



HAL
open science

Modélisation et analyse mathématique de problèmes issus de la mécanique des fluides : applications à la tribologie et aux sciences du vivant

Sébastien Martin

► **To cite this version:**

Sébastien Martin. Modélisation et analyse mathématique de problèmes issus de la mécanique des fluides : applications à la tribologie et aux sciences du vivant. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université Paris Sud - Paris XI, 2012. tel-00765580v2

HAL Id: tel-00765580

<https://theses.hal.science/tel-00765580v2>

Submitted on 17 Feb 2013

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.



UNIVERSITÉ PARIS-SUD
Faculté des Sciences d'Orsay

MÉMOIRE DE SYNTHÈSE
HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES
spécialité « Mathématiques et applications »

Sébastien Martin

MODÉLISATION ET ANALYSE MATHÉMATIQUE DE PROBLÈMES
ISSUS DE LA MÉCANIQUE DES FLUIDES : APPLICATIONS À LA
TRIBOLOGIE ET AUX SCIENCES DU VIVANT.

Après avis des rapporteurs

THIERRY COLIN	Université Bordeaux 1
ANTONIO DESIMONE	SISSA Trieste
BERTRAND MAURY	Université Paris-Sud

ce mémoire a été soutenu le 4 décembre 2012 devant le jury composé de

FRANÇOIS ALOUGES	École Polytechnique
DIDIER BRESCH	CNRS & Université de Savoie
THIERRY COLIN	Université Bordeaux 1
STÉPHANE CORDIER	Université d'Orléans
CÉLINE GRANDMONT	INRIA Paris Rocquencourt
BERTRAND MAURY	Université Paris-Sud

À Denise, Marinette & André.

À Monique & Patrick.

À Estelle, Frédéric & Alexandre.

Avec gratitude et amour.

REMERCIEMENTS

JE souhaiterais en premier lieu exprimer toute ma gratitude envers THIERRY COLIN, ANTONIO DESIMONE et BERTRAND MAURY pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu accorder à ce mémoire malgré leurs très nombreuses obligations. Merci aussi à FRANÇOIS ALOUGES, DIDIER BRESCH, STÉPHANE CORDIER et CÉLINE GRANDMONT d'avoir participé à ce jury et accepté d'évaluer ce travail.

Les travaux présentés dans ce mémoire de recherche sont majoritairement le fruit de collaborations scientifiques. GUY BAYADA et CARLOS VÁZQUEZ ont été des directeurs de thèse bienveillants ; leur enthousiasme et leur amitié constituent un moteur important de nos collaborations scientifiques actuelles. Mes remerciements vont aussi à FARID BAKIR, LAURENT CHUPIN, ASTRID DECOENE, ILDEFONSO DÍAZ, SYLVAIN FAURE, DANIELLE HILHORST, SOFIANE KHELLADI, MAYAN MIMURA, XESUS NOGUEIRA, TAKEO TAKAHASHI, THOMAS SIMILOWSKI, CHRISTIAN STRAUS, JULIEN VOVELLE avec qui j'ai (eu) un grand plaisir à travailler. Je renouvelle ma profonde gratitude envers BERTRAND MAURY pour la richesse des discussions et les réflexions qu'elles entraînent.

L'activité mathématique se nourrit d'interactions. Si celles-ci n'aboutissent pas nécessairement à des publications, elles sont néanmoins essentielles à notre formation scientifique permanente : merci à LAURENT BOUDIN, ANNE DEVYS, LAURENT DI MENZA, JUSTINE FOUCHET-INCAUX, BÉRÉNICE GREC, LOÏC LACOUTURE, FRÉDÉRIC LAGOUTIÈRE, HERVÉ LE MEUR, JEAN-CLAUDE SAUT pour les discussions enrichissantes. Merci également à CLÉMENT MOUHOT et FRANÇOIS ALOUGES pour l'impulsion qu'il m'ont transmise : elle m'a permis de me lancer dans la rédaction de ce mémoire.

La relecture attentive d'un mémoire est une tâche ingrate ; outre le temps consacré à cette activité aux plus belles heures de l'été, leurs auteurs ont grandement contribué à l'amélioration de ce document, en formulant de nombreuses critiques toutes justifiées, toujours avec tact et diplomatie. Un grand merci à GUY BAYADA et CLÉMENT MOUHOT pour leur aide inestimable.

Le laboratoire de mathématiques d'Orsay est un lieu de travail privilégié : l'équipe ANEDP, en particulier, est dotée d'une ambiance studieuse et chaleureuse, idéale pour mener des activités de recherches. Merci donc à ses membres, plus particulièrement à CATHERINE POUPON pour son soutien administratif redoutablement efficace, SYLVAIN FAURE et LOÏC GOUARIN pour accueillir avec amusement et bienveillance mes petites simulations sur les machines de calcul à distance, et ASTRID DECOENE qui supporte péniblement ma présence dans le bureau que nous partageons.

Je remercie vivement les membres de l'équipe INRIA-UPMC REO, en particulier CÉLINE GRANDMONT et JEAN-FRÉDÉRIC GERBEAU, qui m'ont accueilli en délégation : la nature de ce projet et les personnes qui constituent l'équipe en font un lieu d'échange extrêmement stimulant, scientifiquement et humainement.

Merci également aux membres des projets ANR auxquels j'ai participé (MOSICOB, RUGO) ou qui sont en cours de fonctionnement (OXHELEASE).

Un immense merci aux ami(e)s qui ont pu assister à la soutenance et qui, parfois, sont venu(e)s de loin ; en particulier ANNE-AYMONE & JULIEN, CHARLES, CLÉMENT, DAVID, MATHIEU, PIERRE, THIERRY. Un immense merci à celles et ceux qui n'ont pu assister à la soutenance, en particulier AURÉLIE, CHLOÉ, EYLEM, FABIEN, GUILLAUME...

Ce mémoire a été rédigé à Paris, Charette-Varennes et St Genis les Ollières. Que les personnes qui, à cette occasion, ont supporté ma mauvaise humeur et assuré l'organisation de la vie quotidienne soient mille fois remerciées ; je les aime.

Enfin j'aimerais exprimer ma profonde gratitude (et davantage) à ÉLODIE, bien qu'elle contribue grandement à ma production d'erreurs mathématiques, ainsi qu'à LOUISE & CLÉMENCE qui, par bonheur, corrigent ces erreurs avec une aisance déconcertante...

Paris, décembre 2012.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	v
TABLE DES MATIÈRES	vii
INTRODUCTION	1
1 MODÉLISATION, ANALYSE MATHÉMATIQUE ET CALCUL SCIENTIFIQUE APPLIQUÉS À LA MÉCANIQUE DES FILMS MINCES	9
1.1 INFLUENCE DES RUGOSITÉS DANS DES ÉCOULEMENTS MINCES CAVITÉS \mathbb{W}	10
1.1.1 Cavitation et rugosités en lubrification	10
1.1.2 Homogénéisation du modèle d'Elrod-Adams	11
1.1.3 Résultats numériques	13
1.2 FORMATION DE LA CAVITATION EN LUBRIFICATION HYDRODYNAMIQUE	14
1.2.1 Conditions suffisantes d'apparition ou de disparition de la cavitation	14
1.2.2 Résultats numériques	15
1.3 FLUIDES VISCO-ÉLASTIQUES EN LUBRIFICATION	16
1.3.1 Fluides non-newtoniens et l'hypothèse de film mince	16
1.3.2 Approximation « film mince » pour les modèles d'Oldroyd et Phan-Thien & Tanner	17
1.3.3 Méthode de résolution	18
1.4 INFLUENCE DE RUGOSITÉS SUR L'APPROXIMATION DE REYNOLDS	19
1.4.1 Développement formel	21
1.4.2 Justification rigoureuse du développement asymptotique	22
1.4.3 Discussion sur les interactions multi-échelles	22
2 LOIS DE CONSERVATION SCALAIRES SUR UN DOMAINE BORNÉ	23
2.1 ÉCOULEMENT BIFLUIDE MODÉLISÉ PAR UNE ÉQUATION DE BUCKLEY-LEVERETT NON-AUTONOME \mathbb{W}	24
2.1.1 Modèle bifluide en lubrification	24
2.1.2 Équations de Buckley-Leverett et de Reynolds	24
2.1.3 Modèle bifluide et modèle d'Elrod-Adams	25
2.2 PROBLÈME DE CAUCHY-DIRICHLET POUR DES ÉQUATIONS QUASILINÉAIRES DU PREMIER ORDRE \mathbb{W}	26
2.2.1 Formulation entropique	26
2.2.2 Existence d'une solution entropique et bornes L^∞	27
2.2.3 Unicité de la solution entropique	27
2.3 COMPORTEMENT EN TEMPS LONG DE LA SOLUTION D'UNE LOI DE CONSERVATION SCALAIRE	28
2.3.1 Propriétés des solutions entropiques	28
2.3.2 Comportement en temps long de la solution entropique	29
2.3.3 Résultats numériques	31
2.4 APPROXIMATION NUMÉRIQUE DE LA SOLUTION D'UNE LOI DE CONSERVATION SCALAIRE AVEC FLUX DISCONTINU	33
2.4.1 Formulations du problème	33
2.4.2 Schéma numérique	34
2.4.3 Convergence du schéma aux volumes finis	35
2.4.4 Résultats numériques	36
3 MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES AUX SCIENCES DU VIVANT	37
3.1 MODÉLISATION DU POUMON : RIGIDITÉ BRONCHIQUE ET ÉCHANGES GAZEUX	38
3.1.1 Modèle mécanique simplifié : influence du muscle lisse bronchique	38
3.1.2 Modèle d'échanges gazeux	39
3.1.3 Discussion	40
3.2 MODÉLISATION DU POUMON : ASPECTS NON-LINÉAIRES DES ÉCHANGES GAZEUX	40
3.2.1 Limitation diffusive du transfert d'oxygène	41

3.2.2	Hétérogénéité des échanges gazeux le long de l'acinus pulmonaire	43
3.3	SIMULATION DE SUSPENSIONS PASSIVES : UNE APPROCHE DE TYPE DYNAMIQUE STOKESIENNE	46
3.3.1	Modélisation d'un macro-objet à partir de sphères rigides	46
3.3.2	Évaluation numérique des interactions hydrodynamiques	46
3.4	SIMULATION DE SUSPENSIONS ACTIVES : UNE APPROCHE DIRECTE	48
3.4.1	Aspects hydrodynamiques	48
3.4.2	Aspects chimiotactiques	50
CONCLUSION ET PERSPECTIVES		53
BIBLIOGRAPHIE GÉNÉRALE		55
PUBLICATIONS DE L'AUTEUR CITÉES DANS LE MÉMOIRE		55
BIBLIOGRAPHIE		56

INTRODUCTION

Ce mémoire est consacré à l'analyse de problèmes mathématiques issus de la mécanique des fluides. En particulier, par le mélange de modélisation, d'analyse théorique et numérique d'équations aux dérivées partielles ainsi que de calcul scientifique, les champs applicatifs de ces travaux ont porté essentiellement sur deux grandes thématiques : la mécanique des films minces et les biosciences.

Les travaux synthétisés dans ce mémoire ont été regroupés en trois chapitres qui s'articulent successivement autour de la lubrification, des lois de conservation scalaires sur un domaine borné et de la modélisation mathématique appliquée aux sciences du vivant.

Le chapitre 1 est consacré à l'analyse de problèmes issus de la lubrification hydrodynamique ou élasto-hydrodynamique, en particulier, la prise en compte de phénomènes non-linéaires : cavitation hydrodynamique stationnaire ou instationnaire, influence des rugosités de surface sur l'écoulement, propriétés visco-élastiques du lubrifiant.

Le chapitre 2 est consacré à l'étude de lois de conservation scalaires sur un domaine borné, du point de vue de l'analyse mathématique et de l'analyse numérique. Cette thématique est directement issue des travaux portant sur la lubrification : en effet, elle a été initialement motivée par l'étude d'un modèle bifluide dans un film mince dans le contexte de la modélisation de la cavitation.

Le chapitre 3 synthétise une activité qui a été développée à Orsay et au sein de l'équipe-projet INRIA-UPMC REO qui m'a accueilli en délégation, et se focalise sur la modélisation mathématique en sciences du vivant. Il présente deux axes distincts : la modélisation du système respiratoire et, en particulier, des échanges gazeux dans l'arbre bronchique et la simulation de suspensions biomimétiques¹ dans un fluide newtonien.

Les travaux précédés du symbole Ψ sont issus de la thèse de doctorat [0] ; ils ont été intégrés à ce mémoire par souci de cohérence dans la présentation des différentes problématiques scientifiques.

CHAPITRE 1

La lubrification désigne le contrôle de l'usure des matériaux par l'introduction d'un film fluide qui réduit le frottement entre les surfaces en quasi-contact. Le point de départ de la théorie de la lubrification hydrodynamique est un article de Reynolds, publié en 1886, intitulé *On the theory of lubrication and its application to Mr Beauchamp Tower's experiments, including an experimental determination of the viscosity of olive oil*. Dans cet article, Reynolds obtient de manière heuristique l'équation qui porte son nom et qui constitue le socle des études portant sur les écoulements de faible épaisseur. L'équation de Reynolds qui régit la pression p dans le mécanisme s'obtient par un calcul du flux moyen et prise en compte des conditions aux limites (en particulier le cisaillement). C'est donc une équation de conservation du débit qui se décompose en un flux de Poiseuille et flux de Couette et s'écrit :

$$-\operatorname{div} \left(\frac{h^3}{12\mu} \nabla p \right) = -\operatorname{div} \left(h \frac{\mathbf{s}}{2} \right),$$

les profils de vitesse (\mathbf{u}, v) à l'ordre principal pouvant être déduits de la distribution en pression par simple intégration numérique. Ici, $\mathbf{x} \mapsto h(\mathbf{x})$ désigne la distance normalisée entre les deux surfaces en regard, μ la viscosité du lubrifiant (supposé newtonien dans cette approximation), \mathbf{s} la vitesse relative de cisaillement des surfaces qui confinent l'écoulement.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à la prise en compte de phénomènes non-linéaires dans le cadre de l'approximation de Reynolds : cavitation, influence des rugosités de surfaces sur la cavitation ou sur l'approximation de Reynolds elle-même, propriétés visco-élastiques du lubrifiant etc. L'intégration de tels phénomènes dans les modèles simplifiés est absolument nécessaire à la compréhension d'écoulements réels utilisés en ingénierie : les applications sont nombreuses et les aspects multi-physiques aboutissent à une grande richesse mathématique du point de vue de la modélisation, de l'analyse et du calcul.

Influence des rugosités dans des écoulements minces cavités Ψ

Les travaux mentionnés ci-dessus supposent le film de lubrifiant liquide complet et ne prennent pas en compte une éventuelle rupture du film lubrifié dans le mécanisme : dans la partie divergente de certains dispositifs (tels que des paliers ou des roulements à bille), la pression peut diminuer jusqu'à atteindre la pression de vapeur saturante p ; en conséquence, des bulles de gaz se forment dans ces zones. Ce phénomène, appelé cavitation, se caractérise donc par des changements de phase et modifie considérablement les

1. Le biomimétisme est une démarche, essentiellement expérimentale, consistant à reproduire artificiellement les propriétés essentielles d'un système biologique à partir de ses composantes élémentaires.

performances des mécanismes. De nombreux auteurs ont développé des modèles de cavitation intégrés à l'équation de Reynolds : Sommerfeld (1910), Gümbel (1921), Swift-Stieber (1932), Floberg-Jakobsson-Olsson (1957). En particulier, le modèle de Swift-Stieber a été (et demeure) très populaire car il a rapidement été associé à une procédure de calcul : l'algorithme de Christopherson (1949). De plus, ce modèle correspond mathématiquement à l'inéquation variationnelle pour l'équation de Reynolds associée à la contrainte $p \geq \underline{p}$. Le modèle de Swift-Sieber est très populaire en mécanique mais il n'est pas conservatif. Le modèle développé par Elrod & Adams (1974) a constitué une amélioration des modèles, car il est conservatif et aboutit à une modification de l'équation de Reynolds par l'introduction d'une inconnue supplémentaire :

$$-\operatorname{div} \left(\frac{h^3}{12\mu} \nabla p \right) = -\operatorname{div} \left(\theta h \frac{\mathbf{s}}{2} \right), \quad p \geq \underline{p}, \quad H(p - \underline{p}) \leq \theta \leq 1,$$

où H désigne le graphe de Heaviside et θ la saturation (ou fraction) locale en lubrifiant liquide ; les inconnues du problème sont donc la pression $\mathbf{x} \mapsto p(\mathbf{x})$ dans l'écoulement et la saturation $\mathbf{x} \mapsto \theta(\mathbf{x})$ en lubrifiant liquide.

En collaboration avec Guy BAYADA (INSA Lyon) et Carlos VÁZQUEZ (Universidade da Coruña), nous avons étudié l'influence des rugosités de surfaces sur le modèle d'Elrod-Adams. Ce travail est motivé par la prise en compte de ces rugosités, volontairement manufacturées ou non au cours de l'usinage, et la nécessité d'utiliser des modèles équivalents afin de limiter les coûts de calcul.

Les rugosités de surfaces, supposées périodiques, ont été modélisées par la considération d'une hauteur fortement oscillante $h := h_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon)$, $\varepsilon \ll 1$, et l'influence de ces rugosités a été étudiée par des techniques d'homogénéisation multi-échelles. L'homogénéisation de l'équation de Reynolds, qui est un résultat classique, a été étendue à la prise en compte de la non-linéarité introduite par le modèle d'Elrod-Adams : nous avons caractérisé les phénomènes d'anisotropie non seulement pour le flux de Poiseuille mais également pour le flux de Couette [1, 2] et la saturation en particulier. Par la suite, nous avons généralisé ce travail, en décrivant les modèles homogénéisés correspondants, en prenant en compte

- des défauts de surfaces dont les rapports d'échelle varient significativement, i. e. $h := h_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon, \mathbf{x}/\varepsilon^2, \dots)$, par homogénéisation réitérée du modèle [3] ;
- la déformation élastique des surfaces qui confinent l'écoulement (loi de Hertz) et la piézoviscosité du fluide (loi de Barus), ce qui rend le problème non-local [4], i. e.

$$h := h_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) + \int_{\Omega} k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \left(p(\mathbf{z}) - \underline{p} \right) d\mathbf{z}, \quad \mu := \mu_0 e^{\alpha(p - \underline{p})};$$

ici h_0 représente la contribution rigide de l'espacement entre les surfaces, k est la fonction « noyau de Hertz » qui dépend du type de contact considéré et qui vise à pondérer les effets de forte pression sur la déformation élastique des surfaces et $\alpha \geq 0$ est le paramètre de piézoviscosité.

Les résultats de simulation de tels écoulements ont été obtenus à partir d'un code de calculs, nommé SOLEA ², développé en FORTRAN 90, qui repose d'une part sur le couplage entre une méthode des caractéristiques et l'algorithme de Bermúdez-Moreno (1981) et, d'autre part, sur une discrétisation éléments finis.

La motivation de ces travaux repose essentiellement sur une demande en mécanique de prendre en compte des aspects multiphysiques en tribologie et, en particulier, dans l'étude de systèmes lubrifiés tels que des roulements à bille, paliers, patins, coussinets etc. ; d'un point de vue des applications, ces travaux ont donné lieu à des publications dans les revues de référence en tribologie [5, 6] (dont l'une a été primée par l'American Society of Mechanical Engineers).

Formation de la cavitation en lubrification hydrodynamique

Dans le cadre de la théorie de la lubrification, en collaboration avec Jesus Ildelfonso DÍAZ (Universidad Complutense, Madrid), nous avons démontré dans [7] un résultat d'absence de temps de relaxation pour l'apparition de la cavitation dans un mécanisme lubrifié, dans le cadre du modèle d'Elrod-Adams instationnaire :

$$\partial_t(\theta h) + \operatorname{div} \left(\theta h \frac{\mathbf{s}}{2} - \frac{h^3}{12\mu} \nabla p \right) = 0, \quad p \geq \underline{p}, \quad H(p - \underline{p}) \leq \theta \leq 1.$$

Plus précisément, nous avons démontré qu'à partir d'une situation initiale totalement saturée, la condition géométrique $\partial_t h + \operatorname{div}(hs/2) > 0$ induit l'apparition instantanée d'une zone cavitée [$p = 0$] ; *a contrario*, si $\partial_t h + \operatorname{div}(hs/2) \leq 0$, alors la configuration saturée est préservée. Ces résultats reposent sur un principe de comparaison, établi par un dédoublement de variables issu des méthodes de Kružkov, et la construction non triviale de sur- et sous-solutions appropriées. Ce résultat illustre une propriété *mathématique* du modèle d'Elrod-Adams qui est conforme avec les observations expérimentales dans les écoulements lubrifiés. Par ailleurs, il généralise le résultat de propagation obtenu par Carrillo, Díaz & Gilardi (1993) concernant le cas particulier (dont l'intérêt est limité en lubrification) où h est une constante.

2. Code SOLEA : <https://www.projet-plume.org/relier/solea>

Fluides visco-élastiques en lubrification

La justification mathématique de l'équation de Reynolds à partir des équations de Navier-Stokes a été décrite dans un cadre newtonien. Mais, en pratique, de nombreux lubrifiants exhibent des comportements rhéologiques complexes, en raison de l'ajout de nombreux additifs. Avec Guy BAYADA (INSA Lyon) et Laurent CHUPIN (Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand), nous nous sommes intéressés dans [8] à l'asymptotique « film mince » des équations d'Oldroyd, permettant de modéliser des fluides visco-élastiques³ :

$$\begin{aligned} \rho (\partial_t \mathbf{U} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U}) - \mu(1-r)\Delta \mathbf{U} + \nabla p - \operatorname{div} \sigma &= \mathbf{0}, \\ \operatorname{div} \mathbf{U} &= 0, \\ \lambda (\partial_t \sigma + \mathbf{U} \cdot \nabla \sigma + g_a(\nabla \mathbf{U}, \sigma)) + \sigma &= 2\mu r \mathbb{D}(\mathbf{U}), \end{aligned}$$

Dans le cas de lois non-newtoniennes de type quasi-newtonien (lois de puissance, lois de Carreau, fluides micropolaires etc.), le modèle asymptotique correspond à une équation de Reynolds généralisée. Dans le cas de fluides visco-élastiques, la question de l'asymptotique et de la justification d'un modèle limite n'avait pas été abordée, alors que le calcul des écoulements complexes 3D correspondants en film mince est très coûteux, voire impossible. Nous avons donc déterminé formellement le système asymptotique 3D-2D correspondant à l'hypothèse de film mince et avons étudié le caractère bien posé du problème résultant. Incidemment, le modèle asymptotique est connu en lubrification sous le terme de *modèle de Rabinowitsch à deux plateaux*, reproduisant le comportement rhéofluidifiant classiquement observé. Nous avons donc décrit la transition d'un modèle *visco-élastique* vers un modèle *quasi-newtonien* rhéofluidifiant. Cette étude asymptotique justifie donc l'utilisation d'une classe de modèles qui sont généralement obtenus, en mécanique, de façon *ad hoc* par ajustement de paramètres dans des modèles pré-choisis par rapport à des données expérimentales. Nous avons également proposé un algorithme de résolution et développé un code de calculs correspondant⁴, en FORTRAN 90. Par ailleurs, dans [9], cette approche a été étendue à la prise en compte du modèle de Phan-Thien Tanner, qui introduit une non-linéarité supplémentaire dans la loi d'élasticité par un paramètre d'élongation. Par une méthode de perturbation singulière par rapport à ce paramètre, on obtient un modèle limite qui perturbe le modèle limite précédent. De manière un peu inattendue, la correction de Phan-Thien Tanner permet de relaxer la condition d'existence et d'unicité du problème initial et du problème limite. Enfin, dans le cadre de l'hypothèse de film mince (Oldroyd ou Phan-Thien Tanner), on montre que la solution minimise une fonctionnelle d'énergie que nous avons identifiée. Notons que l'existence d'une telle fonctionnelle n'a pas encore été établie pour les modèles d'Oldroyd et Phan-Thien Tanner, sans hypothèse de film mince : cela reste un problème ouvert, réputé très difficile.

Effets de rugosités de faible amplitude et haute fréquence sur l'approximation de Reynolds

La littérature mathématique concernant les problèmes de rugosités en mécanique des fluides s'est considérablement enrichie ces dernières années avec, en particulier, des approches de type *lois de parois* pour des écoulements newtoniens. Avec Laurent CHUPIN (Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand), nous nous sommes intéressés dans [10] à la perturbation par des rugosités de surface de l'asymptotique issue de l'hypothèse de film mince. Néanmoins, nous ne nous sommes pas limités à une approche de type *loi de paroi* qui améliore l'approximation d'ordre 0, puisque nous avons décrit à *tout ordre* les perturbations induites par les rugosités. Le cadre d'études correspond à un écoulement de Stokes confiné dans un domaine d'épaisseur ε et dont les rugosités de surface sont modélisées par une fonction oscillante de période et d'amplitude ε^2 . La présence de ces rugosités entraîne une *perturbation du développement usuel de Reynolds*, obtenu en l'absence de rugosité, par des effets d'échelle. Le développement asymptotique permettant de décrire les effets de couplage entre les différentes échelles est construit sur une suite de problèmes de Reynolds généralisés et de problèmes de Stokes (de type couche limite) en milieu semi-infini. Ce développement est justifié rigoureusement par l'analyse du *résidu* : celui-ci vérifiant un système de Stokes avec termes source et conditions aux limites non homogènes, les estimations sont établies à l'issue d'un relèvement des conditions aux limites, puis du terme source dans l'équation de divergence en utilisant les estimations de Bogovskii (en particulier, la dépendance des constantes par rapport au paramètre ε est estimée, le domaine d'étude étant lui-même dépendant de ε). Nous discutons enfin les résultats mathématiques obtenus : en particulier, le profil convergent-divergent de l'écoulement confiné, qui est typique en lubrification, induit des effets de couplage multi-échelles supplémentaires et non triviaux par rapport au cas d'un canal de section constante (qui est couramment étudié en hydrodynamique, notamment dans les approches de type lois de parois).

3. Ici, ρ , μ et λ modélisent la densité, la viscosité et un temps de relaxation du fluide. Le système est composé de 10 équations à 10 inconnues : $\mathbf{U} = (u, v, w)$ le champ de vitesse, p le champ de pression, $\sigma := (\sigma_{ij})_{1 \leq i, j \leq 3}$ le tenseur symétrique des contraintes élastiques. En notant $\mathbb{D}(\mathbf{U})$ et $\mathbb{W}(\mathbf{U})$ les parties symétrique et anti-symétrique du gradient $\nabla \mathbf{U}$, l'application bilinéaire g_a est définie par

$$g_a(\nabla \mathbf{U}, \sigma) = \sigma \cdot \mathbb{W}(\mathbf{U}) - \mathbb{W}(\mathbf{U}) \cdot \sigma - a(\sigma \cdot \mathbb{D}(\mathbf{U}) + \mathbb{D}(\mathbf{U}) \cdot \sigma), \quad -1 \leq a \leq 1.$$

Un écoulement newtonien peut être modélisé par la simplification de ce modèle, en choisissant $r = 0$ ou $\lambda = 0$.

4. Code ELVIS : <https://www.projet-plume.org/relier/elvis>

CHAPITRE 2

L'étude des lois de conservation scalaires sur un domaine borné qui est proposée dans ce mémoire a été initialement motivée par des questions qui ont émergé de problèmes en lubrification. En effet, l'étude d'un système de Stokes bifluide dans le cadre de l'hypothèse de film mince aboutit à l'émergence d'une loi de conservation scalaire *non-autonome* sous l'influence du cisaillement, et *sur un domaine borné* en raison des conditions aux limites imposées en lubrification. De ce constat ont émergé plusieurs travaux :

- i. une comparaison numérique entre le modèle d'Elrod-Adams et le modèle bifluide construit sur l'équation de Buckley-Leverett [11];
- ii. le caractère bien posé du modèle de Buckley-Leverett aboutissant, de manière plus large, à l'étude d'équations quasilineaires du premier ordre sur un domaine borné pour toute dimension d'espace [12];
- iii. le comportement en temps long de la solution, afin de caractériser la position de chocs entropiques stationnaires, correspondant à la rupture du film mince en lubrification [13];
- iv. la détermination d'une méthode de calcul de la solution d'une loi de conservation avec flux discontinu (en la variable d'état) [14], ce problème correspondant par exemple à l'étude de l'équation de Buckley-Leverett avec un rapport de viscosités évanescents entre les deux fluides.

Évidemment, si ces travaux ont été motivés par les applications en lubrification, nous nous sommes attachés à étudier la structure mathématique de ces problèmes de façon plus globale.

Écoulement bifluide modélisé par une équation de Buckley-Leverett non autonome \boxplus

En collaboration avec Guy BAYADA (INSA Lyon) et Carlos VÁZQUEZ (Universidade da Coruña), nous nous sommes intéressés à la modélisation de l'écoulement de deux fluides newtoniens non miscibles en lubrification [11]. L'asymptotique relative à l'hypothèse de film mince d'un modèle de Stokes multi-fluide, dû à Nouri, Poupaud & Demay (1997) a été obtenue par Paoli (2003). Notons que cette asymptotique 2D-1D (et non 3D-2D comme auparavant) correspond à une approximation supplémentaire appelée *approximation du palier infiniment long*. Ainsi, dans le modèle asymptotique, le comportement de la pression dans le mélange et de la saturation en fluide de référence est décrit par le couplage d'une équation de Reynolds et d'une équation de Buckley-Leverett non-autonome (les profils de vitesse pouvant être déduits des informations précédentes). Néanmoins, l'asymptotique est valable sous une hypothèse forte sur la frontière libre entre les deux fluides et ne permet donc pas rigoureusement d'obtenir un résultat d'existence pour le système limite. Nous avons donc démontré le caractère bien posé de ce système, dont la difficulté repose essentiellement sur l'analyse de l'équation de Buckley-Leverett sur un domaine borné (en dimension 1 d'espace) :

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, x) + \partial_x(\mathcal{F}(x, u(t, x))) &= 0, & (t, x) \in (0, +\infty) \times (0, 1), \\ u(0, x) &= u_0(x), & x \in (0, 1), \\ u(t, x) &= \bar{u} \in \mathbb{R}, & (t, x) \in (0, +\infty) \times \partial(0, 1), \end{aligned}$$

avec $\mathcal{F}(x, u) = f_\varepsilon(u) + \mathcal{H}(x)u(1 - f_\varepsilon(u))$, où $x \mapsto \mathcal{H}(x)$ décrit les effets de cisaillement dans l'écoulement convergent-divergent et ε désigne le rapport des viscosités des deux fluides. Notons que la fonction f_ε admet un profil en forme de \mathcal{S} (avec $f_\varepsilon(0) = 0$ et $f_\varepsilon(1) = 1$) : ces propriétés mathématiques sont similaires à celles du flux de l'équation de Buckley-Leverett habituellement décrite en mécanique des milieux poreux, ce qui justifie la terminologie que nous avons utilisée, même si un terme supplémentaire (et non autonome) dû au cisaillement du dispositif intervient dans notre modèle. Nous avons comparé ce modèle bifluide au modèle d'Elrod-Adams, pour la description de phénomènes de cavitation : l'idée a été de simuler des écoulements bifluides dont le rapport des viscosités est de plus en plus faible, afin d'imiter un mélange liquide-gaz. Les simulations font apparaître qualitativement de fortes similitudes entre les profils de pression-saturation des deux modèles et soulèvent des questions, essentiellement théoriques, qui sont développées dans la suite.

Problème de Cauchy-Dirichlet pour des équations quasilineaires du premier ordre \boxplus

Ce travail a été initialement motivé par des questions liées à l'étude d'un mélange bifluide dans un écoulement de faible épaisseur. L'étude de l'existence, unicité et stabilité de la solution de l'équation de Buckley-Leverett a abouti à celle, plus générale, des lois de conservation scalaires sur un domaine borné [12]. Cette problématique a été initiée par Bardos, Le Roux & Nédélec (1979) pour des données régulières, puis partiellement généralisée par Otto (1996) pour des données peu régulières mais avec flux autonome et en l'absence de terme source. Nous avons donc généralisé ces résultats en montrant le caractère bien posé du problème de Cauchy-Dirichlet pour des équations quasilineaires du premier ordre en toute dimension

d'espace $d \in \mathbb{N}$ et avec des données L^∞ :

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, \mathbf{x}) + \operatorname{div}_{\mathbf{x}} (\mathcal{F}(t, \mathbf{x}, u(t, \mathbf{x}))) + \mathcal{G}(t, \mathbf{x}, u(t, \mathbf{x})) &= 0, & (t, \mathbf{x}) \in (0, T] \times \Omega, \\ u(0, \mathbf{x}) &= u^0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \Omega \\ u(t, \mathbf{r}) &= u^D(t, \mathbf{r}), & (t, \mathbf{r}) \in (0, T] \times \partial\Omega, \end{aligned}$$

où Ω est un ouvert borné de \mathbb{R}^d et sous les hypothèses :

- (i) \mathcal{F} et \mathcal{G} sont deux fonctions régulières : $\mathcal{F} \in (C^2([0, T] \times \overline{\Omega} \times [a, b]))^d$, $\mathcal{G} \in C^2([0, T] \times \overline{\Omega} \times [a, b])$;
- (ii) \mathcal{F} , $\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F}$ et \mathcal{G} sont de régularité Lipschitz par rapport à u , uniformément en (t, \mathbf{x}) ;
- (iii) $(u^0, u^D) \in L^\infty(\Omega; [a, b]) \times L^\infty((0, T] \times \partial\Omega; [a, b])$;
- (iv) $(\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F} + \mathcal{G})(\cdot, \cdot, a) \leq 0$ et $(\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F} + \mathcal{G})(\cdot, \cdot, b) \geq 0$.

En utilisant la classe des semi-entropies de Kružkov (et en définissant au préalable une approximation de ces semi-entropies), nous avons établi le résultat d'existence de solution entropique, en adaptant la méthode de viscosité évanescente (en établissant un résultat de stabilité L^1 pour le problème parabolique associé, des estimations BV puis en appliquant le théorème d'Arzela-Ascoli), ainsi que le résultat d'unicité en adaptant la méthode de dédoublement des variables initiée par Kružkov (1970).

Comportement en temps long de la solution d'une loi de conservation scalaire

En collaboration avec Julien VOVELLE (CNRS & Université Lyon 1), nous avons étudié le comportement en temps long de la solution d'une loi de conservation scalaire non autonome sur un domaine borné, en dimension 1 d'espace [13] :

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, x) + \partial_x (\mathcal{F}(x, u(t, x))) &= 0, & (t, x) \in (0, +\infty) \times (0, 1), \\ u(0, x) &= u_0(x), & x \in (0, 1), \\ u(t, x) &= \bar{u} \in \mathbb{R}, & (t, x) \in (0, +\infty) \times \partial(0, 1), \end{aligned}$$

où les données sont à valeurs dans $[0, 1]$ et la fonction-flux $\mathcal{F} \in C^1([0, 1]^2)$ vérifie certaines hypothèses structurelles (le prototype de loi considérée correspond au modèle de Buckley-Leverett). Si de nombreux travaux se sont intéressés au comportement en temps long de la solution de lois de conservation scalaires sur l'espace entier, la bibliographie sur le comportement en temps long de la solution *sur un domaine borné* n'est pas très importante : ainsi, Mascia & Terracina (1999) ont étudié ce problème avec un terme source et un flux autonome. Le problème qui nous intéresse est caractérisé par une absence de terme source, mais le caractère non autonome du flux induit de nouvelles difficultés mathématiques. Dans ce contexte, nous avons mis en évidence le contrôle exercé par les conditions aux limites dans la structure des états stationnaires et démontré, par une analyse de semi-groupe, la convergence de la solution vers un état stationnaire. En particulier, les conditions aux limites, au sens de Bardos, Le Roux & Nédélec, jouent un rôle essentiel dans la caractérisation des états stationnaires admissibles. Les simulations illustrent le comportement en temps long de la solution, et notamment sa convergence vers un état stationnaire que nous caractériserons *a priori*.

Calcul de la solution du problème de Cauchy-Dirichlet pour une loi de conservation scalaire avec flux discontinu (en la variable d'état)

Dans la continuité du travail précédent, nous nous sommes intéressés dans [14] à l'analyse numérique de lois de conservation scalaires avec un flux discontinu. Cette question émerge naturellement lorsque l'on passe formellement à la limite sur le rapport des viscosités ε dans l'équation de Buckley-Leverett [11] : $f_\varepsilon(u) \rightarrow H(u - 1)$, où H désigne le graphe de Heaviside et cette asymptotique est motivée par le faible rapport des viscosités entre un gaz et un fluide. Nous avons donc considéré une loi de conservation scalaire sur un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. La fonction-flux \mathcal{F} admet éventuellement un nombre fini de discontinuités⁵ du premier type. Si le caractère bien posé de ce problème a été établi par Carrillo (2003), le calcul de la solution n'avait pas été abordé. La difficulté repose sur le fait que les méthodes explicites sont limitées par une condition CFL dans laquelle intervient la constante de Lipschitz du flux ; or, dans notre cas, la constante de Lipschitz n'est même pas définie. Quant aux méthodes implicites, elles échouent en pratique. Nous avons donc utilisé une reformulation du problème, équivalente à celle de Carrillo, qui permet de régulariser le flux (au prix d'une difficulté supplémentaire sur l'identification de la solution) et proposé une méthode aux volumes finis implicite construite sur ce problème équivalent. Nous avons démontré d'une part que le schéma est bien posé (existence et unicité de la solution numérique par degré topologique de Brouwer) et d'autre part que la solution numérique converge vers l'unique solution entropique du problème continu (en établissant des inégalités entropiques discrètes et des estimations BV faibles).

5. Le flux $(t, \mathbf{x}, u) \mapsto \mathcal{F}(t, \mathbf{x}, u)$ est discontinu en la variable d'état u ; cette hypothèse ne doit pas être confondue avec la suivante : dans de nombreux articles, le flux est supposé discontinu en la variable d'espace \mathbf{x} , voir les travaux de Diehl (1996), Towers (2000), Bachmann & Vovelle (2006) et, plus récemment Andreianov, Karlsen & Risebro (2010).

CHAPITRE 3

Ce chapitre est consacré à des travaux de modélisation et de calcul scientifique en sciences du vivant.

Le premier axe concerne la *modélisation du système pulmonaire* humain et, en particulier, des échanges gazeux dans le poumon. Ces travaux de modélisation se sont focalisés sur la construction de modèles simplifiés, nécessaires à la compréhension des phénomènes complexes, en évitant au maximum les procédures d'ajustement de paramètres qui n'ont pas de définition physiologique clairement établie.

Le second axe de cette thématique porte sur la *simulation de fluides biomimétiques* avec une attention particulière pour les suspensions denses. Dans ces travaux, un effort particulier est porté sur la modélisation des interactions à un niveau microscopique (par exemple, les forces d'interaction à courte distance et à longue distance entre des entités passives, les interactions fluide-structure entre le fluide et des entités propulsées, etc.). L'objectif principal de cette approche microscopique est de déterminer le comportement de ces systèmes à l'échelle macroscopique par la simulation d'un grand nombre d'entités dans des écoulements 2D ou 3D.

Modélisation du poumon : influence de la rigidité bronchique sur l'efficacité des échanges gazeux

En collaboration avec Bertrand MAURY (Université Paris-Sud, Orsay), Thomas SIMIŁOWSKI et Christian STRAUS (Hôpital La Pitié-Salpêtrière, Paris), nous avons réalisé un travail de modélisation dont le but est de confirmer ou infirmer certaines hypothèses émises par les cliniciens relatives à l'influence de la rigidité bronchique et du muscle lisse pulmonaire [15]. Plus précisément, nous nous sommes intéressés à l'impact des caractéristiques mécaniques de l'arbre bronchique et du parenchyme pulmonaire sur les échanges gazeux dans le poumon humain. À cet égard, le rôle du muscle lisse bronchique est imparfaitement compris ; ce rôle pourrait être en partie structurel, pour conférer à l'arbre bronchique des caractéristiques mécaniques compatibles avec un transport optimal de l'air inspiré vers les zones d'échange. Pour tester cette hypothèse, deux modèles simplifiés ont été élaborés :

- le modèle mécanique usuel décrivant l'évolution du volume V et du débit \dot{V} au cours de la respiration est un système masse-ressort : $I\dot{V} + R\dot{V} + E(V - V_0) = P_{\text{ext}}$, où V_0 représente le volume pulmonaire à l'équilibre, P_{ext} la pression externe modélisant l'action des muscles respiratoires tels que le diaphragme. Les paramètres I , R et E représentent respectivement l'inertance du poumon, la résistance des voies aériennes et l'élastance du poumon ; ce sont des données usuelles (bien que difficilement identifiables) en physiologie respiratoire. La prise en compte du muscle lisse et, plus généralement, de la rigidité bronchique, a consisté à intégrer une loi de comportement non linéaire pour la résistance, obtenue sous l'hypothèse d'une déformation homothétique des bronches.
- le second modèle est un modèle d'absorption de l'oxygène, basé sur un bilan de la quantité d'oxygène dans le système : en particulier, l'appauvrissement en oxygène dans les alvéoles, par diffusion à travers la membrane alvéolo-capillaire, est pris en compte.

Les deux modèles ont été couplés en série. Les effets de modification des paramètres du modèle mécanique sur le modèle d'absorption ont été décrits et le modèle a montré que la réponse mécanique de l'arbre bronchique aux forces de dilatation relatives à l'inspiration joue un rôle déterminant dans l'efficacité respiratoire. À un extrême, un arbre bronchique totalement rigide serait contre-productif en empêchant une quantité suffisante de gaz d'atteindre les alvéoles. À l'autre extrême, un arbre bronchique totalement déformable permettrait à de très grands volumes d'air d'entrer dans le thorax mais compromettrait l'efficacité des échanges gazeux en limitant le volume alvéolaire et donc la surface de membrane disponible pour le transfert d'oxygène (effet « espace mort »). Ces observations sont en faveur d'une hypothèse du rôle structurel du muscle lisse bronchique destiné à optimiser les propriétés convectives de l'arbre bronchique.

Modélisation du poumon : quelques aspects non-linéaires des échanges gazeux

En collaboration avec Bertrand MAURY (Université Paris-Sud, Orsay), nous avons proposé dans [16] un modèle intégré de transfert d'oxygène dans le sang. Dans la littérature, cet aspect est modélisé par une formule simplificatrice, due à Roughton & Forster (1957). Les enjeux de cette étude résident dans l'identification et la compréhension de mécanismes non-linéaires régissant le transfert d'oxygène dans le sang : i) effets non-linéaires de transfert d'oxygène dans des conditions normales de respiration ; ii) phénomènes de limitation cinétique, observés dans des régimes de respiration extrêmes ; iii) hétérogénéité de la concentration d'oxygène dans l'*acinus* pulmonaire (i. e. la partie *alvéolée* de l'arbre bronchique dans laquelle se produisent les échanges gazeux avec le sang). Cette approche nous permet de retrouver les ordres de grandeur usuels pour le transfert d'oxygène, au repos et à l'exercice, en utilisant les données issues de la littérature, sans procédure de réglage de paramètres ou d'ajustement de courbe par régression. On montre alors que la capacité de diffusion de la membrane n'affecte pas le transfert d'oxygène mais que, lorsqu'elle diminue (par exemple à cause d'emphysème⁶) en-dessous d'une valeur critique, elle devient un paramètre significatif dans la détermination du

6. L'emphysème est une maladie des voies aériennes de la région acinaire, caractérisée par la destruction de la paroi alvéolaire.

transfert d'oxygène en raison de la limitation cinétique. Par ailleurs, un modèle 1D *conservatif* (contrairement aux modèles similaires construits par Foucquier (2010), d'une part, et Swan & Tawhai (2011), d'autre part) a été développé : par conservation de la quantité d'air, une équation de transport permet de déterminer la vitesse moyenne de l'écoulement par génération ; puis, par conservation de la quantité d'oxygène, une équation d'advection-diffusion-absorption détermine le comportement de la concentration d'oxygène le long de l'arbre bronchique. Ce modèle 1D nous permet d'étudier le phénomène d'écrantage diffusionnel, i. e. la possibilité que le transfert d'oxygène puisse être affecté significativement par le fait que la surface d'échange associée aux dernières générations participe peu au transfert d'oxygène au repos, fournissant ainsi une réserve capacitaire pour le transfert d'oxygène à l'exercice. Notre modèle n'identifie pas un tel phénomène, à l'instar des travaux de Swan & Tawhai (2011) : au repos, bien que la concentration d'oxygène soit légèrement inférieure dans les alvéoles terminales, le transfert d'oxygène se localise essentiellement dans la dernière génération.

