, L. et de BAYNAST, A. (2008). Blind deconvolution of ds-cdma signals by means of decomposition in rank- $(1, l, l)$ terms. *Signal Processing, IEEE Transactions on*, 56(4):1562–1571.
- [De Lathauwer et De Moor, 1998] DE LATHAUWER, L. et DE MOOR, B. (1998). From matrix to tensor : Multilinear algebra and signal processing. In *Institute of Mathematics and its Applications Conference Series*, volume 67, pages 1–16. Citeseer.
- [De Sterck, 2011] DE STERCK, H. (2011). A nonlinear gmres optimization algorithm for canonical tensor decomposition. *Arxiv preprint arXiv :1105.5331*.
- [Doi et Ohta, 1991] DOI, M. et OHTA, T. (1991). Dynamics and rheology of complex interfaces .1. *Journal of Chemical Physics*, 95(2):1242–1248.
- [El Afif et El Omari, 2009] EL AFIF, A. et EL OMARI, M. (2009). Flow and mass transport in blends of immiscible viscoelastic polymers. *Rheologica Acta*, 48(3):285–299.
- [F. Chinesta et Joyot, 2008] F. CHINESTA, A. A. et JOYOT, P. (2008). The nanometric and micrometric scales of the structure and mechanics of materials revisited : An introduction to the challenges of fully deterministic numerical descriptions. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 6(3):191–213.
- [Foss et Brady, 2000] FOSS, D. et BRADY, J. (2000). Structure, diffusion and rheology of brownian suspensions by stokesian dynamics simulation. *Journal of Fluid Mechanics*, 407:167–200.
- [Gao et al., 2010] GAO, C., KULKARNI, S., MORRIS, J. et GILCHRIST, J. (2010). Direct investigation of anisotropic suspension structure in pressure-driven flow. *Physical Review E*, 81(4):041403.
- [Grigorascu et Regalia, 1999] GRIGORASCU, V. et REGALIA, P. (1999). Tensor displacement structures and polyspectral matching. In *Fast reliable algorithms for matrices with structure*, pages 245–276. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [Grmela et Ait-Kadi, 1998] GRMELA, M. et AIT-KADI, A. (1998). Rheology of inhomogeneous immiscible blends. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 77(3):191–199.
- [Grmela et al., 1998] GRMELA, M., AIT-KADI, A. et UTRACKI, L. (1998). Blends of two immiscible and rheologically different fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 77(3):253–259.
- [Gu et Grmela, 2008] GU, J. F. et GRMELA, M. (2008). Flow properties of immiscible blends : Doi-ohta model with active advection. *Phys. Rev. E*, 78(5):056302.

- [Gunton *et al.*, 1983] GUNTON, J., MIGUEL, M. et P.S., S. (1983). The dynamics of first order phase transition. *In Phase Transition and Critical Phenomena*, volume 8. C. Domb and J. Lebowitz.
- [Hestenes et Stiefel, 1952] HESTENES, M. et STIEFEL, E. (1952). Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards Vol*, 49(6).
- [Hitchcock, 1927] HITCHCOCK, F. L. (1927). The expression of a tensor or a polyadic as a sum of products. *Journal of Mathematics and Physics*, 6:164–189.
- [Iza et Bousmina, 2000] IZA, M. et BOUSMINA, M. (2000). Nonlinear rheology of immiscible polymer blends : Step strain experiments. *Journal of Rheology*, 44(6):1363–1384.
- [Jedrzejewski, 2005] JEDRZEJEWSKI, F. (2005). *Introduction aux méthodes numériques, Deuxième édition*. Springer - Verlag France.
- [Jones, 1975] JONES, R. M. (1975). *Mechanics of Composite Materials*. McGraw-Hill Book Company, Inc, New York.
- [Kolda et Bader, 2009] KOLDA, T. et BADER, B. (2009). Tensor decompositions and applications. *SIAM review*, 51(3):455–500.
- [Kolli *et al.*, 2002] KOLLI, V., POLLAUFG, E. et GADALA-MARIA, F. (2002). Transient normal stress response in a concentrated suspension of spherical particles. *Journal of Rheology*, 46(1):321–334.
- [K.R. Hall, 1968] K.R. HALL, J. G. (1968). The mixing rates of highly viscous newtonian and non-newtonian fluids in a laboratory sigma-blade mixer. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 46:205–212.
- [Lacroix *et al.*, 1998] LACROIX, C., GRMELA, M. et CARREAU, P. (1998). Relationships between rheology and morphology for immiscible molten blends of polypropylene and ethylene copolymers under shear flow. *Journal of Rheology*, 42(1):41–62.
- [Ladevèze et Nouy, 2003] LADEVÈZE, P. et NOUY, A. (2003). On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(28-30):3061–3087.
- [Ladevèze et Simmonds, 1998] LADEVÈZE, P. et SIMMONDS, J. (1998). *Nonlinear computational structural mechanics : new approaches and non-incremental methods of calculation*. Springer.
- [Lanczos, 1950] LANCZOS, C. (1950). An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45(4):255–282.

