



HAL
open science

Méthodes numériques pour l'écoulement de Stokes 3D: fluides à viscosité variable en géométrie complexe mobile; application aux fluides biologiques

Robin Chatelin

► **To cite this version:**

Robin Chatelin. Méthodes numériques pour l'écoulement de Stokes 3D: fluides à viscosité variable en géométrie complexe mobile; application aux fluides biologiques. Physique mathématique [math-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2013. Français. NNT: . tel-00946993

HAL Id: tel-00946993

<https://theses.hal.science/tel-00946993v1>

Submitted on 19 Feb 2014

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
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Université Toulouse III Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)

Discipline ou spécialité :

Domaine mathématiques – Mathématiques appliquées

Présentée et soutenue par

Robin Chatelin

le : vendredi 29 novembre 2013

Titre :

Méthodes numériques pour l'écoulement de Stokes 3D : fluides à viscosité variable en géométrie complexe mobile ; application aux fluides biologiques

École doctorale :

Mathématiques Informatique Télécommunications (MITT)

Unité de recherche :

Institut de Mathématiques de Toulouse, UMR 5219

Directeur de thèse :

Philippe Poncet, Professeur des universités, Université de Pau et des pays de l'Adour

Rapporteurs :

Philippe Chatelain, Professeur chargé de cours, Université Catholique de Louvain, Belgique

Bertrand Maury, Professeur des universités, Université Paris-Sud

Examineurs :

Georges-Henri Cottet, Professeur des universités, Université Joseph Fourier, Grenoble

Pierre Degond, Directeur de recherches, Imperial College London

Patrick Laborde, Professeur des universités, Université Paul Sabatier, Toulouse

Marc Thiriet, Chargé de recherches, Université Pierre et Marie Curie, Paris

Jean Paul Vila, Professeur des universités, INSA, Toulouse

THÈSE

Méthodes numériques pour l'écoulement de Stokes 3D: fluides à viscosité variable en géométrie complexe mobile ; application aux fluides biologiques

Soutenue le 29 novembre 2013 par
ROBIN CHATELIN

Préparée à l'Institut de Mathématiques de Toulouse
Sous la direction de PHILIPPE PONCET



Résumé

Méthodes numériques pour l'écoulement de Stokes 3D: fluides à viscosité variable en géométrie complexe mobile ; application aux fluides biologiques

Ce travail propose des méthodes numériques pour la résolution du problème de Stokes en géométrie complexe pour des fluides non homogènes. Ce modèle décrit l'écoulement d'un fluide très visqueux, incompressible, dont la viscosité n'est pas uniforme mais dépend de la concentration d'un certain agent. D'un point de vue mathématique, il s'agit de résoudre un problème elliptique couplé à une équation de convection-diffusion, qui génèrent une dynamique non linéaire.

L'algorithme de résolution est basé sur une discrétisation hybride utilisant une grille et des particules. Des algorithmes à pas fractionnaires permettent de séparer la résolution des différents phénomènes pour profiter des avantages spécifiques à ces discrétisations: méthodes lagrangiennes adaptées à la convection et méthodes eulériennes pour la diffusion. Une méthode de pénalisation permet de gérer efficacement l'interaction entre le fluide et la géométrie mobile du domaine. Une méthode de projection itérative est développée pour ce problème quasi-statique, cela permet d'utiliser des solveurs rapides propices aux calculs en grande dimension. Plusieurs cas tests viennent valider la convergence, la conservation et les performances de l'algorithme en 3D.

Ce travail s'inscrit dans le contexte de l'étude de l'écoulement du mucus pulmonaire autour des cellules épithéliales ciliées tapissant les bronches. L'efficacité du transport du mucus, assurant la capture et l'expectoration des agents pathogènes, est étudiée en fonction des paramètres biologiques. D'autres simulations d'un micro-nageur et d'écoulements en milieux poreux complètent cette étude.

Mots clés: *Méthodes numériques pour les EDP, Mécanique des fluides 3D, Écoulements de Stokes, Méthodes particulières lagrangiennes, Interactions fluide-structure, Fluides non homogènes, Fluides biologiques*

Abstract

Numerical methods for 3D Stokes flow: variable viscosity fluids in a complex moving geometry; application to biological fluids.

This work intends to provide numerical methods to solve the Stokes problem in a complex geometry for nonhomogeneous fluids. This model describes highly viscous flows, incompressible, whose viscosity is not uniform, depending on a certain agent concentration. From a mathematical point of view, it is an elliptic problem coupled to a convection-diffusion equation, generating a non linear dynamics.

The computational algorithm is based on an hybrid grid-particles discretization. A fractional-steps algorithm enable to separate the computation of the different phenomena involved, to take advantage of both these discretizations: Lagrangian methods are adapted to solve convection operators and Eulerian methods are used for diffusion. A penalization method enables an efficient treatment of the interaction between the fluid and the domain's complex moving geometry. An iterative projection method is developed for this quasi-static problem, it permits the use of fast solvers compatible with large dimension problems. Several test are presented to validate the convergence, the conservation and the performances of the algorithm in 3D.