Simulation de suspensions passives : une approche de type dynamique stokesienne

Les approches théoriques ou numériques visant à décrire le comportement de suspensions d'entités ont été, pendant longtemps, limitées aux suspensions diluées. Pour les suspensions denses, de nouvelles approches numériques sont requises afin de dépasser deux difficultés majeures : la détermination des interactions multi-corps entre les objets et la détermination de la distribution espace-temps des objets.

Le calcul *direct* pour des suspensions *denses* 3D est actuellement hors de portée. Avec Sylvain FAURE (CNRS & Université Paris-Sud, Orsay), Bertrand MAURY (Université Paris-Sud, Orsay) et Takéo TAKAHASHI (INRIA Nancy Grand Est), nous avons développé un outil de simulation numérique, basé sur une méthode de « dynamique stokesienne », appliqué à la simulation 3D de suspensions denses d'objets rigides [17] : à partir d'un code de calculs C++ granulaire développé par Aline Lefebvre⁷, permettant de définir des macro-objets et de gérer le contact inélastique entre ces objets, nous procédons à une évaluation des forces d'interaction hydrodynamique entre les entités (évitant, ainsi, le calcul de l'écoulement fluide) par la méthode dite de « dynamique stokesienne » développée par Brady & Bossis (1988). Cette méthode permet de déterminer les interactions hydrodynamiques entre des objets rigides ainsi que la distribution spatio-temporelle des entités (i. e. la microstructure), à partir d'une hypothèse d'additivité par paire des interactions. Cette hypothèse d'additivité des interactions est forte, mais elle permet la mise en œuvre d'une procédure de calcul efficace : la méthode consiste à construire une grande matrice *résistance* décrivant l'interaction entre toutes les entités et le fluide et, en conséquence, à résoudre le système linéaire résultant de taille $\mathbb{R}^{3N} \times \mathbb{R}^{3N}$, où N est le nombre d'objets rigides évoluant dans le fluide. Notons que le « coût » de cette méthode peut devenir très important, mais il doit être confronté à celui de la résolution directe du problème fluide-structure dont le nombre de degrés de liberté, après discrétisation, engendre un coût de calcul prohibitif qui le rend impossible. Des résultats exploratoires ont été obtenus pour des suspensions denses de sphères, de globules rouges, et de chaînes de polymère, à partir de lois de Faxen et en intégrant les forces de lubrification.

Simulation de suspensions actives : une approche directe

En collaboration avec Bertrand MAURY et Astrid DECOENE (Université Paris-Sud, Orsay), nous nous sommes intéressés dans [18] à une approche *directe* pour la simulation 2D d'écoulements de Stokes dans lesquels évolue un grand nombre de bactéries auto-propulsées. Le but de cette approche directe est de capter au mieux les interactions multi-corps afin d'obtenir des informations sur le comportement macroscopique de ces suspensions, dont la compréhension est liée à la richesse des observations expérimentales : *dynamique collective* donnant l'impression d'une dynamique turbulente, *rhéologie* complexe qui vise à caractériser la motilité des micro-nageurs à partir de données observables, ou encore *chimiotactisme* résultant de l'interaction des bactéries avec leur environnement chimique couplé aux interactions hydrodynamiques déjà mentionnées.

L'objectif de cette approche *directe* est de développer des méthodes de résolution efficaces pour la simulation de suspensions denses. En particulier, la simulation directe permet de déterminer les interactions minimales aboutissant à l'émergence de dynamiques collectives complexes : interactions hydrodynamiques *uniquement* pour la turbulence faible, interactions hydrodynamiques *et* chimiotactisme pour les mouvements de bioconvection de grande amplitude avec instabilités etc. Nous nous sommes limités au cas d'écoulements 2D car cette dimension réduite permet raisonnablement de développer des outils de simulation *directe* de suspensions *denses*. Dans ce travail, la propulsion des bactéries est modélisée par un couple de forces de même intensité et de direction opposée appliqué sur le corps rigide des bactéries et sur une région du fluide associée au mouvement d'un flagelle. La méthode pour simuler l'écoulement fluide et le mouvement des bactéries est basée sur une formulation variationnelle définie sur tout le domaine, qui induit un couplage fort pour l'interaction fluide-particules : le mouvement rigide du corps des bactéries est assuré par pénalisation du tenseur de déformation sur le domaine rigide. Mathématiquement, le modèle conduit à la résolution d'un problème de minimisation dans un espace fonctionnel non contraint, qui peut être implanté avec un solveur

7. Code SCOPI : <https://www.projet-plume.org/relier/scopi>

éléments finis usuel : à cet effet, un code⁸ `FREEFEM++` a été développé. Ce modèle permet d'obtenir une description précise du mouvement du fluide et des interactions hydrodynamiques pour des suspensions diluées ou denses. À partir de cet outil numérique, une analyse qualitative et quantitative des résultats a été développée afin de mettre en évidence les phénomènes observés dans les expériences, dans le cas de bactéries dites *pusher* (propulsées par un flagelle situés en aval du corps) ou *puller* (tractées par des cils situés en amont du corps et animés d'un mouvement de brasse). En particulier, l'apparition et la persistance de structures cohérentes est quantifiée, de même que la différence de signature rhéologique selon le mode de propulsion. Enfin, les aspects chimiotactiques ont été intégrés, prenant en compte la consommation individuelle d'oxygène et le mode de déplacement caractéristique des bactéries, appelé *run-and-tumble*, qui leur permet de se déplacer vers les gradients favorables de nutriments. L'intégration de ces phénomènes nous permet de reproduire les instabilités hydrodynamiques complexes favorisant des mouvements bioconvectifs.

AUTRES TRAVAUX

Les articles [19] et [20] ne sont pas discutés dans ce document, par souci de brièveté et de cohérence. Néanmoins, nous en proposons une rapide synthèse dans cette introduction.

Ségrégation spatiale dans un système de réaction-compétition-diffusion

En collaboration avec Danielle HILHORST (CNRS & Université Paris-Sud, Orsay) et Masayasu MIMURA (Meiji University, Tokyo), nous avons étudié une asymptotique « réaction rapide » d'un système de réaction-compétition-diffusion à deux espèces [19] :

$$\partial_t u = \Delta u + f(u) - \varepsilon^{-1} uv, \quad \partial_t v = \delta \Delta v + g(v) - \varepsilon^{-1} uv.$$

Les fonctions f et g désignent les réactions intraspécifiques tandis que $(u, v) \mapsto uv$ modélise un terme de compétition interspécifique ; le coefficient de diffusion $\delta \geq 0$ permet de considérer un couplage EDP / EDP ou EDP / EDO. Le paramètre ε^{-1} désigne le taux de réaction (ε représente alors un temps caractéristique de réaction). On associe à ce système des conditions initiales ($u = u_0, v = v_0$) et des conditions aux limites de type Dirichlet-Neumann ($u = \bar{u}, \delta \partial_n v = 0$). Après avoir établi le caractère bien posé du problème EDP / EDP ou EDP / EDO, nous avons étudié l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$. Nous établissons d'abord un principe de ségrégation spatiale entre les deux espèces dans le régime asymptotique : à la limite, u et v ont des supports disjoints. Nous montrons que l'inconnue réduite $w := u - v$, qui permet d'identifier à la fois $u := w^+$ et $v := w^-$, est solution d'un problème parabolique non-linéaire bien posé. De plus, l'ensemble $[w = 0]$ définit une frontière libre qui délimite les habitats des deux espèces. Nous décrivons enfin, sous une hypothèse de régularité de la frontière libre, les conditions de saut à l'interface (notamment sur la vitesse normale de propagation de la frontière libre). Nous caractérisons également le terme de réaction interspécifique comme une mesure localisée sur la frontière libre. Mathématiquement, les outils d'analyse utilisés dans ce travail le rapprochent de l'étude des lois de conservation scalaires exposées au Chapitre 2, à travers leur approximation parabolique.

Méthodes de volumes finis d'ordre élevé pour des écoulements instationnaires sur maillage non structuré

Dans le cadre d'applications industrielles, de nombreux efforts se sont concentrés sur le développement de méthodes d'ordre élevé en calcul scientifique appliqué à la mécanique des fluides ou à l'aéroacoustique. Si les méthodes de différences finies ne sont pas adaptées à la complexité des domaines, la méthode des volumes finis est très populaire, par sa facilité d'implantation et son adaptation à des géométries complexes. Néanmoins, dans le cas de systèmes de conservation, il est difficile d'établir une différentiation des flux en espace avec des ordres élevés de précision. Dans [20], en collaboration avec Sofiane KHELLADI (ENSAM Paris), Xesus NOGUEIRA (Universidade da Coruña) et Farid BAKIR (ENSAM Paris), nous avons présenté trois stratégies qui préservent un *ordre de précision élevé* pour des cas *instationnaires* et sur maillage *non structuré*, en utilisant une méthode de volumes finis basées sur des approximations de moindres carrés avec pondération (méthodes dites Moving Least Squares), afin de résoudre les équations d'Euler (linéarisées ou non-linéaires). La formulation du problème, après discrétisation en espace, revient à résoudre un système différentiel avec une matrice de masse dont le remplissage dépend de la précision requise. Les stratégies de résolution adoptées sont alors : (i) résolution de la formulation *matrice pleine* par un solveur explicite ou par un solveur implicite ; (ii) résolution par un schéma explicite en temps d'une formulation *matrice condensée* obtenue par une reconstruction des variables à moyenne nulle ; (iii) résolution par un solveur explicite d'une formulation *matrice condensée*, obtenue par une pseudo-inversion de la matrice de masse. La comparaison entre la précision effective des trois méthodes est discutée. Thématiquement, ce travail sur les *systèmes* de conservation se rapproche du Chapitre 2, mais il est consacré à des questions de calcul scientifique exclusivement.

8. Code SOPHIALOREN : <https://www.projet-plume.org/relief/sophialoren>

CHAPITRE 1

MODÉLISATION, ANALYSE MATHÉMATIQUE ET CALCUL SCIENTIFIQUE APPLIQUÉS À LA MÉCANIQUE DES FILMS MINCES

1.1	INFLUENCE DES RUGOSITÉS DANS DES ÉCOULEMENTS MINCES CAVITÉS \mathbb{W}	10
1.1.1	Cavitation et rugosités en lubrification	10
1.1.2	Homogénéisation du modèle d'Elrod-Adams	11
1.1.3	Résultats numériques	13
1.2	FORMATION DE LA CAVITATION EN LUBRIFICATION HYDRODYNAMIQUE	14
1.2.1	Conditions suffisantes d'apparition ou de disparition de la cavitation	14
1.2.2	Résultats numériques	15
1.3	FLUIDES VISCO-ÉLASTIQUES EN LUBRIFICATION	16
1.3.1	Fluides non-newtoniens et l'hypothèse de film mince	16
1.3.2	Approximation « film mince » pour les modèles d'Oldroyd et Phan-Thien & Tanner	17
1.3.3	Méthode de résolution	18
1.4	INFLUENCE DE RUGOSITÉS SUR L'APPROXIMATION DE REYNOLDS	19
1.4.1	Développement formel	21
1.4.2	Justification rigoureuse du développement asymptotique	22
1.4.3	Discussion sur les interactions multi-échelles	22

LA lubrification hydrodynamique concerne les mécanismes confinant un liquide et pour lesquels la forme et la vitesse relative de deux surfaces en regard engendrent la formation d'un film mince continu sous une pression suffisamment élevée pour empêcher le contact. La théorie repose fortement sur l'équation de Reynolds [Rey86], qui est une limite asymptotique des équations de Navier-Stokes correspondant à l'hypothèse de film mince (approximation 3D-2D, similaire à la théorie des plaques et coques en élasticité).

La transition des équations de Navier-Stokes vers l'équation de Reynolds utilise la faible distance qui sépare les deux surfaces (quelques dizaines de microns) pour éliminer les variations en pression suivant la direction perpendiculaire aux deux surfaces. D'un point de vue mathématique, les premières démonstrations rigoureuses ont été établies par Bayada & Chambat [BC86] et par Nazarov [Naz90].

Soit un fluide newtonien, de viscosité μ , dans un domaine $\Omega_\delta = \{(\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^3; \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, 0 < z < \delta h(\mathbf{x})\}$ que l'on suppose mince : $\delta \ll 1$. La surface inférieure $z = 0$ est animée d'une *vitesse de cisaillement* notée \mathbf{s} , voir FIG. 1.1. La solution du problème de (Navier) Stokes $(\mathbf{u}_\delta, v_\delta, p_\delta)$ se comporte alors ainsi :

$$\mathbf{u}_\delta(\mathbf{x}, z) = \mathbf{u}^* \left(\mathbf{x}, \frac{z}{\delta} \right) + \mathcal{O}(\delta^2), \quad v_\delta(\mathbf{x}, z) = \delta v^* \left(\mathbf{x}, \frac{z}{\delta} \right) + \mathcal{O}(\delta^3), \quad p_\delta(\mathbf{x}, z) = \frac{p^*(\mathbf{x})}{\delta^2} + \mathcal{O}(1).$$

L'équation de Reynolds qui régit la pression renormalisée $\mathbf{x} \mapsto p^*(\mathbf{x})$ dans le mécanisme s'obtient alors par un calcul du flux moyen et prise en compte des conditions aux limites :

$$-\operatorname{div} \left(\frac{h^3}{12\mu} \nabla p^* \right) = -\operatorname{div} \left(\frac{h\mathbf{s}}{2} \right),$$

les profils de vitesse renormalisée (\mathbf{u}^*, v^*) à l'ordre principal pouvant être déduits de p^* par simple intégration⁹. La simplification induite par cette procédure est immédiate : l'équation de Reynolds propose le calcul d'une quantité scalaire en dimension 2 au lieu d'un calcul en vitesse-pression en dimension 3 !

Dans le cadre de cette hypothèse, de nombreuses études se sont intéressées, du point de vue de la modélisation, de l'analyse ou du calcul, à l'intégration de phénomènes non-linéaires qui émergent en pratique dans les mécanismes industriels : rugosités des surfaces générées par l'usinage, interaction fluide-structure par déformation des surfaces sous l'effet de fortes pressions, cavitation, ajout d'additifs modifiant la rhéologie des lubrifiants etc. Dans ce chapitre, nous présentons une synthèse d'articles portant sur cette problématique.

9. Dans la suite, nous travaillerons avec la pression $p := p^*/(6\mu)$: l'équation de Reynolds se réduit alors à $-\operatorname{div}(h^3 \nabla p) = -\operatorname{div}(h\mathbf{s})$.

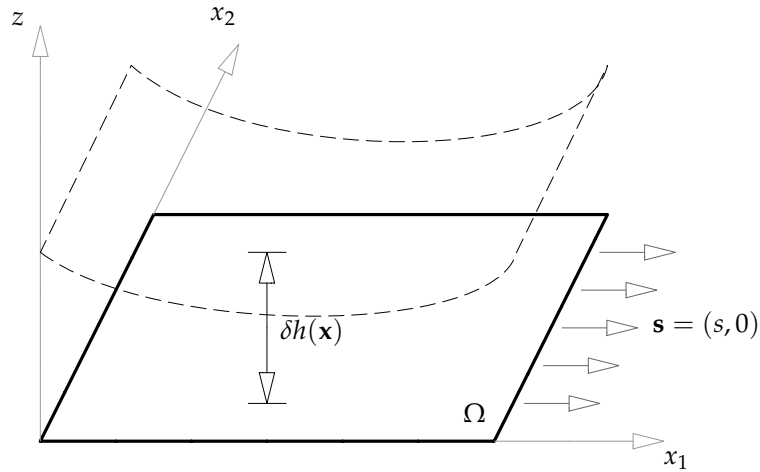


FIGURE 1.1 – *Domaine mince* $\Omega_\delta := \{(\mathbf{x}, z) \in \mathbb{R}^3; \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, 0 < z < \delta h(\mathbf{x})\}$ en lubrification : l'écoulement de faible épaisseur ($\delta \ll 1$) est confiné entre la surface supérieure, fixe, et la surface inférieure animée d'une vitesse de cisaillement \mathbf{s} .

1.1 INFLUENCE DES RUGOSITÉS DANS DES ÉCOULEMENTS MINCES CAVITÉS \square

L'équation de Reynolds, proposée dès 1886, décrit le comportement d'un écoulement visqueux entre deux surfaces très proches en mouvement relatif. Néanmoins, cette modélisation ne prend pas en compte les phénomènes de cavitation, qui est définie comme la rupture du film liquide due à la formation de bulles de gaz, lorsque la pression diminue jusqu'à atteindre la pression de vapeur saturante ; dans les zones dites cavités, l'approximation de Reynolds n'est plus valide. Afin de préserver la réduction de dimension, de nombreuses corrections ont été proposées afin d'intégrer un modèle de cavitation à l'équation de Reynolds.

1.1.1 Cavitation et rugosités en lubrification

Afin de modéliser la cavitation, l'inéquation variationnelle associée à la contrainte $p \geq 0$ (la pression de vapeur saturante est fixée à 0, par simplicité) a été très populaire en mécanique, mais ses propriétés de conservation sont mises en défaut. Elrod & Adams [EA75] ont alors proposé un modèle conservatif, en supposant que la région cavitée est un mélange liquide-gaz modélisé par une inconnue supplémentaire θ : la proportion en liquide du mélange. Le modèle d'Elrod-Adams est une modification de l'équation de Reynolds :

$$-\operatorname{div} \left(h^3 \nabla p \right) = -\operatorname{div} (\theta h \mathbf{s}), \quad p \geq 0, \quad H(p) \leq \theta \leq 1. \quad (1.1)$$

Ici, $h : \Omega \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ est la hauteur normalisée entre les deux surfaces qui confinent l'écoulement, $\mathbf{s} = (s, 0)$ est la vitesse constante de cisaillement du dispositif, $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est la pression dans le film mince (inconnue du problème), $\theta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ est la saturation locale de la phase liquide (inconnue du problème) et H désigne le graphe de Heaviside. Ainsi, une frontière libre peut se former, délimitant deux zones distinctes : la *région saturée* dans laquelle $p \geq 0$ et $\theta = 1$ (au sein de laquelle l'équation de Reynolds est vérifiée) et la *région cavitée* dans laquelle $p = 0$ et $0 \leq \theta < 1$ (la lubrification n'est que partielle). L'intérêt du modèle d'Elrod-Adams réside dans ses propriétés physiques : contrairement à d'autres modèles (tels que l'inéquation variationnelle), il préserve le débit massique et permet d'obtenir des informations supplémentaires sur les zones cavitées telle que la proportion en lubrifiant liquide entre les surfaces. Le modèle est largement utilisé en tribologie et fournit des résultats qui sont en accord avec les résultats expérimentaux.

En lubrification, l'influence des rugosités des surfaces est une question cruciale : la faiblesse de l'épaisseur de l'écoulement rend les mécanismes particulièrement sensibles à ces irrégularités, qui peuvent avoir un impact important sur leurs performances. Du point de vue du calcul, une approche directe est impossible : le maillage à l'échelle de ces irrégularités entraîne des coûts de calculs prohibitifs, si bien que d'autres approches sont nécessaires pour prendre en compte les effets moyens de ces rugosités : c'est le but des approches de type *homogénéisation mathématique*, adopté dans cette section. En considérant des rugosités périodiques, la hauteur entre les deux surfaces devient fortement oscillante :

$$h_\varepsilon(\mathbf{x}) := h(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon)$$

le paramètre ε mesurant la fréquence des rugosités. Ainsi, au lieu de calculer la solution du problème direct à ε fixé, on s'intéressera à la détermination d'une solution approchée en étudiant l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$: la structure du problème *homogénéisé* est généralement proche de celle du problème initial et ses coefficients réguliers non oscillants permettent la mise en œuvre d'une méthode numérique peu coûteuse. Dans le cadre

de l'équation de Reynolds, l'homogénéisation du problème est connue depuis longtemps : il s'agit en effet de l'homogénéisation d'un problème elliptique *classique* avec coefficients fortement oscillants (voir par exemple [BLP78] et les références associées); cette procédure est également identifiée en mécanique par l'utilisation de facteurs de forme décrivent la structure anisotrope de l'écoulement résultant [PC78]. Dans le cadre de l'inéquation *variationnelle* associée à la modélisation de la cavitation, l'homogénéisation du problème est également bien connue [CR81, BF89]. Pour le modèle d'Elrod-Adams, la question n'avait pas été abordée. Dans ce contexte, la difficulté repose sur le caractère elliptique-hyperbolique du problème : l'écoulement est décrit par une inconnue en pression-saturation dont le couplage induit un changement de structure mathématique.

Dans ce contexte, nous désignons par (P^ε) le problème associé à une fonction oscillante de paramètre ε . Dans [1, 2], nous avons décrit le comportement de la solution de (P^ε) , lorsque ε tend vers 0, et caractérisé les fonctions limites comme la solution d'un problème homogénéisé (P^*) dont la structure mathématique est proche de celle du problème initial. Pour cela, nous avons utilisé la méthode d'éclatement périodique [CDGo8] et qui possède des liens étroits avec la technique de convergence double-échelle [All92].

1.1.2 Homogénéisation du modèle d'Elrod-Adams

Par la méthode d'éclatement périodique ou de convergence double-échelle, nous avons établi le comportement de l'écoulement lorsque ε tend vers 0, en supposant que les rugosités ont un profil transverse, longitudinal ou, plus généralement, un profil oblique s'exprimant sous la forme suivante :

Hypothèse 1.1 La hauteur entre les surfaces rigides h_ε s'écrit sous la forme :

$$h := h(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) = H_1^{1-\alpha} \left(\mathbf{x}, \frac{X_1^\gamma(\mathbf{x})}{\varepsilon} \right) H_2^\alpha \left(\mathbf{x}, \frac{X_2^\gamma(\mathbf{x})}{\varepsilon} \right)$$

avec $\alpha \in [0, 1]$ (α est un paramètre d'homogénéité de la surface vis-à-vis de H_1 et H_2). Ici $\mathbf{x} \mapsto (X_1^\gamma(\mathbf{x}), X_2^\gamma(\mathbf{x})) = \mathbf{R}_\gamma \cdot \mathbf{x}$ désigne le changement de coordonnées par la rotation d'angle γ (associée à la matrice de rotation \mathbf{R}_γ).

Remarque 1.1 (Échelles lente et rapide) La fonction oscillante fait intervenir deux échelles distinctes : une échelle lente, décrite par la variable usuelle $\mathbf{x} \in \Omega$, et une échelle rapide décrite par la variable $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$. Les oscillations sont supposées périodiques, de sorte que cette variable \mathbf{y} « vit » sur la cellule unité $Y :=]0, 1]^2$.

Par la suite, nous allons voir que la solution du problème (P^ε) converge vers une limite qui est la solution d'un problème dit *homogénéisé*, noté (P^*) , dont la structure mathématique est proche de celle du problème initial. Définissons sans attendre ce problème homogénéisé :

Définition 1.1 Le problème (P^*) consiste à déterminer une pression p_0 et un couple de saturations $(\Theta_i)_{i \in \{1,2\}}$ tels que

$$-\operatorname{div}(\mathcal{A}^0 \cdot \nabla p_0) = -\operatorname{div}(\mathcal{B}^0(\Theta_1, \Theta_2) \cdot \mathbf{s}), \quad p_0 \geq 0, \quad H(p_0) \leq \Theta_i \leq 1, \quad (i = 1, 2)$$

avec les matrices homogénéisées

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^0 &= \begin{pmatrix} a_1^* & 0 \\ 0 & a_2^* \end{pmatrix} - (a_1^* - a_2^*) \sin \gamma \begin{pmatrix} \sin \gamma & \cos \gamma \\ \cos \gamma & -\sin \gamma \end{pmatrix}, \\ \mathcal{B}^0(\Theta_1, \Theta_2) &= \begin{pmatrix} \Theta_1 b_1^* & 0 \\ 0 & \Theta_2 b_2^* \end{pmatrix} - (\Theta_1 b_1^* - \Theta_2 b_2^*) \sin \gamma \begin{pmatrix} \sin \gamma & \cos \gamma \\ \cos \gamma & -\sin \gamma \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

En notant \overline{f}^Y la moyenne de f par rapport à la variable rapide, les coefficients homogénéisés sont définis par

$$a_1^* = \frac{\overline{H_2^{3\alpha}}^Y}{H_1^{3(-1+\alpha)}}, \quad a_2^* = \frac{\overline{H_1^{3(1-\alpha)}}^Y}{H_2^{-3\alpha}}, \quad b_1^* = \frac{\overline{H_1^{-2(1-\alpha)} H_2^\alpha}^Y}{H_1^{3(-1+\alpha)}}, \quad b_2^* = \frac{\overline{H_1^{1-\alpha} H_2^{-2\alpha}}^Y}{H_2^{3(-\alpha)}}.$$

La construction du problème homogénéisé (P^*) résulte de l'analyse du comportement de la solution du problème (P^ε) . On montre en effet que le lien entre les problèmes (P^ε) et (P^*) est décrit par le

Théorème 1.1 Soit $(p_\varepsilon, \theta_\varepsilon)$ la solution de (P^ε) . Il existe $(p_0, \theta_0) \in H^1(\Omega) \times L^\infty(\Omega \times Y)$ tel que (p_0, θ_0) est la limite double-échelle de $(p_\varepsilon, \theta_\varepsilon)$, à une sous-suite près de ε . En définissant les saturations

$$\Theta_1(\mathbf{x}) := \frac{\overline{(\theta_0(\mathbf{x}, \cdot) H_1^{-2(1-\alpha)}(\mathbf{x}, \cdot) H_2^\alpha(\mathbf{x}, \cdot))}^Y}{\overline{H_1^{-2(1-\alpha)}(\mathbf{x}, \cdot) H_2^\alpha(\mathbf{x}, \cdot)}^Y}, \quad \Theta_2(\mathbf{x}) := \frac{\overline{(\theta_0(\mathbf{x}, \cdot) H_2^{-2\alpha}(\mathbf{x}, \cdot) H_1^{1-\alpha}(\mathbf{x}, \cdot))}^Y}{\overline{H_2^{-2\alpha}(\mathbf{x}, \cdot) H_1^{1-\alpha}(\mathbf{x}, \cdot)}^Y}, \quad (1.2)$$

alors $(p_0, \Theta_1, \Theta_2)$ est solution du problème (P^*) .

Idée de la preuve. Ce résultat de convergence est démontré en suivant les étapes suivantes :

1. *Reformulation du problème dans les coordonnées définies par les directions des rugosités.* Le changement de coordonnées n'affecte que la direction du cisaillement : le vecteur \mathbf{s} a été changé en $\mathbf{s}^\gamma := \mathbf{R}_\gamma \cdot \mathbf{s}$.
2. *Estimations, résultats de convergence et propriétés des fonctions limites.* Les fonctions p_ε et θ_ε sont bornées dans $H^1(\Omega)$ et $L^\infty(\Omega)$ respectivement. Par conséquent [All92, Proposition 1.14], il existe $(p_0, p_1) \in H^1(\Omega) \times L^2(\Omega; H^1_{\text{per}}(Y)/\mathbb{R})$ et $\theta_0 \in L^2(\Omega \times Y)$ tels que, à une sous-suite près, dans $L^2(\Omega \times Y)$:

$$\mathcal{T}_\varepsilon(p_\varepsilon) \rightarrow p_0, \quad \mathcal{T}_\varepsilon(\nabla p_\varepsilon) \rightarrow \nabla_{\mathbf{x}} p_0 + \nabla_{\mathbf{y}} p_1, \quad \mathcal{T}_\varepsilon(\theta_\varepsilon) \rightarrow \theta_0.$$

L'opérateur d'éclatement périodique [CDGo8] $\mathcal{T}_\varepsilon : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega \times Y)$ est défini par :

$$\mathcal{T}_\varepsilon(w)(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = w \left(\varepsilon \left[\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \right]_Y + \varepsilon \mathbf{y} \right),$$

où $[\mathbf{x}]_Y \in \mathbb{Z}^2$ désigne la partie entière de \mathbf{x} est l'unique élément tel que $\mathbf{x} - [\mathbf{x}]_Y$ appartient à Y .

3. *Décomposition macroscopique et microscopique.* Les fonctions p_0, p_1 et θ_0 vérifient les équations suivantes :

$$-\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \left(\int_Y h^3(\cdot, \mathbf{y}) \left[\nabla_{\mathbf{x}} p_0(\cdot) + \nabla_{\mathbf{y}} p_1(\cdot, \mathbf{y}) \right] d\mathbf{y} \right) = -\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \left(\int_Y \theta_0(\cdot, \mathbf{y}) h(\cdot, \mathbf{y}) \mathbf{s}^\gamma d\mathbf{y} \right), \quad (1.3)$$

$$-\operatorname{div}_{\mathbf{y}} \left(h^3(\mathbf{x}, \cdot) \left[\nabla_{\mathbf{x}} p_0(\mathbf{x}) + \nabla_{\mathbf{y}} p_1(\mathbf{x}, \cdot) \right] \right) = -\operatorname{div}_{\mathbf{y}} \left(\theta_0(\mathbf{x}, \cdot) h(\mathbf{x}, \cdot) \mathbf{s}^\gamma \right). \quad (1.4)$$

4. *Définition des problèmes de cellule.* Les problèmes locaux, notés (\mathcal{N}_i^*) (resp. (\mathcal{N}_i^0)) consistent à déterminer, pour $i \in \{1, 2\}$, les fonctions $W_i^*, W_i^0 \in L^2(\Omega; H^1_{\text{per}}(Y)/\mathbb{R})$ telles que, pour p.p. $\mathbf{x} \in \Omega$,

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}_{\mathbf{y}} \left(h^3(\mathbf{x}, \cdot) \nabla_{\mathbf{y}} W_i^*(\mathbf{x}, \cdot) \right) &= -\partial_{y_i} h(\mathbf{x}, \cdot), \\ -\operatorname{div}_{\mathbf{y}} \left(h^3(\mathbf{x}, \cdot) \nabla_{\mathbf{y}} W_i^0(\mathbf{x}, \cdot) \right) &= -\partial_{y_i} (\theta_0(\mathbf{x}, \cdot) h(\mathbf{x}, \cdot)). \end{aligned}$$

Par le théorème de Lax-Milgram, le problème (\mathcal{N}_i^*) (resp. (\mathcal{N}_i^0)) est bien posé.

5. *Définition du problème homogénéisé.* À partir des problèmes locaux, nous obtenons la relation :

$$p_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = - \begin{pmatrix} W_1^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ W_2^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \end{pmatrix} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} p_0(\mathbf{x}) + \begin{pmatrix} W_1^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ W_2^0(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \end{pmatrix} \cdot \mathbf{s}^\gamma, \quad \text{dans } L^2(\Omega; H^1_{\text{per}}(Y)/\mathbb{R}).$$

Le problème homogénéisé s'obtient en substituant cette expression dans l'équation macroscopique (1.3) :

$$-\operatorname{div}(\mathcal{A}^0 \cdot \nabla p_0) = -\operatorname{div}(\mathcal{B}^0 \cdot \mathbf{s}^\gamma), \quad \text{avec } \mathcal{A}_{ij}^0 := h^3 \delta_{ij} - h^3 \frac{\partial W_j^*}{\partial y_i}, \quad \mathcal{B}_{ij}^0 := \theta_0 h \delta_{ij} - h^3 \frac{\partial W_j^0}{\partial y_i}.$$

6. *Calcul des coefficients homogénéisés.* L'Hypothèse 1.1 de séparation des variables microscopiques sur la géométrie des rugosités est essentielle au calcul direct des coefficients, en particulier des fonctions de saturation Θ_i définies par l'équation (1.2).
7. *Formulation du problème homogénéisé dans les coordonnées initiales.* Les étapes précédentes ont été réalisées dans les coordonnées associées aux directions des rugosités. On se ramène alors aux coordonnées initiales, d'où l'influence de l'angle de rotation γ dans l'expression des matrices homogénéisées. □

Théorème 1.2 *Le problème (P^*) admet une solution dite isotrope, i. e. une solution (p, Θ_1, Θ_2) telle que $\Theta_1 = \Theta_2$.*

Idée de la preuve. La démonstration de l'existence d'une solution isotrope repose sur l'homogénéisation d'un problème pénalisé, dans lequel on substitue à la fonction de saturation θ une approximation du graphe de Heaviside $H_\eta(p) := \min(0, \max(p/\eta, 1))$. Dès lors, on procède à l'homogénéisation du problème pénalisé avec coefficients oscillants, puis au passage à la limite sur η . L'intérêt de cette procédure réside dans le fait que l'isotropie de la pseudo-saturation $H_\eta(p_\varepsilon^\eta)$ est conservée lors de la phase d'homogénéisation. □

Remarque 1.2 *La question de l'unicité d'une solution isotrope pour le problème homogénéisé est ouverte : en effet, la méthode de dédoublement de variable exploite grandement la direction privilégiée de l'écoulement et ne permet pas, de manière immédiate, de conclure positivement. De même pour la question de l'unicité dans le cas général. En revanche, dans le cas $\gamma = k\pi/2$, $k \in \mathbb{N}$, le problème homogénéisé admet une structure mathématique dépourvue d'ambiguïté : il est similaire au problème initial. En particulier, le problème admet une unique solution.*

Notons que cette étude peut être généralisée afin de prendre en compte d'autres phénomènes non linéaires, tels que la déformation élastique des surfaces qui confinent l'écoulement (loi de contact de Hertz) et la piézoviscosité du fluide (loi de Barus), ce qui rend le problème non-local [4], i. e.

$$h := h_0(\mathbf{x}, \mathbf{x}/\varepsilon) + \int_\Omega k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) p(\mathbf{z}) d\mathbf{z}, \quad \mu := \mu_0 e^{\alpha p};$$

ici h_0 représente la contribution rigide de l'espacement entre les surfaces, k est la fonction « noyau de Hertz » qui dépend du type de contact considéré et qui vise à pondérer les effets de forte pression sur la déformation élastique des surfaces et $\alpha \geq 0$ est le paramètre de piézo-viscosité. L'intérêt supplémentaire de cette étude réside également dans le calcul direct de la solution *avec un faible nombre de rugosités* : dans le cas de l'utilisation d'algorithmes basés sur des méthodes multi-grille en mécanique, même avec un nombre limité de rugosités, le calcul sur la grille grossière de l'algorithme nécessite l'utilisation d'un modèle équivalent (*homogénéisé*, d'un point de vue mathématique) afin de résoudre efficacement le problème direct, même si le calcul de la solution homogénéisée n'est pas pertinent sur la grille fine.

1.1.3 Résultats numériques

Afin de déterminer numériquement la solution du modèle d'Elrod-Adams, il existe essentiellement deux méthodes dont les propriétés mathématiques ont été établies (d'autres procédures de calcul sont parfois utilisées en mécanique, mais leur adéquation avec le modèle continu n'est établie que par une validation numérique) : une première approche est basée sur une adaptation des travaux de Alt [Alt79] et Marini & Pietra [MP86], dans le cadre d'écoulements en milieu poreux. La méthode est basée sur une reformulation du problème qui consiste à définir une nouvelle inconnue $v := p + \theta$ (qui concentre toutes les informations en pression-saturation), puis à résoudre itérativement, par une procédure de point fixe, le système non-linéaire résultant de la discrétisation éléments finis. Une deuxième approche a été déterminée par Bayada, Chambat & Vázquez [BCV98]. Cette méthode est basée sur le couplage entre une méthode des caractéristiques et l'algorithme de Bermúdez-Moreno [BM81], par l'introduction d'une dépendance artificielle en temps : la solution stationnaire est alors déterminée après convergence en temps de l'algorithme. Chaque étape en temps consiste à résoudre un problème non-linéaire qui entre dans le cadre de résolution proposé par Bermúdez et Moreno : l'algorithme de pénalisation-dualité, basé sur les propriétés des opérateurs maximaux monotones et de leur régularisée d'Yosida, permet, par un processus itératif résolvant une suite de problèmes linéaires, de construire simultanément la solution en pression-saturation du problème discrétisé (au sens des éléments finis) à chaque pas de temps.

La simulation numérique présentée dans ce mémoire correspond à un jeu de données réaliste du point de vue des applications en lubrification hydrodynamique (voir [2] ou la FIG. 1.2 non publiée). Elle a été réalisée avec l'algorithme de couplage entre la méthode des caractéristiques et l'algorithme de Bermúdez-Moreno, en contribuant au développement d'un code de calculs développé en FORTRAN 90¹⁰.

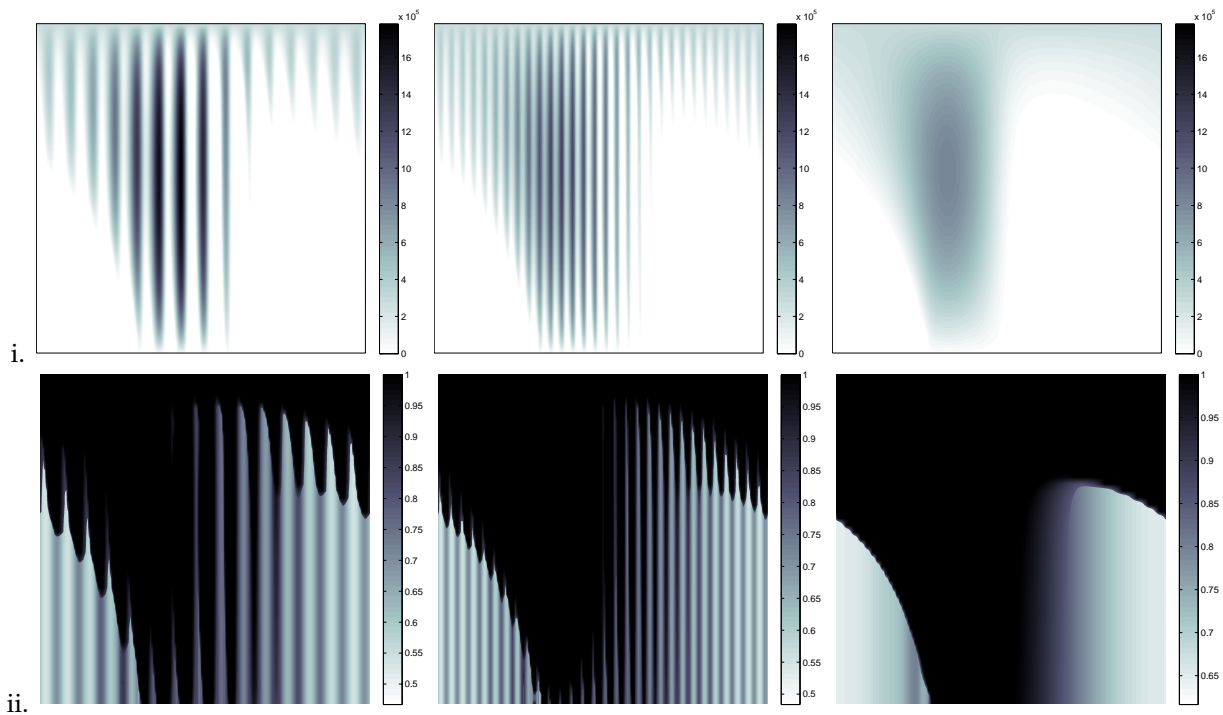


FIGURE 1.2 – Simulation numérique avec un jeu de données réaliste (coussinet à rainure circonférentielle) : distribution en i. pression ii. saturation pour ε^{-1} défauts de surfaces (rugosités transverses, $\varepsilon^{-1} = 15, 30, +\infty$) – coussinet de longueur $L = 19$ mm, de rayon moyen $R_m = 16.4850$ mm, de jeu radial $c = 0.0275$ mm, de vitesse de cisaillement $s = 17.25$ m.s⁻¹, de viscosité $\mu = 0.02$ Pa.s et une pression d'alimentation $p = 2.83 \cdot 10^5$ Pa.

10. Code SOLEA : <https://www.projet-plume.org/relier/solea>

1.2 FORMATION DE LA CAVITATION EN LUBRIFICATION HYDRODYNAMIQUE

La modélisation de la cavitation elle-même est un sujet de débat intense en lubrification. Le modèle d'Elrod-Adams est conservatif, ce qui lui confère une grande popularité, mais de nombreuses questions restent ouvertes : le modèle ne décrit pas la structure liquide-gaz dans la zone cavitée puisqu'il ne rend compte que d'une proportion locale moyenne de lubrifiant liquide sans hypothèse de localisation des deux phases. Par ailleurs, la question de la dynamique d'apparition des zones cavitées est importante car cela permet de localiser en temps et en espace les endommagements éventuels des mécanismes. Ainsi, dans ce travail, on s'intéresse à la version instationnaire du modèle d'Elrod-Adams :

$$\partial_t(\theta h) - \operatorname{div}(h^3 \nabla p) = -\operatorname{div}(\theta h \mathbf{s}), \quad p \geq 0, \quad H(p) \leq \theta \leq 1. \quad (1.5)$$

Le but principal de ce travail [7] a été de décrire rigoureusement comment le comportement de la pression et de la saturation dépend du comportement de la hauteur $(t, \mathbf{x}) \mapsto h(t, \mathbf{x})$ entre les surfaces. En particulier, à notre connaissance, nous avons exhibé pour la première fois des conditions simples pour lesquelles nous démontrons l'apparition *instantanée* d'une région cavitée (même si l'écoulement est initialement saturé uniformément). Des simulations numériques confirment les résultats et permettent de conjecturer des propriétés similaires pour des formulations plus sophistiquées.