- [Larson, 1999] LARSON, R. (1999). The structure and rheology of complex fluids.
- [Lee et Park, 1994] LEE, H. et PARK, O. (1994). Rheology and Dynamics of Immiscible Polymer Blends. *Journal of Rheology*, 38(5):1405–1425.
- [Liang *et al.*, 2002] LIANG, Y. C., LEE, H. P., LIM, S. P., LIN, W. Z., LEE, K. H. et WU, C. G. (2002). Proper orthogonal decomposition and its applications—part i : Theory. *Journal of Sound and Vibration*, 252(3):527 – 544.
- [Lipschutz, 1970] LIPSCHUTZ, M. (1970). *Differential geometry*. McGraw-Hill.
- [Loux, 2011] LOUX, C. (2011). *Modélisation du fonctionnement d'un nouveau type de mélangeur : simulation des écoulements, validation sur des systèmes modèles et optimisation du procédé*. Thèse de doctorat, Université de Strasbourg.
- [Lumley, 1970] LUMLEY, J. (1970). Stochastic tools in turbulence. volume 12. applied mathematics and mechanics. Rapport technique, DTIC Document.
- [Mackley et Saraiva, 1999] MACKLEY, M. et SARAIVA, R. N. (1999). The quantitative description of fluid mixing using lagrangian- and concentration-based numerical approaches. *Chemical Engineering Science*, 54(2):159 – 170.
- [MacMECCAN *et al.*, 2009] MACMECCAN, R., CLAUSEN, J., NEITZEL, G. et AIDUN, C. (2009). Simulating deformable particle suspensions using a coupled lattice-boltzmann and finite-element method. *Journal of Fluid Mechanics*, 618(1):13–39.
- [Maitrejean *et al.*, 2010] MAÎTREJEAN, G., AMMAR, A. et CHINESTA, F. (2010). Simulating microstructure evolution during passive mixing. *International Journal of Material Forming*, pages 1–9.
- [Miller *et al.*, 2009] MILLER, R., SINGH, J. et MORRIS, J. (2009). Suspension flow modeling for general geometries. *Chemical Engineering Science*, 64(22):4597–4610.
- [Morris, 2009] MORRIS, J. (2009). A review of microstructure in concentrated suspensions and its implications for rheology and bulk flow. *Rheologica acta*, 48(8):909–923.
- [Morris et Katyal, 2002] MORRIS, J. et KATYAL, B. (2002). Microstructure from simulated brownian suspension flows at large shear rate. *Physics of Fluids*, 14:1920.