The context of this work is the mucus flow in the lung, around the epithelium ciliated cells covering bronchus. The study focuses on the efficiency of mucus transport, which captures and expectorate pathogen agents, with respect to biological parameters. Other simulations of a micro-swimmer and a porous media flow supplement this study.

Key words: *Numerical methods for PDE, 3D Computational fluid dynamics, Stokes flow, Particle Lagrangian methods, Fluid-structure interactions, Non homogeneous fluids, Biological fluids*

Table des matières

RÉSUMÉ	v
ABSTRACT	vii
REMERCIEMENTS	xiii
LISTE DES CONTRIBUTIONS	xv
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 POSITION DU PROBLÈME	2
1.1.1 <i>Contexte</i>	2
1.1.2 <i>Problématique</i>	2
1.1.3 <i>Choix de modélisation</i>	4
Modèle à viscosité variable	4
Généralités sur le problème de Stokes	6
Interaction entre le fluide et la géométrie en mouvement . .	7
Interaction entre le fluide et le cycle respiratoire	9
1.2 ÉTAT DE L'ART, CHOIX DES MÉTHODES DE DISCRÉTISATION ET DE RÉOLUTION	9
1.2.1 <i>Méthodes de résolution pour les équations de convection</i> .	10
1.2.2 <i>Méthodes de résolution pour l'interaction fluide-structure</i> .	11
Maillage conforme	11
Méthodes de frontières immergées	12
Méthodes de domaine fictif volumique	13
Méthodes lagrangiennes basées sur les solutions fondamentales	16
1.2.3 <i>Méthodes de résolution pour le problème de Stokes</i>	16
1.2.4 <i>Méthodes de discrétisation</i>	19
1.2.5 <i>Applications aux fluides biologiques</i>	19
1.3 CONTRIBUTIONS	19
1.4 ORGANISATION DU MANUSCRIT	21
CHAPITRE 2 ALGORITHMES NUMÉRIQUES	23
2.1 MÉTHODES DE RÉOLUTION POUR L'ÉQUATION DE CONVECTION- DIFFUSION	24
2.1.1 <i>Méthode de splitting pour le problème de convection-diffusion</i>	25
Cas linéaire	25

Splitting du problème de convection-diffusion	26
2.1.2 <i>Intégration temporelle de la méthode de splitting</i>	27
2.1.3 <i>Discrétisation lagrangienne de la convection</i>	29
2.1.4 <i>Discussion sur les noyaux d'interpolation</i>	31
Choix des noyaux	31
Implémentation	34
Calcul parallèle	35
2.1.5 <i>Remaillage particulière</i>	35
2.1.6 <i>Résolution de la diffusion de la fraction massique</i>	36
2.2 ALGORITHME RAPIDE POUR LE PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ	37
2.2.1 <i>Méthode de pénalisation pour l'interaction fluide-structure</i>	37
2.2.2 <i>Une méthode de projection sur les champs à divergence nulle</i>	38
2.2.3 <i>Méthode de point fixe multi-critère</i>	40
Présentation de la méthode	40
Adaptation à d'autres conditions aux limites	41
2.2.4 <i>Traitement explicite des termes de viscosité non homogène</i>	42
2.2.5 <i>Implémentation numérique</i>	43
Solveurs utilisés	44
Projection et grilles décalées	45
Calcul parallèle	47
2.3 RÉSUMÉ DE L'ALGORITHME COMPLET DE RÉOLUTION	47
CHAPITRE 3 VALIDATIONS	51
3.1 TOURBILLON DE GREEN-TAYLOR	52
3.1.1 <i>Convergence de l'algorithme de point fixe</i>	53
3.1.2 <i>Ordre de la méthode</i>	54
3.1.3 <i>Temps de calcul</i>	54
3.2 CAS TEST DE LA SPHÈRE DANS UN ÉCOULEMENT INCIDENT	55
3.3 CONVERGENCE EN TEMPS ET DISCUSSION SUR LES INTÉGRATEURS TEMPORELS	58
3.4 CONSERVATION DE LA MASSE	61
3.5 TEMPS DE CALCUL POUR LE PROBLÈME COMPLET	65
CHAPITRE 4 AMÉLIORATIONS DES ALGORITHMES DE RÉOLUTION	67
4.1 APPROCHE SHERMANN-MORRISON-WOODBURY POUR LA PÉNALISATION	68
4.1.1 <i>La formule de Sherman-Morrison-Woodbury</i>	68
4.1.2 <i>Présentation pour un problème de Poisson pénalisé</i>	69
Réécriture du problème pour faire apparaître la formule SMW	69
Approche itérative de type GMRES et couplage avec les solveurs FFT	71
Temps de calcul et occupation mémoire, comparaison avec MUDPACK	72
4.1.3 <i>Application au problème de Stokes pénalisé</i>	75
Reformulation de l'étape d'estimation	75