1.2.1 Conditions suffisantes d'apparition ou de disparition de la cavitation

Bien que les techniques exposées dans cette synthèse puissent être appliquées dans un cadre plus général, pour fixer les idées nous nous restreignons au cas d'un domaine rectangulaire $\Omega =]0, L_1[\times]0, L_2[$ de frontières $\Gamma_0 = \{L_1\} \times]0, L_2[$ et $\Gamma_+ = \partial\Omega \setminus \Gamma_0$. En introduisant un temps $T > 0$, nous notons $Q_T = (0, T) \times \Omega$. Afin d'établir une formulation simple, nous supposons que l'écoulement est soumis à un cisaillement de vitesse uniforme $\mathbf{s} = (s, 0)$ de sorte que la formulation d'Elrod-Adams est associée à l'EDP suivante :

$$\partial_t(\theta h) - \operatorname{div}(h^3 \nabla p) = -s \partial_{x_1}(\theta h), \quad p \geq 0, \quad H(p) \leq \theta \leq 1$$

Nous nous donnons une condition initiale correspondant à une situation totalement saturée (soit $p(0, \cdot) = p_0 \geq 0$ d'une part et $\theta(0, \cdot) \equiv 1$ d'autre part) ainsi que des conditions aux limites. Pour simplifier la formulation, nous supposons qu'il existe un relèvement régulier, que l'on note $p^* : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^+$, tel que $p^*|_{\Gamma_0} = 0$ et on impose alors la condition au bord :

$$p|_{(0,T) \times \partial\Omega} = p^*|_{\partial\Omega} \leq M.$$

Dans ce contexte, *il existe un principe de comparaison*¹¹ qui peut être établi par une technique basée sur des opérateurs croissants au sens de la norme L^1 [D91] ou par une technique de dédoublement de variables [AC94, AO03] initiée par Kruřkov [Kru70]. Notons que ce résultat non trivial est établi dans le cas de conditions aux limites réalistes (alimentation axiale ou circonférentielle). L'article [7] complète les résultats de propagation obtenus par Carrillo, Díaz & Gilardi [CDG93] concernant le cas particulier (et d'intérêt limité en lubrification) où h est constant, en soulignant comment le signe de la combinaison $\partial_t h + s \partial_{x_1} h$ joue un rôle crucial dans la formation et la propagation d'une région cavitée (au sein de laquelle $p = 0$ et $\theta < 1$).

Théorème 1.3 *Supposons qu'il existe $\varepsilon > 0$ tel que*

$$D_t h := \partial_t h + s \partial_{x_1} h \geq \varepsilon, \text{ sur } \overline{Q_T}. \quad (1.6)$$

Supposons que M soit inférieure à une constante qui ne dépend que des données du problème (les dimensions du domaine L_1 et L_2 , la hauteur h , la constante ε définie ci-dessus) et soit $L \equiv L(h, M)$ une constante qui ne dépend que de h et M . Alors $p(t, \mathbf{x}) = 0$ pour $t \in]0, T]$ et p.p. $\mathbf{x} \in \Omega$ tel que $d(\mathbf{x}, \Gamma_+) \geq L$. De plus, $\theta(t, \mathbf{x}) < 1$ pour tout $t \in]0, s^{-1}(x_1 - L)]$ et p.p. $\mathbf{x} \in \Omega$ tel que $d(\mathbf{x}, \Gamma_+) > L$.

Remarque 1.3 *Le résultat ci-dessus illustre comment la condition portant sur la dérivée totale de h permet à la cavitation de se former instantanément ; cette propriété est supposément vérifiée sous des conditions plus générales, comme le montrent les résultats numériques. Cela signifie qu'il n'existe pas de temps de relaxation entre l'instant initial et l'apparition d'une frontière libre. Ce comportement est différent de celui observé pour des problèmes paraboliques dégénérés [ADSo2], notamment l'équation $\partial_t u - \Delta(|u|^{m-1}u) + |u|^{\gamma-1}u = 0$, avec $\gamma \in (0, 1)$, $m \geq 1$ et $m + \gamma < 2$.*

¹¹. Dans cette note, nous rappelons les notions de sur- et sous-solution, ainsi que l'énoncé du principe de comparaison :

Définition 1.2 (Notions de sous-solution et sur-solution) *On dit que (p, θ) est une sous-solution (resp. sur-solution) si elle vérifie :*

- i. $p \geq 0, H(p) \leq \theta \leq 1$;
- ii. $p|_{\partial\Omega} \leq p^*|_{\partial\Omega}$ (resp. $p|_{\partial\Omega} \geq p^*|_{\partial\Omega}$);
- iii. $(p, \theta)(0, \cdot) \leq (p_0; \theta_0)$ (resp. $(p, \theta)(0, \cdot) \geq (p_0; \theta_0)$);
- iv. $\partial_t(\theta h) + \operatorname{div}(\theta h \mathbf{s} - h^3 \nabla p) \leq 0$ (resp. $\partial_t(\theta h) + \operatorname{div}(\theta h \mathbf{s} - h^3 \nabla p) \geq 0$);

Lemme 1.1 (Principe de comparaison) *Soit $(\bar{p}, \bar{\theta})$ (resp. $(\underline{p}, \underline{\theta})$) une sur-solution (resp. sous-solution). Alors, $\underline{p} \leq \bar{p}$ et $\underline{\theta} \leq \bar{\theta}$.*

La preuve du Théorème 1.3 est basée sur la construction d'une sur-solution, en décomposant l'EDP en

$$[h D_t \theta + \omega \theta D_t h] + [-\operatorname{div}(h^3 \nabla p) + (1 - \omega) \theta D_t h] = 0,$$

avec $\omega \in (0, 1)$. En adaptant les résultats de Díaz [D85], on construit une sur-solution $(\bar{p}, 1)$, où \bar{p} est l'unique solution d'une famille de problèmes stationnaires bien choisis. Notons que la dérivée totale de h apparaît explicitement dans la décomposition de l'EDP et le contrôle du signe de $D_t h$ apparaît alors naturellement dans la construction d'une sur-solution. Dans un deuxième temps, on affine le résultat précédent en travaillant sur la fonction de saturation : on construit une fonction $\bar{\theta}$ telle que $(\bar{p}, \bar{\theta})$ est une sur-solution et telle que $\bar{\theta}(t, \mathbf{x}^0) < 1$ pour tout $t \in]0, s^{-1}(x_1^0 - L)]$. Le principe de comparaison permet alors de conclure la preuve.

La seconde propriété que nous avons démontrée concerne la préservation des zones saturées : si $D_t h \leq 0$ sur $\overline{Q_T}$, alors on assure la conservation des zones saturées. Mathématiquement, ce résultat est moins intéressant que le précédent car il résulte d'une propriété de l'équation de Reynolds instationnaire (sans cavitation) à laquelle on applique un principe du maximum fort. Néanmoins, ce résultat est un contre-point du précédent.

1.2.2 Résultats numériques

Illustrons les résultats théoriques qui viennent d'être décrits. Nous avons adapté le code de calculs mentionné précédemment, développé en FORTRAN 90¹², afin d'en établir une version instationnaire. La FIG. 1.3, publiée dans [7], correspond à un écoulement renormalisé au sein duquel la contrainte (1.6) est vérifiée : les isovalues de la pression (en particulier la zone $[p = 0]$) indique que la cavitation apparaît instantanément entre l'instant initial et un instant défini par un pas de temps sous l'effet de la contrainte (1.6), puis elle tend à disparaître en raison de l'influence des conditions aux limites en pression. Numériquement, un raffinement du pas de temps aboutit aux mêmes observations : il n'existe pas de temps de relaxation entre la naissance de la cavitation et l'initialisation. De manière similaire, la préservation de zones saturées peut être illustrée : en partant d'une configuration totalement saturée, lorsque la condition $D_t h \leq 0$ est vérifiée, on peut alors observer la persistance uniforme des zones totalement saturées, même dans la partie divergente (en espace) du dispositif qui est pourtant favorable à l'apparition de la cavitation en régime stationnaire.

Pour des écoulements quelconques, même si une condition de signe sur $D_t h$ n'est pas vérifiée uniformément dans tout le domaine, le comportement local de la solution dépend fortement de la contrainte locale de dérivée totale de h . Ceci est illustré par la FIG. 1.4 (non publiée) en considérant une hauteur stationnaire (en temps) au profil convergent-divergent (en espace), avec des conditions aux limites associées à un palier à alimentation axiale : dans ce cas, la cavitation apparaît instantanément dans la partie divergente ($D_t h = s \partial_{x_1} h > 0$) tandis que la zone saturée est préservée dans la partie convergente ($D_t h = s \partial_{x_1} h < 0$).

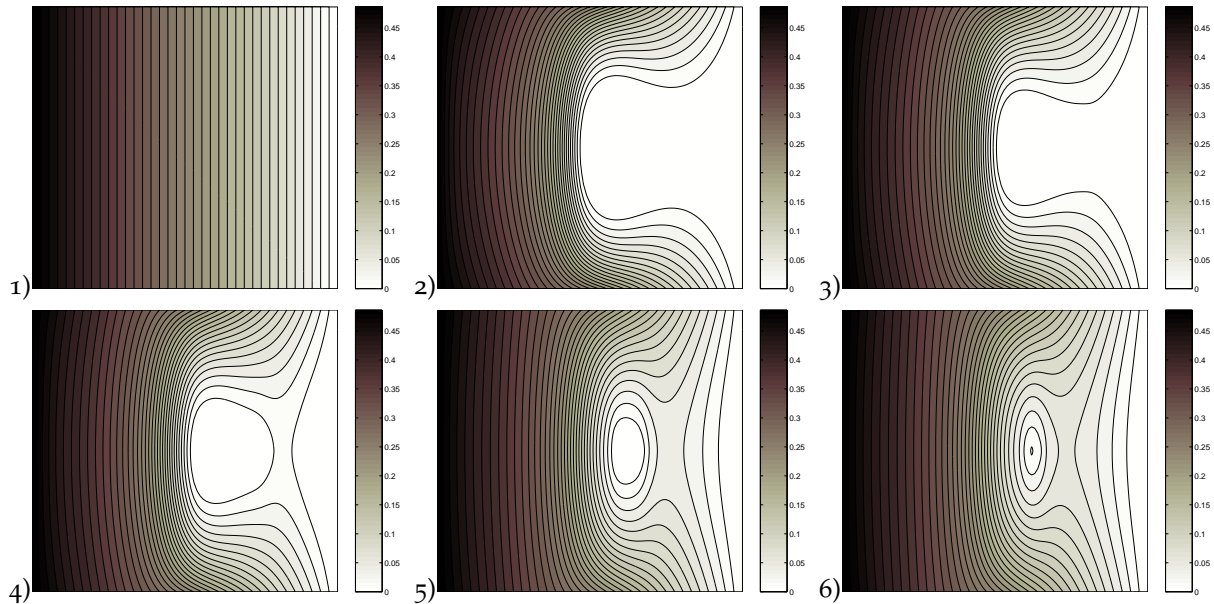


FIGURE 1.3 – Distribution en pression p à différents instants, dans un dispositif vérifiant la condition (1.6) favorable à la cavitation : 1) situation initiale complètement saturée ; 2) apparition instantanée d'une zone cavitée $[p = 0]$, suivie d'une disparition progressive de la zone cavitée sous l'influence de l'alimentation (contrôle par les conditions aux limites), de 3) à 6).

12. Code SOLEA : <https://www.projet-plume.org/relier/solea>

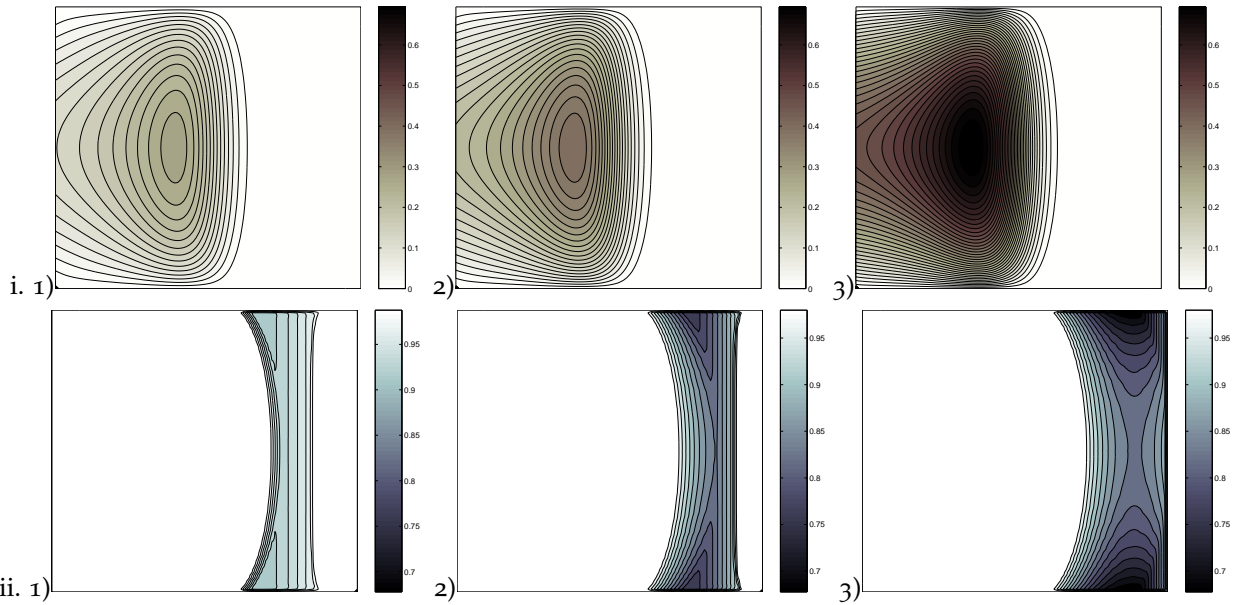


FIGURE 1.4 – Distribution en i. pression et ii. saturation dans le dispositif, à différents instants à partir d'une situation initiale totalement saturée (et non représentée) : développement simultané d'une zone saturée dans la partie convergente de l'écoulement (partie gauche du dispositif) et d'une zone cavitée sous l'effet du cisaillement dans la partie divergente de l'écoulement (partie droite du dispositif). En particulier, la zone cavitée qui est instantanément apparue, voir ii. 1), se renforce au cours du temps : la zone $[\theta < 1]$ s'est propagée et la proportion locale de lubrifiant liquide dans la zone cavitée (partie droite du dispositif) a diminué.

1.3 FLUIDES VISCO-ÉLASTIQUES EN LUBRIFICATION

Dans cette section, nous présentons des résultats concernant le comportement des fluides *visco-élastiques* dans des domaines minces. La prise en compte de ces modèles en lubrification est justifiée par l'emploi généralisé d'additifs dans les lubrifiants, afin de garantir leurs performances dans des gammes de fonctionnement ciblées ou élargies. Ces additifs entraînent une modification importante de la rhéologie des lubrifiants, qui deviennent non-newtoniens et, dans le cas de lubrifiants pâteux, visco-élastiques.

1.3.1 Fluides non-newtoniens et l'hypothèse de film mince

Le modèle d'Oldroyd permet de prendre en compte des effets d'élasticité dans l'écoulement d'un fluide. Dans les modèles proposés, il est d'usage de répartir la contrainte en une partie visqueuse pondérée par $1 - r$ où r est un paramètre réel dans $[0, 1]$, et une partie élastique (qui s'annule lorsque $r = 0$). Dans ce contexte, nous considérons des écoulements modélisés par les équations de Navier-Stokes et Oldroyd, pour lequel la vitesse \mathbf{U} et la pression p , exprimées en grandeurs et variables sans dimension, vérifient

$$\text{Re}^* \left(\partial_t \mathbf{U} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) - (1 - r) \Delta \mathbf{U} + \nabla p - \text{div} \sigma_{\text{el}} = \mathbf{0}, \quad (1.7)$$

$$\text{div} \mathbf{U} = 0, \quad (1.8)$$

où Re^* désigne le nombre de Reynolds, $r \in [0, 1]$ est un paramètre de relaxation et σ_{el} est le tenseur de contrainte élastique. Ces équations sont complétées par une équation différentielle de fermeture :

$$\text{We}^* \left(\partial_t \sigma_{\text{el}} + \mathbf{U} \cdot \nabla \sigma_{\text{el}} + g_a(\nabla \mathbf{U}, \sigma_{\text{el}}) \right) + f(\sigma_{\text{el}}) \sigma_{\text{el}} = 2r \mathbb{D}(\mathbf{U}). \quad (1.9)$$

où We^* est le nombre de Weissenberg lié à un temps de relaxation qui caractérise l'élasticité du fluide. Ici $\mathbb{D}(\mathbf{U})$ désigne la partie symétrique du gradient de vitesse. La fonction g_a , $-1 \leq a \leq 1$, est une application bilinéaire reliée à la dérivée totale, dans laquelle le paramètre a , sans dimension, interpole une famille de modèles se situant entre le modèle à dérivée sur-convectée ($a = 1$) et sous-convectée ($a = -1$), le cas $a = 0$ désignant le modèle corotationnel. Le cas $f \equiv 1$ définit le modèle d'Oldroyd tandis que le modèle de Phan-Thien & Tanner, physiquement plus réaliste, prend en compte une non-linéarité supplémentaire :

$$f(\sigma_{\text{el}}) = 1 + \text{We}^* \text{K}^* \text{tr}(\sigma_{\text{el}}), \quad (1.10)$$

où K^* est un nombre décrivant le comportement élongationnel du fluide. Ces modèles ont eu beaucoup de succès ces 50 dernières années puisque ce sont les modèles les plus simples de fluide visco-élastique. Malgré

tout, les non-linéarités issues du terme g_a font de ce modèle un véritable casse-tête mathématique. Le lecteur intéressé par ces aspects pourra consulter en particulier [Ren85, GS90a, LMoo, MTo4].

Dans les articles [8, 9], nous avons étudié l'asymptotique « film mince » pour des écoulements décrits par le modèle d'Oldroyd. Cette étude est motivée par la nécessité d'utiliser des modèles réduits en raison de la forte anisotropie de l'écoulement dans les régimes lubrifiés et des non-linéarités induites par le modèle : de cette double difficulté résultent la difficulté de simuler des écoulements à partir du modèle 3D dans la géométrie réelle et la nécessité de justifier des modèles réduits permettant des calculs à un coût raisonnable.

Dans le contexte des écoulements lubrifiés non-newtoniens, de nombreux travaux existent en mécanique :

- *Fluides quasi-newtoniens*. Dans la plupart des travaux, l'ingrédient essentiel repose sur le choix d'une loi de comportement *quasi-newtonienne* reliant la viscosité effective du fluide et le taux de cisaillement. Pour des écoulements 3D, les modèles de Carreau-Yasuda constituent une classe générale de lois :

$$\mu_{\text{eff.}}(\dot{\gamma}) = \mu_2 + \frac{\mu_1 - \mu_2}{(1 + (b\dot{\gamma})^c)^{\frac{1-n}{c}}}.$$

Les valeurs des paramètres sont souvent obtenues par ajustement de données expérimentales. Par ailleurs, certaines valeurs de ces paramètres permettent d'obtenir une équation de Reynolds 1D dans le contexte de la lubrification (modèle d'Ellis : $\mu_2 = 0$, $c = 1 - n$ dans [Baio6], modèle de Rabinowitsch à deux plateaux : $c = 2$, $n = -1$ dans [BKo5], modèle de Ferry à deux plateaux : $c = 1$, $n = 0$ dans [BKo5], modèle de Carreau approché à un plateau : $\mu_2 = 0$, $c = 2$ dans [BKo6], modèle de Rabinowitsch à un plateau dans [Lino1]), ou 2D avec le modèle de Rabinowitsch à un plateau [Baio2]. La justification d'une équation de Reynolds généralisée est particulièrement intéressante car elle permet de limiter les coûts de calcul. Ainsi, des équations de Reynolds 2D ont été proposées dans [EDT98] et [Hoo00].

- *Fluides visco-élastiques*. Pour des lois différentielles décrivant la visco-élasticité du fluide, Tichy [Tic96] et Bellout & Talay Akyildiz [BTA04], ont proposé des modèles en films minces à partir de lois de type Oldroyd ou Phan Thien & Tanner, mais uniquement pour l'approximation 2D-1D et dans le cas dégénéré $a = 1$ et $r = 1$ qui aboutit à des dimensionnements différents de celui que nous avons proposé.

Incidemment, nous verrons par la suite que le modèle asymptotique que nous avons obtenu à partir d'un écoulement d'Oldroyd correspond à un modèle de Rabinowitsch à deux plateaux, caractérisé par un comportement rhéofluidifiant (qui est l'effet prédominant conféré au lubrifiant par les additifs).

1.3.2 Approximation « film mince » pour les modèles d'Oldroyd et Phan-Thien & Tanner

Modèle d'Oldroyd, voir [8]

Considérons un écoulement visco-élastique dans un domaine Ω_δ que l'on suppose mince ($\delta \ll 1$, voir la FIG. 1.1 en introduction de ce chapitre), et notons $([\mathbf{u}_\delta, v_\delta], p_\delta, \sigma_\delta)$ les caractéristiques de l'écoulement associé à cette géométrie. En conservant un dimensionnement identique au cas newtonien en vitesse-pressure, soit

$$\mathbf{u}_\delta(\mathbf{x}, z) \sim \mathbf{u}\left(\mathbf{x}, \frac{z}{\delta}\right), \quad v_\delta(\mathbf{x}, z) \sim \delta v\left(\mathbf{x}, \frac{z}{\delta}\right), \quad p_\delta(\mathbf{x}, z) \sim \frac{p(\mathbf{x})}{\delta^2},$$

et pour un dimensionnement des nombres sans dimension préservant les effets non-newtoniens, soit $(\text{Re}^*, \text{We}^*, K^*) = (\text{Re}, \delta \text{We}, \delta K)$, nous avons déterminé l'ordre principal des équations (1.7)–(1.9), soit :

$$-\partial_z (\mu_{\text{eff.}} [\partial_z \mathbf{u}]) \partial_z \mathbf{u} + \nabla_x p = 0, \quad \text{div}_x \left(\int_0^{h(\mathbf{x})} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \hat{z}) d\hat{z} \right) = 0, \quad (1.11)$$

dans le domaine 3D renormalisé $\hat{\Omega} = \{(\mathbf{x}, \hat{z}) \in \mathbb{R}^3; \mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, 0 < \hat{z} < h(\mathbf{x})\}$, où h désigne la hauteur normalisée entre les surfaces ; la loi de viscosité (relative) *effective* non-linéaire vérifie :

$$\mu_{\text{eff.}}^{(1)}[\partial_z \mathbf{u}] := 1 - r + \frac{r}{1 + (1 - a^2) \text{We}^2 \|\partial_z \mathbf{u}\|^2}. \quad (1.12)$$

Par ailleurs, toutes les autres composantes du tenseur de contraintes et du champ de vitesses peuvent être déduites directement de l'équation (1.11). À titre de comparaison, le cas newtonien se réduit à $\mu_{\text{eff.}} \equiv 1$ ce qui, par intégration en \hat{z} et prise en compte des conditions aux limites, permet de retrouver l'équation de Reynolds. À cet égard, notons que, dans le cas visco-élastique et contrairement au cas newtonien, il n'est pas possible de récupérer une équation de Reynolds explicite dans laquelle la pression pourrait être déterminée indépendamment de la vitesse. Bien que le modèle asymptotique soit beaucoup plus simple que le modèle initial, la réduction de dimension n'est pas complète et le modèle asymptotique reste essentiellement 3D. Notons enfin que le modèle asymptotique révèle une loi de comportement *quasi-newtonienne* de type *Rabinowitsch à deux plateaux*, telle que cela a été présenté précédemment. En particulier, l'effet rhéofluidifiant que nous décrivons dans le régime asymptotique est issu d'un modèle visco-élastique. La justification rigoureuse de cette asymptotique a été démontrée *a posteriori* pour le modèle corotationnel, soit $a = 0$, dans [BCGo9].

Modèle de Phan-Thien & Tanner, voir [9]

Le dimensionnement utilisé pour obtenir l'équation (1.11) est lié à un nombre élongationnel K^* dont l'ordre de grandeur est $\mathcal{O}(\delta)$, où δ est l'épaisseur du film mince. Dans ce cas, ce paramètre élongationnel n'intervient pas dans le modèle asymptotique. En revanche, si $K = \mathcal{O}(1)$ (i. e. $K^* = K$) mais suffisamment petit, par une méthode de perturbation, il est possible d'obtenir un problème limite avec élongation :

$$\mu_{\text{eff}}^{(2)}[\partial_z \mathbf{u}] := \mu_{\text{eff}}^{(1)}[\partial_z \mathbf{u}] - 2Ka r^2 \text{We}^2 \|\partial_z \mathbf{u}\|^2 \frac{1 - \text{We}^2(1 - a^2) \|\partial_z \mathbf{u}\|^2}{(1 + \text{We}^2(1 - a^2) \|\partial_z \mathbf{u}\|^2)^3}. \quad (1.13)$$

Analyse mathématique

L'équation (1.11) doit être complétée par des conditions aux limites réalistes du point de vue des mécanismes utilisés en lubrification : conditions en pression ou en débit, comme cela a été discuté dans [8] (article qui inclut une étude mathématique extensive sur la prise en compte de ces conditions aux limites). En négligeant ces aspects, le caractère bien posé du problème est directement relié à la monotonie de l'opérateur

$$A^{(i)} := \mathbf{u} \mapsto -\partial_z \left(\mu_{\text{eff}}^{(i)}[\partial_z \mathbf{u}] \partial_z \mathbf{u} \right), \quad i \in \{1, 2\}.$$

En particulier, dans le cas du modèle d'Oldroyd,

- $A^{(1)}$ est strictement monotone pour $r < 8/9$, de sorte que le problème est bien posé ;
- $A^{(1)}$ n'est pas monotone $r > 8/9$, de sorte que le problème est mal posé ;
- $A^{(1)}$ est monotone pour $r = 8/9$ mais la monotonie n'est pas stricte, ce qui aboutit à des résultats de non-unicité, bien que l'existence de solutions soit garantie.

La valeur critique $r = 8/9$ n'est pas surprenante, puisqu'elle joue un rôle crucial dans le système initial sans hypothèse de film mince [GS90b]. Mais dans le cas de la correction de Phan-Thien & Tanner, on aboutit à une *relaxation de la condition portant sur le caractère bien posé du problème limite* : on peut en effet trouver des valeurs $r > 8/9$ pour lesquelles $A^{(2)}$ est strictement monotone, pour un choix adapté de paramètres (par exemple $r = 0.91$ avec $a = 0.8$, $\text{We} = 0.72$, $K = 0.82$). Soulignons également que $A^{(i)}$ dérive d'une fonctionnelle $\mathcal{J}^{(i)}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^{(1)}(\mathbf{u}) &:= \frac{1}{2}(1-r) \int_{\Omega} \left[\|\partial_z \mathbf{u}\|^2 \right] + \frac{r}{2(1-a^2)\text{We}^2} \int_{\Omega} \left[\ln \left(1 + (1-a^2)\text{We}^2 \|\partial_z \mathbf{u}\|^2 \right) \right], \\ \mathcal{J}^{(2)}(\mathbf{u}) &:= \mathcal{J}^{(1)}(\mathbf{u}) - \frac{Ka r^2}{(1-a^2)^2 \text{We}^2} \int_{\Omega} \left[\left(1 + (1-a^2)\text{We}^2 \|\partial_z \mathbf{u}\|^2 \right)^{-2} - 3 \left(1 + (1-a^2)\text{We}^2 \|\partial_z \mathbf{u}\|^2 \right)^{-1} \right. \\ &\quad \left. - \ln \left(1 + (1-a^2)\text{We}^2 \|\partial_z \mathbf{u}\|^2 \right) \right]. \end{aligned}$$

En conséquence, le caractère bien posé du problème limite dépend de la convexité de la fonctionnelle associée. Notons que l'existence d'une telle fonctionnelle n'a pas encore été établie pour les modèles d'Oldroyd et Phan-Thien & Tanner, sans hypothèse de film mince : cela reste un problème ouvert, réputé très difficile.

1.3.3 Méthode de résolution

La méthode de calcul de la solution est basée sur une procédure de type point-fixe, présentée dans [8], aboutissant à l'écriture d'un code de calculs développé en FORTRAN 90¹³. L'idée consiste à considérer que l'inconnue en vitesse-pression (\mathbf{u}, p) peut être calculée comme la limite, lorsque n tend vers l'infini, d'une suite (\mathbf{u}^n, p^n) solution de

$$-\partial_z \left(\mu_{\text{eff}}^{(i)}[\partial_z \mathbf{u}^{n-1}] \partial_z \mathbf{u}^n \right) + \nabla p^n = 0, \quad \text{div}_x \left(\int_0^h \mathbf{u}^n(\cdot, z) dz \right) = 0. \quad (1.14)$$

Autrement dit, à chaque étape, (\mathbf{u}^n, p^n) est la solution d'un problème de type newtonien. Afin de résoudre l'équation (1.14), une semi-discrétisation dans la direction x est introduite : en définissant une grille structurée, on note h_{ij} la valeur approchée de h au noeud (i, j) , $\mathbf{U}(z) = (\mathbf{u}_{ij}(z))$ la vitesse horizontale semi-discrétisée et $P = (p_{ij})$ la pression discrétisée. Soit A (resp. B) la discrétisation en x de l'opérateur ∇ (resp. div) et soit

$$\left(\widetilde{H\mathbf{U}} \right)_{ij} := \int_0^{h_{ij}} \mathbf{u}_{ij}(z) dz.$$

13. Code ELVIS : <https://www.projet-plume.org/relier/elvis>

La procédure de calcul est alors la suivante :

$$\begin{cases} \mathbf{U}^{n,0} = \mathbf{U}^n, & p^{n,0} = p^n, \\ \left| \begin{array}{l} -\partial_z \left(\mu_{\text{eff}} (\partial_z \mathbf{U}^n) \partial_z \mathbf{U}^{n,k+1} \right) + A \circ p^{n,k} = \mathbf{0}, \\ p^{n,k+1} - p^{n,k} + \delta B \circ \left(\widetilde{H\mathbf{U}}^{n,k+1} \right) = 0, \end{array} \right. \\ \mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^{n,\infty}, & p^{n+1} = p^{n,\infty}. \end{cases}$$

Le problème interne est linéaire : le calcul de la pression $p^{n,k+1}$ est explicite tandis que le calcul de la vitesse $\mathbf{U}^{n,k+1}$ est obtenu en résolvant un système différentiel en z ou, de manière équivalente, en résolvant un système linéaire après discrétisation dans la direction z .

Les résultats présentés sur la Fig. 1.5 ont été réalisés pour un écoulement mince de type Oldroyd, avec un paramètre de retard $r = 0.8$ et un nombre de Weissenberg $We = 1.3$ et dans le cas d'un profil de hauteur linéairement convergent, avec des conditions aux limites de Dirichlet homogènes. Dans le cas newtonien, la viscosité du fluide est uniformément égale à 1 ; dans le modèle d'Oldroyd, les gradients de vitesse entraînent une non-uniformité de la viscosité effective, qui varie entre $1 - r$ et 1.

La Fig. 1.6 représente la distribution en pression dans les cas newtonien $r = 0$ et non-newtonien ($r = 0.2, 0.5, 0.7$). La géométrie de l'écoulement est un profil convergent-divergent avec un flux imposé en entrée du mécanisme ; les dimensions du mécanisme que nous avons défini sont telles que le rapport entre les dimensions du dispositif (largeur-longueur) est égal à 5 : cela nous place dans les conditions de validité de l'approximation du palier infiniment long, couramment utilisée en mécanique. Dans le cas newtonien, loin des bords latéraux, l'approximation est valide et permet l'utilisation d'un modèle réduit 1D, au lieu du modèle 3D initial. Dans le cas non-newtonien, les résultats numériques suggèrent qu'une telle approximation n'est plus valide lorsque le paramètre de retard devient trop important : bien que des modèles 1D soient construits en mécanique par analogie avec le cadre d'étude newtonien, les propriétés élastiques du fluide invalident complètement l'approximation 1D.

1.4 INFLUENCE DES RUGOSITÉS DE FAIBLE AMPLITUDE ET DE HAUTE FRÉQUENCE SUR L'APPROXIMATION DE REYNOLDS

De nombreuses études ont été consacrées à l'effet des rugosités sur des écoulements newtoniens. Depuis les travaux de Navier [Nav27] en 1827 sur les lois de parois, de nombreux auteurs ont établi des résultats mathématiques dans cette direction (voir en particulier [JM01, ABLSo1, AS96, BM10] pour des rugosités périodiques, [GV09] pour des rugosités plus générales). Dans le contexte de la lubrification, les irrégularités de surface sont généralement le fruit de l'usinage des pièces et sont souvent non négligeables dans la définition des caractéristiques des mécanismes. Certains auteurs [BCC05] ont étudié l'importance de rugosités dont la taille est au moins d'ordre comparable à la hauteur du film mince ; d'autres auteurs [BCC⁺10] ont considéré une taille de rugosités supposée petite par rapport à l'épaisseur du film mince (ce sera le cas également du travail présenté dans cette section) mais ils démontrent un résultat de convergence dans un domaine renormalisé focalisé sur la rugosité. Récemment, dans [CDLLSG10], Casado-Díaz et ses co-auteurs ont proposé une étude générale (en termes d'ordres de magnitude pour la rugosité et l'épaisseur du film), mais leur approche est entièrement axée sur les lois de parois, ce qui n'est pas le point de vue adopté dans notre travail [10]. En effet, dans le cadre des hypothèses qui vont être précisées plus loin, nous ne nous sommes pas limités à une approche de type *loi de paroi* qui améliore l'approximation d'ordre 0, mais nous avons décrit à *tout ordre* les perturbations induites par les rugosités sur l'écoulement (et l'approximation de Reynolds en particulier).

Nous avons étudié dans [10] l'influence des rugosités sur l'approximation de Reynolds en considérant le cas d'écoulements dans des domaines minces (d'épaisseur ε) dont le bord inférieur est rugueux (avec des rugosités périodiques, de fréquence et d'amplitude d'ordre ε^2). Le domaine de l'écoulement est le suivant :

$$\Omega_\varepsilon(t) = \left\{ (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}, \quad -\varepsilon^2 h^- \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{s}t}{\varepsilon^2} \right) < z < \varepsilon h^+(\mathbf{x}) \right\},$$

où h^+ et h^- sont deux fonctions régulières de \mathbb{T}^d dans $]0, 1[$. Les équations de Stokes que nous considérons ici couplent le champ des vitesses $(\mathbf{u}_\varepsilon, v_\varepsilon)$ et le champ de pression p_ε :

$$\begin{cases} -\Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u}_\varepsilon - \Delta_z \mathbf{u}_\varepsilon + \nabla_{\mathbf{x}} p_\varepsilon = 0, & \text{dans } \Omega_\varepsilon(t), \\ -\Delta_{\mathbf{x}} v_\varepsilon - \Delta_z v_\varepsilon + \partial_z p_\varepsilon = 0, & \text{dans } \Omega_\varepsilon(t), \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathbf{u}_\varepsilon + \partial_z v_\varepsilon = 0, & \text{dans } \Omega_\varepsilon(t), \\ (\mathbf{u}_\varepsilon, v_\varepsilon) = (\mathbf{0}, 0), & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^+(t), \\ (\mathbf{u}_\varepsilon, v_\varepsilon) = (\mathbf{s}, 0), & \text{sur } \Gamma_\varepsilon^-(t). \end{cases}$$

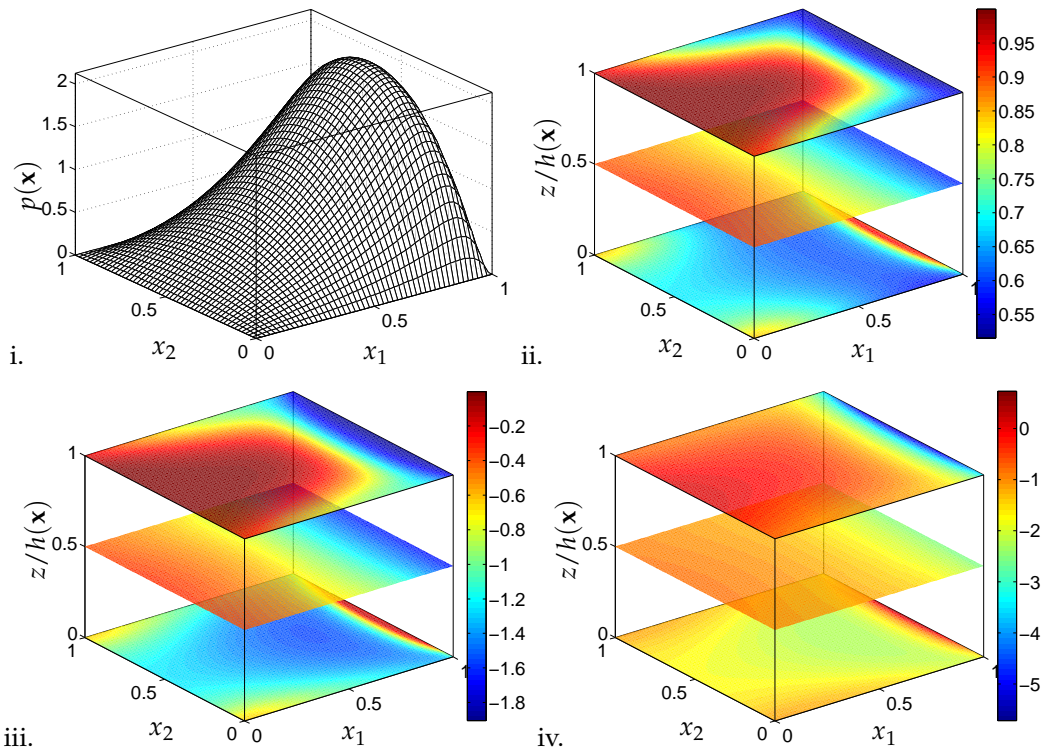


FIGURE 1.5 – Écoulement visco-élastique dans un profil linéairement convergent avec $r = 0.8$, $We = 1.3$ et $a = 0.8$: i) distribution en pression $\mathbf{x} \mapsto p(\mathbf{x})$, ii) en viscosité effective $(\mathbf{x}, z) \mapsto \mu_{\text{eff}}(\mathbf{x}, z)$, iii) contraintes élastiques $(\mathbf{x}, z) \mapsto (\sigma_{11} - \sigma_{33})(\mathbf{x}, z)$ et iv) $(\mathbf{x}, z) \mapsto \sigma_{13}(\mathbf{x}, z)$.

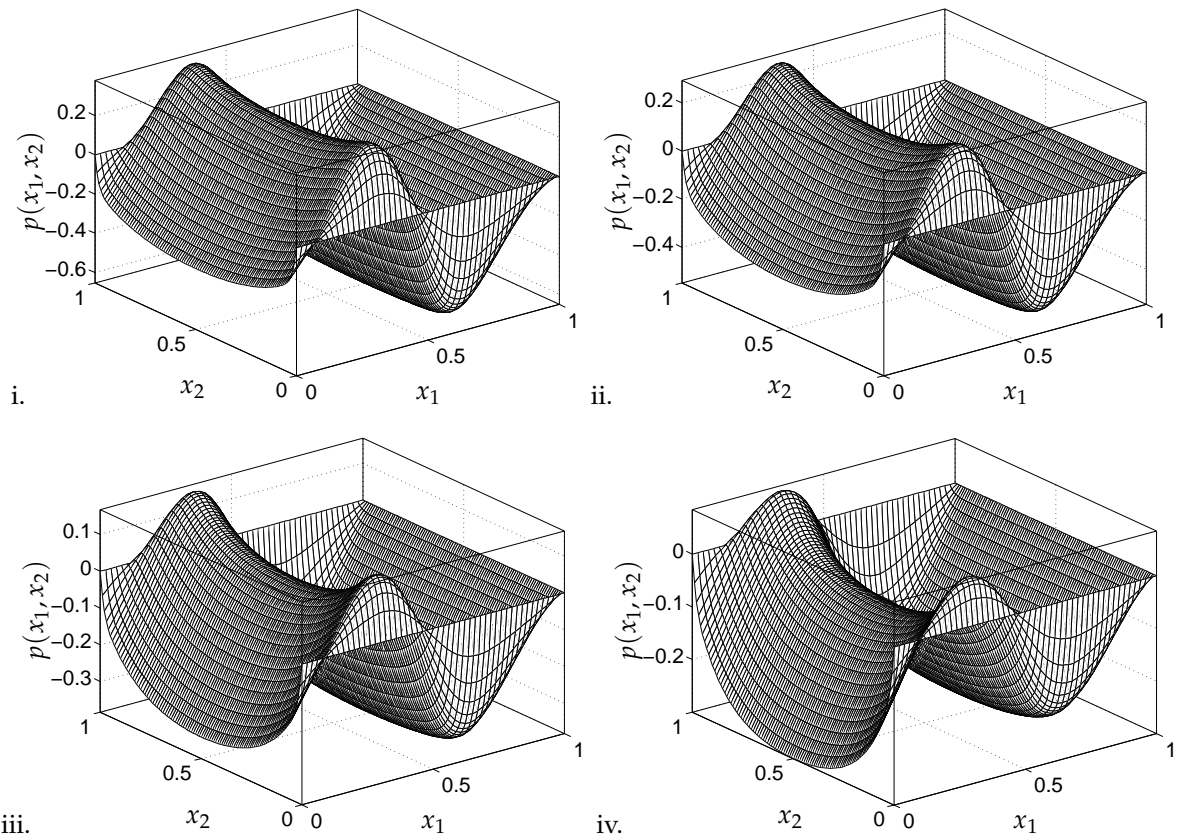


FIGURE 1.6 – Distribution en pression dans un écoulement mince visco-élastique de type Oldroyd pour un profil convergent-divergent : cas newtonien i. $r = 0.0$ et non newtonien ii. $r = 0.2$, iii. $r = 0.5$ et iv. $r = 0.7$.

Comme indiqué dans l'introduction de ce mémoire, il est bien connu (voir [BC86] ou plus récemment [Wil09]) que la solution de ce système de Stokes dans un domaine mince avec un fond plat $h^- = 0$ est approchée, à l'ordre principal, à l'aide de la solution de l'équation de Reynolds. La question naturelle est de savoir ce qu'il advient du développement asymptotique lorsqu'on prend en compte des effets de rugosités de ce type.