- [Nouy, 2010] NOUY, A. (2010). A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time-dependent partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:1603–1626.
- [Nouy et Ladevèze, 2004] NOUY, A. et LADEVÈZE, P. (2004). Multiscale computational strategy with time and space homogenization : a radial-type approximation technique for solving micro-problems. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2:4.
- [Ohl et Gleissle, 1993] OHL, N. et GLEISSLE, W. (1993). The characterization of the steady-state shear and normal stress functions of highly concentrated suspensions formulated with viscoelastic liquids. *Journal of Rheology*, 37(2):381–406.
- [Ohta et al., 1982] OHTA, T., JASNOW, D. et KAWASAKI, K. (1982). Universal scaling in the motion of random interfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 49(17):1223–1226.
- [Ottino, 1989] OTTINO, J. M. (1989). *The kinematics of mixing : stretching, chaos and transport*. Cambridge University Press.
- [Pal, 1996] PAL, R. (1996). Effect of droplet size on the rheology of emulsions. *AIChE journal*, 42(11):3181–3190.
- [Parsi et Gadala-Maria, 1987] PARSİ, F. et GADALA-MARIA, F. (1987). Fore-and-aft asymmetry in a concentrated suspension of solid spheres. *Journal of Rheology(New York)*, 31(8):725–32.
- [Pearson, 1901] PEARSON, K. (1901). Liii. on lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine Series 6*, 2(11):559–572.
- [Phan-Thien, 1995] PHAN-THIEN, N. (1995). Constitutive equation for concentrated suspensions in newtonian liquids. *Journal of Rheology*, 39(4):679–695.
- [Phung et al., 1996] PHUNG, T., BRADY, J. et BOSSIS, G. (1996). Stokesian dynamics simulation of brownian suspensions. *Journal of Fluid Mechanics*, 313:181–207.
- [Quarteroni et al., 2004] QUARTERONI, A., SACCO, R. et SALERI, F. (2004). *Méthodes Numériques : Algorithmes, analyse et applications*. Springer - Verlag Italia.
- [Rampall et al., 1997] RAMPALL, I., SMART, J. et LEIGHTON, D. (1997). The influence of surface roughness on the particle-pair distribution function of dilute suspensions of non-colloidal spheres in simple shear flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 339:1–24.

- [Rielly *et al.*, 1994] RIELLY, C., SMITH, D., LINDLEY, J., NIRANJAN, K. et PHILLIPS, V. (1994). Mixing processes for agricultural and food materials .4. assessment and monitoring of mixing systems. *Journal of Agricultural Engineering Research*, 59(1):1–18.
- [Russel *et al.*, 1992] RUSSEL, W., RUSSEL, W., SAVILLE, D. et SCHOWALTER, W. (1992). *Colloidal dispersions*. Cambridge Univ Pr.
- [Ryckelynck, 2002] RYCKELYNCK, D. (2002). Réduction a priori de modèles thermomécaniques. *Comptes rendus. Mécanique*, 330(7):499–505.
- [Ryckelynck, 2005] RYCKELYNCK, D. (2005). A priori hyperreduction method : an adaptive approach. *Journal of computational physics*, 202(1):346–366.
- [Ryckelynck et Missoum Benziane, 2010] RYCKELYNCK, D. et MISSOUM BENZIANE, D. (2010). Multi-level a priori hyper-reduction of mechanical models involving internal variables. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(17-20):1134–1142.
- [Saad et Schultz, 1986] SAAD, Y. et SCHULTZ, M. (1986). Gmres : A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7(3):856–869.
- [Smoluchowski, 1915] SMOLUCHOWSKI, M. V. (1915). Über brownsche molekulare bewegung unter einwirkung äußerer kräfte und den zusammenhang mit der verallgemeinerten diffusionsgleichung. *Ann. Phys.*, 353:1103–1112.
- [So *et al.*, 2001] SO, J., YANG, S. et HYUN, J. (2001). Microstructure evolution and rheological responses of hard sphere suspensions. *Chemical Engineering Science*, 56(9):2967–2977. 8th Nisshin Engineering Particle Technology International Seminar (NEPTIS), Kobe, Japan, Dec 05-07, 1999.
- [Strang, 2006] STRANG, G. (2006). *Linear algebra and its applications*. Thomson Brooks/Cole.
- [Van der Vorst, 1992] Van der VORST, H. (1992). Bi-cgstab : A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and Statistical Computing*, 13:631.
- [Verdon, 2007] VERDON, N. (2007). Un système dynamique d'ordre réduit basé sur une approche apr-pod pour l'étude de l'interaction écoulement turbulent-particules.
- [Wagner *et al.*, 1999] WAGNER, N., OTTINGER, H. et EDWARDS, B. (1999). Generalized Doi-Ohta model for multiphase flow developed via GENERIC. *AIChE Journal*, 45(6):1169–1181.