1.4.1 Développement formel

L'idée principale est de voir le cas « rugueux » comme une perturbation du cas « lisse ». Il est alors naturel de décomposer le domaine en $\Omega_\varepsilon = \Omega_\varepsilon^+ \cup \Sigma \cup \Omega_\varepsilon^-$ avec

$$\Omega_\varepsilon^+ = \left\{ (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}, 0 < z < \varepsilon h^+(\mathbf{x}) \right\}, \quad \Omega_\varepsilon^-(t) = \left\{ (\mathbf{x}, z) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}, -\varepsilon^2 h^- \left(\frac{\mathbf{x} - \mathbf{s}t}{\varepsilon^2} \right) < z < 0 \right\}.$$

Ainsi, si (\mathbf{u}_0, v_0, p_0) correspond au cas sans rugosités, défini dans Ω_ε^+ , la première idée est de prolonger cette solution dans Ω_ε^- . Pour vérifier la condition de continuité de la contrainte dans le fluide, le prolongement de la vitesse doit être de classe C^1 ; la solution en vitesse du problème de Reynolds étant polynomiale en la variable transverse, son extension vérifie également le système de Reynolds dans Ω_ε^- . En revanche, si \mathbf{u}_0 vaut \mathbf{s} sur le bord de Ω_ε^+ (i. e. en $z = 0$), alors la condition aux limites de non-glissement n'est plus vérifiée sur le bord inférieur de Ω_ε^- (i. e. en $z = -\varepsilon^2 h^-((\mathbf{x} - \mathbf{s}t)/\varepsilon^2)$). On doit donc rajouter à \mathbf{u}_0 un correcteur $\varepsilon \tilde{\mathbf{u}}_1$ qui a pour rôle de contrebalancer cette valeur au bord « défectueuse »¹⁴. On s'aperçoit que $\varepsilon \tilde{\mathbf{u}}_1$ (qui est pertinent près du bord) induit une perturbation d'ordre ε sur l'autre bord du domaine physique $z = \varepsilon h^+(\mathbf{x})$. Cette dernière est alors corrigée par $\varepsilon \mathbf{u}_1$ qui vérifie une équation de type Reynolds. On itère alors cette procédure, en diminuant successivement l'erreur. Ainsi, introduisons les coordonnées adaptées à cette description :

$$(\hat{\mathbf{x}}, \hat{z}) = \left(\mathbf{x}, \frac{z}{\varepsilon} \right), \quad (\mathbf{X}, Y) = \left(\frac{\mathbf{x}}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right), \quad T = \frac{t}{\varepsilon^2}.$$

ainsi que les domaines normalisés (film mince usuel d'une part, et couche limite d'autre part)

$$\hat{\omega} := \left\{ (\hat{\mathbf{x}}, \hat{z}) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}, 0 < \hat{z} < h^+(\hat{\mathbf{x}}) \right\}, \quad \omega_{bl}(T) = \left\{ (\mathbf{X}, Y) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}, -h^-(\mathbf{X} - \mathbf{s}T) < Y \right\}.$$

L'écoulement est principalement gouverné par un écoulement de Reynolds dans le domaine Ω_ε^+ : il est décrit en variables $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{z})$ dans le domaine $\hat{\omega}$ correspondant au domaine Ω_ε^+ après remise à l'échelle. En présence de rugosités, les variables (\mathbf{X}, Y) décrivent l'écoulement dans la couche limite ω_{bl} correspondant à Ω_ε^- . On cherche ensuite une solution $(\mathbf{u}_\varepsilon, v_\varepsilon, p_\varepsilon)$ du système de Stokes sous forme d'*ansatz* défini par

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_\varepsilon(\mathbf{x}, z, t) &= \sum_{j=0}^N \varepsilon^j \left[\mathbf{u}_j \left(\mathbf{x}, \frac{z}{\varepsilon} \right) + \varepsilon \tilde{\mathbf{u}}_{j+1} \left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{x} - \mathbf{s}t}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right) \right] + \mathbf{R}^{(N)}(\mathbf{x}, z, t), \\ v_\varepsilon(\mathbf{x}, z, t) &= \sum_{j=0}^N \varepsilon^{j+1} \left[v_j \left(\mathbf{x}, \frac{z}{\varepsilon} \right) + \tilde{v}_{j+1} \left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{x} - \mathbf{s}t}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right) \right] + S^{(N)}(\mathbf{x}, z, t), \\ p_\varepsilon(\mathbf{x}, z, t) &= \sum_{j=0}^N \varepsilon^{j-2} \left[p_j \left(\mathbf{x}, \frac{z}{\varepsilon} \right) + \varepsilon \tilde{p}_{j+1} \left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{x} - \mathbf{s}t}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right) \right] + Q^{(N)}(\mathbf{x}, z, t). \end{aligned}$$

En injectant ce développement dans les équations de Stokes et en regroupant les termes par puissance de ε , on en déduit des systèmes vérifiés par les fonctions élémentaires qui ont été introduites : la construction du développement est basée sur l'*identification des problèmes* dont les termes (\mathbf{u}_j, v_j, p_j) et $(\tilde{\mathbf{u}}_j, \tilde{v}_j, \tilde{p}_j)$ sont solutions. La difficulté, en définissant ces problèmes par l'ajustement de constantes choisies *a posteriori*, consiste à montrer que chaque terme du développement existe et que le comportement de la solution vérifie des propriétés de décroissance à l'infini permettant de définir la correction à l'ordre suivant. Sans entrer dans les détails, les termes (\mathbf{u}_j, v_j, p_j) sont les solutions de problèmes de Reynolds, notés $\mathbf{R}[j]$, définis sur le domaine $\hat{\omega}$ tandis que les termes $(\tilde{\mathbf{u}}_j, \tilde{v}_j, \tilde{p}_j)$ sont les solutions de problèmes de Stokes, $S_{bl}[j]$, définis sur le domaine ω_{bl} .

Remarque 1.4 *Un point essentiel dans la construction de l'ansatz est le comportement des correcteurs $(\tilde{\mathbf{u}}_j, \tilde{v}_j, \tilde{p}_j)$ lorsque Y tend vers $+\infty$. En effet, c'est cette limite qui doit être corrigée par la condition aux limites imposée au correcteur suivant, soit (\mathbf{u}_j, v_j, p_j) . Puisque les correcteurs $(\tilde{\mathbf{u}}_j, \tilde{v}_j, \tilde{p}_j)$ vérifient un problème de Stokes linéaire, dans un domaine ω_{bl} périodique en \mathbf{X} , on caractérise le comportement des solutions par un développement en série de Fourier par rapport à la variable \mathbf{X} . En particulier, on identifie des constantes α_j et β_j telles que $\|\tilde{\mathbf{u}}_j(\cdot, \mathbf{X}, Y) - \alpha_j\| \lesssim e^{-Y}$ et $|\tilde{v}_j(\cdot, \mathbf{X}, Y) - \beta_j| \lesssim e^{-Y}$. Ce sont ces valeurs α_j et β_j qui sont corrigées par la solution de Reynolds à l'ordre suivant.*

¹⁴. Certains auteurs choisissent de prolonger \mathbf{u}_0 par la constante \mathbf{s} dans le domaine rugueux Ω_ε^- . Dans ce cas le correcteur $\varepsilon \tilde{\mathbf{u}}_1$ a pour rôle de contrebalancer le saut de contrainte induit sur Σ .

1.4.2 Justification rigoureuse du développement asymptotique

Le *résidu* $(\mathbf{R}^{(N)}, S^{(N)}, Q^{(N)})$ défini dans l'*ansatz* vérifie un système de Stokes défini dans le domaine $\Omega_\varepsilon(t)$ et avec des termes source qui s'expriment en fonction de termes calculés au préalable et identifiés comme des solutions des problèmes de Stokes ou Reynolds. De même, les conditions aux limites sont définies à partir des solutions élémentaires que nous avons construites.

La justification rigoureuse du développement consiste à établir des estimations sur le *résidu*, afin de contrôler la qualité de l'approximation lorsque ε est faible. Pour cela, on se ramène à l'analyse d'un système de Stokes avec conditions aux limites homogènes et divergence nulle, à l'aide de deux relèvements successifs :

- relèvement des conditions aux limites ;
- relèvement de l'équation de divergence, à partir de la formule de Bogovskii ; en particulier, la dépendance par rapport à ε de la constante de Bogovskii a été adaptée au domaine.

À l'issue de cette procédure, il est possible de conclure avec des estimations classiques pour des solutions du problème de Stokes usuel. Notons que le contrôle du résidu est possible car les termes source ont de bonnes propriétés de décroissance à l'infini et on obtient alors les estimations suivantes :

$$\|(\mathbf{R}^{(N)}, S^{(N)})\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} \lesssim \varepsilon^{N+1/2}, \quad \|Q^{(N)}\|_{L^2(\Omega_\varepsilon)} \lesssim \varepsilon^{N-1/2}.$$

Ainsi, quitte à choisir N suffisamment grand, la solution $(\mathbf{u}_\varepsilon, v_\varepsilon, p_\varepsilon)$ du problème de Stokes peut être approchée par les sommes partielles issues de l'*ansatz*, à tout ordre.

1.4.3 Discussion sur les interactions multi-échelles

Terminons cette étude par deux cas particuliers illustrant l'importance des interactions multi-échelles dans l'analyse des effets de rugosités en lubrification.

Influence des rugosités sur l'approximation de Reynolds classique. En l'absence de rugosités, le développement asymptotique est le suivant : seuls les termes des problèmes de Reynolds $R[2j]$ interviennent. Autrement dit, il n'est évidemment pas nécessaire de définir des correcteurs de Stokes dans les couches limites mais, de plus, la moitié des correcteurs de Reynolds précédemment définis (les solutions des problèmes $R[2j+1]$) ne sont plus nécessaires à la description de l'écoulement. Évidemment, en présence de rugosités, négliger volontairement les correcteurs issus des problèmes $S_{bl}[j]$ et $R[2j+1]$ dégrade les estimations dès les premières corrections.

Influence de la courbure de la surface supérieure. Par contraste, supposons que h^+ soit constante. Autrement dit, on étudie l'influence des rugosités dans un canal de section constante et de faible épaisseur. Pour simplifier, on se limite au cas $d = 1$ et on note s la vitesse de cisaillement de la paroi inférieure. Alors,

- i. La solution (u_0, v_0, p_0) du problème de Reynolds ($R[0]$) est un écoulement de Couette :

$$u_0(\hat{x}, \hat{z}) = s(h^+ - \hat{z}), \quad v_0(\hat{x}, \hat{z}) = 0, \quad p_0(\hat{x}) = 0 ;$$

- ii. soit $(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1, \tilde{p}_1)$ le correcteur de Stokes dans la couche limite, vérifiant $-\Delta_{X,Y}(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) + \nabla_{X,Y}\tilde{p}_1 = 0$ et $\text{div}_{X,Y}(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = 0$ dans ω_{bl} , avec la condition au bord $(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1)|_{\gamma_{bl}} = (-sh^-, 0)$. Notons que la variable x ne joue plus le rôle de paramètre dans ce problème et on montre que tous les correcteurs aux étapes suivantes se définissent simplement par une relation de récurrence ;

- iii. la solution exacte peut être approchée, à une erreur en $\mathcal{O}(e^{-h^+/\varepsilon})$ près, par :

$$\begin{aligned} u_\infty(x, z, t) &= s + \frac{s}{s - \varepsilon \alpha_1} \left(u_0 \left(x, \frac{z}{\varepsilon} \right) - s \right) + \frac{\varepsilon \alpha_1}{s - \varepsilon \alpha_1} \tilde{u}_1 \left(\frac{x - st}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right), \\ v_\infty(x, z, t) &= \frac{\varepsilon \alpha_1}{s - \varepsilon \alpha_1} \tilde{v}_1 \left(\frac{x - st}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right), \\ p_\infty(x, z, t) &= \frac{1}{\varepsilon} \frac{\alpha_1}{s - \varepsilon \alpha_1} \tilde{p}_1 \left(\frac{x - st}{\varepsilon^2}, \frac{z}{\varepsilon^2} \right), \end{aligned}$$

où α_1 caractérise la forme de la rugosité : $\alpha_1 = \lim_{Y \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{T}} \tilde{u}_1(X, Y) dX$.

Ainsi, la construction d'une telle approximation indique que tous les effets de couplage entre les trois échelles de l'écoulement ne sont plus nécessaires à la description d'une excellente approximation de la solution. Néanmoins, cette hypothèse de simplification mathématique n'a qu'un intérêt très limité en tribologie (un profil convergent-divergent est en général nécessaire pour induire une portance), mettant en lumière l'importance des interactions multi-échelles (à l'ordre 1, ε et ε^2) induites par les rugosités sur l'écoulement mince.

CHAPITRE 2

LOIS DE CONSERVATION SCALAIRES SUR UN DOMAINE BORNÉ

2.1	ÉCOULEMENT BIFLUIDE MODÉLISÉ PAR UNE ÉQUATION DE BUCKLEY-LEVERETT NON-AUTONOME \mathbb{Q}	24
2.1.1	Modèle bifluide en lubrification	24
2.1.2	Équations de Buckley-Leverett et de Reynolds	24
2.1.3	Modèle bifluide et modèle d'Elrod-Adams	25
2.2	PROBLÈME DE CAUCHY-DIRICHLET POUR DES ÉQUATIONS QUASILINÉAIRES DU PREMIER ORDRE \mathbb{Q}	26
2.2.1	Formulation entropique	26
2.2.2	Existence d'une solution entropique et bornes L^∞	27
2.2.3	Unicité de la solution entropique	27
2.3	COMPORTEMENT EN TEMPS LONG DE LA SOLUTION D'UNE LOI DE CONSERVATION SCALAIRE	28
2.3.1	Propriétés des solutions entropiques	28
2.3.2	Comportement en temps long de la solution entropique	29
2.3.3	Résultats numériques	31
2.4	APPROXIMATION NUMÉRIQUE DE LA SOLUTION D'UNE LOI DE CONSERVATION SCALAIRE AVEC FLUX DISCONTINU	33
2.4.1	Formulations du problème	33
2.4.2	Schéma numérique	34
2.4.3	Convergence du schéma aux volumes finis	35
2.4.4	Résultats numériques	36

DANS ce chapitre, nous présentons quelques résultats d'analyse pour des lois de conservation scalaires sur un domaine borné. Le développement de cette thématique est directement issu de l'étude de la cavitation en lubrification hydrodynamique : le caractère hyperbolique du modèle d'Elrod-Adams et l'étude d'un modèle bifluide en lubrification ont nécessité des développements théoriques et numériques « naturels » dans cette direction. Pour cette raison, nous présentons tout d'abord le modèle bifluide qui a justifié ces développements (et qui constitue un pont thématique entre le Chapitre 1 et le Chapitre 2); puis nous décrivons les travaux relatifs à l'étude des lois de conservation scalaires sur un domaine borné : caractère bien posé dans un cadre L^∞ , comportement en temps long, schéma numérique pour une loi de conservation avec flux discontinu en la variable d'état.

L'étude des lois de conservation scalaires a été profondément marquée par le travail pionnier de Kružkov [Kru70], dans lequel il définit les concepts essentiels à l'analyse mathématique du problème défini sur l'espace entier : l'entropie et le flux d'entropie associé. Sur un *domaine borné*, la compréhension de la condition aux limites de Dirichlet n'est pas aisée et doit être interprétée : cette condition ne peut être, en général, vérifiée partout, même si la solution est régulière. En supposant que la donnée initiale est BV et que la donnée au bord est de classe C^2 , Bardos, Le Roux & Nédélec [BIRN79] ont établi le caractère bien posé du problème en fournissant par ailleurs une interprétation de la condition aux limites; ce cadre d'étude implique une régularité de la solution qui admet une trace au bord. Pour des données L^∞ , la difficulté repose sur l'impossibilité de définir une notion de trace sur le bord. Néanmoins, la notion de solution entropique a été étendue (en l'absence de terme source et pour un flux autonome) par Otto [Ott96] avec le concept d'entropie-flux de frontière.

Parallèlement à ces développements théoriques, l'approximation numérique des lois de conservation sur un domaine borné a rencontré un succès croissant, dès lors que le concept de solution à valeur mesure, introduit par Szepessy [Sze91] en suivant le travail de DiPerna [DiP85], a permis à plusieurs auteurs d'étudier la convergence de schémas numériques associés au problème continu : convergence d'une méthode éléments finis avec diffusion selon les lignes de courant par Szepessy [Sze91], convergence de la méthode des volumes finis monotone par Cockburn, Coquel & LeFloch [CCL95], convergence des E-schémas par [BCV95]. Pour des données L^∞ , la convergence de la méthode des volumes finis monotone a été démontrée par Vovelle [Vovo2].

Si les travaux qui sont synthétisés dans ce chapitre sont motivés par les problématiques issues de la lubrification, ils s'inscrivent dans le prolongement des travaux mentionnés ci-dessus.

2.1 ÉCOULEMENT BIFLUIDE MODÉLISÉ PAR UNE ÉQUATION DE BUCKLEY-LEVERETT NON-AUTONOME \square

Dans l'article [11], nous tentons d'établir un lien entre le modèle heuristique d'Elrod-Adams et une description bifluide de la cavitation. À partir d'un écoulement de Stokes bifluide [NPD97], nous reprenons l'asymptotique « film mince » étudiée par Paoli [Pa003]. Ainsi, un écoulement bifluide (i. e. dans lequel interviennent deux fluides de viscosité μ_ℓ et μ_g et de même densité) en film mince peut être décrit par une équation de Reynolds décrivant le comportement de la pression couplée à une équation de Buckley-Leverett décrivant le comportement de la saturation du fluide de référence. L'obtention de ces équations n'est pas rigoureuse car elle nécessite une hypothèse de graphe sur la frontière libre séparant les deux fluides. Afin de démontrer le caractère bien posé du système limite, il est donc nécessaire d'effectuer une analyse mathématique rigoureuse de ces équations, ce qui a été omis dans [Pa003] sauf lorsque le cisaillement est nul (ce qui n'est pas réaliste pour les régimes de lubrification). Nous utilisons ce modèle afin de simuler un écoulement bifluide dont les rapports de viscosité sont très faibles et comparons les résultats avec ceux issus du modèle d'Elrod-Adams modélisant les phénomènes de cavitation.

2.1.1 Modèle bifluide en lubrification

Considérons un domaine mince, typique de la lubrification, dans lequel évolue l'écoulement. En variables sans dimension, ce domaine peut être décrit sous la forme :

$$\Omega_\delta = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq \delta h(x)\},$$

où h désigne la hauteur normalisée qui sépare les deux surfaces en regard. On considère également des conditions aux limites appropriées aux régimes de lubrification (vitesse de cisaillement s sur la partie inférieure du domaine notamment). De manière analogue à cette démarche permettant de justifier l'utilisation de l'équation de Reynolds à partir du système de Stokes, Paoli [Pa003] a étudié le comportement de l'écoulement en présence de deux fluides de viscosité différente μ_ℓ et μ_g . Les équations de Stokes pour un bifluide [NPD97] régissent l'écoulement de deux fluides immiscibles de viscosité μ_ℓ, μ_g , décrit par une distribution en vitesse, pression et viscosité ($u_\delta, p_\delta, \mu_\delta \in \{\mu_\ell, \mu_g\}$). À partir d'estimations *a priori* et d'un changement d'échelle, le passage à la limite sur δ permet de capturer le régime asymptotique correspondant à l'approximation du film mince [Pa003]. La réduction du problème est la suivante : une équation de Reynolds, qui régit le comportement de la pression, est couplée à une équation de Buckley-Leverett qui régit le comportement de la saturation du fluide de référence.

2.1.2 Équations de Buckley-Leverett et de Reynolds

Nous présentons les équations obtenues par Paoli [Pa003] dans le cadre de l'approximation du film mince à partir du modèle bifluide de Nouri, Poupaud & Demay [NPD97]. Soit $Q_T =]0, T[\times (0, 1)$ et $\Sigma_T =]0, T[\times \partial(0, 1)$. La pression $(t, x) \mapsto p(t, x)$ dans le bifluide vérifie une équation de Reynolds :

$$-\partial_x \left(A(\theta(t, x)) \frac{h^3(x)}{12\mu_\ell} \partial_x p(t, x) \right) = -\partial_x \left(B(\theta(t, x)) \frac{s}{2} h(x) \right), \quad (t, x) \in Q_T. \quad (2.1)$$

Cette équation de Reynolds dépend de la distribution en saturation $(t, x) \mapsto \theta(t, x)$ du fluide de référence. Les fonctions $\theta \mapsto A(\theta)$ et $\theta \mapsto B(\theta)$ dépendent du rapport des viscosités μ_g/μ_ℓ . De plus, $A(1) = B(1) = 1$ de sorte que, pour un monofluide, l'équation de Reynolds classique est vérifiée. La saturation de la phase liquide $(t, x) \mapsto \theta(t, x)$ vérifie une équation de Buckley-Leverett :

$$\partial_t (h(x)\theta(t, x)) + \partial_x (Q_{in}(t)f(\theta(t, x)) + sh(x)g(\theta(t, x))) = 0, \quad (t, x) \in Q_T, \quad (2.2)$$

où Q_{in} est le débit imposé. Les fonctions f et g dépendent évidemment du rapport des viscosités μ_g/μ_ℓ . Dans tous les cas, le flux partiel f représente une contribution classique au flux de Buckley-Leverett couramment utilisé dans le cadre de l'étude des milieux poreux : en effet, $f(0) = 0$, $f(1) = 1$ et f a un profil en forme de S . En revanche, le flux partiel g est une contribution non classique, induite par le cisaillement et le profil variable en espace de la hauteur h . Néanmoins, cette contribution possède également un profil particulier, puisque $g(0) = g(1) = 0$. Cette équation est prise en compte avec les conditions initiales et aux limites suivantes :

$$\theta(0, \cdot) = \theta_0, \quad \text{sur } \Omega \quad (2.3)$$

$$\theta = \bar{\theta}, \quad \text{sur } \Sigma_T \quad (2.4)$$

où les conditions aux limites sont définies au sens de par Bardos, Le Roux & Nédélec [BIRN79]. Notons que θ_0 et $\bar{\theta}$ sont des fonctions à valeurs dans $[0, 1]$. On montre alors le résultat suivant :

Théorème 2.1 Pour une condition initiale dans $L^\infty((0, 1); [0, 1])$ et une condition aux limites dans $[0, 1]$, le problème (2.2)–(2.4) admet une unique solution faible entropique. C'est une fonction à valeurs dans $[0, 1]$.

Idée de la preuve. Sous des hypothèses de régularité des données, l'existence et l'unicité découlent des résultats de Bardos, Le Roux et Nédélec [BIRN79]; néanmoins, cela ne permet pas d'établir que la solution est une fonction à valeurs dans $[0, 1]$. Remarquons par ailleurs que l'équation (2.2) est une loi qui est conservative par rapport à θh , ce qui permet *a priori* d'espérer établir des bornes sur θh et non θ . Nous traitons alors le cas de données L^∞ et nous montrons que θ est à valeurs dans $[0, 1]$: par un changement de variables adapté, on montre que l'équation (2.2) se réduit en une loi de conservation scalaire par rapport à une fonction de saturation uniquement et dont le flux possède les mêmes propriétés que le flux initial. L'existence et l'unicité d'une solution faible entropique pour ce problème se déduit du *travail synthétisé à la section 2.2*. \square

2.1.3 Modèle bifluide et modèle d'Elrod-Adams

Un schéma aux volumes finis monotone tel que défini dans [Vovo2] permet de prendre en compte de façon appropriée les conditions aux limites au sens de Bardos, Le Roux & Nédélec. Néanmoins, la performance du schéma dépend évidemment des données du problème. Or, pour des rapports de viscosités $\varepsilon = \mu_g/\mu_\ell$ faibles (rappelons que $\varepsilon \sim 10^{-3}$ pour un mélange liquide-gaz), le flux de l'équation de Buckley-Leverett tend à dégénérer. En raison de la contrainte liée à la condition de Courant-Friedrichs-Lewy, l'ordre de grandeur des paramètres de discrétisation autorisant une résolution effective du problème par un schéma explicite induit une limitation sévère sur le pas de temps et d'espace. Ce problème est d'autant plus difficile que nous déterminons la solution stationnaire du problème, nécessitant un calcul en temps long (*ce qui a inspiré le travail présenté en section 2.3*). La simulation numérique par un schéma explicite pour de très faibles valeurs de ε n'est donc pas raisonnable en termes de coûts de calculs. D'un point de vue théorique également, l'obtention d'un modèle asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$ constitue un enjeu de compréhension car le flux converge vers un graphe multivalué (*ce qui a inspiré le travail développé dans la section 2.4*) :

$$f(u) := f_\varepsilon(u) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} H(u - 1), \quad g(u) := g_\varepsilon(u) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u H(1 - u),$$

où, comme précédemment, H désigne le graphe de Heaviside.

Numériquement, nous avons comparé le modèle d'Elrod-Adams avec le modèle bifluide. Rappelons que le modèle d'Elrod-Adams introduit l'idée que le film lubrifié n'est que partiel dans les zones cavités. Mais il ne donne aucune indication sur la répartition des phases à l'intérieur de cette zone. On peut ainsi supposer que le lubrifiant liquide adhère à la paroi mobile ou, inversement, qu'il adhère à la paroi fixe, ou encore que deux couches de lubrifiant liquide entourent une couche gazeuse (multi-couches) ou une structure en bulles. Le modèle bifluide que nous avons développé n'est pertinent que dans les deux premiers cas, qui respectent l'hypothèse de graphe de la frontière libre. Nous comparons la solution du modèle d'Elrod-Adams à celle du modèle bifluide (pour $\mu_g/\mu_\ell = 10^{-3}$). Lorsque l'on suppose que le lubrifiant adhère à la paroi mobile, nous obtenons une solution dont les propriétés sont très proches de celle d'Elrod-Adams *pour certains régimes d'alimentation*, voir FIG. 2.1, en particulier pour la saturation (les écarts importants entre les pressions étant directement issues des faibles écarts entre les saturations).

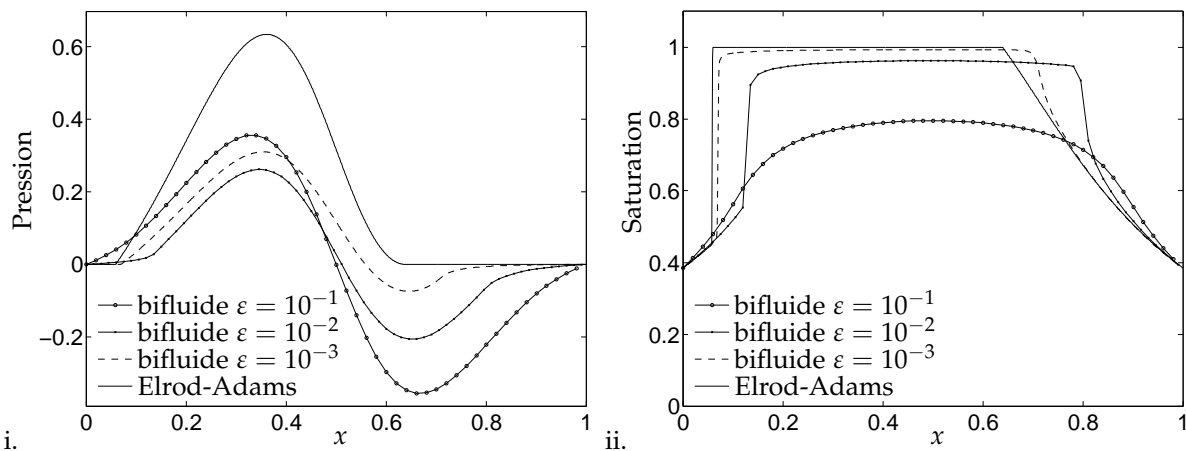


FIGURE 2.1 – Comparaison entre les modèles d'Elrod-Adams et bifluide pour différentes valeurs de ε : i. pression et ii. saturation.

2.2 PROBLÈME DE CAUCHY-DIRICHLET POUR DES ÉQUATIONS QUASILINÉAIRES DU PREMIER ORDRE \square

L'étude des équations limites pour le modèle bifluide nous a conduit à nous interroger sur les équations quasilinearaires du premier ordre sur un domaine borné avec des données L^∞ . Sommairement, cette étude s'inscrit dans la continuité de nombreux travaux, qu'elle complète ou généralise :

- (1) Posé dans l'espace entier, ce problème a été étudié par Kružkov [Kru70] qui a introduit les concepts d'entropie-flux d'entropie (de Kružkov) et de solution entropique, afin de fournir un cadre d'existence et d'unicité de solution.
- (2) Pour un domaine borné, Bardos, Le Roux & Nédélec [BIRN79] ont également établi un résultat d'existence et d'unicité basé sur l'entropie-flux d'entropie de Kružkov, ainsi qu'une interprétation de la condition aux limites. En effet, des conditions de Dirichlet ne peuvent être imposées en tout point de la frontière et on parlera alors de condition au sens de Bardos, Le Roux & Nédélec. Néanmoins, cette étude nécessite une régularité BV des données, afin de garantir la notion de trace sur le bord.
- (3) Dans un domaine borné et avec des données L^∞ , les difficultés ont été surmontées par Otto [Ott96] qui a introduit le concept d'entropie-flux d'entropie de frontière afin de garantir l'unicité de la solution. Notons que ces résultats permettent de retrouver ceux de Bardos, Le Roux & Nédélec. Cependant, l'article d'Otto ne concerne que les lois autonomes et sans terme source et la formulation introduite par Otto ne se généralise pas à la prise en compte du caractère non-autonome des flux et aux termes source.

L'article [12] généralise le travail d'Otto, en prenant en compte la présence de termes source et le caractère non-autonome du flux. Par ailleurs, un résultat de stabilité par rapport aux données est établi, ce qui n'apparaît pas dans le travail de Bardos, Le Roux & Nédélec. Nous utilisons essentiellement le concept de *semi entropies-flux d'entropie de Kružkov*, introduit dans [Car99], qui est équivalent à celui d'entropies-flux d'entropie de frontière utilisé par Otto, mais qui est plus approprié à l'étude des lois de conservation avec termes source et flux non-autonomes. Le résultat d'existence est établi par approximation parabolique alors que le résultat d'unicité est obtenu par la méthode du dédoublement de variables. Le résultat de stabilité dépend d'hypothèses supplémentaires sur le terme source et le flux de l'équation, conjointement aux données¹⁵.

2.2.1 Formulation entropique

Soit Ω un domaine borné régulier de \mathbb{R}^d , $d \geq 1$. On s'intéresse aux équations suivantes :

$$\partial_t u(t, \mathbf{x}) + \operatorname{div}_{\mathbf{x}} (\mathcal{F}(t, \mathbf{x}, u(t, \mathbf{x}))) + \mathcal{G}(t, \mathbf{x}, u(t, \mathbf{x})) = 0, \quad (t, \mathbf{x}) \in Q_T := (0, T) \times \Omega, \quad (2.5)$$

$$u(0, \mathbf{x}) = u^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.6)$$

$$u(t, \mathbf{r}) = u^D(t, \mathbf{r}), \quad (t, \mathbf{r}) \in \Sigma_T := (0, T) \times \partial\Omega, \quad (2.7)$$

où le sens des conditions aux limites, de type Dirichlet, doit être pris en un sens faible.

Hypothèse 2.1

- i. \mathcal{F} et \mathcal{G} sont deux fonctions régulières : $\mathcal{F} \in (C^2([0, T] \times \overline{\Omega} \times [a, b]))^d$, $\mathcal{G} \in C^2([0, T] \times \overline{\Omega} \times [a, b])$,
- ii. \mathcal{F} , $\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F}$ et \mathcal{G} sont lipschitziennes par rapport à u , uniformément en (t, \mathbf{x}) ,
- iii. $(u^0, u^D) \in L^\infty(\Omega; [a, b]) \times L^\infty(\Sigma_T; [a, b])$,
- iv. $(\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F} + \mathcal{G})(\cdot, \cdot, a) \leq 0$ et $(\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F} + \mathcal{G})(\cdot, \cdot, b) \geq 0$.

Nous établissons la définition d'une solution entropique du problème (2.5)–(2.7) :

Définition 2.1 *Supposons l'Hypothèse 2.1 vérifiée. Une fonction $u \in L^\infty(Q_T)$ est une sous-solution (resp. sur-solution) entropique du problème (2.5)–(2.7) si elle vérifie :*

$$(\mathcal{E}) \left\{ \begin{array}{l} \int_{Q_T} \left\{ (u(t, \mathbf{x}) - k)^\pm \partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) + (\operatorname{sgn}_\pm(u(t, \mathbf{x}) - k) (\mathcal{F}(t, \mathbf{x}, u(t, \mathbf{x})) - \mathcal{F}(t, \mathbf{x}, k))) \cdot \nabla \varphi(t, \mathbf{x}) \right. \\ \left. - \operatorname{sgn}_\pm(u(t, \mathbf{x}) - k) (\operatorname{div}_{\mathbf{x}} \mathcal{F}(t, \mathbf{x}, k) + \mathcal{G}(t, \mathbf{x}, u(t, \mathbf{x}))) \varphi(t, \mathbf{x}) \right\} dx dt \\ + \int_{\Omega} (u^0(\mathbf{x}) - k)^\pm \varphi(0, \mathbf{x}) dx + \mathcal{L}_{[\mathcal{F}]} \int_{\Sigma_T} (u^D(t, \mathbf{r}) - k)^\pm \varphi(t, \mathbf{r}) d\gamma(\mathbf{r}) dt \geq 0, \\ \forall \varphi \in C_0^\infty((-\infty, T) \times \mathbb{R}^d), \varphi \geq 0, \forall k \in \mathbb{R}, \end{array} \right.$$

¹⁵. Notons que, pour la lubrification, le cadre L^∞ n'est pas absolument nécessaire : la donnée initiale peut être considérée comme régulière, au moins dans BV . Néanmoins, la recherche d'un résultat de stabilité préservant l'intervalle $[0, 1]$, pour la saturation, ainsi que l'état de l'art, lorsque ces problèmes ont été abordés, nous ont amené à considérer ce problème.

où $\mathcal{L}_{[\mathcal{F}]}$ désigne la constante de Lipschitz de \mathcal{F} . Les fonctions $u \mapsto (u - \kappa)^\pm$ sont les semi entropies de Kruřkov [Car99, Ser96, Vovo2], définies par $(u - \kappa)^+ = \max(u - \kappa, 0)$ et $(u - \kappa)^- = (\kappa - u)^+$, et $u \mapsto \text{sgn}_\pm(u)$ est la dérivée de la fonction $u \mapsto u^\pm$ avec la valeur 0 en 0. Une solution entropique si elle est sous-solution et sur-solution entropique.

2.2.2 Existence d'une solution entropique et bornes L^∞

On établit tout d'abord le résultat de stabilité suivant :

Théorème 2.2 (Stabilité) *Soit $u \in L^\infty(Q_T)$ une fonction vérifiant (\mathcal{E}) . Alors $a \leq u \leq b$ p.p.*

Idée de la preuve. Le résultat est obtenu en utilisant directement les propriétés des *semi entropies-flux de Kruřkov*, avec $(u - a)^-$ d'une part et $(u - b)^+$ d'autre part comme fonction test. L'Hypothèse 2.1 iv. joue ici un rôle essentiel dans ce résultat. Notons que cette propriété se démontre aisément par l'utilisation des *semi entropies-flux de Kruřkov*, tandis que le cadre posé par Bardos, Le Roux & Nédélec [BIRN79] utilisant les entropies-flux de Kruřkov n'est pas adapté à une démonstration similaire. \square

Nous établissons le résultat d'existence par approximation parabolique. Dans un premier temps, nous considérons le problème :

$$\partial_t u_\varepsilon(t, \mathbf{x}) + \text{div}_{\mathbf{x}}(\mathcal{F}(t, \mathbf{x}, u_\varepsilon(t, \mathbf{x}))) + \mathcal{G}(t, \mathbf{x}, u_\varepsilon(t, \mathbf{x})) = \varepsilon \Delta u_\varepsilon(t, \mathbf{x}), \quad (t, \mathbf{x}) \in Q_T, \quad (2.8)$$

$$u_\varepsilon(0, \mathbf{x}) = u_\varepsilon^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.9)$$

$$u_\varepsilon(t, \mathbf{r}) = u_\varepsilon^D(t, \mathbf{r}), \quad (t, \mathbf{r}) \in \Sigma_T, \quad (2.10)$$

où u_ε^D et u_ε^0 vérifient des hypothèses de régularité et compatibilité, voir [LSU67]. On s'intéresse en particulier au comportement de la solution de ce problème lorsque ε tend vers 0. On établit au préalable deux résultats essentiels : d'une part, une formulation entropique du problème parabolique, qui préfigure celle que l'on obtiendra par passage à la limite pour le problème hyperbolique et, d'autre part, des estimations *BV* qui constituent une étape préalable au passage à la limite sur ε .

Théorème 2.3 (Existence) *Supposons l'Hypothèse 2.1 vérifiée. Soit u_ε l'unique solution de (2.8)–(2.10) correspondant aux données $(u_\varepsilon^0, u_\varepsilon^D)$ vérifiant les hypothèses de régularité et compatibilité, et soit*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon^D = u^D \quad \text{dans } L^1(\Sigma_T), \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} u_\varepsilon^0 = u^0 \quad \text{dans } L^1(\Omega),$$

avec $u^D \in L^\infty(\Sigma_T; [a, b])$ et $u^0 \in L^\infty(\Omega; [a, b])$. Alors, la suite $\{u_\varepsilon\}_\varepsilon$ converge vers une fonction $u \in L^\infty(Q_T; [a, b])$ dans $C^0([0, T], L^1(\Omega))$. De plus, u est une solution entropique du problème (2.5)–(2.7).

Idée de la preuve. Afin d'établir l'existence d'une solution, on passe à la limite sur ε . Néanmoins, nous ne pouvons utiliser les estimations *BV* pour u_ε établies précédemment car u_ε^D et u_ε^0 vérifient des conditions de compatibilité mais n'ont pas nécessairement une extension sur \overline{Q}_T avec une régularité suffisante. Néanmoins, une régularisation supplémentaire nous permet d'appliquer le théorème d'Arzelà-Ascoli afin de démontrer que $\{u_\varepsilon\}$ est relativement compacte dans $C^0([0, T]; L^1(\Omega))$. \square

2.2.3 Unicité de la solution entropique

Nous établissons le résultat d'unicité par la méthode de dédoublement de variables.

Lemme 2.1 (Principe de comparaison) *Soit $u \in L^\infty(Q_T)$ (resp. $v \in L^\infty(Q_T)$) une solution de (\mathcal{E}) avec des données $(u^0, u^D) \in L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Sigma_T)$ (resp. $(v^0, v^D) \in L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Sigma_T)$); alors, pour tout $\psi \in C_0^\infty((-\infty, T) \times \mathbb{R}^d)$,*

$$\begin{aligned} - \int_{Q_T} \left\{ |u - v| \partial_t \psi + \text{sgn}(u - v) (\mathcal{F}(\cdot, \cdot, u) - \mathcal{F}(\cdot, \cdot, v)) \cdot \nabla \psi - \text{sgn}(u - v) (\mathcal{G}(\cdot, \cdot, u) - \mathcal{G}(\cdot, \cdot, v)) \psi \right\} \\ \leq \int_{\Omega} |u^0 - v^0| \psi(0, \cdot) + \mathcal{L}_{[\mathcal{F}]} \int_{\Sigma_T} |u^D - v^D| \psi. \end{aligned}$$

Idée de la preuve. On établit une formulation entropique équivalente par sommation des deux inégalités liées aux semi entropies-flux de Kruřkov, et en utilisant un choix approprié d'entropies-flux de frontière. Le principe de comparaison est obtenu par application de la méthode de dédoublement de variables, initiée par Kruřkov, à cette formulation équivalente. \square

Théorème 2.4 (Unicité) *Sous l'Hypothèse 2.1, le problème (2.5)–(2.7) admet une unique solution entropique.*

Idée de la preuve. En utilisant le principe de comparaison précédent, avec $u^0 = v^0$ et $u^D = v^D$, le résultat est obtenu par le lemme de Gronwall. \square

2.3 COMPORTEMENT EN TEMPS LONG DE LA SOLUTION D'UNE LOI DE CONSERVATION SCALAIRE

Comme indiqué précédemment, le travail présenté dans cette section, voir [13] pour les détails, a été inspiré par la recherche de solutions stationnaires pour le modèle bifluide.

Si de nombreux travaux se sont intéressés au comportement en temps long de la solution de lois de conservation scalaires défini sur l'espace entier, notamment [Lax57, IO60, DiP75, LP84, Daf85, Kimo3], la bibliographie sur le comportement en temps long de la solution de lois de conservation scalaires *sur un domaine borné* n'est pas très importante : Mascia & Terracina [MT99] ont étudié l'influence d'un terme source (avec un flux autonome). Dans le problème qui nous intéresse, l'absence de terme source est contrebalancée par le caractère non autonome du flux. Notons que, dans le cas de l'espace entier, de nombreux auteurs se sont également intéressés à la stabilité des chocs [KM85, MN94, LN97, FS01, Ser96]. En particulier, Serre et ses co-auteurs ont développé une stratégie générale pour l'étude de la stabilité des profils qui nous a inspiré pour cette étude. Nous avons considéré le problème suivant, en dimension $d = 1$ d'espace :

$$(P) \begin{cases} \partial_t u(t, x) + \operatorname{div}_x (\mathcal{F}(x, u(t, x))) &= 0, & (t, x) \in Q_T := (0, T) \times (0, 1), \\ u(0, x) &= u^0(x), & x \in (0, 1), \\ u(t, r) &= \bar{u} \in \mathbb{R}, & (t, r) \in (0, T) \times \partial(0, 1). \end{cases}$$

Dans ce cadre d'étude (les hypothèses sur le flux vont être précisées), nous avons déterminé le comportement en temps long de la solution, qui converge vers un état stationnaire qu'il est possible de caractériser dans la très grande majorité des cas. Précisons la difficulté inhérente de ce problème : comme nous l'avons souligné précédemment, la condition aux limites doit être interprétée en un sens faible : il s'agit plus précisément d'inégalités au sens de Bardos, Le Roux et Nédélec et l'analyse du comportement en temps long de la solution doit prendre en compte l'influence de cette condition de bord sur la dynamique du transport non-linéaire.

Dans le cadre particulier de la lubrification, des hypothèses sur le flux et sur les données sont spécifiées :

Hypothèse 2.2 *La condition initiale vérifie $u^0 \in L^\infty(0, 1; [0, 1])$; la condition aux limites vérifie $\bar{u} \in [0, 1]$. La fonction flux $\mathcal{F} \in C^1([0, 1]^2)$ vérifie les hypothèses (voir FIG. 2.2 pour un exemple) :*

- $\forall x \in [0, 1], \mathcal{F}(x, \cdot) = \mathcal{F}(1 - x, \cdot), \mathcal{F}(x, 0) = 0, \mathcal{F}(x, 1) = Q \geq 0$;
- $\forall x \in [0, 1], \exists \alpha(x) \in (0, 1), \partial_u \mathcal{F}(x, \cdot) > 0$ sur $[0, \alpha(x)]$ et $\partial_u \mathcal{F}(x, \cdot) < 0$ sur $(\alpha(x), 1]$;
- $\forall u \in [0, 1], \partial_x \mathcal{F}(\cdot, u) \leq 0$ sur $[0, \frac{1}{2}]$.

Pour alimenter la discussion sur l'Hypothèse (2.2), insistons sur la nécessité de restreindre les formes possibles pour les données et le flux. En effet, dans le cas $\mathcal{F}(x, u) = u$ et d'une donnée au bord $t \mapsto \bar{u}(t)$, la solution est, pour $t > 1$, $u(t, x) = \bar{u}(t - x)$ et $u(t, \cdot)$ converge vers une fonction de $L^\infty(0, 1; [0, 1])$ en norme L^1 en $t \rightarrow +\infty$ uniquement si les moyennes de \bar{u} convergent vers une constante.

Remarque 2.1 (Cas modèle) *Le flux suivant, inspiré du modèle de Buckley-Leverett, vérifie ces hypothèses :*

$$\mathcal{F}(x, u) = Qu + H(x)u(1 - u)$$

où H est une fonction strictement positive, au profil convergent-divergent. Selon l'importance du terme $H(x)/Q$, on a soit $\alpha(x) = 1$ (auquel cas $\mathcal{F}(x, \cdot)$ est alors croissante sur $[0, 1]$), soit $\alpha(x) \in (0, 1)$ (auquel cas $\mathcal{F}(x, \cdot)$ possède alors un seul maximum strict en $\alpha(x)$), voir FIG. 2.2.

2.3.1 Propriétés des solutions entropiques

Les notions de solution entropique, sous-solution entropique et sur-solution entropique ont été définies à la section 2.2 (voir Définition 2.1, page 26). En particulier, le problème (P) admet une unique solution entropique, celui-ci résultant d'un principe de comparaison. Énonçons un résultat supplémentaire qui est particulièrement important pour la suite, puisqu'il fait émerger une structure de semi-groupe essentielle à l'analyse du comportement en temps long :

Lemme 2.2 (Continuité en temps) *La solution entropique du problème (P) vérifie :*

$$u \in C^0([0, +\infty); L^1(0, 1)) \quad \text{et} \quad \lim_{t \rightarrow 0} u(t) = u^0 \text{ dans } L^1(0, 1).$$

Remarque 2.2 *En particulier, et d'après le Lemme 2.2, le problème (P) définit un semi-groupe $S_{\bar{u}}(t) : u^0 \mapsto u(t, \cdot)$ de $L^\infty(0, 1; [0, 1]) \times [0, 1]$ vers $L^\infty(0, 1; [0, 1])$, qui associe à (u^0, \bar{u}) la valeur au temps t de la solution entropique du problème (P) avec la donnée initiale u^0 et la donnée au bord \bar{u} . Nous avons*

$$\lim_{t \rightarrow 0} S_{\bar{u}}(t)u^0 = u^0 \text{ dans } L^1(0, 1).$$

De plus, le principe de comparaison établit que pour $\bar{u} \in [0, 1]$, $S_{\bar{u}}(t)$ est non-expansive dans L^1 :

$$\forall u^0, v^0 \in L^\infty(0, 1; [0, 1]), \quad \forall t > 0, \quad \|S_{\bar{u}}(t)u^0 - S_{\bar{u}}(t)v^0\|_{L^1(0,1)} \leq \|u^0 - v^0\|_{L^1(0,1)}.$$

En particulier, $S_{\bar{u}}(t)$ est continue sur $L^\infty(0, 1; [0, 1])$ muni de la topologie induite par la norme L^1 .

Il existe plusieurs manières de démontrer le Lemme 2.2. Soit en démontrant la convergence d'une approximation dans $C^0([0, T]; L^1(0, 1))$, $T > 0$ étant arbitraire (et par unicité de la solution entropique), comme cela a été réalisé dans [12] (voir section 2.2); ou par une preuve directe basée sur la formulation entropique, le point critique étant de démontrer la continuité en $t = 0$ et de retrouver la condition initiale, voir [CR00, Vas01] pour une analyse du problème de la couche initiale pour les lois de conservation scalaires.

Complétons la Remarque 2.2 avec la remarque suivante :

Remarque 2.3 Pour tout $u^0 \in BV(0, 1) \cap L^\infty(0, 1; [0, 1])$, on a $u(t) := S_{\bar{u}}(t)u^0 \in BV(0, 1)$ pour tout t . En particulier, les traces aux bords sont définies et les conditions aux limites sont données par les inégalités de Bardos, Le Roux & Nédélec [BIRN79].

Lemme 2.3 Soient $u^0 \in BV(0, 1) \cap L^\infty(0, 1; [0, 1])$ et $\bar{u} \in [0, 1]$. Alors, une fonction

$$u \in C^0([0, +\infty); L^1(0, 1)) \cap L^\infty(0, +\infty, BV(0, 1))$$

est solution entropique de (P) (i. e. $u(t) = S_{\bar{u}}(t)u^0$) si, et seulement si, elle vérifie les inégalités d'entropie à l'intérieur de $(0, 1)$: pour $\kappa \in [0, 1]$, pour tout $\varphi \in C_0^\infty((0, 1) \times [0, +\infty))$, $\varphi \geq 0$,

$$\int_0^\infty \int_0^1 \left\{ (u(t, x) - \kappa)^\pm \partial_t \varphi(t, x) + \operatorname{sgn}_\pm(u(t, x) - \kappa) (\mathcal{F}(x, u(t, x)) - \mathcal{F}(x, \kappa)) \partial_x \varphi(t, x) - \operatorname{sgn}_\pm(u(t, x) - \kappa) \partial_x \mathcal{F}(x, \kappa) \varphi(t, x) \right\} dx dt + \int_0^1 (u^0(x) - \kappa)^\pm \varphi(0, x) dx \geq 0, \quad (2.11)$$

et si, de plus, elle vérifie les inégalités de Bardos, Le Roux & Nédélec (avec la notation $\mathcal{I}(a, b) = [\min(a, b), \max(a, b)]$) :

$$\begin{cases} \forall t > 0, \forall \kappa \in \mathcal{I}(u(t, 0), \bar{u}), \operatorname{sgn}(u(t, 0) - \bar{u})(\mathcal{F}(0, u(t, 0)) - \mathcal{F}(0, \kappa)) \leq 0, \\ \forall t > 0, \forall \kappa \in \mathcal{I}(u(t, 1), \bar{u}), \operatorname{sgn}(u(t, 1) - \bar{u})(\mathcal{F}(1, u(t, 1)) - \mathcal{F}(1, \kappa)) \geq 0. \end{cases}$$

La caractérisation d'une solution énoncée dans le Lemme 2.3 est particulièrement utile pour l'analyse du comportement en temps long : afin de décrire les états stationnaires puis le comportement en temps long vers les états stationnaires, on se concentrera d'abord sur les inégalités d'entropies à l'intérieur du domaine puis sur les conditions aux limites au sens de Bardos, Le Roux & Nédélec.

2.3.2 Comportement en temps long de la solution entropique

Décrivons dans un premier temps la structure des états stationnaires. La particularité de cette étape est double : les états stationnaires doivent non seulement vérifier des inégalités entropiques (ce qui implique l'existence de critères d'admissibilité pour les discontinuités) mais aussi les conditions aux limites au sens des inégalités de Bardos, Le Roux & Nédélec (et non au sens classique). Dans un deuxième temps, nous analyserons la convergence en temps long d'une solution entropique vers un état stationnaire en utilisant la structure de semi-groupe et nous caractériserons, si possible, l'état stationnaire associé.

Description des états stationnaires

Définition 2.2 Une fonction $w \in L^\infty(0, 1; [0, 1])$ est une solution stationnaire du problème (P) s'il existe une donnée $\bar{u} \in [0, 1]$ telle que $w = S_{\bar{u}}(t)w$ pour tout $t > 0$.

Nous effectuons l'analyse des états stationnaires de (P) en inversant l'équation $\mathcal{F}(x, w) = c \in \mathbb{R}$. En notant f^0 la valeur de $\mathcal{F}(x, w(x))$, les hypothèses structurelles sur le flux (voir Hypothèse 2.2) indiquent que l'équation $\mathcal{F}(x, w(x)) = f^0$ peut avoir zéro, une ou deux branches de solutions selon la valeur de f^0 (par branche de solution, nous entendons une fonction continue w de $[0, 1]$ dans $[0, 1]$ telle que $\mathcal{F}(x, w(x)) = f^0$ pour tout x). Dans ce contexte, deux types de forme pour la surface \mathcal{S} sont possibles, voir la FIG. 2.2, selon la valeur du paramètre

$$\mathcal{F}_{\text{crit.}} := \min\{\mathcal{F}(x, \alpha(x)), x \in [0, 1]\} = \mathcal{F}\left(\frac{1}{2}, \alpha\left(\frac{1}{2}\right)\right).$$

En effet,

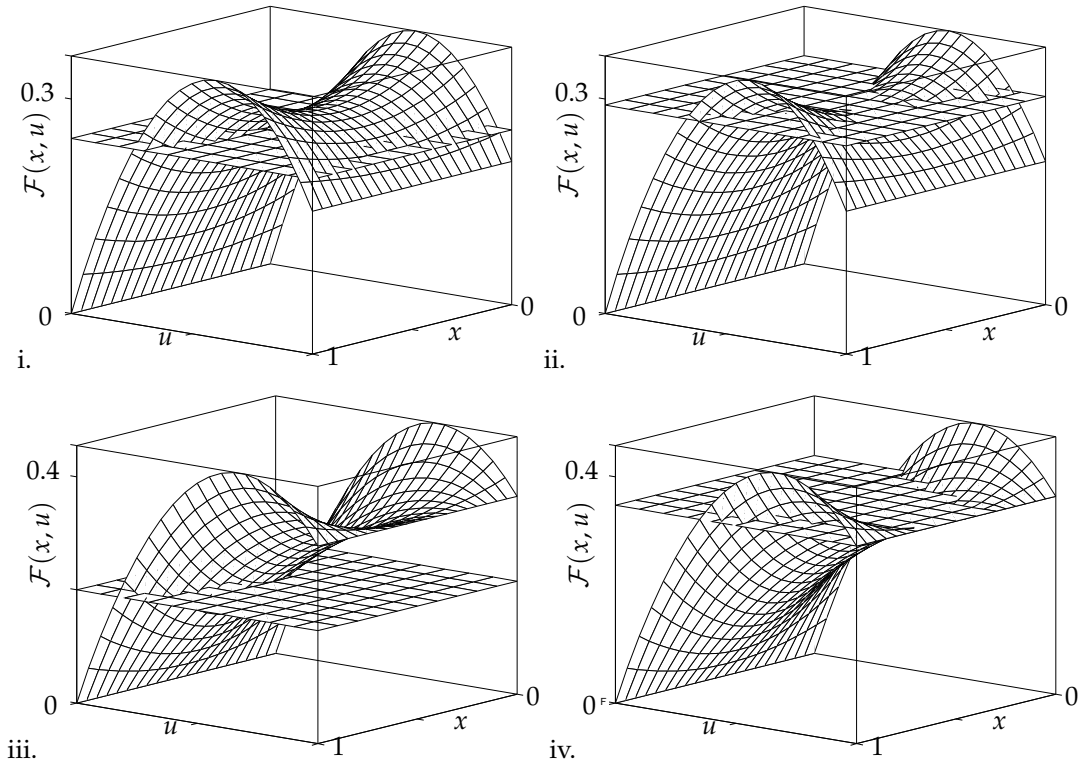


FIGURE 2.2 – Intersection entre la surface $S := \{z = \mathcal{F}(x, u), (x, u) \in [0, 1]^2\}$ pour le flux $\mathcal{F}(x, u) := Qu + H(x)u(1 - u)$ et la surface plane $z = f^0$. Selon la valeur de Q , la surface S est en forme de selle, voir i. et ii., ou en forme de toboggan, voir iii. et iv.; de plus, selon la valeur de $f^0 \in [0, \mathcal{F}_{\text{crit.}}]$, l'intersection peut être décrite par : i. deux branches distinctes (d'intersection vide), ii. deux branches non distinctes (d'intersection réduite à un point), iii. une branche unique, iv. deux branches distinctes (d'intersection réduite à un segment).

- soit $\mathcal{F}_{\text{crit.}} > Q$, auquel cas la surface S est en forme de selle, voir FIG. 2.2 i. ou ii.;
- soit $\mathcal{F}_{\text{crit.}} = Q$, auquel cas la surface S est en forme de toboggan, voir FIG. 2.2 iii. ou iv.

On montre alors que pour $f^0 \in [0, \mathcal{F}_{\text{crit.}}]$, l'équation $\mathcal{F}(x, w(x)) = f^0$ possède une ou deux branches de solutions. Nous les appelons λ et μ , $\lambda \leq \mu$, avec la convention $\lambda = \mu$ s'il n'existe qu'une seule branche.

Lemme 2.4 Soient λ et μ les branches de solutions. Introduisons un saut croissant entre λ et μ en définissant

$$w_z := \lambda \mathbf{1}_{[0, z]} + \mu \mathbf{1}_{(z, 1]}, \quad 0 \leq z \leq 1,$$

et, dans le cas où λ et μ s'intersectent, introduisons un second saut croissant en définissant

$$w_{z, z'} := w_z \mathbf{1}_{[0, \frac{1}{2}]} + w_{z'} \mathbf{1}_{[\frac{1}{2}, 1]}, \quad 0 \leq z \leq \frac{1}{2} \leq z' \leq 1.$$

Alors toute solution stationnaire w du problème (P) telle que $\mathcal{F}(x, w(x)) = f^0$ p.p. est une fonction w_z ou une fonction $w_{z, z'}$, cette dernière possibilité étant restreinte au cas où λ et μ s'intersectent (i. e. $0 \leq f^0 \leq \mathcal{F}_{\text{crit.}}$).

Les fonctions w_z et $w_{z, z'}$ sont solutions entropiques à l'intérieur de $(0, 1)$ et admettent une trace au bord. On utilise alors la condition de Bardos, Le Roux & Nédélec pour caractériser les solutions stationnaires de (P).

Théorème 2.5 Soit $u \in L^\infty((0, 1); [0, 1])$ une solution stationnaire de (P) avec la donnée au bord \bar{u} . Alors,

- i. la solution stationnaire u est une fonction w_z ou $w_{z, z'}$ et le flux $\mathcal{F}(x, u(x))$ est égal p.p. à une constante f^0 ;
 - ii. si $\mathcal{F}(0, \bar{u}) \leq \mathcal{F}_{\text{crit.}}$, alors la constante fixant la valeur du flux f^0 est déterminée par $f^0 := \mathcal{F}(0, \bar{u})$;
 - iii. si $\mathcal{F}(0, \bar{u}) > \mathcal{F}_{\text{crit.}}$, alors la constante fixant la valeur du flux f^0 est déterminée par $f^0 := \mathcal{F}_{\text{crit.}}$;
- En conséquence, on peut presque toujours caractériser l'état stationnaire :
- iv. si $\mathcal{F}(0, \bar{u}) < \mathcal{F}_{\text{crit.}}$, soit $\bar{u} = \lambda(0)$ auquel cas $u = \lambda$, soit $\bar{u} = \mu(0)$ auquel cas $u = \mu$;
 - v. si $\mathcal{F}(0, \bar{u}) > \mathcal{F}_{\text{crit.}}$, alors $u = w_{0, 1} = \mu \mathbf{1}_{[0, \frac{1}{2}]} + \lambda \mathbf{1}_{[\frac{1}{2}, 1]}$;
 - vi. une solution stationnaire discontinue n'existe que dans le cas $\mathcal{F}(0, \bar{u}) = \mathcal{F}_{\text{crit.}}$.

Le Théorème 2.5 illustre ainsi l'influence de la valeur au bord sur la structure des états stationnaires et, en particulier, la valeur du flux stationnaire. Cette influence est décrite par l'existence de trois régimes différents dépendant de la valeur de $\mathcal{F}(0, \bar{u})$ par rapport à $\mathcal{F}_{\text{crit.}}$.

Convergence vers un état stationnaire

Nous avons ainsi décrit les solutions stationnaires du problème (P). Dans l'analyse du comportement en temps long, nous utilisons le principe de comparaison ; pour cela, nous avons besoin de connaître la structure des sous-solutions et sur-solutions stationnaires afin d'analyser les ensembles ω -limites des trajectoires. À cet effet, nous avons procédé comme précédemment : nous avons d'abord examiné les solutions à l'intérieur de $(0, 1)$ en nous focalisant sur les conditions d'entropie, puis nous avons examiné les conditions aux limites. Cette méthode nous a permis d'établir :

Théorème 2.6 Pour tout $u^0 \in L^\infty(0, 1; [0, 1])$, $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers un état stationnaire décrit dans le Théorème 2.5.

Remarque 2.4 Si $\mathcal{F}(0, \bar{u}) \neq \mathcal{F}_{\text{crit.}}$, alors il n'existe qu'une seule solution stationnaire (voir Théorème 2.5 v)) et le Théorème 2.6 décrit le comportement asymptotique de $S_{\bar{u}}(t)u^0$ qui converge vers l'unique solution stationnaire. Dans le cas $\mathcal{F}(0, \bar{u}) = \mathcal{F}_{\text{crit.}}$, le comportement asymptotique des trajectoires dépend de leur point de départ. Il est cependant possible de préciser la limite dans un certain nombre de cas, voir la Proposition 2.1.

La proposition suivante complète le Théorème 2.6 dans le cas $\mathcal{F}(0, \bar{u}) = \mathcal{F}_{\text{crit.}}$.

Proposition 2.1 Supposons que $\mathcal{F}(0, \bar{u}) = \mathcal{F}_{\text{crit.}}$. On a alors : soit $\bar{u} = \lambda(0)$, soit $\bar{u} = \mu(0)$. De plus,

- i. si $u^0 \leq \lambda$, alors $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers λ ;
- ii. si $u^0 \geq \mu$, alors $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers μ ;
- iii. si $\lambda \leq u^0 \leq \mu$ et $\bar{u} = \lambda(0)$, alors $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers $w_{z,1}$ où z est l'unique élément de $[0, \frac{1}{2}]$ tel que

$$\int_0^{\frac{1}{2}} (u^0(x) - \lambda(x)) \, dx = \int_0^{\frac{1}{2}} (w_{z,1}(x) - \lambda(x)) \, dx ;$$

- iii'. si $\lambda \leq u^0 \leq \mu$ et $\bar{u} = \mu(0)$, alors $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers $w_{0,z'}$ où z' est l'unique élément de $[\frac{1}{2}, 1]$ tel que

$$\int_{\frac{1}{2}}^1 (\mu(x) - u^0(x)) \, dx = \int_{\frac{1}{2}}^1 (\mu(x) - w_{0,z'}(x)) \, dx.$$

Remarque 2.5 Notons que lorsque la donnée u^0 n'est pas ordonnée par rapport à λ et μ , nous n'avons pu caractériser la position des chocs stationnaires z et z' . Par ailleurs, les simulations ne nous ont pas permis d'établir une conjecture.

Remarque 2.6 Comme mentionné précédemment, le cas $\mathcal{F}(0, \bar{u}) = \mathcal{F}_{\text{crit.}}$ est particulier puisqu'il autorise l'existence de solutions stationnaires discontinues. La Proposition 2.1 localise exactement la position des chocs entropiques stationnaires. Cette caractérisation est importante dans le cadre de l'analogie avec le modèle bifluide, puisque ce choc entropique stationnaire modélise la rupture du film mince dans le mécanisme lubrifié. Soulignons néanmoins que le flux considéré dans cette section est un modèle jouet : le flux de Buckley-Leverett décrit dans le modèle bifluide admet de changements de convexité, de sorte qu'il n'existe qu'une unique solution stationnaire (qui dépend de la donnée au bord, mais pas de la donnée initiale).

2.3.3 Résultats numériques

Les résultats numériques présentés illustrent les Théorèmes 2.5 et 2.6 dans le cas du flux modèle précédemment considéré :

$$\mathcal{F}(x, u) = Qu + H(x)u(1 - u).$$

Plus précisément, on s'intéresse au cas $\mathcal{F}(0, \bar{u}) = \mathcal{F}_{\text{crit.}}$ qui est le plus intéressant puisqu'il induit la possibilité de chocs entropiques stationnaires. La FIG. 2.3 met en exergue le comportement de la solution en temps long lorsque les états stationnaires sont décrits par deux branches :

- i. Comme $u^0 \leq \lambda$, $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers λ .
- ii. Comme $\lambda \leq u^0 \leq \mu$ et $\bar{u} = \lambda(0)$, alors $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers $w_{z,1}$, où z est l'unique élément de $[0, \frac{1}{2}]$ qui préserve la masse initiale sur $(0, \frac{1}{2})$.
- iii. La situation est identique à celle décrite en ii., mais la condition initiale est différente. Un choc entropique stationnaire s'est formé en une position z caractérisée par la conservation de la masse sur $(0, \frac{1}{2})$; en revanche, la discontinuité initiale décroissante n'est pas préservée car, le flux étant concave, ce choc n'est pas admissible et ne vérifie pas les inégalités d'entropie locales.

Le cas $\mathcal{F}(0, \bar{u}) > \mathcal{F}_{\text{crit.}}$ est illustré par la FIG. 2.3 iv. : on observe que $S_{\bar{u}}(t)u^0$ converge vers $w_{0,1}$. Notons que la condition aux limites n'est pas vérifiée au sens classique : $u(+\infty, 0) = 1 \neq \bar{u}$ et $u(+\infty, 1) = \lambda(0) \neq \bar{u}$; en revanche, les conditions aux limites sont vérifiées au sens des inégalités de Bardos, Le Roux & Nédélec.

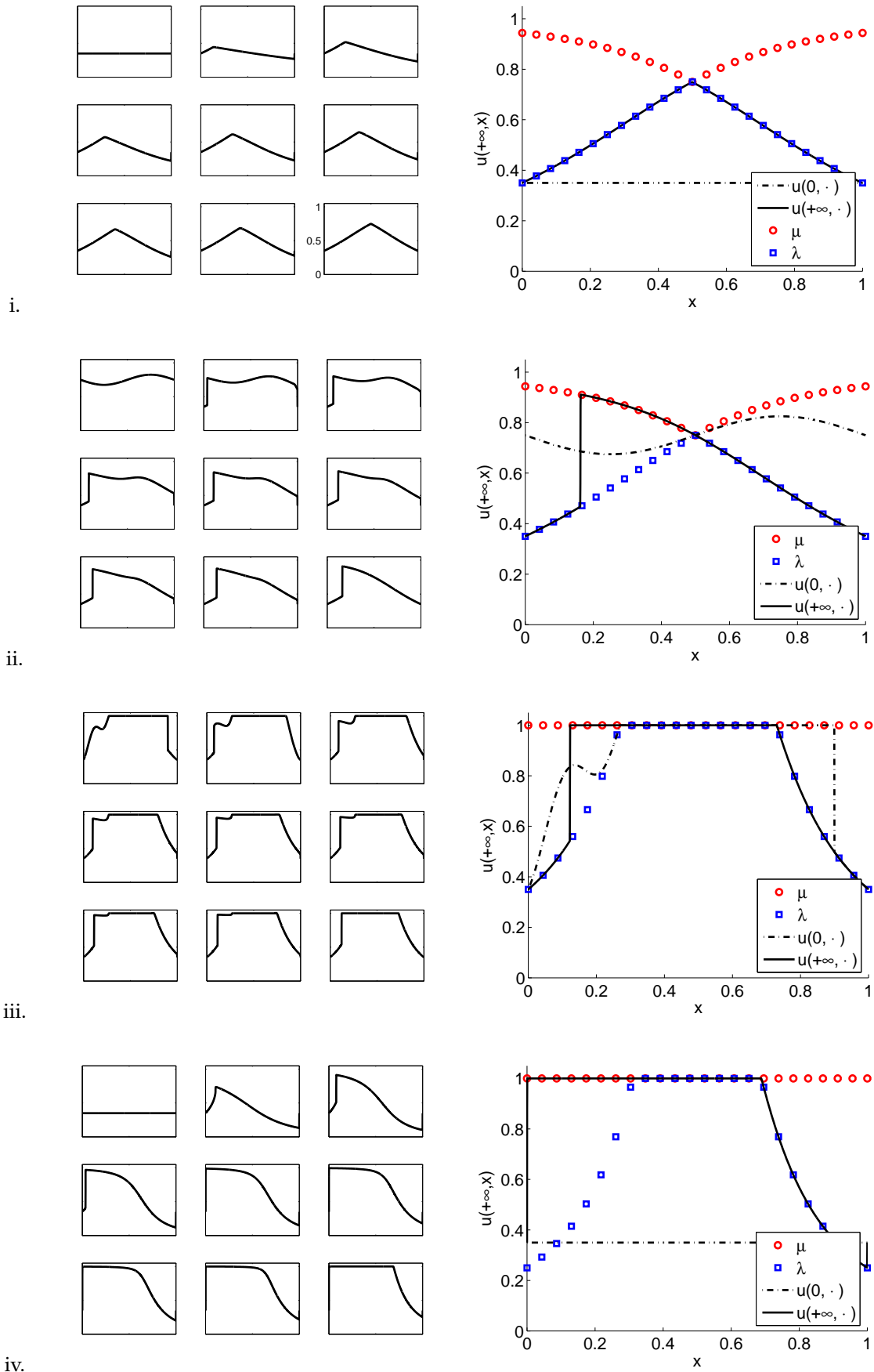


FIGURE 2.3 – Comportement en temps long de la solution entropique : i. convergence vers la branche inférieure; ii. convergence vers $w_{z,1}$ avec préservation de la masse sur $(0, \frac{1}{2})$; iii. idem avec préservation de la masse sur $(0, \frac{1}{2})$ et non-préservation du choc décroissant initial qui est non admissible; iv. convergence vers un état stationnaire qui ne vérifie pas les conditions limites au sens classique (les conditions aux limites sont vérifiées au sens des inégalités de Bardos, Le Roux et Nédélec).

2.4 APPROXIMATION NUMÉRIQUE DE LA SOLUTION D'UNE LOI DE CONSERVATION SCALAIRE AVEC FLUX DISCONTINU EN LA VARIABLE D'ÉTAT

Comme nous l'avons mentionné en introduction de ce chapitre, l'approche moderne des lois de conservation scalaires, définies sur l'espace entier, a été initiée par Kružkov [Kru70] en 1971. Bardos, Leroux & Nédélec [BIRN79] ont démontré l'existence et l'unicité de la solution entropique sur un domaine borné et pour des données régulières. Puis ces résultats ont été étendus au cadre L^∞ par Otto [Ott96]. Mais, dans tous ces travaux, la régularité du flux en la variable d'état est supposée au moins de classe C^1 ; lorsque le flux, supposé autonome, est de classe C^0 , l'existence et l'unicité de la solution entropique pour des données bornées ont été démontrées par Carrillo [Car99], qui a ensuite étendu ces résultats pour des flux avec des discontinuités¹⁶ du premier type [Car03].

L'analyse numérique de ces problèmes s'est développée initialement à partir du concept de *solution à valeur mesure*, avec les travaux de Szepessy [Sze91] qui a démontré la convergence d'une méthode éléments finis avec diffusion selon les lignes de courant; dans [CCL95], Cockburn, Coquel & LeFloch ont démontré la convergence de la méthode des volumes finis monotone, puis Benharbit, Chalabi & Vila [BCV95] celle des E-schémas. Dans [Vovo2], Vovelle a établi la convergence de la méthode des volumes finis pour des données L^∞ , en utilisant le concept de *solution issue d'un processus entropique*, équivalent à celui de solution à valeur mesure, et introduit par Eymard, Gallouët & Herbin [EGH00]. Néanmoins, dans tous ces travaux, le flux est supposé régulier. L'article [14] présenté dans cette section propose une méthode numérique pour le calcul de la solution entropique des lois de conservation scalaires avec flux discontinu en la variable d'état.

2.4.1 Formulations du problème

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné régulier de \mathbb{R}^d , $d \geq 1$, soit $\mathcal{F}: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ une fonction qui est continue sauf en certains points d'un ensemble fini \mathcal{S} , soient $u^0 \in L^\infty(\Omega)$ et $f \in L^1_{\text{loc}}(0, +\infty; L^\infty(\Omega))$; notons $Q_T := (0, T) \times \Omega$. On considère le problème d'évolution suivant :

$$P(u^0, f) \begin{cases} \partial_t u + \operatorname{div}(\mathcal{F}(u)) &= f, & \text{sur } Q_T, \\ u(0, \cdot) &= u^0, & \text{sur } \Omega, \\ u &= 0, & \text{sur } (0, T) \times \partial\Omega. \end{cases}$$

Le flux \mathcal{F} peut contenir des discontinuités du premier type : nous notons $\gamma_s = \mathcal{F}(s^+) - \mathcal{F}(s^-) \in \mathbb{R}^d$ le saut de discontinuité du flux en $s \in \mathcal{S}$ et nous supposons que le flux a la structure suivante :

$$\mathcal{F} = \phi + J, \quad \phi \in C^0(\mathbb{R}, \mathbb{R}^d), \quad \phi(0) = 0, \quad J(r) = \sum_{s \in \mathcal{S}, s \leq 0} \gamma_s H^-(r-s) + \sum_{s \in \mathcal{S}, s \geq 0} \gamma_s H^+(r-s),$$

$$H^-(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } r > 0, \\ [-1, 0] & \text{si } r = 0, \\ -1 & \text{si } r < 0, \end{cases} \quad H^+(r) = \begin{cases} 1 & \text{si } r > 0, \\ [0, 1] & \text{si } r = 0, \\ 0 & \text{si } r < 0. \end{cases}$$

Autrement dit, le flux est la somme d'une fonction régulière et d'une fonction constante par morceaux avec un nombre fini de discontinuités. Carrillo [Car03] a démontré que ce problème admet une unique solution entropique (au sens où, classiquement, une formulation variationnelle avec inégalités entropiques est vérifiée par la solution) en utilisant une transformation du problème. En introduisant les inconnues $\theta_s \in H^-(u-s)$ si $s \leq 0$ et $\theta_s \in H^+(u-s)$ si $s \geq 0$, on pose

$$v := u + \sum_{s \in \mathcal{S}} \theta_s.$$

Dans ce cas, $v \in (I + \mathcal{G})(u)$, où \mathcal{G} est un opérateur maximal monotone de \mathbb{R} . Alors $u := g(v)$ où $g := (I + \mathcal{G})^{-1}$ est croissante, bornée et continue, et $g \in C^{0,1}(\mathbb{R})$, $g(0) = 0$, $D(g^{-1}) = D(I + \mathcal{G}) = \mathbb{R}$. Ceci mène à l'introduction du problème

$$\tilde{P}(u^0, f) \begin{cases} \partial_t g(v) + \operatorname{div}(\tilde{\mathcal{F}}(v)) &= f, & \text{sur } Q_T, \\ g(v)(0, \cdot) &= u^0, & \text{sur } \Omega, \\ g(v) &= 0, & \text{sur } (0, T) \times \partial\Omega, \end{cases}$$

où $u = g(v)$, $\tilde{\mathcal{F}}(v) = \mathcal{F} \circ g$, $\tilde{\mathcal{F}}$ étant lipschitzienne. Carrillo [Car03] a établi l'équivalence entre les problèmes $P(u^0, f)$ et $\tilde{P}(u^0, f)$ ainsi que l'existence et l'unicité de la solution entropique (en analysant $\tilde{P}(u^0, f)$).

Avant de nous intéresser à la résolution numérique du problème, mentionnons deux éléments de comparaison qui jettent un pont entre le modèle d'Elrod-Adams et les lois de conservation (avec flux discontinu) :

¹⁶. Dans ce travail, le flux $(\mathbf{x}, u) \mapsto \mathcal{F}(t, \mathbf{x}, u)$ est discontinu en la variable d'état u ; cette hypothèse ne doit pas être confondue avec celle, très répandue dans la littérature, qui consiste à considérer des discontinuités du flux en la variable d'espace \mathbf{x} , voir notamment [Die96, Towoo, BV06] et, plus récemment [AKR10].

Remarque 2.7 L'idée essentielle sur laquelle repose l'analyse mathématique du problème $P(u^0, f)$ est une reformulation du problème grâce au changement d'inconnues $v := u + \sum_{s \in \mathcal{S}} \theta_s$. Incidemment, c'est cette même idée qui est exploitée dans l'algorithme de résolution du modèle d'Elrod-Adams proposé par Alt [Alt79] et Marini & Pietra [MP86]. L'inconnue $v := p + \theta$ contient les informations sur p et θ simultanément : si $v \in (0, 1)$, alors $p = 0$ et $\theta = v$ tandis que si $v \geq 1$, alors $\theta = 1$ et $p = v - 1$. Dans le travail de Carrillo [Caro3], cette approche est généralisée à un nombre fini de sauts de discontinuités. Ainsi, bien que forts différents, les deux problèmes font émerger des structures semblables du point de vue de l'analyse mathématique.

Remarque 2.8 Pour rappel, la technique de dédoublement de variables, initiée par Kružkov [Kru70], constitue l'ingrédient essentiel pour établir un principe de comparaison aboutissant à un résultat d'unicité dans le modèle d'Elrod-Adams. Elle constitue donc un autre point commun entre ces deux thématiques. De ce point de vue, le pont méthodologique entre les lois de conservation scalaires et la lubrification a été jeté par Alvarez & Carrillo qui, dans [Alv86, AC94], ont établi l'unicité de la solution du modèle d'Elrod-Adams pour un certain type de conditions aux limites.

Les schémas aux volumes finis ne permettent pas de résoudre numériquement $P(u^0, f)$ (voir ci-après). Nous avons donc proposé un schéma aux volumes finis implicite construit sur l'équivalence entre les deux problèmes $P(u^0, f)$ et $\tilde{P}(u^0, f)$. Nous avons montré que le problème discret est bien posé : l'existence repose sur une méthode de degré topologique, adaptée de [EGH00], alors que l'unicité est une conséquence d'un résultat de contraction au sens de la norme L^1 . Nous avons également démontré la convergence de la solution numérique vers la solution entropique du problème : pour cela, nous avons utilisé le concept de *solution issue d'un processus entropique*, en généralisant des résultats de [Vov02].

Dans les sous-sections suivantes, nous nous intéressons à une méthode des volumes finis qui nous permet de calculer la solution entropique de $P(u^0, f)$ et aux propriétés mathématiques de cette méthode : existence et unicité de la solution discrète associée au schéma numérique et convergence de la solution numérique vers la solution du problème continu. Pour cela, nous utilisons les propriétés de régularité du flux $\tilde{\mathcal{F}}$, de sorte que la formulation $\tilde{P}(u^0, f)$ constitue la pierre angulaire de cette méthode. En préalable à l'exposé de ce schéma et de ses propriétés, remarquons simplement que les schémas aux volumes finis classiques ne permettent pas de calculer la solution pour les raisons suivantes :

- Les méthodes usuelles consacrées au problème $P(u^0, f)$ ne peuvent être utilisées pour calculer la solution, à cause du manque de régularité du flux : en particulier, les méthodes de volumes finis *explicites* sont basées sur une condition de Courant-Friedrichs-Lewy dans laquelle la constante de Lipschitz du flux joue un rôle crucial pour la stabilité du schéma. Mais la constante de Lipschitz de $u \mapsto \mathcal{F}(u)$ n'est pas même définie ! Autrement dit, comment prendre en compte les sauts de discontinuité du flux ? De même, les schémas de volumes finis *implicites* se révèlent incapables de capturer une solution numérique : la mise en œuvre d'un algorithme de Newton à chaque pas de temps nécessite la détermination d'une matrice jacobienne qui est non-définie en raison du manque de régularité du flux. En pratique, le comportement de ces schémas usuels est pour le moins étonnant, sinon divergent, lorsque l'on s'intéresse à la résolution directe de $P(u^0, f)$.
- Lorsque l'on considère le problème $\tilde{P}(u^0, f)$, nous pourrions penser que les difficultés évoquées ci-dessus ont disparu puisque $v \mapsto \tilde{\mathcal{F}}(v)$ est de régularité Lipschitz. Mais, en fait, l'utilisation d'un schéma aux volumes finis *explicite* est, là encore, vouée à l'échec : à chaque pas de temps, la procédure nécessiterait de déduire la valeur de v sur chaque cellule de contrôle de la valeur de $g(v)$ sur chaque cellule de contrôle, alors que g n'est pas strictement monotone (autrement dit g^{-1} n'est pas univaluée) ! Dès lors, il reste à explorer la piste d'une méthode de volumes finis *implicite* consacré au problème $\tilde{P}(u^0, f)$.

À la lumière des considérations ci-dessus, la méthode d'approximation que nous avons proposée repose sur la construction d'une méthode *implicite* basée sur le problème $\tilde{P}(u^0, f)$.

2.4.2 Schéma numérique

Soit \mathcal{T} une famille de sous-ensembles polygonaux connexes disjoints de Ω (appelés volumes de contrôle) telle que $\overline{\Omega}$ est l'union des fermetures des éléments de cette famille et telle que l'interface commun de deux volumes de contrôle est inclus dans un hyperplan de \mathbb{R}^d . Soit h la taille du maillage, qui possède en outre la propriété de régularité usuelle définie dans le cadre de la méthode des volumes finis, voir [EGH00] par exemple. Les flux numériques sont calculés à l'aide de fonctions *flux numériques* aux interfaces : $\tilde{F}_{KL}^n : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, pour tout $n \in \mathbb{N}$, pour tout $K \in \mathcal{T}$ et tout voisin $L \in \mathcal{T}$ de K (nous utilisons alors, abusivement, la notation $L \in \partial K$), avec les propriétés de consistance avec le flux $\tilde{\mathcal{F}}$, conservation, monotonie et régularité usuelles. La solution entropique de $P(u^0, f)$ est approchée par le schéma aux volumes finis *implicite*, construit sur

l'équivalence avec problème $\tilde{P}(u^0, f)$ et défini par :

$$\forall K \in \mathcal{T}, u_K^0 = \frac{1}{|K|} \int_K u^0(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad f_K^n = \frac{1}{\delta t |K|} \int_{n\delta t}^{(n+1)\delta t} \int_K f(t, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \, dt, \quad (2.12)$$

$$\forall K \in \mathcal{T}, g(v_K^{n+1}) = u_K^n - \frac{\delta t}{|K|} \sum_{L \in \partial K} \tilde{F}_{KL}^n(v_K^{n+1}, v_L^{n+1}) + \delta t f_K^n, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.13)$$

$$\forall K \in \mathcal{T}, u_K^{n+1} = g(v_K^{n+1}), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (2.14)$$

Dans l'équation (2.13), v_L^{n+1} est égal à 0 si L est un volume fictif (modélisant le bord du domaine).

Définition 2.3 La fonction caractéristique d'un ensemble X est notée $\mathbf{1}_X$. Pour un ensemble de valeurs (u_K^n) , $n \in \mathbb{N}$, $K \in \mathcal{T}$, nous notons u^n (resp. u_h) la fonction constante par morceaux sur Ω (resp. Q_T) définie par

$$u^n = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K^n \mathbf{1}_K \quad \left(\text{resp. } u_h = \sum_{n \in \mathbb{N}} u^{n+1} \mathbf{1}_{[n\delta t, (n+1)\delta t)} \right).$$

Dans un premier temps, nous montrons que la solution numérique définie par le schéma *existe* et qu'elle est *unique*. Cette propriété mathématique permet de discuter sans ambiguïté d'une solution numérique dont on caractérisera par la suite la propriété de *convergence* vers la solution du problème continu.

Théorème 2.7 (Existence et unicité de la solution numérique) *Supposons $u^0 \in L^\infty(\Omega)$ et $f \in L^1_{\text{loc}}([0, +\infty), L^\infty(\Omega))$. Alors le schéma aux volumes finis (2.12)–(2.14) admet une solution (u_h, v_h) , où u_h est déterminée de manière unique.*

Preuve du Théorème 2.7. L'existence découle d'un argument de degré topologique (voir [Dei85, Chapitre 1] pour une présentation du degré), comme dans [EGHoo]. Au préalable, nous montrons que u_h est bornée :

$$\|u_h\|_{L^\infty(Q_T)} \leq \|u^0\|_{L^\infty(\Omega)} + \|f\|_{L^1(0, T; L^\infty(\Omega))}. \quad (2.15)$$

Soit $n \in \mathbb{N}$ et supposons que l'existence de u^1, \dots, u^n vérifiant (2.13) et (2.14) a été démontrée. Nous écrivons les équations (2.13) et (2.14) comme la recherche d'une solution u^{n+1} sous forme vectorielle du système

$$(I - G)(X) = F, \quad (2.16)$$

dans \mathbb{R}^P , $P = \text{card}(\mathcal{T})$. Posons $R := \|u^0\|_{L^\infty(\Omega)} + \|f\|_{L^1(0, T; L^\infty(\Omega))} + 1$ et notons $B(0, R)$ la boule ouverte de centre 0 et rayon R dans \mathbb{R}^P . D'après l'estimation (2.15), l'équation (2.16) n'admet pas de solution sur $\partial B(0, R)$: on peut alors définir le degré topologique de l'application $I - G$ associée à l'ensemble $B(0, R)$ et au point F , que l'on note $\text{deg}(I - G, B(0, R), F)$. La preuve s'adapte immédiatement pour montrer que

$$(I - \lambda G)(X) = F, \quad \lambda \in [0, 1]$$

n'admet pas de solution sur $\partial B(0, R)$. Par invariance du degré topologique par homotopie, nous avons $\text{deg}(I - G, B(0, R), F) = \text{deg}(I, B(0, R), F)$. Comme $F \in B(0, R)$, on a $\text{deg}(I - F, 0, B(0, R)) = 1$ et, par suite, $\text{deg}(I - G, B(0, R), F) \neq 0$: l'équation (2.16) admet donc une solution. L'unicité est une conséquence d'un principe de contraction. \square

2.4.3 Convergence du schéma aux volumes finis

La convergence de la méthode est la conjonction d'inégalités entropiques discrètes et de la consistance du schéma (cette dernière propriété étant établie à partir d'une inégalité *BV*, telle que cela est établi dans [EGHoo]), établissant ainsi que la solution u_h du schéma aux volumes finis est une approximation de la solution entropique de $P(u^0, f)$. On aboutit ainsi aux résultats suivants :

Lemme 2.5 (Inégalités d'entropie) *Une solution (u_h, v_h) des équations (2.12)–(2.14) vérifie les inégalités entropiques approchées suivantes : pour tout $\kappa \geq 0$, pour toute fonction test $\varphi \in C_0^\infty(Q_T)$, $\varphi \geq 0$,*

$$\int_{Q_T} (u_h - g(\kappa))^+ \partial_t \varphi + \text{sgn}_+(v_h - \kappa) (\tilde{\mathcal{F}}(v_h) - \tilde{\mathcal{F}}(\kappa)) \cdot \nabla \varphi - \text{sgn}_+(v_h - \kappa) f \, d\mathbf{x} \, dt + \int_{\Omega} (u^0 - g(\kappa))^+ \varphi(\cdot, 0) \, d\mathbf{x} \geq \eta(h, \delta t, \varphi),$$

où $\eta(h, \delta t, \varphi) \rightarrow 0$ lorsque $(h, \delta t) \rightarrow (0, 0)$.

Théorème 2.8 (Convergence) *Soit (\mathcal{T}_h) une suite de maillages de taille h , telle que $h \rightarrow 0$ et telle que la condition d'uniformité est vérifiée uniformément par rapport à h ; soit $\delta t \rightarrow 0$. Soit $(u_{h, \delta t}, v_{h, \delta t})$ la solution numérique définie par le schéma (2.12)–(2.14). Alors, pour tout $1 \leq p < +\infty$, $(u_{h, \delta t})$ converge fortement dans $L^p(Q_T)$ vers la solution entropique de $P(u^0, f)$.*

2.4.4 Résultats numériques

La méthode de volumes finis implicite que nous venons de présenter a été utilisée afin de déterminer la solution du problème de Riemann pour un flux de *Lighthill-Whitham-Richards*. La FIG. 2.4 représente la solution entropique d'un problème de Riemann avec les flux (continu puis discontinu) :

$$f^{(1)}(u) = u(1 - u), \quad f^{(2)}(u) = f^{(1)}(u) H^+(u_d - u),$$

où u_d désigne la position de la discontinuité. En raison du principe du maximum, l'influence de la discontinuité du flux n'est observable que si $\min(u_L, u_R) < u_d < \max(u_L, u_R)$. La FIG. 2.4 a été obtenue avec $u_L = 1$, $u_R = 0.5$ et une discontinuité placée en $u_d = 0.75$. Dans le cas continu, une onde de détente entre les deux états se propage ; dans le cas discontinu, une onde composée d'un choc et d'une détente est apparue.

La méthode a été adaptée au cas d'un flux non-autonome de type *Buckley-Leverett*, issu de l'analyse d'un modèle bifluide en lubrification : une simulation numérique est présentée sur la FIG. 2.5. C'est précisément cet exemple qui a motivé l'étude des lois de conservation scalaires avec flux discontinu et la détermination d'une méthode numérique permettant d'en calculer la solution. Nous avons donc considéré le flux

$$\mathcal{F} : (t, x, u) \mapsto Q H^+(u - 1) + H(x) u H^+(1 - u),$$

avec $Q \in \mathbb{R}$ et $x \mapsto H(x)$ est une fonction régulière au profil convergent-divergent. La FIG. 2.5 correspond à un débit $Q = 0.5 \cdot H(0)$ et la condition aux limites imposée est $\bar{u} = 0.5$; en particulier, les états constants ($u \equiv 0.5$ ou $u \equiv 0$) imposés initialement ne sont pas des solutions stationnaires et ne sont donc pas préservés.