- [Wetzel et Tucker, 1999] WETZEL, E. et TUCKER, C. (1999). Area tensors for modeling microstructure during laminar liquid-liquid mixing. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(1):35–61.
- [Yurkovetsky et Morris, 2008] YURKOVETSKY, Y. et MORRIS, J. (2008). Particle pressure in sheared brownian suspensions. *Journal of rheology*, 52:141.
- [Yziquel *et al.*, 1999] YZIQUEL, F., CARREAU, P., MOAN, M. et TANGUY, P. (1999). Rheological modeling of concentrated colloidal suspensions. *Journal of non-newtonian fluid mechanics*, 86(1-2):133–155.
- [Zmievski *et al.*, 2005] ZMIEVSKI, V., GRMELA, M., BOUSMINA, M. et DAGRÉOU, S. (2005). Non-linear microstructure and rheology of semidilute colloidal suspensions of structureless particles. *Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys*, 71(5 Pt 1):051503.

Contributions à la modélisation numérique de la théorie cinétique des suspensions

Résumé : Ce travail présente une contribution à la modélisation numérique des systèmes de suspensions dans le cadre de la théorie cinétique. Cette description continue des systèmes de suspensions permet de prendre en compte l'influence de la structure à l'échelle microscopique sur la cinétique de l'écoulement macroscopique. Cependant elle présente l'inconvénient majeur d'être définie sur un espace à haute dimension et rend alors difficile la résolution de ces modèles avec des approches déterministes classiques.

Afin de s'affranchir, ou du moins d'alléger, le poids du caractère micro-macro des approches en théorie cinétique, plusieurs techniques de réduction dimensionnelle s'appuyant sur l'utilisation de la Décomposition Généralisée en modes Propres (PGD) sont présentées. Une étude de différents algorithmes PGD est conduite, et dont l'efficacité en termes de vitesse de convergence et d'optimalité de la solution est illustrée.

La simulation de mélanges de fluides immiscibles est conduite à l'aide du Tenseur d'aire qui est un puissant outil de caractérisation du mélange. Cependant celui-ci nécessite l'introduction d'une relation de fermeture dont l'impact est évalué avec le modèle de théorie cinétique équivalent et exact.

Finalement, la simulation de systèmes de suspensions colloïdales décrits par l'équation de Smoluchowski présente une approche originale de la modélisation des suspensions solides. Cette approche permet de s'affranchir avantageusement du bruit statistique inhérent aux simulations stochastiques traditionnellement mises en œuvre.

Mots-Clés : Réduction dimensionnelle, Décomposition Généralisée en mode Propre, Théorie cinétique, Mélange de fluides immiscibles, Suspensions colloïdales.

Contributions to numerical modeling of the kinetic theory of suspensions

Abstract : This work is a contribution to the numerical modeling of suspension system in the kinetic theory framework. This continuum description of suspension system allows to account for the microstructure impact on the kinetic of the macroscopic flow. However, its main drawback is related to the high dimensional spaces in which kinetic theory models are defined and makes difficult for classical deterministic approaches to solve such systems.

One possibility for circumventing, or at least alleviate, the weight of the micro-macro kinetic theory approaches lies in the use of separated representations strategies based on the Proper Generalized Decomposition (PGD). A study of different PGD algorithms is driven, illustrating the efficiency of these algorithms in terms of convergence speed and optimality of the solution obtained.

The immiscible fluids blends modeling is driven using the area tensor which is a powerful numerical tool for characterizing blends. However it needs the introduction of closure relation of which impact is measured using equivalent and exact kinetic theory model.

Finally, the numerical modeling of colloidal suspension system described by the Smoluchowski equation presents an original approach of the modeling of solid suspension system. This description allows to circumvent the statistical noise inherent to the stochastic approaches commonly used.

Keywords : Dimensional reduction, Proper Generalized Decomposition, Kinetic theory, Immiscible fluids blend, Colloïdal suspension.