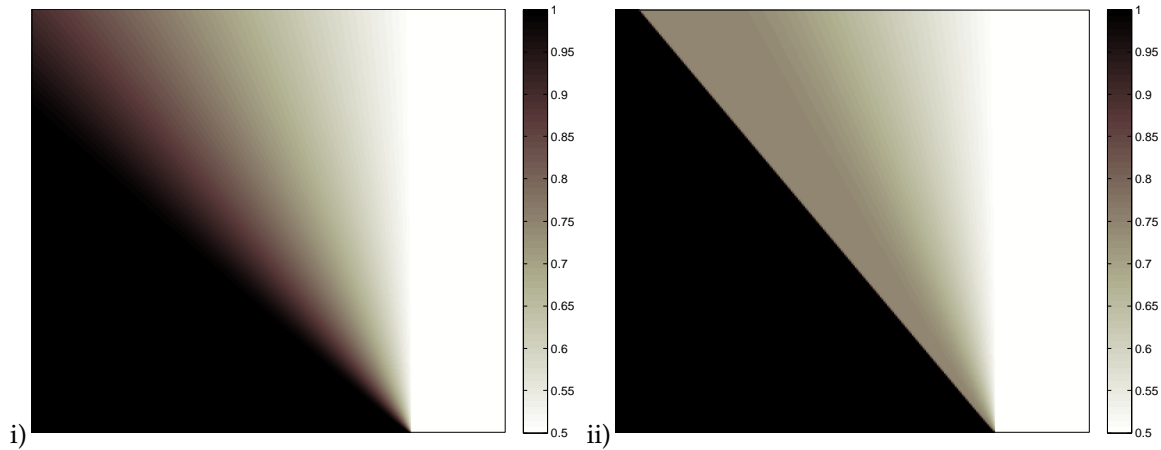


FIGURE 2.4 – Équation de *Lighthill-Whitham-Richards* (trafic routier) : solution du problème de Riemann dans le plan (x, t) pour i) le flux continu $f^{(1)}$ puis ii) le flux discontinu $f^{(2)}$.

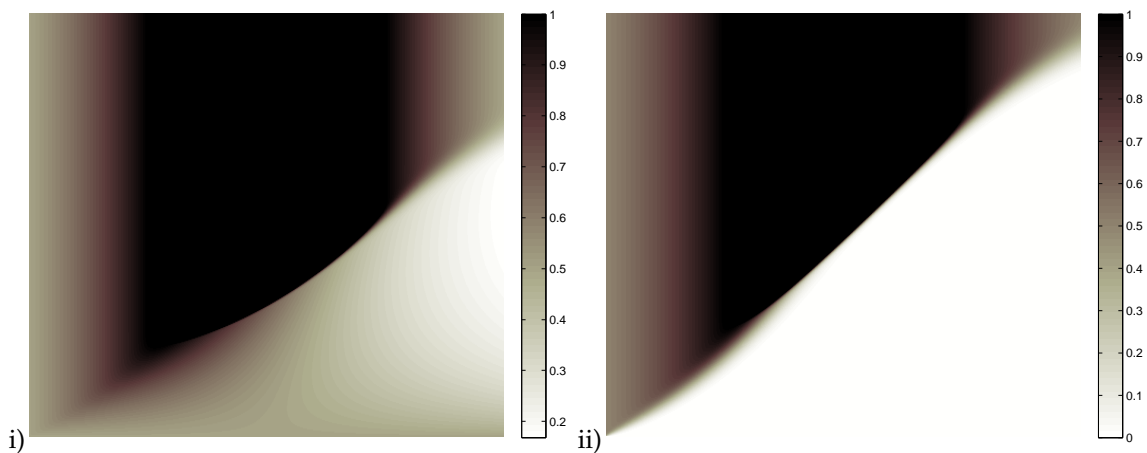


FIGURE 2.5 – Équation de *Buckley-Leverett* avec flux non-autonome discontinu : solution dans le plan (x, t) . Les états constants imposés initialement i) $u = 0.5$ et ii) $u = 0$ ne sont pas des solutions stationnaires et ne sont donc pas préservés.

CHAPITRE 3

MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES AUX SCIENCES DU VIVANT

3.1	MODÉLISATION DU POUMON : RIGIDITÉ BRONCHIQUE ET ÉCHANGES GAZEUX	38
3.1.1	Modèle mécanique simplifié : influence du muscle lisse bronchique	38
3.1.2	Modèle d'échanges gazeux	39
3.1.3	Discussion	40
3.2	MODÉLISATION DU POUMON : ASPECTS NON-LINÉAIRES DES ÉCHANGES GAZEUX	40
3.2.1	Limitation diffusive du transfert d'oxygène	41
3.2.2	Hétérogénéité des échanges gazeux le long de l'acinus pulmonaire	43
3.3	SIMULATION DE SUSPENSIONS PASSIVES : UNE APPROCHE DE TYPE DYNAMIQUE STOKESIENNE	46
3.3.1	Modélisation d'un macro-objet à partir de sphères rigides	46
3.3.2	Évaluation numérique des interactions hydrodynamiques	46
3.4	SIMULATION DE SUSPENSIONS ACTIVES : UNE APPROCHE DIRECTE	48
3.4.1	Aspects hydrodynamiques	48
3.4.2	Aspects chimiotactiques	50

DANS ce chapitre, nous présentons des travaux en sciences du vivant. Cette activité, développée à Orsay, se concentre davantage sur des aspects de modélisation et de calcul scientifique et s'est focalisée sur deux thématiques : la *modélisation de l'appareil respiratoire* et la *simulation de suspensions biomimétiques*. Discutons au préalable des particularités des sciences du vivant, qui modifient l'approche classique de la modélisation.

En sciences du vivant, la *réalité microscopique* est complexe si bien qu'une approche partant d'une description détaillée pour aboutir à une description globale basée sur des observables est difficile. Les *paramètres* définis dans le processus de modélisation sont de *grande variabilité* et les sources d'incertitude induisent la nécessité d'apporter une attention extrême à l'effet des variations de paramètres dans les modèles élaborés. Les *phénomènes sont couplés et interdépendants*, de sorte qu'il est difficile de modéliser les phénomènes individuellement : la modélisation du système global nécessite l'élaboration de modèles multi-compartiments, avec différents niveaux de description, en conservant les effets principaux des interactions entre les phénomènes.

La complexité, la variabilité des paramètres ainsi que la difficulté à définir des observables pour certains systèmes aboutissent à la nécessité d'utiliser plusieurs approches afin d'espérer une compréhension des phénomènes observés. Une première approche, dite *microscopique-macroscopique*, consiste à décrire les phénomènes à l'échelle la plus petite qui permette une description de la réalité par des principes fondamentaux (au sens étymologique), et à en déduire des lois réduites basées sur des quantités macroscopiques observables : en un sens, cela consiste à « homogénéiser » le modèle microscopique pour construire un modèle macroscopique basé sur des lois « effectives ». Cette approche sera adoptée en particulier pour l'étude de suspensions biomimétiques, dans laquelle on cherche à déduire des lois de comportement à l'échelle macroscopique à partir de la description individuelle d'entités dans le fluide ; c'est ce passage microscopique-macroscopique qui constitue le cœur des études en rhéologie et un défi pour les numériciens du point de vue de la simulation directe. Dans d'autres contextes, la description des phénomènes à l'échelle microscopique est si complexe qu'elle nécessite l'introduction d'un grand nombre de paramètres mal identifiés ou aux valeurs incertaines et inobservables. Dans ce cas, on préférera une seconde approche, dite *macroscopique-microscopique*, qui consiste à introduire des quantités globales directement, même si leur lien avec des quantités microscopiques n'apparaît pas clairement dans un premier temps, puis à essayer d'identifier certaines relations fonctionnelles entre ces quantités. Cette approche, qui consiste à confronter le modèle à la réalité et à l'enrichir si nécessaire, sera privilégiée dans la modélisation du poumon, pour lequel la géométrie de l'arbre bronchique, la description du réseau alvéolaire et son intrication avec le réseau sanguin sont si difficiles à appréhender qu'une description à l'échelle de chacun des $300 \cdot 10^6$ alvéoles ou de chacune des 2^{23} bronches est hors de portée. Comme une réponse à l'approche microscopique-macroscopique, cette approche sera également utilisée dans le cas des suspensions biomimétiques puisque les observables macroscopiques obtenus par le calcul direct (tels que la viscosité effective) sont réinterprétés à la lumière de phénomènes décrits à l'échelle microscopique.

3.1 MODÉLISATION DU POUMON : RIGIDITÉ BRONCHIQUE ET ÉCHANGES GAZEUX

La modélisation du système respiratoire est complexe en raison de la géométrie du poumon et des phénomènes non-linéaires sous-jacents. La principale fonction du poumon consiste à permettre l'échange gazeux entre l'air extérieur et le sang qui transporte l'oxygène vers les muscles et les organes. Le sang circule en circuit fermé, isolé du monde extérieur, si bien que le transfert d'oxygène se produit à travers une surface d'échange : la *membrane alvéolo-capillaire*. L'oxygène est transporté de l'extérieur vers les alvéoles à travers l'*arbre bronchique*. Cet arbre est une structure dichotomique d'environ 23 générations, partant de la trachée jusqu'à atteindre 23 niveaux de bifurcations. La partie *advective* est constituée des générations 1 à 15 : l'oxygène est essentiellement transporté par advection. La partie *acinaire* est la zone allant de la génération 16 à 23, caractérisée par l'apparition d'alvéoles associées aux bronches à partir de la génération 16 et jusqu'aux dernières générations auxquelles sont associées un grand nombre d'alvéoles : dans cette zone, le transport d'oxygène est essentiellement diffusif, favorisant le transfert d'oxygène à travers la membrane alvéolo-capillaire. Les échanges gazeux sont favorisés par la surface d'échange entre le sang et les alvéoles : l'aire de la surface alvéolo-capillaire (la somme des surfaces d'échange offertes par les $300 \cdot 10^6$ d'alvéoles) est d'environ 120 m^2 .

La compréhension des mécanismes décrivant le système respiratoire dépend ainsi de deux ingrédients essentiels : la modélisation de la *ventilation mécanique* décrivant les principales données observables et mesurables pour un clinicien (débit, volume) et la modélisation des *échanges gazeux* au niveau de la membrane alvéolo-capillaire. Si les résultats issus de modèles doivent être confrontés à des mesures expérimentales, la phase de modélisation elle-même est toujours délicate : par rapport à un modèle réduit, un modèle riche en paramètres est davantage susceptible de reproduire des données expérimentales car le nombre de degrés de libertés (les paramètres) permet des ajustements facilitant cette reproduction (partielle ou totale) des données observables ; mais cela ne traduit pas nécessairement une compréhension fine des phénomènes essentiels qui pilotent le fonctionnement de l'objet étudié. Dès lors, un compromis est nécessaire afin de construire des mécanismes de compréhension des phénomènes, basés sur une description réduite de paramètres clairement identifiés par les cliniciens et les physiologistes. Dans ce contexte, l'article [15] présenté dans cette section se concentre sur l'influence de certains paramètres mécaniques sur l'efficacité des échanges gazeux.

3.1.1 Modèle mécanique simplifié : influence du muscle lisse bronchique

Les modèles simplifiés en physiologie sont très populaires, voir [BT06] pour une présentation d'une hiérarchie de modèles du système respiratoire, ainsi que [Wes74, Wei63] pour une description détaillée de la physiologie du poumon humain. Décrivons un modèle mécanique simplifié basé sur une représentation du poumon comme un compartiment flexible. Introduisons les paramètres principaux permettant de modéliser le poumon du point de vue de la mécanique (voir FIG.3.1).

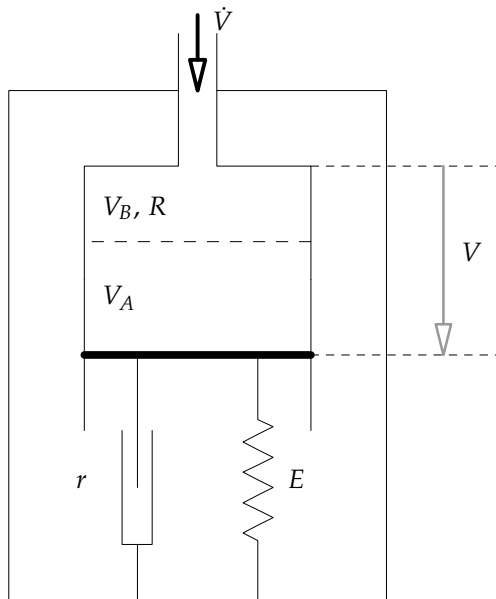


FIGURE 3.1 – Modèle mécanique simplifié du poumon.

Les paramètres mécaniques du modèle réduit sont :

- le volume courant V du poumon et le volume à l'équilibre V_0 ;
- l'inertance I du poumon, liée à la masse pulmonaire déplacée au cours de la respiration ;
- l'élastance E mesurant la raideur liée aux forces de rappel permettant au poumon de revenir spontanément à sa position d'équilibre ;
- la résistance des tissus r , due à la friction entre les tissus du poumon et la paroi thoracique ;
- la résistance des voies aériennes R , due à la friction entre les molécules de gaz et les parois des voies aériennes ;
- la pression extérieure P_{ext} correspondant aux efforts musculaires (en particulier ceux du diaphragme) aboutissant à la déformation de la cage thoracique qui induit l'inspiration (ainsi que l'expiration forcée, notamment à l'exercice).

Les modèles simplifiés utilisés dans la littérature considèrent le poumon comme un système masse-ressort. Ainsi, par le principe fondamental de la dynamique, le modèle le plus simple décrivant le comportement mécanique du poumon est décrit par l'équation différentielle *linéaire*

$$I \cdot \ddot{V} + (R + r) \cdot \dot{V} + E \cdot (V - V_0) = P_{\text{ext}}. \quad (3.1)$$

La définition d'une résistance constante est basée sur l'hypothèse selon laquelle les bronches sont parfaitement rigides. Ce n'est évidemment pas le cas. Dans [15], nous avons pris en compte la déformation des bronches au cours du cycle respiratoire, ce qui aboutit à la définition d'une résistance *non-linéaire* qui permet de conserver une approche de type modèle réduit (au prix de l'introduction d'une non linéarité).

La construction du modèle mécanique non linéaire nécessite d'introduire le *muscle lisse*, qui entoure les bronches, et qui est responsable de la bronchoconstriction¹⁷ : il limite la déformation des bronches en leur conférant une certaine rigidité structurelle (en cas d'hyperactivité, l'action du muscle lisse peut même diminuer le diamètre des bronches à l'inspiration). Néanmoins, son rôle est imparfaitement compris et fait l'objet de vifs débats en médecine. Dans ce travail, nous avons inclus l'action du muscle lisse pulmonaire comme paramètre de la rigidité bronchique. Dans le contexte du modèle simplifié (3.1), nous supposons que la variation de volume pulmonaire, $\delta V := V - V_0$, se répartit entre les bronches et les alvéoles par un paramètre de distribution θ . La variation de volume δV est la somme de δV_A (pour les alvéoles) et δV_B (pour les bronches) :

$$\delta V_A := (1 - \theta) \delta V, \quad \delta V_B := \theta \delta V.$$

Cette approche est basée sur une conservation du volume, en supposant que la déformation des tissus du parenchyme se produit sans variation de volume.

Remarque 3.1 *Le paramètre θ quantifie la distensibilité des parois bronchiques : la valeur neutre de θ correspond à une déformation relative identique pour les bronches et les alvéoles (autrement dit, les bronches sont aussi molles que les alvéoles). On a ainsi $\delta V_A/V_A^0 = \delta V_B/V_B^0$, où $V_{A,B}^0$ désigne le volume alvéolaire ou bronchique au repos. Cette situation correspond à la valeur neutre $\theta_0 \simeq 0.2$. Lorsque $\theta < \theta_0$, on considérera alors que le muscle lisse est actif et, en particulier, lorsque θ est petit, l'activité du muscle lisse est importante puisqu'il tend à empêcher la déformation des bronches.*

Nous supposons maintenant, de manière très simplifiée, que les bronches se déforment de manière homothétique, i. e. sans modification de forme. Comme la résistance des bronches est proportionnelle à L/D^4 (L et D sont respectivement la longueur et le diamètre de la bronche) dans un écoulement de Poiseuille, elle est inversement proportionnelle au volume et on en déduit une expression non linéaire de la résistance :

$$R(V) := \frac{R_0}{1 + \theta(V - V_0)/V_B^0}, \quad (3.2)$$

ce qui induit un modèle mécanique non linéaire incluant la déformation des bronches :

$$I \cdot \ddot{V} + (R(V) + r) \cdot \dot{V} + E \cdot (V - V_0) = P_{\text{ext.}} \quad (3.3)$$

3.1.2 Modèle d'échanges gazeux

Définissons maintenant un critère simple d'efficacité du poumon. Un critère naïf serait de définir une efficacité basée sur la quantité d'air qui pénètre dans le poumon. Mais l'efficacité du processus de ventilation ne repose pas uniquement sur cette quantité mais aussi (et surtout) sur la quantité d'oxygène qui est transférée dans le sang à travers la paroi alvéolo-capillaire. Ce flux d'oxygène est directement lié à la surface d'échange entre les alvéoles et les capillaires et à la quantité d'oxygène dans les alvéoles. La surface d'échange, notée S_A , dépend directement du volume alvéolaire :

$$S_A \propto V_A^{2/3} \propto (V_A^0 + (1 - \theta)(V - V_0))^{2/3}.$$

tandis qu'un modèle d'*appauvrissement de l'oxygène dans les alvéoles* permet d'identifier la concentration moyenne d'oxygène $t \mapsto c(t)$ dans les alvéoles. Ces deux quantités nous ont alors permis de définir et calculer le flux d'oxygène qui passe dans le sang :

$$\dot{Q}(t) = \Lambda (V_A^0 + (1 - \theta)(V(t) - V_0))^{2/3} c(t),$$

où Λ définit une capacité physiologique de diffusion de la membrane. Pour un temps donné, ce modèle fournit une estimation qui caractérise la relation $\theta \mapsto \langle \dot{Q}_\theta \rangle$. Lorsque θ est petit, les voies aériennes sont rigides, l'inspiration n'a que peu d'effet sur le volume de l'arbre bronchique et la résistance des voies aériennes n'est que faiblement affectée par l'augmentation du volume pulmonaire : cette situation peut être induite par un important tonus du muscle lisse qui limite la bronchodilatation passive résultant de la traction élastique exercée par le parenchyme sur les bronches. En conséquence, le volume d'air qui passe dans les voies aériennes est réduit, mais la proportion d'air inspiré qui est disponible dans le volume alvéolaire a augmenté : cela correspond à une augmentation de la surface d'échange. Inversement, lorsque θ est grand, l'arbre bronchique est distensible et se dilate aisément. À l'inspiration, une plus grande quantité d'air entre dans le thorax, mais une moindre proportion atteint les alvéoles. Cela correspond à une augmentation de ce que l'on appelle en physiologie *l'espace mort* et qui est défini comme la région ventilée mais non alvéolée du système respiratoire.

¹⁷. À cet égard, le muscle lisse est directement impliqué dans certaines affections respiratoires, telles que l'asthme : l'utilisation de broncho-dilatateurs permet alors d'inhiber le muscle lisse, augmentant ainsi la lumière bronchique, ce qui favorise la ventilation.

3.1.3 Discussion

En utilisant les valeurs issues de la littérature (en particulier, [Wei63, Wes74, BT06]), le modèle capture numériquement les principales données observables expérimentalement : amplitude des variations de volume (0.5 L au repos, 2.5 L à l'exercice), concentration moyenne en oxygène dans les alvéoles (14 %, contre 20 % dans l'air frais), flux moyen d'oxygène qui diffuse dans le sang ($0.25 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ au repos, $2.5 \text{ L} \cdot \text{min}^{-1}$ à l'exercice).

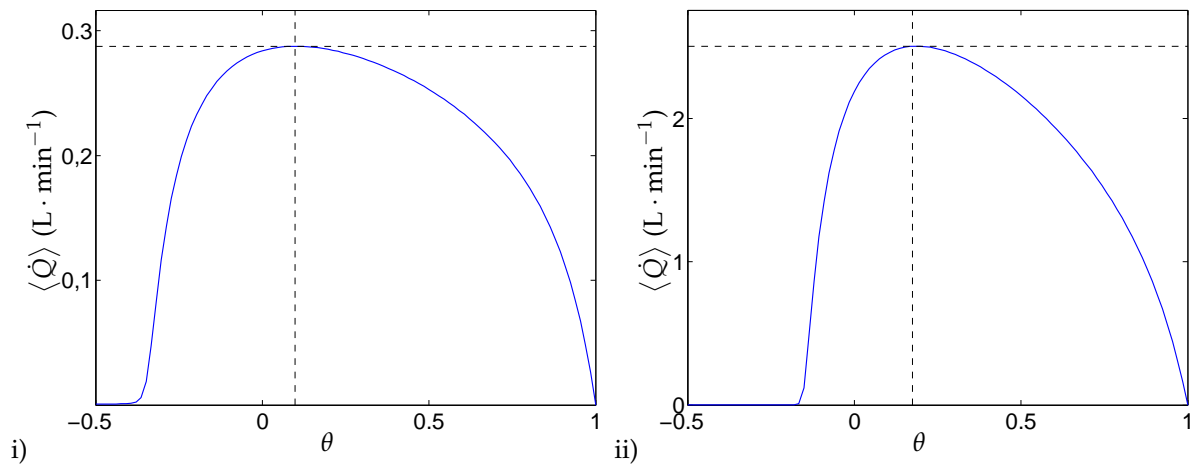


FIGURE 3.2 – Influence de la rigidité bronchique sur l'efficacité du poumon, i) en respiration normale et ii) à l'exercice ; le paramètre θ quantifie la rigidité des bronches tandis que $\langle \dot{Q} \rangle$ désigne le flux moyen d'oxygène qui diffuse dans le sang. Notons que les valeurs négatives de θ traduisent une suractivité du muscle lisse, qui tend à réduire la lumière bronchique pendant les manœuvres respiratoires.

On s'intéresse au rôle de la rigidité bronchique sur l'efficacité du poumon, voir la FIG. 3.2. À l'inspiration, lorsque θ est proche de 0, le volume des bronches ne varie presque pas : la résistance ne diminue que faiblement (i. e. une plus faible quantité d'air est entraînée dans les voies aériennes) mais, par ailleurs, l'augmentation du volume thoracique se produit essentiellement dans le compartiment alvéolaire, ce qui tend à augmenter la surface d'échange. Ce phénomène de compétition entre deux effets antagonistes permet ainsi de définir une efficacité maximale pour une certaine valeur de θ . D'une part, on observe que cette efficacité maximale est atteinte en $\theta_{\text{opt.}} = 0.08$ en respiration normale, $\theta_{\text{opt.}} = 0.16$ à l'exercice. D'autre part, l'efficacité chute brutalement lorsque, à partir de cette efficacité maximale, on rigidifie le système (en diminuant la valeur de θ) : cela signifie que le système est plutôt instable dans cette zone de fonctionnement. Notons que $\theta_{\text{opt.}}$ diffère de la valeur neutre θ_0 correspondant à une déformation relative identique pour les bronches et les alvéoles ; ainsi, le cas $\theta = \theta_{\text{opt.}}$ correspond à une faible déformation des bronches et souligne le rôle actif du muscle lisse comme caractéristique importante de l'efficacité du poumon.

Notons que la courbe d'efficacité reproduit une observation récurrente : une augmentation de la rigidité bronchique, à partir d'une valeur haute, entraîne des conséquences beaucoup plus importantes sur l'efficacité de la ventilation qu'une perturbation de la rigidité bronchique à partir d'une valeur usuelle correspondant à une situation saine. De ce point de vue, la configuration optimale peut être considérée comme dangereuse, car très sensible aux petites perturbations. Cette situation est en accord avec les conclusions de Mauroy et ses co-auteurs [MFAJSo3], qui ont étudié la notion d'optimalité géométrique de l'arbre bronchique par rapport à la résistance globale sous contrainte de volume. À cet égard, la sous-optimalité par rapport au critère d'efficacité, qui est observée en pratique, apparaît comme un compromis entre optimalité et robustesse par rapport aux perturbations. Ces observations sont en faveur d'une hypothèse du rôle structural du muscle lisse bronchique destiné à optimiser les propriétés convectives de l'arbre bronchique.

3.2 MODÉLISATION DU POUMON : ASPECTS NON-LINÉAIRES DES ÉCHANGES GAZEUX

Nous décrivons maintenant un modèle original, détaillé dans [16], quantifiant le transfert d'oxygène dans le sang, basé sur l'utilisation de paramètres physiologiques documentés. Les enjeux de cette étude résident dans l'identification et la compréhension de mécanismes non-linéaires régissant le transfert d'oxygène dans le sang. Cette approche vise à enrichir le modèle d'échanges gazeux simplifié, afin d'intégrer des effets non linéaires et d'identifier la sensibilité du transfert gazeux par rapport aux paramètres dans des régimes de fonctionnement usuels. Notons que, dans la littérature, le transfert d'oxygène est estimé par une formule simplificatrice, due à Roughton & Forster [RF57], qui aboutit souvent à des ajustements de paramètres *ad hoc* lorsque l'on vise à intégrer des phénomènes non-linéaires.

3.2.1 Limitation diffusive du transfert d'oxygène

Saturation de l'hémoglobine

Pour estimer le flux d'oxygène qui passe dans le sang \dot{Q} , on introduit le temps de transit τ_b des globules rouges dans la zone d'échange et nous considérons, comme dans [ST11], que le phénomène suivant se produit périodiquement à chaque période τ_b : une quantité V_c de sang veineux (le volume capillaire) est apportée instantanément au voisinage des alvéoles, reste dans la zone d'échange pendant une durée τ_b , puis est évacuée et remplacée par la même quantité de sang veineux. Le transfert net d'oxygène est la différence entre la quantité totale d'oxygène à l'issue de ce cycle et la quantité initiale. De plus, nous supposons [BGA03] que la pression partielle en oxygène dans les alvéoles P_A est constante et uniforme, que les propriétés de diffusion de la barrière air-sang sont constantes et uniformes le long des capillaires, et que la réaction chimique de l'oxygène avec l'hémoglobine est instantanée. Ainsi, dans le sang, l'oxygène existe sous deux formes :

- sous forme *native* (ou libre) : sa concentration dans le plasma, notée γ , est liée à la solubilité σ de l'oxygène dans le plasma et à la pression partielle P de l'oxygène dans le plasma par la relation $\gamma := \sigma P$;
- sous forme *combinée* (captée par l'hémoglobine) : sa concentration s'écrit $4Cf(P)$ où C est la concentration totale d'hémoglobine, le coefficient 4 est le nombre maximal de molécules d'oxygène qu'une molécule d'hémoglobine peut transporter et $P \mapsto f(P) \in [0, 1]$ quantifie la saturation de l'hémoglobine en oxygène. Cette *fonction de saturation de Hill* est bien identifiée dans la littérature [KS98], voir Fig. 3.3 i. :

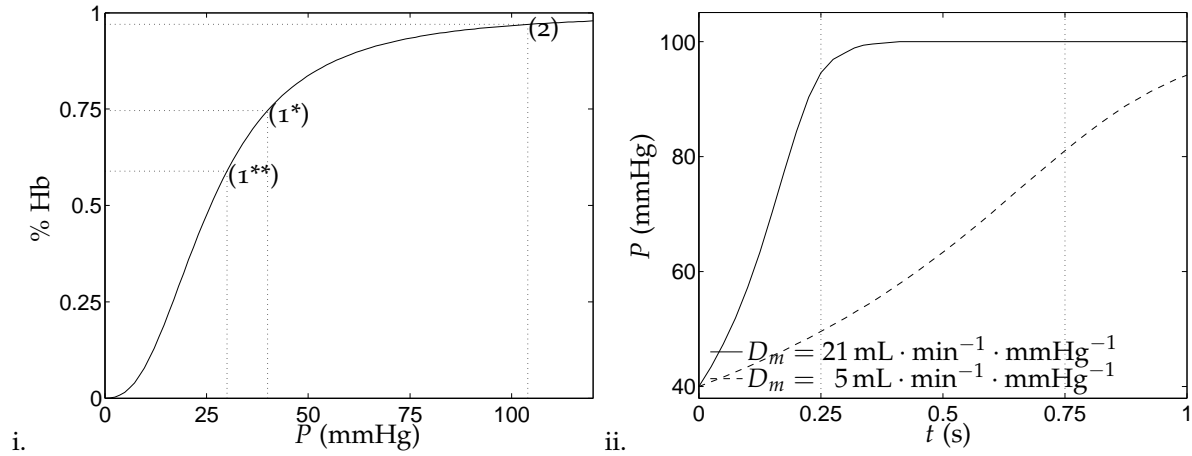


FIGURE 3.3 – Saturation en oxygène de l'hémoglobine : i. courbe de Hill $P \mapsto f(P)$ – la pression partielle en oxygène dans le sang veineux est d'environ 40 mmHg au repos (1^*) correspondant à une saturation de l'hémoglobine à 75 %, et 30 mmHg à l'exercice (1^{**}) correspondant à une saturation de l'hémoglobine à 60 % ; elle atteint 100 mmHg en sortie du capillaire (2) correspondant à une saturation de l'hémoglobine à 97 %. ii. : évolution en temps de la pression partielle en oxygène P dans les capillaires – la pression partielle atteint la valeur P_A^* à $t = 0.75$ s (au repos) ou $t = 0.25$ s (à l'exercice) pour une valeur usuelle de la capacité diffusive de la membrane ; en revanche, l'équilibre des pressions partielles n'est pas atteint lorsque la capacité diffusive de la membrane est dégradée.

Le flux instantané d'oxygène à travers la membrane par diffusion passive est proportionnelle à la différence des pressions partielles (P_A dans les alvéoles, P dans le sang), et cette relation implique une quantité cruciale D_m qui est la capacité diffusive de la membrane alvéolo-capillaire. La concentration d'oxygène dans le sang sous les deux formes (libre et capturée par l'hémoglobine) s'écrit $\sigma P + 4Cf(P)$, de sorte que l'équilibre de la quantité totale d'oxygène s'écrit :

$$V_c \frac{d}{dt} (\sigma P + 4Cf(P)) = D_m(P_A - P), \quad \text{soit} \quad \left(1 + 4C\sigma^{-1}f'(P)\right) \dot{P} = \frac{D_m}{\sigma V_c} (P_A - P). \quad (3.4)$$

Notons que la présence d'hémoglobine tend à ralentir la mise à l'équilibre de P vers P_A : en captant l'oxygène, elle joue le rôle de *pompe* active qui favorise le transfert d'oxygène par le maintien d'une différence de pression.

Intéressons-nous maintenant à deux aspects des échanges gazeux : d'une part, la détermination du transfert d'oxygène et, d'autre part, la possible limitation diffusive du transfert d'oxygène.

Transfert d'oxygène

Remarquons d'abord qu'en supposant que l'équilibre entre les pressions partielles est atteint durant le temps τ_b pendant lequel le sang veineux est en contact avec les alvéoles, la quantité d'oxygène qui a été transférée *ne dépend pas de la cinétique*. Si nous notons V_c le volume capillaire, le taux de transfert d'oxygène peut être estimé de la façon suivante : une quantité V_c de sang veineux est apportée instantanément au voisinage des alvéoles, puis reste dans ce voisinage pendant un temps τ_b , permettant aux échanges de se

produire, puis est finalement évacuée et remplacée par la même quantité de sang veineux ; ce phénomène est reproduit périodiquement. Dans ce contexte, le transfert net d'oxygène correspond à la différence entre la quantité totale à la fin du cycle et la quantité totale en début de cycle. Comme la pression d'oxygène initiale dans le plasma est P_V , et la pression finale est P_A (après un temps τ_b), et comme la concentration totale d'oxygène, sous formes native et combinée, pour une pression partielle d'oxygène dans le plasma P , est $\sigma P + 4Cf(P)$, on obtient alors une estimation de la quantité d'oxygène transférée dans le sang :

$$\dot{Q} = \frac{V_c}{\tau_b} \left[\sigma P + 4Cf(P) \right]_{P_V}^{P_A} := \frac{V_c}{\tau_b} (\sigma P_A - \sigma P_V + 4C(f(P_A) - f(P_V))). \quad (3.5)$$

Ce modèle simple permet de retrouver, sans aucun ajustement artificiel de paramètres, l'ordre de grandeur du taux de transfert d'oxygène au repos, en utilisant les valeurs usuelles de la littérature [BT06, CCM06, KS98] : $\dot{Q} = 250 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$, en accord avec les observations physiologiques [GH02, Wei84, WSF05].

Limitation diffusive du transfert d'oxygène

L'estimation proposée précédemment est basée sur l'hypothèse que l'équilibre entre les pressions partielles est atteint pendant le temps que le sang passe au voisinage des alvéoles. Cette hypothèse est robuste : dans des conditions normales, au repos, le temps nécessaire à la réalisation de cet équilibre (0.25 s) est d'environ le tiers du temps disponible (0.75 s) (voir la Fig. 3.3). Cependant, ce fait peut être invalidé dans certaines situations, par exemple :

1. si D_m est réduit (par exemple, dans le cas d'emphysème), le processus est ralenti, et le temps nécessaire à la réalisation de l'équilibre peut alors devenir supérieur à τ_b ; la Fig. 3.3 présente une situation pour laquelle D_m passe de $21 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{mmHg}^{-1}$ (valeur usuelle) à $5 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1} \cdot \text{mmHg}^{-1}$;
2. si τ_b est réduit significativement (par exemple durant l'exercice), cela peut diminuer le temps nécessaire à la réalisation de l'équilibre ;
3. si V_c augmente, la quantité d'oxygène nécessaire à la réalisation de l'équilibre augmente.

Le modèle doit donc être étendu afin de prendre en compte cette possible mise en défaut de l'équilibre des pressions partielles durant le temps disponible τ_b . Cela est obtenu par la résolution de l'équation (3.4) sur un intervalle de temps $(0, \tau_b)$, à partir d'une valeur initiale fixée à la pression partielle en oxygène du sang veineux, i. e. $P(0) = P_V$. Si on note $P_A^* := P(\tau_b)$ la valeur de P au temps τ_b , le transfert d'oxygène correspondant est alors

$$\dot{Q} = \frac{V_c}{\tau_b} \left[\sigma P + 4Cf(P) \right]_{P_V}^{P_A^*} := \frac{V_c}{\tau_b} (\sigma P_A^* - \sigma P_V + 4C(f(\sigma P_A^*) - f(\sigma P_V))).$$

Remarquons que si l'équilibre des pressions partielles est atteint, i. e. $P_A^* = P_A$, on retrouve alors le modèle précédent (sans limitation diffusive) mais la forme générale doit être conservée si l'on souhaite modéliser des pathologies ou des situations extrêmes (réduction drastique de D_m ou de τ_b durant l'exercice etc.). Pour un régime donné caractérisé par une ventilation périodique contrôlée par les muscles abdominaux (dont l'action est modélisée par P_{ext}), de période T , on définit alors $\langle \dot{Q} \rangle$ la moyenne en temps du flux d'oxygène qui passe dans le sang : c'est cette quantité qui définit la fonction utilité du poumon dans les études suivantes.

Discussion

Les résultats numériques permettent de reproduire qualitativement et quantitativement les principales données observables telles que la variation de volume, le débit, la concentration alvéolaire moyenne et le flux moyen d'oxygène transféré dans le sang. Nous nous sommes également intéressés à la dépendance de la fonction utilité $\langle \dot{Q} \rangle$ par rapport aux variations relatives d'un ensemble de paramètres. La caractéristique la plus frappante, parmi les résultats, est l'absence de sensibilité par rapport à la capacité diffusive de la membrane alvéolo-capillaire D_m au repos, dans des conditions normales de fonctionnement. C'est une conséquence directe de la mise à l'équilibre des pressions partielles en un temps qui est beaucoup plus faible que le temps de transit τ_b . Le système est très robuste, de ce point de vue : la membrane alvéolo-capillaire peut être dégradée jusqu'à un certain point (i. e. D_m peut être réduit de façon importante) sans effet significatif sur le transfert d'oxygène. Notons que cette robustesse est typique des conditions de fonctionnement au repos. À l'exercice, avec une fréquence cardiaque plus élevée ($\tau_b \simeq 0.25 \text{ s}$), cette zone de sécurité n'existe plus, et une diminution de la capacité diffusive de la membrane dégrade le transfert d'oxygène. Ces résultats sont synthétisés par la FIG. 3.4 (non publiée).

Une autre source de dégénérescence repose sur la forme plate de la courbe de Hill au voisinage de la pression d'équilibre entre les pressions partielles (100 mmHg). Si l'on néglige la limitation diffusive, le flux moyen d'oxygène transféré dépend de la fonction de saturation f évaluée en $P_A = cP_{\text{atm}}$, où c désigne la

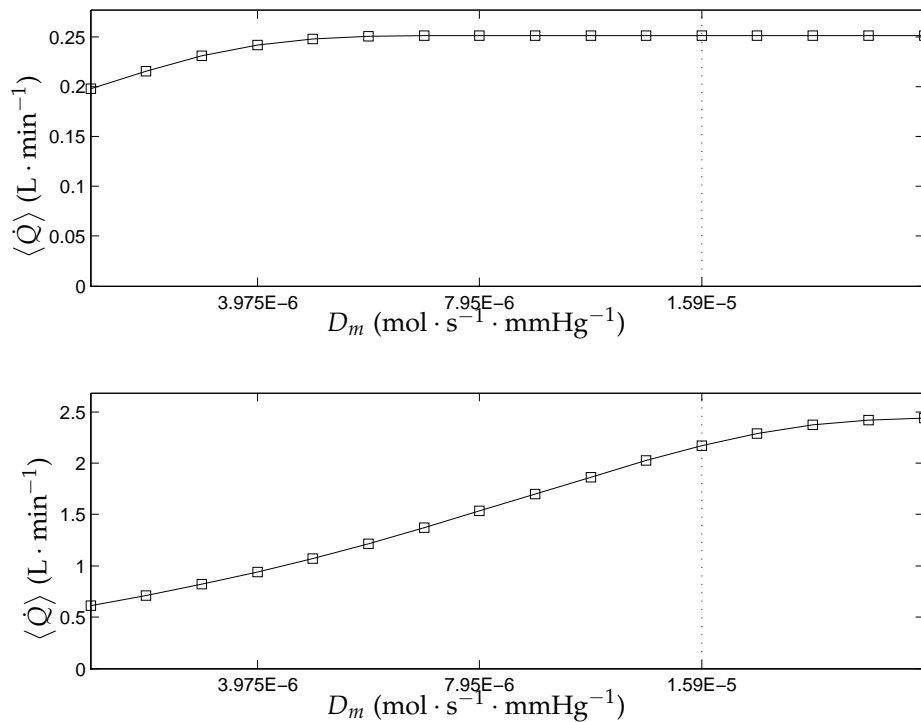


FIGURE 3.4 – Modèle intégré : flux moyen d’oxygène transféré dans le sang comme une fonction de la capacité diffusive de la membrane alvéolo-capillaire au repos (h.) et à l’exercice (b.).

concentration d’oxygène dans l’air alvéolaire (d’environ 14 %) et P_{atm} la pression atmosphérique. Comme cela est illustré sur la FIG. 3.3, cette valeur est presque constante lorsque la pression partielle d’oxygène est plus grande que 70 mmHg, ce qui correspond à une concentration alvéolaire en oxygène d’environ 10%. Le transfert d’oxygène est donc largement insensible à la concentration alvéolaire moyenne si celle-ci reste supérieure à 10 %. Cela explique pourquoi *la sensibilité par rapport aux paramètres mécaniques pour un patient sain au repos est faible*. Par exemple, une augmentation de l’élastance entraîne mécaniquement une diminution du volume courant et, en conséquence, du renouvellement de l’oxygène par ventilation et, finalement, de la concentration alvéolaire. Mais tant que cette valeur (qui est typiquement de 15 %) reste au-dessus de 10 %, cela n’affecte pas le transfert d’oxygène de façon significative.

3.2.2 Hétérogénéité des échanges gazeux le long de l’acinus pulmonaire

Afin de décrire l’hétérogénéité de la distribution de l’oxygène dans le poumon, nous introduisons un modèle EDP basé sur la dimension longitudinale x de l’arbre bronchique, structure dichotomique de 23 générations. À notre connaissance, Paiva & Engel [PE84] ont été les premiers à proposer un modèle EDP afin d’étudier cette hétérogénéité durant le processus respiratoire : une équation de convection-diffusion pour la concentration d’oxygène est proposée bien que le modèle contienne de sérieuses limitations : absence de terme source modélisant l’absorption d’oxygène (la concentration est prescrite en bout d’arbre), absence de modèle mécanique (une variation de volume artificielle est imposée). Cette approche a été étendue par Fouquier [Fou10] pour prendre en compte le transfert d’oxygène. Une approche similaire a été proposée dans [ST11]. Néanmoins, les équations que nous obtenons présentent des différences importantes : le terme source décrivant les échanges gazeux le long de l’arbre dans l’acinus (partie alvéolée de l’arbre bronchique) est estimé à partir du modèle non-linéaire présenté dans la sous-section précédente, et l’ensemble des équations lui-même est obtenu de manière très différente, de sorte que le modèle est complètement conservatif (contrairement aux modèles proposés dans [Fou10, ST11]) pour les quantités d’air et d’oxygène, fournissant ainsi des propriétés consistantes d’un point de vue physique : principe du maximum et inégalité de Jensen.

Modèle EDP

Le cœur de cette approche repose sur quatre quantités géométriques qui peuvent être définies localement le long de l’arbre bronchique (voir [WSF05, Wei84, PE84]) :

1. la *longueur moyenne de chaque génération* est la longueur du trajet, de la trachée à la fin de la génération terminale, construite sur ces données physiologiques ;

2. la *section transverse*, notée S , correspond à la section transverse totale disponible pour le flux longitudinal. Près de l'entrée, avant la première bifurcation, cela correspond simplement à la section de la trachée, tandis qu'à la génération n (après n bifurcations), elle est fixée 2^n fois la section transverse d'une bronche de cette génération. Cette variable est particulièrement documentée dans la littérature ;
3. le *volume linéique* \tilde{V} correspond au volume du poumon par unité de longueur longitudinale, incluant le volume de tous les alvéoles connectés aux bronches de chaque génération. Notons que pour la *partie conductive* (i. e. non alvéolée, de la génération 1 à 15), cette donnée est égale à la variable précédente S , tandis qu'elle devient beaucoup plus grande lorsque l'on entre dans la *partie acinaire* (i. e. alvéolée, de la génération 16 à 23).
4. la *surface d'échange linéique* $\tilde{\Sigma}$ correspond à la surface des alvéoles disponible pour les échanges gazeux par unité de longueur. Cette donnée, homogène à une longueur, est égale à 0 pour la partie conductive, et commence à augmenter lorsque l'on entre dans la zone acinaire. La surface alvéolaire totale, d'environ 120 m^2 , est distribuée par génération en proportion de la surface bronchique, comme cela est suggéré dans les modèles morphométriques [WSFo5].

Les quantités définies ci-dessus vérifient par construction

$$\int_0^L \tilde{V}(x, t) dx = V(t), \quad \int_0^L \tilde{\Sigma}(x, t) dx = \Sigma(t),$$

où $V(t)$ est le volume total de l'air contenu dans les poumons, $\Sigma(t)$ est la surface totale d'échange. En notant u la vitesse longitudinale de l'air le long de l'arbre, le modèle EDP est obtenu par conservation des quantités d'air, considéré comme incompressible, et d'oxygène :

$$\partial_t(\tilde{V}) + \partial_x(Su) = 0, \quad (3.6)$$

$$\partial_t(\tilde{V}c) + \partial_x(Scu) - D_{\text{O}_2}\partial_x(S\partial_x c) = -\frac{\tilde{\Sigma}}{\Sigma}\dot{q}(c), \quad (3.7)$$

où $\dot{q}(c)$ décrit le flux d'oxygène qui passe dans le sang, défini selon l'approche développée dans le modèle intégré présenté dans la sous-section précédente (par simplicité, nous négligeons les phénomènes de limitation cinétique dans la présentation bien que leur intégration dans le modèle EDP ne pose aucune difficulté) :

$$\dot{q}(c) := \frac{V_c}{\tau_b} (\sigma c P_{\text{atm}} - \sigma P_V + 4C(f(\sigma c P_{\text{atm}}) - f(\sigma P_V))). \quad (3.8)$$

Les équations (3.6) et (3.7) modélisent ainsi le transport advectif de l'air et le transport advectif-diffusif de l'oxygène (incluant le terme de perte dû au transfert d'oxygène dans le sang) le long de l'arbre bronchique.

Remarque 3.2 *Le modèle repose sur une hypothèse d'uniformité de la concentration d'oxygène dans la direction transverse. Cette hypothèse appelle deux remarques importantes : d'une part, elle restreint cette approche à une situation géométrique régulière, dont les caractéristiques et les variables dynamiques ne dépendent que de la dimension longitudinale ; d'autre part, elle induit qu'au niveau d'une bronche individuelle alvéolée, la concentration est uniforme dans chaque section, y compris dans les alvéoles reliés à la bronche de même abscisse. Cette dernière hypothèse peut être justifiée en considérant le coefficient de diffusion de l'oxygène dans l'air, qui est $D_{\text{O}_2} = 2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, ainsi que la direction transverse d'ordre $h = 1 \text{ mm}$: on obtient alors un temps caractéristique de $h^2/D_{\text{O}_2} = 0.05 \text{ s}$, de sorte que la diffusion passive assure l'uniformité locale quasi-instantanée dans la direction transverse.*

Bilan sur la quantité d'oxygène et lien avec le modèle intégré

Le bilan sur la quantité d'oxygène est réalisé par intégration l'équation (3.7) sur $[0, L]$:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_0^L (\tilde{V}c)(x, t) dx \right) = \mathcal{F}_{\text{in}}(t) - \mathcal{F}_{\text{out}}(t) - \dot{Q}(t)$$

où $\mathcal{F}_{\text{in}}(t)$ et $\mathcal{F}_{\text{out}}(t) \equiv 0$ représentent le flux total $\mathcal{F}(\cdot, t)$ (advectif et diffusif) à l'entrée (en $x = 0$) et au bout de l'arbre (en $x = L$) et où le flux d'oxygène transféré dans le sang est défini par

$$\dot{Q}(t) := \int_0^L \frac{\tilde{\Sigma}(x, t)}{\Sigma(t)} \dot{q}(c(x, t)) dx.$$

Remarque 3.3 (Principe du maximum) *Le flux d'oxygène transféré dans le sang, $\dot{Q}(t)$ peut être interprété comme l'espérance de $\dot{q}(c)$ selon la mesure de probabilité $\tilde{\Sigma}(x, t) dx / \Sigma(t)$ sur $[0, L]$. Notons que, comme \dot{q} est croissante, on a*

$$\dot{Q} \in [\dot{q}(c_{\text{min}}), \dot{q}(c_{\text{max}})].$$

Remarque 3.4 (Inégalité de Jensen) Comme $c \mapsto \dot{q}(c)$ est concave dans la zone d'intérêt, l'inégalité de Jensen s'écrit

$$\dot{Q}(t) \leq \dot{q}(\bar{c}(t)), \quad \text{avec} \quad \bar{c}(t) = \int_0^L \frac{\tilde{\Sigma}(x,t)}{\Sigma(t)} c(x,t) dx,$$

\bar{c} étant la valeur moyenne instantanée de la concentration d'oxygène. Notons également que cette inégalité est stricte dès lors que la concentration n'est plus uniforme. Cette remarque jette une lumière sur une différence par rapport au modèle intégré construit en sous-section 3.1.2 : ce dernier est basé sur le fait que la quantité d'oxygène transférée est estimée par $\dot{q}(\bar{c})$, où \bar{c} est la valeur moyenne de c dans tout le poumon. Cette approche serait exacte si \dot{q} était affine mais, comme elle est strictement concave dans la zone d'intérêt, le modèle intégré surestime systématiquement ce transfert.

Discussion

Le modèle EDP fournit une information sur la distribution de l'oxygène le long de l'arbre bronchique. La FIG. 3.5 (h.) représente, pour chaque génération, la concentration moyenne locale en oxygène, ainsi que les valeurs extrêmes durant le cycle de ventilation. La concentration moyenne est quasiment uniforme dans la partie conductive, jusqu'à la 15ème génération, diminue lorsque l'on entre dans la zone acinaire, et reste quasiment uniforme et constante en temps dans les dernières générations.

Notons que la valeur de 14 % obtenue au bout de l'arbre, où se produit l'essentiel du transfert d'oxygène, correspond à une pression partielle de $0.14 \times 760 \text{ mmHg} \simeq 100 \text{ mmHg}$, en accord avec les valeurs documentées dans la littérature, voir [Wes74, GH02, BT06]. En particulier, l'intérêt de ce modèle réside dans la sa capacité à déterminer la valeur bien connue de la concentration moyenne en oxygène dans les alvéoles, environ 14 %, alors que le modèle intégré tend à surestimer cette valeur. La FIG. 3.5 (b.) détaille les différentes contributions des différentes générations en transfert d'oxygène. Comme cela est attendu, l'essentiel des surfaces d'échange est localisé dans les deux dernières générations de sorte que le transfert d'oxygène est essentiellement concentré dans ces générations et que la contribution des régions proches de l'entrée de l'acinus est très faible. Qualitativement, nos résultats sont proches de ceux parus dans [ST11]. Le modèle nous a aussi permis d'étudier l'hypothèse du phénomène d'*écrantage diffusif* [FFSo3], i. e. la possibilité que le transfert d'oxygène soit significativement affecté par le fait que la zone d'échange localisée dans les dernières générations ne participe que faiblement au transfert d'oxygène, fournissant ainsi une réserve capacitaire naturelle pour le transfert d'oxygène à l'exercice. Clairement, ce phénomène n'est pas identifié dans les régimes que nous avons considérés, à l'instar des résultats publiés dans [ST11]. Ainsi, le transfert d'oxygène ne joue pas un rôle significatif dans la diminution de la pression partielle d'oxygène le long de l'arbre. Mais, contrairement aux modèles précédents, le critère que nous utilisons ne dépend pas uniquement de l'hétérogénéité de la concentration d'oxygène le long de l'arbre mais aussi d'une étude quantitative du transfert d'oxygène.

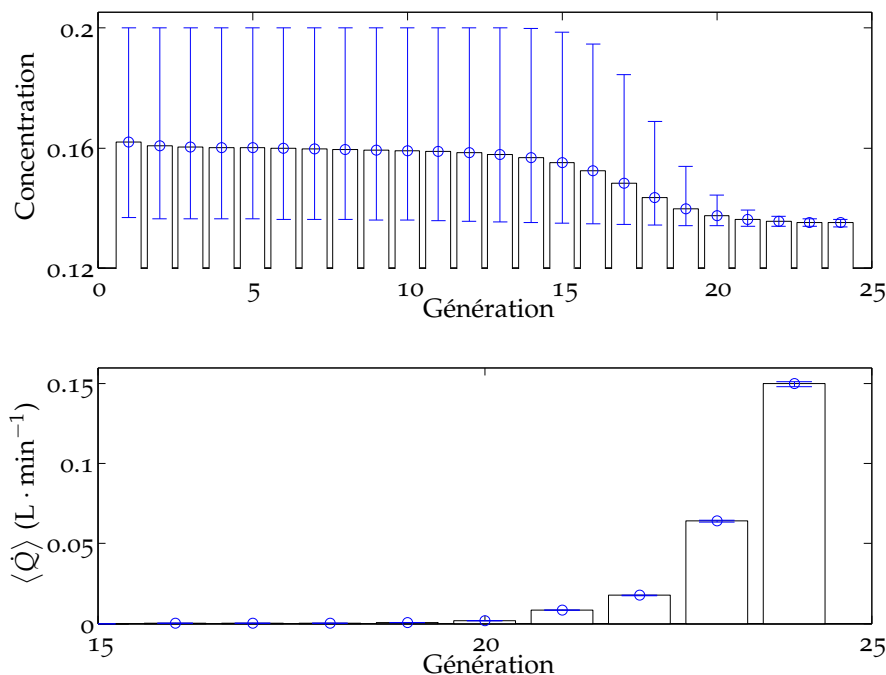


FIGURE 3.5 – Modèle EDP : concentration moyenne en oxygène et flux moyen d'oxygène transféré dans le sang par génération, au repos. Les cercles indiquent la valeur moyenne sur un cycle de respiration, tandis que la limite supérieure (resp. inférieure) indique la valeur maximale (resp. minimale) de la concentration au cours du cycle.

3.3 SIMULATION DE SUSPENSIONS PASSIVES : UNE APPROCHE DE TYPE DYNAMIQUE STOKESIENNE

Les approches théoriques visant à déterminer le comportement de suspensions d'entités rigides ou déformables, passives ou actives, ont longtemps été limitées à l'analyse de suspensions diluées. Cette approche a commencé avec les travaux fondateurs d'Einstein [Eino6] sur la viscosité effective d'une suspension diluée de sphères rigides et, depuis, elle a été complétée par de nombreux travaux (Batchelor [Bat74], Brenner [Bre74], Jeffrey & Acrivos [JA76], Russel [Rus80], Davis & Acrivos [DA85]). Du point de vue de la prédiction, la plupart de ces travaux s'intéressent à des suspensions aux concentrations solides faibles, et dont le comportement est essentiellement déterminé par les interactions par paire. Lorsque l'on s'intéresse à des suspensions denses, une nouvelle méthodologie est nécessaire, afin de dépasser les deux difficultés majeures suivantes :

- la détermination des interactions (hydrodynamiques) multi-corps entre les particules,
- la détermination de la distribution en espace et en temps des entités.

La détermination des interactions hydrodynamiques entre les particules contient deux types de difficultés :

- dans le cas de suspensions denses, les forces de lubrification jouent un rôle essentiel dans la dynamique de la macro-structure. Ces forces sont dues à la présence d'une fine couche de fluide visqueux entre les entités en quasi-contact. Un effet majeur de la lubrification réside dans le fait que le mouvement relatif entre deux entités tend vers 0 lorsque leur distance tend vers 0.
- les interactions à longue portée résultent de toutes les perturbations du champ de vitesse due à la présence des entités évoluant dans le fluide. Elles soulignent l'importance des interactions multi-corps.

De plus, la microstructure ne peut être spécifiée *a priori* mais doit être considérée comme une inconnue supplémentaire du problème : les entités évoluent dans le fluide, soumises non seulement aux forces non-hydrodynamiques (qui peuvent être modélisées très simplement dans certains cas), mais aussi aux forces hydrodynamiques (qui peuvent être difficiles à identifier, comme souligné précédemment).

Du point de vue du calcul scientifique, pour un modèle fluide (par exemple les équations de Stokes) et un modèle solide (par exemple, contrainte de mouvement rigide pour des objets délimités par une frontière) nous distinguons les approches *directes*, basées sur le calcul effectif de l'écoulement fluide et de l'interaction avec les objets décrits individuellement, des approches basées sur des *approximations* visant à réduire les coûts de calculs au prix de simplifications physiques. À cet égard, les méthodes directes pour des suspensions avec des concentrations solides *denses* sont coûteuses et des méthodes d'approximation sont parfois nécessaires pour tenter de décrire le comportement global d'une suspension. En ce sens, l'article [17] présenté dans cette section propose une méthode de simulation *approchée* pour des suspensions passives 3D tandis que le travail présenté en section 3.4 est basé sur une approche *directe* pour des suspensions actives 2D.

3.3.1 Modélisation d'un macro-objet à partir de sphères rigides

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la simulation de suspensions passives d'entités telles que des sphères, des globules rouges, des chaînes de polymère et, d'une manière générale des objets rigides dans un fluide visqueux, à partir d'une approche *granulaire* mise en place dans le cadre du développement d'un code de calculs C++, développé par Aline Lefebvre [Lef07]¹⁸.

Un macro-objet est modélisé à partir d'un assemblage de sphères rigides dont la cohésion est assurée par la définition d'interactions. À titre d'illustration, un globule rouge, dont la forme caractéristique est un discoïde biconcave, est « fabriqué » en définissant des interactions à deux et trois corps entre une sphère, située au centre, et 10 sphères périphériques pour lesquelles on autorise une interpénétration apparente (en définissant un rayon interne pour les sphères appartenant au même globule rouge, et un rayon extérieur pour la gestion des contacts avec les autres macro-objets). La stabilité de la forme biconcave du macro-objet est assurée par la définition de forces d'interaction entre les sphères, en particulier des interactions à deux corps entre la sphère centrale et les sphères périphériques, des interactions à deux corps entre sphères périphériques adjacentes, et interactions à trois corps entre sphères périphériques adjacentes (afin d'assurer la rigidité de l'objet). La sphère centrale est de taille plus petite que les sphères périphériques, ce qui confère au macro-objet une forme biconcave, voir les FIG. 3.6 et 3.7. À ce stade, la dynamique aboutissant à la formation des objets n'a pas de sens physique : c'est une étape préalable à la modélisation numérique du fluide environnant.

3.3.2 Évaluation numérique des interactions hydrodynamiques

Nous nous sommes intéressés au développement d'une méthode permettant d'étudier le comportement de suspensions denses d'entités rigides (telles que celles qui ont été décrites ci-dessus) dans un fluide visqueux, en portant une attention particulière aux interactions à courte portée entre ces entités (forces de contact, forces de lubrification). En ce qui concerne le fluide lui-même, la stratégie consiste à éviter le calcul

¹⁸. Code SCOPI : <https://www.projet-plume.org/relier/scopi>

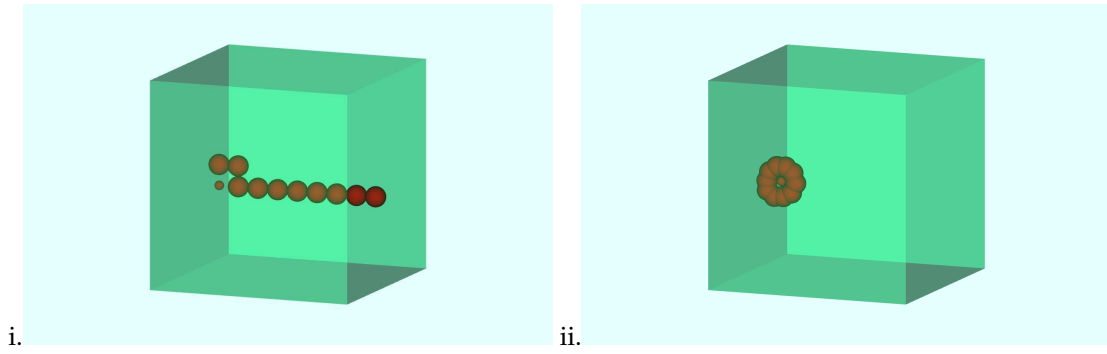


FIGURE 3.6 – Modélisation d'un globule rouge : la forme biconcave est définie par les interactions à deux ou trois corps entre des sphères appartenant au macro-objet et par l'utilisation d'un algorithme de contact : i. configuration initiale et ii. configuration finale des sphères, aboutissant à la définition d'un objet stable de forme biconcave.

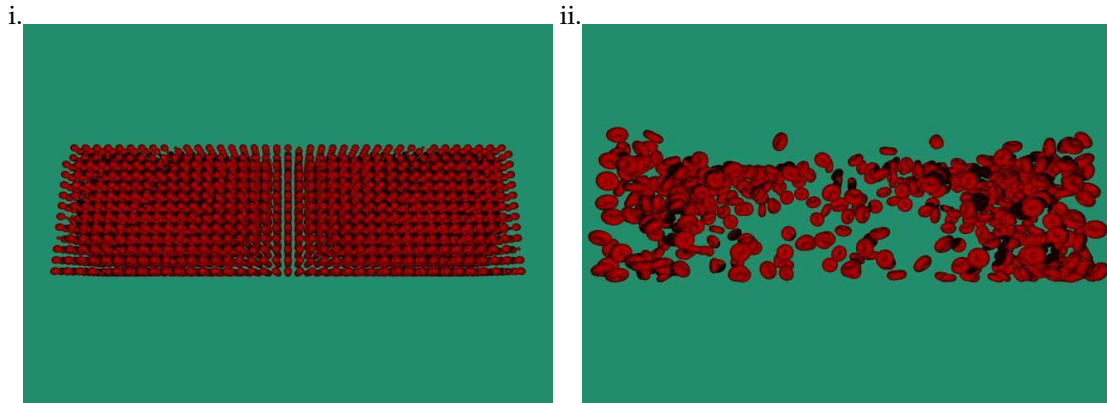


FIGURE 3.7 – Formation de 500 globules rouges : i. configuration initiale et ii. configuration finale des sphères.

direct et coûteux de la solution des équations de Stokes, en déterminant uniquement les forces d'interaction qui jouent un rôle significatif dans le comportement général de la suspension.

Le problème hydrodynamique est, de manière inhérente, un phénomène multi-corps avec des singularités à longue et courte distances. Happel & Brenner [HB73] ont montré que, dans le cas de particules sphériques situées à une position \mathbf{q} dans un écoulement de Stokes en cisaillement, on peut relier la vitesse des particules \mathbf{U} aux forces d'interactions hydrodynamiques \mathbf{F} par une relation instantanée linéaire

$$\mathbf{F} = -\mathcal{R} \cdot (\mathbf{U} - \mathcal{E} \cdot \mathbf{q}) + \Phi \cdot \mathcal{E},$$

où \mathcal{E} est le tenseur (connu) de cisaillement de l'écoulement non perturbé ; \mathcal{R} (dite *matrice de résistance*) et Φ (dite *matrice de résistance au cisaillement*) ne dépendent que de la position courante des particules. On peut également inverser la relation entre les forces hydrodynamiques et le champ de vitesse par

$$\mathbf{U} = -\mathcal{M} \cdot (\mathbf{F} - \Phi \cdot \mathcal{E}) + \mathcal{E} \cdot \mathbf{q},$$

où $\mathcal{M} = \mathcal{R}^{-1}$ est appelée *matrice de mobilité*. L'enjeu est alors de construire, à chaque pas de temps, cette matrice de résistance (ou de mobilité) qui ne dépend que de la position des sphères afin d'évaluer le vecteur vitesse \mathbf{U} au temps courant, puis de mettre à jour la position des particules. Notons que l'hypothèse d'additivité par paire des interactions peut être définie de deux manières différentes :

- par additivité dans la construction de \mathcal{M} , i. e. par la superposition des perturbations des vitesses ;
- par additivité dans la construction de \mathcal{R} , i. e. par superposition des forces.

Ces deux approximations ne sont pas équivalentes, mais Brady & Bossis [BB88] privilégient la superposition des forces, qui semble respecter davantage la physique des suspensions car les forces de lubrification, qui sont évaluées en formulation résistance, empêchent l'interpénétration des particules. Ainsi, sous cette hypothèse d'additivité, il « suffit » de connaître la matrice de résistance pour deux sphères uniquement (et pour toute distance entre ces deux sphères) afin de procéder à l'assemblage de la grande matrice.

Comment construire la matrice de résistance en pratique ? Dans le cas de deux sphères, tous les éléments de la matrice de résistance sont connus de manière exacte [JO84], en raison de la simplicité de la configuration géométrique qui repose sur un unique vecteur : la distance entre les deux particules. Néanmoins, il n'existe pas de forme analytique simple valable pour toute distance de séparation. On utilise alors des expressions approchées : les forces à longue portée sont implantées en formulation mobilité par la méthode des réflexions

[Luk89] tandis que *les forces de lubrification* [JO84, DM03] sont exprimées en formulation résistance. Cela aboutit à la définition d'une matrice de mobilité « longue portée » \mathcal{M}^∞ et d'une matrice de résistance « courte portée » \mathcal{R}_{2B} . La matrice de résistance globale \mathcal{R} est construite en rassemblant ces informations.

Dans ce cadre d'approximation, nous avons présenté dans [17] des simulations numériques préliminaires sur des suspensions denses de sphères, de globules rouges, et de chaînes de polymère, à partir de lois de Faxen et en intégrant les forces de lubrification.

3.4 SIMULATION DE SUSPENSIONS ACTIVES : UNE APPROCHE DIRECTE

Dans cette section, nous présentons une approche *directe* pour la simulation de suspensions actives. Contrairement à la modélisation du poumon qui est basée sur la construction de modèles simplifiés à partir de données observables en raison de la complexité des phénomènes aux petites échelles, cette approche est construite sur une (relative) bonne connaissance des observables à l'échelle microscopique ; en revanche, la difficulté repose sur la grande complexité qui émerge de l'interaction entre les micro-nageurs.

Dans [18], nous nous sommes intéressés à la modélisation des bactéries, qui sont capables de nager dans un fluide visqueux par auto-propulsion. Ces bactéries sont si petites ($3\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$) qu'à leur échelle, le fluide est essentiellement visqueux et les effets inertiels peuvent être négligés. D'un point de vue hydrodynamique, deux aspects essentiels à la compréhension de ces suspensions ont émergé : une *dynamique collective*, caractérisée par l'apparition de structures cohérentes [CCD⁺07, DCC⁺04, SS12, SAGK07], est observée dans des suspensions concentrées, révélant de grandes structures qui évoluent de façon codirectionnelle, se déplaçant de manière chaotique à des vitesses supérieures à la vitesse d'un micro-nageur isolé, donnant l'apparence de turbulence. Par ailleurs, la *rhéologie* de ces suspensions actives est un enjeu majeur car elle vise à mesurer des paramètres macroscopiques permettant de caractériser la motilité d'une population de micro-nageurs.

Numériquement, les approches microscopique-macroscopique dans la littérature sont nombreuses mais elles n'intègrent pas l'ensemble des difficultés numériques : description individuelle de chaque bactérie physiquement représentée, description du fluide par la résolution exacte des équations de Stokes et simulation numérique pour des concentrations denses de micro-nageurs. Ainsi certains modèles sont basés sur des approximations visant à simplifier le calcul : on peut ainsi simplifier la présence d'une bactérie en la représentant par un simple dipôle de forces [HABK08] ou le calcul de l'écoulement fluide par l'utilisation de noyaux de Green et d'un principe de superposition [SS07, HS⁺09, IP07, CCD⁺07]. Ces simplifications permettent d'atteindre efficacement des simulations 3D, parfois jusqu'à des concentrations denses, mais au prix d'approximations dans la détermination des interactions hydrodynamiques des micro-nageurs alors que, précisément, l'enjeu lié à la compréhension de ces suspensions consiste à identifier la nature des interactions aboutissant aux dynamiques collectives observées : à cet égard, la simulation directe constitue un outil d'analyse efficace.

Dans les modèles directs, le modèle d'autopropulsion est phénoménologique mais les bactéries sont effectivement représentées à un niveau individuel et évoluent dans un fluide visqueux dont les caractéristiques sont déterminées par un calcul direct, permettant une meilleure description des interactions hydrodynamiques, en particulier des forces de lubrification. Ainsi Gyrya et ses co-auteurs [GLAB11] ont considéré des bactéries 2D mais les calculs se limitent aux suspensions diluées ou modérées. Les travaux de Jibuti [Jib11] se sont intéressés à des calculs 3D mais pour un faible nombre de nageurs. Dans ce travail, nous présentons des *simulations directes* de suspensions *denses* ; néanmoins cette approche est limitée au cas 2D.

3.4.1 Aspects hydrodynamiques

Les bactéries de type *pusher*, telles que *Escherichia coli* ou *Bacillus subtilis* [Ber83], sont modélisées par des particules rigides B de forme ellipsoïdale associées à une force d'autopropulsion localisées dans un flagelle P , de magnitude F_p et direction $-\tau$, voir FIG. 3.8. L'équilibre des forces pour un micro-nageur isolé est un élément essentiel de cette dynamique : la force de propulsion des flagelles doit être égale, au signe près, à la force de traînée du corps de la bactérie qui est connecté au flagelle, soit $\mathbf{F}_p = -F_p \tau = -\mathbf{F}_b$. Par ailleurs, ces forces sont définies comme des forces volumiques \mathbf{f}_p et \mathbf{f}_b d'intensité constante. Le modèle est ainsi défini :

- Les *particules rigides*, définies comme des inclusions rigides $(B_i)_{i=1\dots N}$ dans un domaine Ω , désignent les corps des bactéries. On note alors $B = \cup_{i=1\dots N} B_i$ le domaine rigide, \mathbf{x}_i les coordonnées du centre de masse de B_i , θ_i l'angle définissant la position du flagelle de B_i , $\mathbf{V} = (\mathbf{V}_i = \dot{\mathbf{x}}_i) \in \mathbb{R}^{2N}$ (resp. $\omega = (\omega_i = \dot{\theta}_i) \in \mathbb{R}^N$) le vecteur vitesse de translation (resp. rotation) des bactéries.
- Le *fluide* est modélisé par les équations de Stokes, définies sur le domaine fluide uniquement :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\mu \Delta \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \nabla p(\mathbf{x}, t) = \mathbf{f}_f(\mathbf{x}, t) := \sum_{i=1}^N \mathbf{f}_{p_i}(t) \chi_{P_i(t)}(\mathbf{x}) & (\mathbf{x}, t) \in \cup_{t \in (0, \infty)} \{\Omega \setminus \bar{B}(t) \times \{t\}\}, \\ \operatorname{div}(\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) = 0 & (\mathbf{x}, t) \in \cup_{t \in (0, \infty)} \{\Omega \setminus \bar{B}(t) \times \{t\}\}, \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 & (\mathbf{x}, t) \in \cup_{t \in (0, \infty)} \{\partial\Omega \times \{t\}\}, \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{V}_i(t) + \omega_i(t) (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t))^\perp & (\mathbf{x}, t) \in \cup_{t \in (0, \infty)} \{\partial B_i(t) \times \{t\}\}, \forall i. \end{array} \right.$$

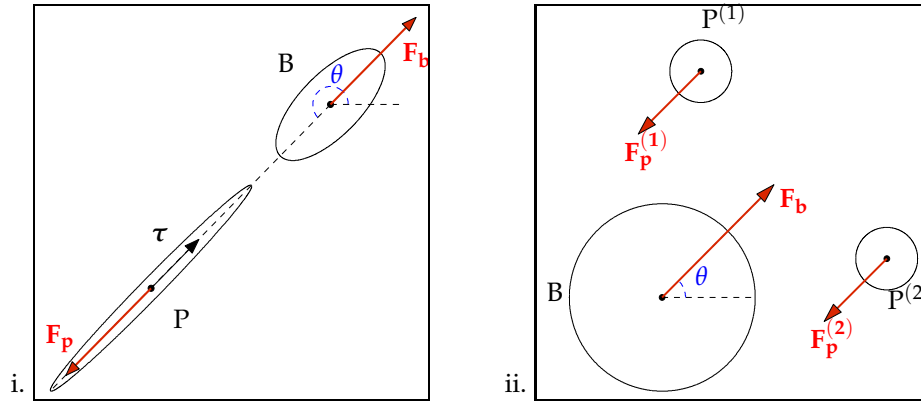


FIGURE 3.8 – Modélisation des bactéries auto-propulsées. i. Pusher : le corps B est supposé rigide tandis que l'action du flagelle sur le fluide environnant est localisée par un terme de propulsion en aval du corps de la bactérie P ; ii. Puller : l'action des cils $P^{(i)}$ sur le fluide environnant est localisée par des terme de propulsion en aval du corps B du micro-nageur.

Le terme source modélise l'action des flagelles sur le fluide. On considère des conditions d'adhérence sur le bord des corps rigides : la vitesse imposée traduit ici la contrainte de mouvement rigide des bactéries dont les vitesses de translation \mathbf{V}_i et de rotation ω_i sont inconnues.

- Le couplage fluide-structure repose sur l'équilibre des forces (seconde loi de Newton) : pour tout i ,

$$\int_{B_i(t)} \mathbf{f}_{b_i}(t) \, d\mathbf{x} - \int_{\partial B_i(t)} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) \, d\mathbf{x} = 0,$$

$$\int_{B_i(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t))^\perp \cdot \mathbf{f}_{b_i}(t) \, d\mathbf{x} - \int_{\partial B_i(t)} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t))^\perp \cdot (\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}, t)) \, d\mathbf{x} = 0.$$

Si les *pushers* utilisent un flagelle qui exerce une force nette sur le fluide par un mouvement non-réciproque, d'autres micro-organismes, tels que *Chlamydomonas reinhardtii*, utilisent deux cils reproduisant une brasse : ce mouvement de traction aboutit à la définition de micro-nageurs de type *puller* (voir FIG. 3.8 et 3.10).

Par simplicité, en raison de l'instantanéité des équations de Stokes, la dépendance des fonctions par rapport au temps n'est plus précisée. En utilisant la contrainte de mouvement rigide définie sur la partie solide (modélisant le corps des bactéries), on peut étendre le champ de vitesse dans *tout* le domaine (fluide et solide) et exploiter une caractérisation du mouvement rigide :

$$K_B = \{ \mathbf{u} \in H_0^1(\Omega), \mathbb{D}(\mathbf{u}) = 0 \text{ p.p. dans } B \}, \quad V_B = \{ p \in L_0^2(\Omega), p = 0 \text{ p.p. dans } B \}.$$

Autrement dit, K_B est l'espace des fonctions qui ne déforment pas B . Cela nous permet de définir une formulation variationnelle définie sur tout le domaine (*fluide et solide*) avec un espace fonctionnel *contraint* :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } (\mathbf{u}, p) \in K_B \times V_B \text{ tel que} \\ 2\mu \int_{\Omega} \mathbb{D}(\mathbf{u}) \cdot \mathbb{D}(\tilde{\mathbf{u}}) - \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{u}}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \tilde{\mathbf{u}}, \quad \forall \tilde{\mathbf{u}} \in K_B, \\ \int_{\Omega} q \operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0, \quad \forall q \in V_B, \end{array} \right.$$

avec $\mathbf{f} := \sum_{i=1}^N (\mathbf{f}_{b_i} \chi_{B_i} + \mathbf{f}_{p_i} \chi_{P_i})$. La dynamique des bactéries est alors déterminée par

$$\dot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{V}_i := \int_{B_i} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \cdot) \, d\mathbf{x}, \quad \dot{\theta}_i = \omega_i := \frac{\int_{B_i} \mathbf{u}(\mathbf{x}, \cdot) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^\perp \, d\mathbf{x}}{\int_{B_i} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2 \, d\mathbf{x}}.$$

Algorithme de résolution

Numériquement, afin d'éviter des procédures coûteuses de remaillage du domaine fluide, nous avons choisi une approche de type domaine fictif, qui a déjà été utilisée dans le cadre de la simulation fluide-particules. Une possibilité est d'utiliser un algorithme itératif sur un champ auxiliaire, composé de multiplicateurs de Lagrange, permettant de garantir la contrainte de mouvement rigide des particules. Une autre possibilité repose sur les méthodes de pénalisation : la contrainte de mouvement rigide est obtenue par relaxation d'un terme dans la formulation variationnelle. Ainsi, plutôt que travailler avec un espace fonctionnel avec contrainte, nous obtenons une formulation mixte posée dans un espace classique (non contraint) et dont

la solution est facilement calculable avec un solveur éléments finis usuel (à cet effet, nous avons développé un code FREEFEM++¹⁹, par facilité d'implantation, mais sans restriction méthodologique quant à l'utilisation d'autres solveurs). Décrivons l'algorithme en supposant la position des bactéries au temps t^n connue.

- i. *Résolution du problème mixte.* Le champ de vitesse instantanée \mathbf{u}^n est déterminé par la résolution du problème mixte pénalisé associé au terme source $\mathbf{f} := \mathbf{f}^n = \sum_{i=1}^N (\mathbf{f}_{b_i}(t^n)\chi_{B_i^n} + \mathbf{f}_{p_i}(t^n)\chi_{P_i^n})$, où $\chi_{B_i^n}$ (resp. $\chi_{P_i^n}$) est la fonction caractéristique associée aux corps rigides (resp. flagelles) au temps t^n , le dipôle composé des forces volumiques $\mathbf{f}_{b_i}(t^n)$ et $\mathbf{f}_{p_i}(t^n)$ est dirigé selon l'orientation de la bactérie au temps t^n et le terme de pénalisation est défini sur $B := B^n$, le domaine rigide au temps t^n .
- ii. *Calcul des vitesses.* On identifie les vitesses instantanées de translation et rotation des bactéries :

$$\mathbf{V}_i^n = \frac{1}{\text{mes}(B_i^n)} \int_{B_i^n} \mathbf{u}^n(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \quad \omega_i^n = \frac{\int_{B_i^n} \mathbf{u}^n(\mathbf{x}) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i^n)^\perp \, d\mathbf{x}}{\int_{B_i^n} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i^n\|^2 \, d\mathbf{x}}$$

- iii. *Mise à jour des positions.* La position des bactéries au temps $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ est déterminée par

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \Delta t \mathbf{V}_i^n, \quad \theta_i^{n+1} = \theta_i^n + \Delta t \omega_i^n.$$

La FIG. 3.9 (resp. FIG. 3.10, non publiée) présente le champ de vitesse et les lignes de courant générées par une bactérie de type *pusher* (resp. *puller*). De même, la FIG. 3.11 représente les mêmes informations pour une collection de cinq bactéries de type *pusher*, laissant entrevoir la complexité des interactions hydrodynamiques. La FIG. 3.12, non publiée, présente les champs de vitesse et de vorticit  pond r e g n r s par 400 bact ries : l' coulement semble turbulent, avec des r gions coh rentes beaucoup plus grandes que les dimensions d'une bact rie et apparaissant de fa on intermittente. La pr sence de ces structures r sultent uniquement des interactions hydrodynamiques entre les micro-nageurs. Par ailleurs, l'analyse quantitative aboutit   la caract risation d'une taille et d'un temps d'existence dont les ordres de grandeur sont comparables   ceux d termin s exp rimentalement [SAGK07] dans un film mince. Enfin, l'influence de la motilit  sur la viscosit  effective a  t   tudi e : la diminution (resp. l'augmentation) de la viscosit  effective pour des *pushers* (resp. *pullers*) [SA09, RJP10] est valid e et des  tudes extensives sont en cours, afin de quantifier la d pendance de la viscosit  par rapport   la concentration de bact ries, afin d' tendre les lois de viscosit   tablies par analyse asymptotique pour des concentrations dilu es   des lois de viscosit  pour des concentrations denses.

3.4.2 Aspects chimiotactiques

La bioconvection constitue un enjeu de compr hension important de la dynamique collective de micro-nageurs. Dans une suspension non satur e en oxyg ne, les bact ries nagent vers l'interface fluide-air qui est riche en oxyg ne. Comme les bact ries sont environ 10 % plus denses que l'eau, l'accumulation   l'interface aboutit   un gradient instable sous l'effet de comp tition avec la gravit , cr ant ainsi une dynamique convective. Dans un m nisque horizontal, ces stratifications  voluent en instabilit s hydrodynamiques d crites par des panaches entra nant les bact ries de la surface vers le fond. Nous nous sommes int ress s en particulier   deux exp riences [DCC⁺04, TCD⁺05], dans lesquelles une dynamique de bioconvection pour des suspensions de *B. subtilis* sont pr sent es. Les exp riences montrent en particulier l'influence de la g om trie de la goutte sur cette dynamique. Les bact ries nagent vers la surface libre et, sous l'influence de la gravit , « glissent » le long du m nisque vers le fond ou retombent vers le fond au sein de colonnes instables. Un tourbillon hydrodynamique persistant favorise l'advection d'oxyg ne dans la suspension.

Mod le de *run and tumble*

Individuellement, les bact ries alternent deux modes de comportement basiques [Ber83] : un d placement quasi-rectiligne dans une direction donn e appel  *run* et un mouvement hautement erratique appel  *tumble* dont le but est de r orienter la bact rie. Les bact ries se d placent ainsi en fonction du gradient du chimio-attractant [Ber83, KP92]. La dur e d'un *run* (~ 1 s) est beaucoup plus grande que la dur e d'une phase de *tumble* (~ 0.1 s) mais, en fait, lorsque les bact ries se d placent dans une direction favorable, les dur es de *run* augmentent. Ces bact ries  tant trop petites pour d tecter instantan ment les diff rences spatiales en concentration du chimio-attractant, elles mesurent le gradient de concentration en l' valuant successivement et contin ment en temps au cours de leur d placement. Cette alternance entre les deux modes, en particulier l'augmentation du temps de *run* lorsque la direction est favorable, aboutit   cette observation : sur de grandes  chelles de temps, les bact ries effectuent une marche al atoire avec un biais dans la direction favorable.

D taillons le processus de *run-and-tumble* [SBB86, KP92, LP09, BP00, EO04, Loco7] : les bact ries que nous consid rons se d placent en alternant des *run* et des *tumble*, en biaisant la dur e des *run*. Les *run* sont

¹⁹. Code SOPHIALOREN : <https://www.projet-plume.org/relier/sophialoren>

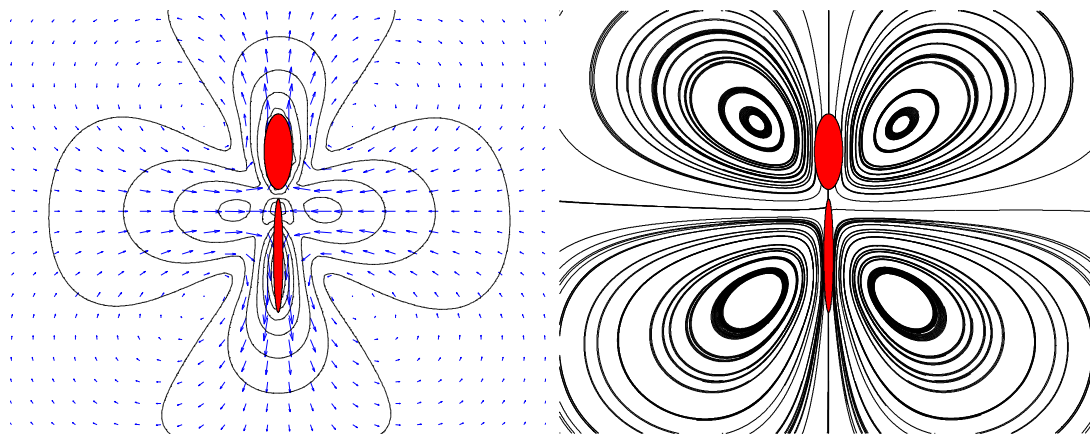


FIGURE 3.9 – Bactérie de type pusher dans un fluide au repos : champ de vitesse et lignes de courant.

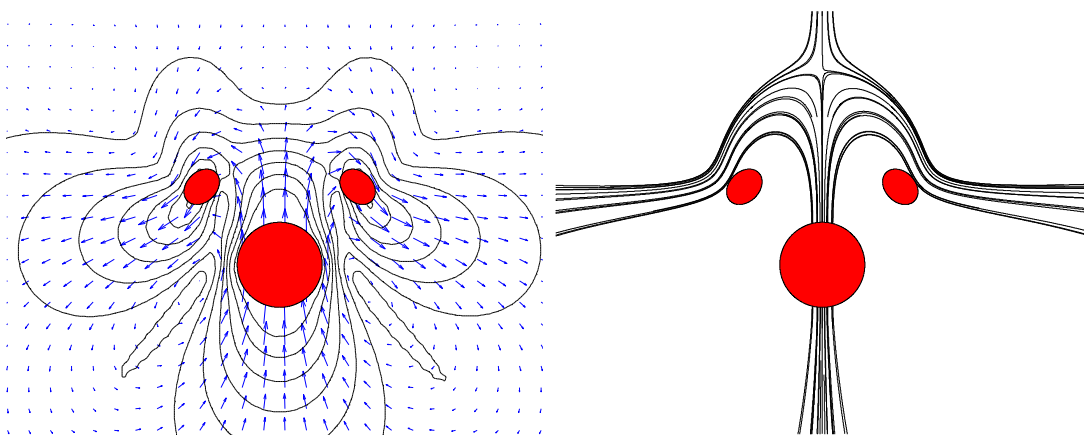


FIGURE 3.10 – Bactérie de type puller dans un fluide au repos : champ de vitesse et lignes de courant.

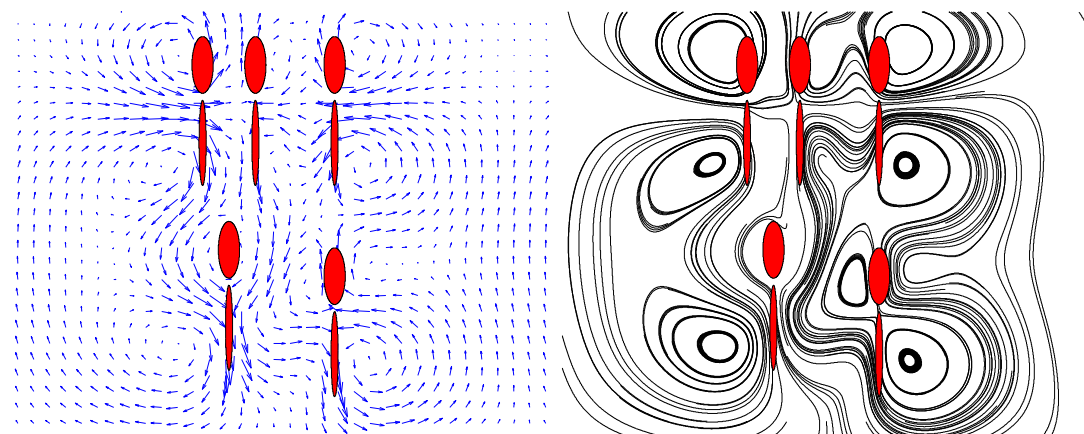


FIGURE 3.11 – Cinq bactéries de type pusher évoluant côte-à-côte : champ de vitesse et lignes de courant.

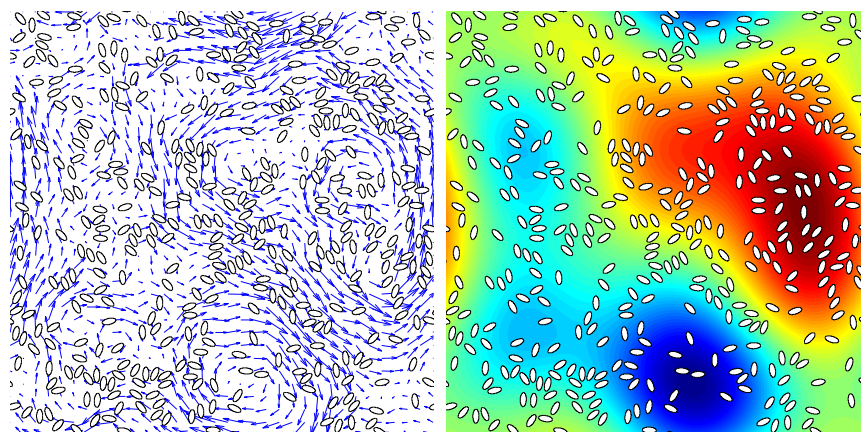


FIGURE 3.12 – Suspension dense de bactéries de type pusher : champs des vitesse et vorticité pondérée.

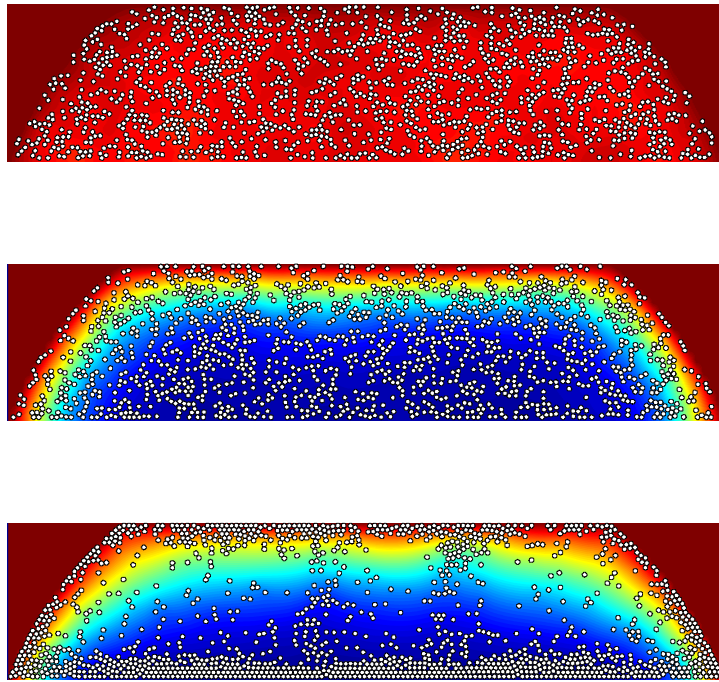


FIGURE 3.13 – Évolution de bactéries chimiotactiques et de la concentration en oxygène dans une goutte.

distribuées exponentiellement avec une fréquence qui dépend dynamiquement de l'environnement. Dans le cas d'*E. coli*, par exemple, la fréquence de *tumbling* est en moyenne $\lambda \sim 1 \text{ s}^{-1}$. Si on désigne par c la concentration de l'attractant chimique, la fréquence de *tumbling* est alors déterminée [LP09, SBB86] par :

$$\lambda(t) = \lambda_0 \left(1 - \int_{-\infty}^t c(s) R(t-s) ds \right), \quad (3.9)$$

où λ_0 est la fréquence moyenne de *tumbling*, R est un noyau modélisant la mémoire de la bactérie. À cet égard, différents choix de noyaux sont utilisés dans la littérature pour modéliser l'effet de mémoire.

Couplage entre le modèle hydrodynamique et l'oxytaxie

Dans [18], nous avons considéré l'oxygène comme le seul chimio-attractant dans l'environnement des bactéries. La dynamique de la concentration en oxygène c est alors décrite par l'équation :

$$\partial_t c + \mathbf{u} \cdot \nabla c - D_c \Delta c = -\kappa f(c) \chi_B,$$

où D_c est le coefficient de diffusion de l'oxygène dans l'eau, \mathbf{u} est la vitesse du fluide. Le terme source modélise la consommation d'oxygène par les bactéries [TCD⁺05] : κ est le taux de consommation volumique d'oxygène (en molécules d'oxygène par seconde et par volume de bactéries), χ_B est la fonction caractéristique pour le domaine rigide occupé par les bactéries, et $c \mapsto f(c)$ est une fonction de modulation : $f(c) = 1$ lorsque c est grand, et $f(c) = 0$ lorsque c est plus petit qu'une valeur critique.

Le mouvement des bactéries est également lié à la concentration d'oxygène, puisque les bactéries qui ne consomment pas suffisamment d'oxygène perdent leur capacité d'auto-propulsion. Ainsi l'intensité de la force de propulsion f_p est modulée par une fonction de motilité [TCD⁺05] qui s'annule lorsque la concentration est inférieure à une valeur critique. Le modèle hydrodynamique est couplé à la chimiotaxie par la ré-orientation individuelle que l'on a décrite. En pratique, chaque bactérie est animée d'un mouvement de translation et rotation déterminé par le modèle hydrodynamique. Mais elle se ré-oriente à la fréquence $\lambda(t)$ qui est définie par l'équation (3.9) et dépend du signe du gradient de la concentration d'oxygène le long de la trajectoire. Lors de la phase de *tumbling*, une bactérie se ré-oriente de façon aléatoire.

La simulation présentée sur la FIG. 3.13 met en évidence des instabilités hydrodynamiques dues au gradient de densité (bactéries à flottabilité non nulle). À l'instant initial le milieu est saturé en oxygène ; sous l'effet de consommation de l'oxygène par les bactéries, un gradient d'oxygène se forme entre l'interface fluide-air et le fond de la goutte ; des colonnes de bactéries se constituent sous l'effet de la gravité, entraînant les bactéries vers le fond. Par ailleurs, des bactéries sont piégées au fond : la concentration étant faible, leur force de propulsion est quasi-nulle. Les re-circulations permettent néanmoins un réapprovisionnement en oxygène vers le fond, autorisant à nouveau un accès vers l'interface aux bactéries momentanément piégées.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Le contexte général dans lequel se situent les travaux présentés dans ce mémoire est celui des équations aux dérivées partielles intervenant dans le domaine de la mécanique des fluides.

Résumé de l'approche mathématique

Le spectre mathématique des travaux présentés dans ce mémoire couvre à la fois des développements théoriques et des aspects clairement applicatifs (en biophysique, médecine ou mécanique).

En *modélisation mathématique*, nous nous sommes intéressés à la justification de modèles existants (notamment en lubrification) ou à la détermination de modèles simplifiés suffisamment riches pour décrire des phénomènes complexes (en particulier dans l'étude des échanges gazeux dans le poumon, ou encore dans l'étude des suspensions actives). L'approche générale a consisté, de façon permanente, à *accepter les contraintes des modèles*, afin de développer les outils d'analyse propres à chaque domaine étudié.

Du point de vue de l'*analyse mathématique d'équations aux dérivées partielles*, différents aspects ont été abordés : l'analyse asymptotique est au cœur de ces études au sens où dans la plupart des chapitres interviennent des nombres $\delta, \varepsilon \ll 1$ qui caractérisent un contraste entre deux grandeurs physiques. D'autres aspects sont présents dans ce mémoire : comportement en temps long de la solution d'une équation, analyse numérique de méthodes d'approximation, que l'on peut interpréter comme une analyse de stabilité de ces équations, existence et unicité de la solution. De façon synthétique, ces résultats d'analyse ont porté sur l'influence des géométries ou des conditions aux limites sur les écoulements.

En *calcul scientifique*, nous nous sommes attachés à déterminer de nouveaux algorithmes de calculs : pour des écoulements visco-élastiques dans lesquels l'hypothèse de film mince nous a permis de construire une méthode numérique efficace ; pour des écoulements minces avec prise en compte de l'interaction de phénomènes complexes (film mince, cavitation, rugosités) ; pour des lois de conservation à flux discontinu en la variable d'état, pour lesquelles nous avons construit une méthode de calcul de la solution approchée, alors que les méthodes usuelles sont mises en échec ; pour la détermination du comportement de suspensions denses (dynamique stokesienne en 3D ou calcul direct en 2D) afin d'en déduire des propriétés macroscopiques par le calcul au niveau des plus petites échelles.

L'ensemble de ces activités a été menée avec un souci d'*interdisciplinarité* et l'idée d'établir des interactions fortes entre mathématiques appliquées et autres champs scientifiques. La proposition de méthodologies, d'analyses, d'algorithmes de calculs, de reformulations de problèmes afin de faire émerger des structures mathématiques a guidé ces travaux dans le but de répondre précisément à des problématiques extérieures avec, en retour, l'émergence de problèmes mathématiques nouveaux, difficiles et motivants. Ces interactions ont été formalisées de la manière suivante : en *mécanique*, les résultats obtenus ont donné lieu à des publications dans les revues de tribologie de référence, dont l'une a été primée par l'American Society of Mechanical Engineers. En *médecine*, une collaboration avec Thomas Similowski & Christian Straus (Hôpital La Pitié Salpêtrière) a abouti à une étude de l'influence des paramètres mécaniques sur les échanges gazeux. En *biophysique*, la collaboration avec le Laboratoire Interdisciplinaire de Physique (LyPhy, Grenoble) a été menée au sein du projet ANR Mosaicob (2007 – 11), permettant de nombreuses interactions avec la communauté (essentiellement non-mathématique) qui travaille sur la thématique de suspensions actives.

Perspectives de recherches

Les différents points de vue (modélisation, analyse et calcul) résumés précédemment donnent un bon aperçu des travaux que j'ai effectués depuis mes débuts dans la recherche académique. La façon la plus naturelle de conclure ce mémoire est d'en donner quelques perspectives non-exhaustives.

Influence des rugosités en lubrification

En lubrification élasto-hydrodynamique, l'*interaction fluide-structure* sous l'effet des fortes pressions est modélisée par une équation de Reynolds modifiée par une non-linéarité spécifique (modèle de Hertz) qui dépend du type de contact et qui rend le problème non local. De façon un peu surprenante, le modèle de contact hertzien, utilisé en mécanique de façon quasi-exclusive, est une adaptation de lois de contact décrites en mécanique du solide pour le frottement sec, et n'a jamais été justifié mathématiquement pour des contacts lubrifiés. De plus, l'influence des rugosités sur le noyau de Hertz lui-même, complètement négligée en première approximation, est discutable et constitue un sujet de débat. La justification rigoureuse du modèle de Hertz et l'étude de sa dépendance par rapport aux rugosités est un problème ouvert.

Par ailleurs, en lubrification hydrodynamique, la question de la régularité des rugosités est l'objet de discussions intenses, aussi bien en mathématiques qu'en mécanique : que se passe-t-il lorsque la rugosité

n'est plus décrite par une fonction périodique, mais par un graphe multivalué périodique ou par une fonction de forme aléatoire? Dans le cas d'un écoulement de Stokes, l'influence de rugosités « aléatoires » de taille ε a été décrite par David Gérard-Varet (2009). Le prolongement de ces résultats dans le cadre des films minces ne semble pas immédiat mais cette problématique est intéressante si l'on souhaite étudier mathématiquement les effets de forme de rugosités réalistes sur l'approximation de Reynolds.

Simulation d'écoulements complexes

La simulation d'écoulements sanguins est difficile pour plusieurs raisons : comportement non-newtonien du sang, anisotropie de l'écoulement générée par la géométrie des vaisseaux sanguins, interaction fluide-structure entre le sang et les parois etc. Aussi, une approche possible consiste à étudier des asymptotiques correspondant à la prise en compte du faible rapport entre le rayon caractéristique des vaisseaux et leur longueur. Si cette approche est parfaitement identifiée dans le cas de fluides newtoniens et, dans une certaine mesure, dans le cas de fluides quasi-newtoniens, le cas des fluides visco-élastiques est ouvert ; à cet effet, les modèles de type Oldroyd sont de bons candidats à la modélisation d'écoulements sanguins. Cette thématique fait déjà l'objet d'un travail préliminaire en collaboration avec Laurent Chupin (Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand).

Le *transport mucociliaire* est un autre type d'écoulement physiologique comportant des aspects de modélisation, d'analyse et de calcul intéressants, en lien avec des applications potentielles en médecine : ce processus permet aux particules inhalées et déposées dans l'appareil broncho-pulmonaire d'être éliminées, grâce à la dynamique collective de cils baignant partiellement dans un fluide newtonien qui va presque jusqu'à leur sommet, le haut des cils étant pris dans une couche de mucus visco-élastique. Ce thème constitue le sujet de thèse de Loïc LACOUTURE, que je co-encadre avec Astrid Decoene et Bertrand Maury (Université Paris-Sud), et portant sur l'analyse asymptotique (exploitant la structure fine des cils pour en simplifier le calcul) conjuguée à la détermination d'outils d'analyse et de simulation numérique afin d'étudier la rhéologie et caractériser la motilité des cils (et les éventuels défauts de motilité qui engendrent des pathologies respiratoires).

L'étude du *transport solide* ou *charriage* s'inscrit dans la continuité des travaux liés à la simulation de suspensions denses. Elle fait l'objet d'une collaboration avec les mécaniciens de l'ENSAM ParisTech (Sofiane Khelladi & Farid Bakir), formalisée par l'encadrement commun de la thèse de Salah ZOUAOUI, dont le but est de proposer des méthodes de calcul directes ou approchées pour l'étude du charriage et s'appuie également sur les dispositifs expérimentaux développés à l'ENSAM ParisTech afin de confronter les résultats numériques aux mesures expérimentales pour des suspensions diverses (monodisperses ou polydisperses).

Modélisation du poumon humain

Pour des patients souffrant de broncho-pneumopathies chroniques obstructives, un traitement usuel consiste à administrer, par inhalation, un mélange d'hélium-oxygène, dont le transport et la diffusion dans le système respiratoire semble facilité par rapport à l'air. Dans cette perspective, un projet ANR Technologies de la Santé sur les mélanges hélium-oxygène dans le système respiratoire, impliquant des partenaires aux spécialités très différentes²⁰, a démarré en octobre 2011. Ce projet est consacré à l'étude de l'impact de l'inhalation de l'hélium-oxygène sur la ventilation et le dépôt d'aérosol dans les maladies respiratoires chroniques obstructives telles que l'asthme et l'emphysème. Il inclut une étude préalable de la ventilation et du dépôt d'aérosol dans différents modèles animaux (sains ou pathologiques), puis la caractérisation de la morphologie des voies respiratoires des rats sains et pathologiques afin de reconstruire numériquement cette morphologie en 3D. Les modèles théoriques de prédiction de ventilation et de dépôt d'aérosol disponibles dans la littérature n'intègrent pas les morphologies pathologiques ; aussi des modèles analytiques et numériques prenant en compte les caractéristiques pathologiques et l'asymétrie des voies respiratoires de la morphologie 3D reconstruite seront développés. Ce projet constitue un cadre de travail multidisciplinaire pour Justine FOUCHET-INCAUX dont je co-encadre la thèse avec Céline Grandmont (INRIA Paris-Rocquencourt) et Bertrand Maury (Université Paris-Sud) portant précisément sur la simulation numérique de l'air dans des arbres bronchiques géométriquement réalistes (au moins pour la partie proximale de l'arbre).

Par ailleurs, les modèles permettant de reproduire les phénomènes mesurables, comme la ventilation, la quantité d'oxygène absorbée par minute, ou la concentration moyenne en oxygène au niveau des alvéoles, sont pour l'heure de nature déterministe, nourris par des paramètres physiologiques fixés à des valeurs trouvées dans la littérature. Il est nécessaire, désormais, de développer des approches orientées vers le patient, qui permettraient d'adapter les modèles (en particulier de déterminer des jeux de paramètres) qui respectent les caractéristiques d'un individu ou d'une classe d'individus. Dans cette perspective, l'étude systématique de la variabilité des paramètres physiologiques et de leur influence sur la sensibilité des résultats issus des modèles permettra de toucher de façon plus large la communauté des utilisateurs potentiels de ce type de modèles : les cliniciens.

20. Air Liquide R&D - Groupe Gaz Médicaux, IRPHE - Institut de Recherche sur les Phénomènes Hors Équilibre, IR4M Imagerie par Résonance Magnétique et Multi-Modalités, INSERM U618, IT/TSP Institut TELECOM / Telecom Sud Paris, UPS / LMO Laboratoire de Mathématiques d'Orsay, UPRES EA 2363, Service de radiologie, Assistance Publique - Hôpitaux de Paris.

BIBLIOGRAPHIE GÉNÉRALE

PUBLICATIONS DE L'AUTEUR CITÉES DANS LE MÉMOIRE

- [0] S. MARTIN. *Contribution à la modélisation de phénomènes de frontière libre en mécanique des films minces*. Thèse de doctorat de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2005.
- [1] G. BAYADA, S. MARTIN, et C. VÁZQUEZ. Effets d'anisotropie par homogénéisation dans un problème à frontière libre. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 340(7) :541–546, 2005.
- [2] G. BAYADA, S. MARTIN, et C. VÁZQUEZ. Two-scale homogenization of a hydrodynamic Elrod-Adams model. *Asymptot. Anal.*, 44(1-2) :75–110, 2005.
- [3] S. MARTIN. Influence of multiscale roughness patterns in cavitated flows: applications to journal bearings. *Math. Probl. Eng.*, pages 439319, 26, 2008.
- [4] G. BAYADA, S. MARTIN, et C. VÁZQUEZ. Homogenization of a nonlocal elasto-hydrodynamic lubrication problem: a new free boundary model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 15(12) :1923–1956, 2005.
- [5] G. BAYADA, S. MARTIN, et C. VÁZQUEZ. An asymptotic flow model of the Reynolds roughness including a mass-flow preserving cavitation model. *ASME J. Tribol.*, 127(4) :793–802, 2005.
- [6] G. BAYADA, S. MARTIN, et C. VÁZQUEZ. Micro-roughness effects in elasto-hydrodynamic lubrication including a mass-flow preserving cavitation model. *Tribol. Int.*, 39(12) :1707–1718, 2006.
- [7] J. I. DÍAZ et S. MARTIN. On the instantaneous formation of cavitation in hydrodynamic lubrication. *C. R. Mécanique*, 334(11) :645–650, 2006.
- [8] G. BAYADA, L. CHUPIN, et S. MARTIN. Viscoelastic fluids in a thin domain. *Quart. Appl. Math.*, 65(4) :625–651, 2007.
- [9] G. BAYADA, L. CHUPIN, et S. MARTIN. From the Phan-Thien Tanner / Oldroyd-B non-Newtonian model to the double shear thinning Rabinowitsch thin film model. *ASME J. Tribol.*, 133(3) :031802, 2011.
- [10] L. CHUPIN et S. MARTIN. Rigorous derivation of the thin film approximation with roughness-induced correctors. *SIAM J. Math. Anal.*, 44(4) :3041–3070, 2012.
- [11] G. BAYADA, S. MARTIN, et C. VÁZQUEZ. About a generalized Buckley-Leverett equation and lubrication multifluid flow. *European J. Appl. Math.*, 17(5) :491–524, 2006.
- [12] S. MARTIN. First order quasilinear equations with boundary conditions in the L^∞ framework. *J. Differential Equations*, 236(2) :375–406, 2007.
- [13] S. MARTIN et J. VOVELLE. Large-time behaviour of the entropy solution of a scalar conservation law with boundary conditions. *Quart. Appl. Math.*, 65(3) :425–450, 2007.
- [14] S. MARTIN et J. VOVELLE. Convergence of implicit finite volume methods for scalar conservation laws with discontinuous flux function. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 42(5) :699–727, 2008.
- [15] S. MARTIN, T. SIMIŁOWSKI, C. STRAUS, et B. MAURY. Impact of respiratory mechanics model parameters on gas exchange efficiency. *ESAIM Proc.*, 23 :30–47, 2008.
- [16] S. MARTIN et B. MAURY. Numerical modeling of the oxygen transfer in the respiratory process. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, pages 28 p., accepté pour publication, 2012.
- [17] S. FAURE, S. MARTIN, B. MAURY, et T. TAKAHASHI. Towards the simulation of dense suspensions: a numerical tool. *ESAIM Proc.*, 28 :55–79, 2009.
- [18] A. DECOENE, S. MARTIN, et B. MAURY. Microscopic modelling of active bacterial suspensions. *Math. Model. Nat. Phenom.*, 6(5) :98–129, 2011.
- [19] D. HILHORST, S. MARTIN, et M. MIMURA. Singular limit of a competition-diffusion system with large interspecific interaction. *J. Math. Anal. Appl.*, 390(2) :488–513, 2012.
- [20] S. KHELLADI, S. MARTIN, X. NOGUEIRA, et F. BAKIR. Higher-order preserving methods for unsteady finite volume solvers based on reproducing kernels: application to aeroacoustic problems. Dans *16th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, 7-9 June 2010, Stockholm, Sweden, 2010. AIAA-2010-3817.

Les articles [19] et [20] ne sont pas discutés dans ce document, par souci de brièveté et de cohérence.

BIBLIOGRAPHIE

- [ABLS01] Y. AMIRAT, D. BRESCH, J. LEMOINE, et J. SIMON. Effect of rugosity on a flow governed by stationary Navier-Stokes equations. *Quart. Appl. Math.*, 59(4) :769–785, 2001.
- [AC94] S. J. ALVAREZ et J. CARRILLO. A free boundary problem in theory of lubrication. *Comm. Partial Differential Equations*, 19(11-12) :1743–1761, 1994.
- [ADS02] S. N. ANTONTSEV, J. I. DÍAZ, et S. SHMAREV. *Energy methods for free boundary problems*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 48. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2002. Applications to nonlinear PDEs and fluid mechanics.
- [AKR10] B. ANDREIANOV, K. H. KARLSEN, et N. H. RISEBRO. On vanishing viscosity approximation of conservation laws with discontinuous flux. *Netw. Heterog. Media*, 5(3) :617–633, 2010.
- [All92] G. ALLAIRE. Homogenization and two-scale convergence. *SIAM J. Math. Anal.*, 23(6) :1482–1518, 1992.
- [Alt79] H. W. ALT. Strömungen durch inhomogene poröse Medien mit freiem Rand. *J. Reine Angew. Math.*, 305 :89–115, 1979.
- [Alv86] S. J. ALVAREZ. *Problemas de frontera libre en teoría de lubricación*. Tesis doctoral de la Universidad Complutense de Madride, 1986.
- [AO03] S. J. ALVAREZ et R. OUJJA. On the uniqueness of the solution of an evolution free boundary problem in theory of lubrication. *Nonlinear Anal.*, 54(5) :845–872, 2003.
- [AS96] Y. AMIRAT et J. SIMON. Influence de la rugosité en hydrodynamique laminaire. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 323(3) :313–318, 1996.
- [Baio2] S. BAIR. The shear rheology of thin compressed liquid films. *Proc. Inst. Mech. Eng. J J. Eng. Tribol.*, 216(1) :1–17, 2002.
- [Baio6] S. BAIR. A Reynold-Ellis equation for line contact with shear-thinning. *Tribol. Int.*, 39(4) :310–316, 2006.
- [Bat74] G. K. BATCHELOR. Transport properties of two-phase materials with random structure. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 6 :227–255, 1974.
- [BB88] J. F. BRADY et G. BOSSIS. Stokesian dynamics. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 20 :111–157, 1988.
- [BC86] G. BAYADA et M. CHAMBAT. The transition between the Stokes equations and the Reynolds equation: a mathematical proof. *Appl. Math. Optim.*, 14(1) :73–93, 1986.
- [BCC05] N. BENHABOUCHA, M. CHAMBAT, et I. CIUPERCA. Asymptotic behaviour of pressure and stresses in a thin film flow with a rough boundary. *Quart. Appl. Math.*, 63(2) :369–400, 2005.
- [BCC⁺10] D. BRESCH, C. CHOQUET, L. CHUPIN, T. COLIN, et M. GISCLON. Roughness-induced effect at main order on the Reynolds approximation. *Multiscale Model. Simul.*, 8(3) :997–1017, 2010.
- [BCG09] Guy BAYADA, Laurent CHUPIN, et Bérénice GREC. Viscoelastic fluids in thin domains : a mathematical proof. *Asymptot. Anal.*, 64(3-4) :185–211, 2009.
- [BCV95] S. BENHARBIT, A. CHALABI, et J.-P. VILA. Numerical viscosity and convergence of finite volume methods for conservation laws with boundary conditions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(3) :775–796, 1995.
- [BCV98] G. BAYADA, M. CHAMBAT, et C. VÁZQUEZ. Characteristics method for the formulation and computation of a free boundary cavitation problem. *J. Comput. Appl. Math.*, 98(2) :191–212, 1998.
- [Ber83] H. C. BERG. *Random walks in biology*. Princeton University Press, Princeton, 1983.
- [BF89] G. BAYADA et J.-B FAURE. A double-scale analysis approach of the Reynolds roughness. Comments and application to the journal bearing. *ASME J. Tribol.*, 111 :323–330, 1989.
- [BGA03] C. BRIGHENTI, G. GNUDI, et G. AVANZOLINI. A simulation model of the oxygen alveolo-capillary exchange in normal and pathological conditions. *Physiol. Meas.*, 24(2) :261–275, 2003.
- [BK05] S. BAIR et M. M. KHONSARI. Generalized Reynolds equations for line contact with double-Newtonian shear-thinning. *Tribol. Lett.*, 18(4) :513–520, 2005.
- [BK06] S. BAIR et M. M. KHONSARI. Reynolds Equation for common generalized Newtonian models and an approximate Reynolds-Carreau equation. *Proc. Inst. Mech. Eng. J J. Eng. Tribol.*, 220(4) :365–374, 2006.
- [BLP78] A. BENSOUSSAN, J.-L. LIONS, et G. PAPANICOLAOU. *Asymptotic analysis for periodic structures*, volume 5 de *Studies in Mathematics and its Applications*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1978.

- [BIRN79] C. BARDOS, A. Y. le ROUX, et J.-C. NÉDÉLEC. First order quasilinear equations with boundary conditions. *Comm. Partial Differential Equations*, 4(9) :1017–1034, 1979.
- [BM81] A. BERMÚDEZ et C. MORENO. Duality methods for solving variational inequalities. *Comput. Math. Appl.*, 7(1) :43–58, 1981.
- [BM10] D. BRESCH et V. MILISIC. High order multi-scale wall-laws, Part I: the periodic case. *Quart. Appl. Math.*, 68(2) :229–253, 2010.
- [BP00] R. N. BEARON et T. J. PEDLEY. Modelling run-and-tumble chemotaxis in a shear flow. *Bull. Math. Biol.*, 62(4) :775–791, 2000.
- [Bre74] H. BRENNER. Rheology of a dilute suspension of axisymmetric Brownian particles. *Int. J. Multiphase Flow*, 1(2) :195–341, 1974.
- [BT06] A. BEN-TAL. Simplified models for gas exchange in the human lungs. *J. Theor. Biol.*, 238(2) :474–495, 2006.
- [BTA04] H. BELLOUT et F. TALAY AKYILDIZ. Viscoelastic lubrication with phan-thien-tanner fluid (ptt). *ASME J. Tribol.*, 126(2) :288–291, 2004.
- [BV06] F. BACHMANN et J. VOVELLE. Existence and uniqueness of entropy solution of scalar conservation laws with a flux function involving discontinuous coefficients. *Comm. Partial Differential Equations*, 31(1-3) :371–395, 2006.
- [Car99] J. CARRILLO. Entropy solutions for nonlinear degenerate problems. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 147(4) :269–361, 1999.
- [Car03] J. CARRILLO. Conservation laws with discontinuous flux functions and boundary condition. *J. Evol. Equ.*, 3(2) :283–301, 2003.
- [CCD⁺07] L. H. CISNEROS, R. CORTEZ, C. DOMBROWSKI, R. E. GOLDSTEIN, et J. O. KESSLER. Fluid dynamics of self-propelled microorganisms, from individual to concentrated populations. *Exp. Fluids*, 43(5) :737–753, 2007.
- [CCL95] B. COCKBURN, F. COQUEL, et P. G. LEFLOCH. Convergence of the finite volume method for multidimensional conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32(3) :687–705, 1995.
- [CCM06] J. E. COTES, D. J. CHINN, et M. R. MILLER. *Lung function: physiology, measurement and application in medicine*. Blackwell Publishing Ltd, 6ème édition, 2006.
- [CDG93] J. CARRILLO, J. I. DÍAZ, et G. GILARDI. The propagation of the free boundary of the solution of the dam problem and related problems. *Appl. Anal.*, 49(3-4) :255–276, 1993.
- [CDG08] D. CIORANESCU, A. DAMLAMIAN, et G. GRISO. The periodic unfolding method in homogenization. *SIAM J. Math. Anal.*, 40(4) :1585–1620, 2008.
- [CDLLSG10] J. CASADO-DÍAZ, M. LUNA-LAYNEZ, et F. J. SUÁREZ-GRAU. Asymptotic behavior of a viscous fluid with slip boundary conditions on a slightly rough wall. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(1) :121–156, 2010.
- [CR81] M. CODEGONE et J.-F. RODRIGUES. Convergence of the coincidence set in the homogenization of the obstacle problem. *Ann. Fac. Sci. Toulouse*, 3(3-4) :275–285, 1981.
- [CR00] G.-Q. CHEN et M. RASCLE. Initial layers and uniqueness of weak entropy solutions to hyperbolic conservation laws. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 153(3) :205–220, 2000.
- [D85] J. I. DÍAZ. *Nonlinear partial differential equations and free boundaries. Vol. I*, volume 106 de *Research Notes in Mathematics*. Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, MA, 1985. Elliptic equations.
- [D91] J. I. DÍAZ. On the mathematical analysis of transient cavitation problems in hydrodynamic lubrication. Dans *Mathematical Modelling in Lubrication*, Proceedings of the 1990 international workshop on lubrication in Vigo, pages 37–49. Publicacions da Universidade de Vigo, 1991.
- [DA85] R. H. DAVIS et A. ACRIVOS. Sedimentation of noncolloidal particles at low Reynolds numbers. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 17 :91–118, 1985.
- [Daf85] C. M. DAFERMOS. Regularity and large time behaviour of solutions of a conservation law without convexity. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 99(3-4) :201–239, 1985.
- [DCC⁺04] C. DOMBROWSKI, L. H. CISNEROS, S. CHATKAEW, R. E. GOLDSTEIN, et J. O. KESSLER. Self-concentration and large-scale coherence in bacteria dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 93(9) :098103, 2004.
- [Dei85] K. DEIMLING. *Nonlinear functional analysis*. Springer-Verlag, Berlin, 1985.

- [Die96] S. DIEHL. Scalar conservation laws with discontinuous flux function. I. The viscous profile condition. *Comm. Math. Phys.*, 176(1) :23–44, 1996.
- [DiP85] R. J. DiPERNA. Measure-valued solutions to conservation laws. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 88(3) :223–270, 1985.
- [DiP75] R. J. DiPERNA. Decay and asymptotic behavior of solutions to nonlinear hyperbolic systems of conservation laws. *Indiana Univ. Math. J.*, 24(11) :1047–1071, 1974/75.
- [DM03] S. L. DANCE et M. R. MAXEY. Incorporation of lubrication effects into the force-coupling method for particulate two-phase flow. *J. Comp. Phys.*, 189(1) :212–238, 2003.
- [EA75] H. G. ELROD et M. L. ADAMS. A computer program for cavitation. Dans *Cavitation and related phenomena in lubrication*, Proceedings of the 1st Leeds-Lyon symposium, pages 37–42. Institution of Mechanical Engineers, 1975.
- [EDT98] P. EHRET, D. DOWSON, et C. M. TAYLOR. On lubricant transport conditions in elastohydrodynamic conjunctions. *Proc. R. Soc. A*, 454(1971) :763–787, 1998.
- [EGH00] R. EYMARD, T. GALLOUËT, et R. HERBIN. Finite volume methods. Dans *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.
- [Ein06] A. EINSTEIN. Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Ann. Phys. (Berlin)*, 19(2) :289–306, 1906.
- [EO04] R. ERBAN et H. OTHMER. From individual to collective behavior in bacterial chemotaxis. *SIAM J. Appl. Math.*, 65(2) :361–391, 2004.
- [FFS03] M. FELICI, M. FILOCHE, et B. SAPOVAL. Diffusional screening in the human pulmonary acinus. *J. Appl. Physiol.*, 94(5) :2010–2016, 2003.
- [Fou10] A. FOUCQUIER. *Dynamique du transport et du transfert de l'oxygène au sein de l'acinus pulmonaire humain*. Thèse de doctorat de l'École Polytechnique, 2010.
- [FS01] H. FREISTÜHLER et D. SERRE. The L^1 -stability of boundary layers for scalar viscous conservation laws. *J. Dynam. Differential Equations*, 13(4) :745–755, 2001.
- [GH02] A. C. GUYTON et J. E. HALL. *Textbook of medical physiology*. Saunders, Philadelphia, Pennsylvania, 11ème édition, 2002.
- [GLAB11] V. GYRYA, K. LIPNIKOV, I.S. ARANSON, et L. BERLYAND. Effective shear viscosity and dynamics of suspensions of micro-swimmers from small to moderate suspensions. *J. Math. Biol.*, 62(5) :707–740, 2011.
- [GS90a] C. GUILLOPÉ et J.-C. SAUT. Existence results for the flow of viscoelastic fluids with a differential constitutive law. *Nonlinear Anal.*, 15(9) :849–869, 1990.
- [GS90b] C. GUILLOPÉ et J.-C. SAUT. Global existence and one-dimensional nonlinear stability of shearing motions of viscoelastic fluids of Oldroyd type. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 24(3) :369–401, 1990.
- [GV09] D. GÉRARD-VARET. The Navier wall law at a boundary with random roughness. *Comm. Math. Phys.*, 286(1) :81–110, 2009.
- [HABK08] B. M. HAINES, I. S. ARANSON, L. BERLYAND, et D. A. KARPEEV. Effective viscosity of dilute bacterial suspensions: a two-dimensional model. *Phys. Biol.*, 5(4) :046003, 2008.
- [HB73] J. HAPPEL et H. BRENNER. *Low Reynolds number hydrodynamics*. Noordhoff International Publishing, 1973.
- [H0000] C. J. HOOKE. The behaviour of low-amplitude surface roughness under lines contacts: non-Newtonian fluids. *Proc. Inst. Mech. Eng. J J. Eng. Tribol.*, 214(3) :253–265, 2000.
- [HS⁺09] B. M. HAINES, A. SOKOLOV, I. S. ARANSON, L. BERLYAND, et D. A. KARPEEV. Three-dimensional model for the effective viscosity of bacterial suspensions. *Phys. Rev. E*, 80(4) :041922, 2009.
- [IO60] A. M. IL'IN et O. A. OLEINIK. Asymptotic behavior of solutions of the Cauchy problem for some quasi-linear equations for large values of the time. *Mat. Sb. (N.S.)*, 51 (93) :191–216, 1960.
- [IP07] T. ISHIKAWA et T. J. PEDLEY. The rheology of a semi-dilute suspension of swimming model micro-organisms. *J. Fluid Mech.*, 588 :399–435, 2007.
- [JA76] D. J. JEFFREY et A. ACRIVOS. The rheological properties of suspensions of rigid particles. *AIChE J.*, 22(3) :417–432, 1976.
- [Jib11] L. JIBUTI. *Locomotion et écoulement dans les fluides complexes confinés*. Thèse de doctorat de l'Université de Grenoble, 2011.

- [JM01] W. JÄGER et A. MIKELIĆ. On the roughness-induced effective boundary conditions for an incompressible viscous flow. *J. Differential Equations*, 170(1) :96–122, 2001.
- [JO84] D. J. JEFFREY et Y. ONISHI. Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow. *J. Fluid Mech.*, 139 :261–290, 1984.
- [Kim03] Y. J. KIM. Asymptotic behavior of solutions to scalar conservation laws and optimal convergence orders to N -waves. *J. Differential Equations*, 192(1) :202–224, 2003.
- [KM85] S. KAWASHIMA et A. MATSUMURA. Asymptotic stability of traveling wave solutions of systems for one-dimensional gas motion. *Comm. Math. Phys.*, 101(1) :97–127, 1985.
- [KP92] J. O. KESSLER et T. J. PEDLEY. Hydrodynamic phenomena in suspensions of swimming microorganisms. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 24 :313–58, 1992.
- [Kru70] S. N. KRUŽKOV. First order quasilinear equations with several independent variables. *Mat. Sb. (N.S.)*, 81 (123) :228–255, 1970.
- [KS98] J. KEENER et J. SNEYD. *Mathematical physiology*, volume 8 de *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1998.
- [Lax57] P. D. LAX. Hyperbolic systems of conservation laws. II. *Comm. Pure Appl. Math.*, 10 :537–566, 1957.
- [Lef07] A. LEFEBVRE. *Simulation numérique d'écoulements fluide-particules*. Thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud, 2007.
- [Lino01] J. R. LIN. Non-Newtonian effects on the dynamic characteristics of one-dimensional slider bearings : Rabinowitsch fluid model. *Tribol. Lett.*, 10(4) :237–243, 2001.
- [LM00] P. L. LIONS et N. MASMOUDI. Global solutions for some Oldroyd models of non-Newtonian flows. *Chinese Ann. Math. Ser. B*, 21(2) :131–146, 2000.
- [LN97] T.-P. LIU et K. NISHIHARA. Asymptotic behavior for scalar viscous conservation laws with boundary effect. *J. Differential Equations*, 133(2) :296–320, 1997.
- [Loc07] J. T. LOCSEI. Persistence of direction increases the drift velocity of run and tumble chemotaxis. *J. Math. Biol.*, 55(1) :41–60, 2007.
- [LP84] T.-P. LIU et M. PIERRE. Source-solutions and asymptotic behavior in conservation laws. *J. Differential Equations*, 51(3) :419–441, 1984.
- [LP09] J. T. LOCSEI et T. J. PEDLEY. Run and tumble in chemotaxis in a shear flow: the effect of temporal comparisons, persistence, rotational diffusion, and cell shape. *Bull. Math. Biol.*, 71(5) :1089–1116, 2009.
- [LSU67] O. A. LADYŽENSKAJA, V. A. SOLONNIKOV, et N. N. URAL'CEVA. *Linear and quasilinear equations of parabolic type*. Translated from the Russian by S. Smith. Translations of Mathematical Monographs, Vol. 23. American Mathematical Society, Providence, R.I., 1967.
- [Luk89] J. H. C. LUKE. Convergence of a multiple reflection method for calculating Stokes flow in a suspension. *SIAM J. Appl. Math.*, 49(6) :1635–1651, 1989.
- [MFA]So3] B. MAUROY, M. FILOCHE, J.S. ANDRADE JR., et B. SAPOVAL. Interplay between flow distribution and geometry in an airway tree. *Phys. Rev. Lett.*, 90(14) :148101, 2003.
- [MN94] A. MATSUMURA et K. NISHIHARA. Asymptotic stability of traveling waves for scalar viscous conservation laws with non-convex nonlinearity. *Comm. Math. Phys.*, 165(1) :83–96, 1994.
- [MP86] L. D. MARINI et P. PIETRA. Fixed-point algorithms for stationary flow in porous media. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 56(1) :17–45, 1986.
- [MT99] C. MASCIA et A. TERRACINA. Large-time behavior for conservation laws with source in a bounded domain. *J. Differential Equations*, 159(2) :485–514, 1999.
- [MT04] L. MOLINET et R. TALHOUK. On the global and periodic regular flows of viscoelastic fluids with a differential constitutive law. *NoDEA Nonlinear Differential Equations Appl.*, 11(3) :349–359, 2004.
- [Nav27] C. L. M. H. NAVIER. Sur les lois de l'équilibre et du mouvement des corps élastiques. *Mem. Acad. R. Sci. Inst. France*, 6(369), 1827.
- [Naz90] S. A. NAZAROV. Asymptotic solution of the Navier-Stokes problem on the flow of a thin layer of fluid. *Siberian Math. J.*, 31(2) :296–307, 1990.
- [NPD97] A. NOURI, F. POUPAUD, et Y. DEMAY. An existence theorem for the multi-fluid Stokes problem. *Quart. Appl. Math.*, 55(3) :421–435, 1997.
- [Ott96] F. OTTO. Initial-boundary value problem for a scalar conservation law. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 322(8) :729–734, 1996.

- [Paoo3] L. PAOLI. Asymptotic behavior of a two fluid flow in a thin domain: from Stokes equations to Buckley-Leverett equation and Reynolds law. *Asymptot. Anal.*, 34(2) :93–120, 2003.
- [PC78] N. PATIR et H. S. CHENG. An average flow model for determining effects of three-dimensional roughness on partial hydrodynamic lubrication. *ASME J. Lubrication Technol.*, 100 :12–17, 1978.
- [PE84] M. PAIVA et L. A. ENGEL. Model analysis of gas distribution within human lung acinus. *J. Appl. Physiol.*, 56(2) :418–425, 1984.
- [Ren85] M. RENARDY. Existence of slow steady flows of viscoelastic fluids with differential constitutive equations. *Z. Angew. Math. Mech.*, 65(9) :449–451, 1985.
- [Rey86] O. REYNOLDS. On the theory of lubrication and its application to Mr Beauchamp Tower's experiments, including an experimental determination of the viscosity of olive oil. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, A(117) :157–234, 1886.
- [RF57] F. J. ROUGHTON et R.E. FORSTER. Relative importance of diffusion and chemical reaction rates in determining rate of exchange of gases in the human lung, with special reference to true diffusing capacity of pulmonary membrane and volume of blood in the lung capillaries. *J. Appl. Physiol.*, 11(2) :290–302, 1957.
- [RJP10] S. RAFAÏ, L. JIBUTI, et P. PEYLA. Effective viscosity of microswimmer suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, 104(9) :098102, 2010.
- [Rus80] W. B. RUSSEL. A review of the role of colloidal forces in the rheology of suspensions. *J. Rheol.*, 24(3) :287–317, 1980.
- [SA09] A. SOKOLOV et I. S. ARANSON. Reduction of viscosity in suspensions of swimming bacteria. *Phys. Rev. Lett.*, 103(14) :148101, 2009.
- [SAGK07] A. SOKOLOV, I. S. ARANSON, R. E. GOLDSTEIN, et J. O. KESSLER. Concentration dependence of the collective dynamics of swimming bacteria. *Phys. Rev. Lett.*, 98(15) :158102, 2007.
- [SBB86] J. E. SEGALL, S.M. BLOCK, et H. C. BERG. Temporal comparisons in bacterial chemotaxis. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 83(23) :8987–8991, 1986.
- [Serg96] D. SERRE. *Systèmes de lois de conservation. II. Fondations*. [Foundations]. Diderot Editeur, Paris, 1996. Structures géométriques, oscillation et problèmes mixtes. [Geometric structures, oscillation and mixed problems].
- [SSo7] D. SAINTILLAN et M. J. SHELLEY. Orientational order and instabilities in suspensions of self-locomoting rods. *Phys. Rev. Lett.*, 99(5) :058102, 2007.
- [SS12] D. SAINTILLAN et M. J. SHELLEY. Emergence of coherent structures and large-scale flows in motile suspensions. *J. R. Soc. Interface*, 9(68) :571–585, 2012.
- [ST11] A. J. SWAN et M. H. TAWHAI. Evidence for minimal oxygen heterogeneity in the healthy human pulmonary acinus. *J. Appl. Physiol.*, 110(2) :528–537, 2011.
- [Sze91] A. SZEPESSY. Convergence of a streamline diffusion finite element method for scalar conservation laws with boundary conditions. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 25(6) :749–782, 1991.
- [TCD⁺05] I. TUVAL, L. H. CISNEROS, C. DOMBROWSKI, C. W. WOLGEMUTH, J. O. KESSLER, et R. E. GOLDSTEIN. Bacterial swimming and oxygen transport near contact lines. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 102(7) :2277–2282, 2005.
- [Tic96] J. TICHY. Non-Newtonian lubrication with the convective Maxwell model. *ASME J. Tribol.*, 118(2) :344–349, 1996.
- [Tow00] J. D. TOWERS. Convergence of a difference scheme for conservation laws with a discontinuous flux. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38(2) :681–698 (electronic), 2000.
- [Vas01] A. VASSEUR. Strong traces for solutions of multidimensional scalar conservation laws. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 160(3) :181–193, 2001.
- [Vovo2] J. VOVELLE. Convergence of finite volume monotone schemes for scalar conservation laws on bounded domains. *Numer. Math.*, 90(3) :563–596, 2002.
- [Wei63] E. R. WEIBEL. *Morphometry of the human lung*. Springer Verlag and Academic Press, Berlin and New York, 1963.
- [Wei84] E. R. WEIBEL. *The pathway for oxygen*. Harvard University Press, 1984.
- [Wes74] J. B. WEST. *Respiratory physiology: the essentials*. Williams & Wilkins, Baltimore, 1974.
- [Wil09] J. WILKENING. Practical error estimates for Reynolds' lubrication approximation and its higher order corrections. *SIAM J. Math. Anal.*, 41(2) :588–630, 2009.
- [WSFo5] E. R. WEIBEL, B. SAPOVAL, et M. FILOCHE. Design of peripheral airways for efficient gas exchange. *Resp. Phys. and Neur.*, 148(1-2) :3–21, 2005.