Étude des performances en fonction de la géométrie	76
4.1.4 Extension aux équations de Navier-Stokes	79
4.2 ACCÉLÉRATION DE LA CONVERGENCE DU POINT FIXE	80
4.2.1 Préconditionnement multigrille	81
4.2.2 Extrapolation de Richardson des conditions aux limites	81
4.2.3 Améliorations des temps de calcul	83
4.3 RÉGULARISATION DE LA FONCTION CARACTÉRISTIQUE	84
4.4 RAFFINEMENT DOUBLÉ DES VARIABLES TRANSPORTÉES	85
CHAPITRE 5 RÉSULTATS D'EXISTENCE ET D'UNICITÉ POUR LE PROBLÈME PÉNALISÉ	89
5.1 NOTATIONS ET DÉFINITIONS PRÉLIMINAIRES	90
5.2 ÉNONCÉ DU RÉSULTAT PRINCIPAL	92
5.3 ARGUMENTS TECHNIQUES	94
5.4 ANALYSE DU PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ	95
5.4.1 Existence et unicité	95
5.4.2 Prolongement "harmonique" de \bar{u}	97
5.4.3 Estimations sur (u, p)	98
5.4.4 Régularité de la solution	99
5.5 PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ DANS UN DOMAINE DÉPEN- DANT DU TEMPS	99
5.6 RÉSULTATS POUR LE PROBLÈME DE CONVECTION-DIFFUSION	101
5.7 ÉTUDE DU COUPLAGE ENTRE LE PROBLÈME DE STOKES PÉNA- LISÉ ET LE PROBLÈME DE CONVECTION-DIFFUSION	102
5.8 PREUVE DU THÉORÈME 2	106
5.9 PREUVE DU THÉORÈME 3	107
5.9.1 Étude de α	107
5.9.2 Étude de μ	107
5.9.3 Étude de (u, p)	108
5.9.4 Unicité	108
CHAPITRE 6 APPLICATIONS AUX FLUIDES BIOLOGIQUES	111
6.1 GÉNÉRALITÉS SUR LES FLUIDES BIOLOGIQUES	112
6.2 TRANSPORT DU MUCUS PULMONAIRE PAR LES CILS DES CEL- LULES ÉPITHÉLIALES	114
6.2.1 Position du problème	114
6.2.2 Modélisation de la rhéologie du mucus	116
6.2.3 Dynamique d'oscillation de la cellule épithéliale	117
6.2.4 Conditions aux limites pour l'écoulement du fluide	120
6.2.5 Simulation autour d'un cil	121
6.2.6 Simulations autour de différentes cellules	125
Cellule à seize cils	125
Cellule de forme elliptique et battement circulaire	125
Tapis de cils et synchronisation métachronale	129
6.2.7 Influence des paramètres biologiques	137
Profil de viscosité linéaire à un paramètre	138

Profil de viscosité logarithmique à trois paramètres	139
Fréquence de battement	143
Épaisseur du film de mucus	143
Diffusion de la fraction massique	145
Synchronisation métachronale	146
Conclusion sur l'influence des différents paramètres	147
6.3 EXEMPLE D'UN MICRO-NAGEUR : LE SPERMATOZOÏDE	148
6.3.1 Contexte et position du problème	148
6.3.2 Modélisation du mouvement de battement	150
6.3.3 Simulations numériques	150
6.4 CALCULS D'ÉCOULEMENTS DANS LES MILIEUX POREUX	154
6.4.1 Position du problème	154
6.4.2 Transport dans les milieux poreux	156
CHAPITRE 7 CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	161
7.1 CONCLUSIONS	162
7.1.1 Modélisation	162
7.1.2 Développement d'algorithmes rapides de résolution	163
Méthodes utilisées	163
Performances	163
7.1.3 Modélisation de l'écoulement du mucus pulmonaire	164
7.1.4 Autres applications	164
7.2 PERSPECTIVES	165
7.2.1 Enrichissement du modèle	165
Modèle two-ways pour l'interaction fluide-structure	165
Prise en compte de l'interface air-liquide	166
Modélisation des effets non newtoniens	166
Modélisation des sécrétions de mucines	167
7.2.2 Plate-forme intégrative	168
7.2.3 Analyse mathématique	168
7.2.4 Extension à d'autres écoulements	168
BIBLIOGRAPHIE	171

Remerciements

Je veux commencer par remercier Philippe Chatelain et Bertrand Maury pour l'intérêt qu'ils portent à ce travail en acceptant de rapporter sur ce manuscrit.

Je remercie également Georges-Henri Cottet, Pierre Degond, Patrick Laborde, Marc Thiriet et Jean Paul Vila qui ont accepté d'être examinateurs dans mon jury de thèse.

Dans le cadre du projet ANR BioFiReaDy, j'ai eu l'occasion d'échanger avec des scientifiques de plusieurs horizons autour des problèmes liés aux écoulements de mucus pulmonaire. Je remercie Dominique Anne-Archard pour ses explications éclairées en matière de rhéologie. Merci également à Alain Didier et Marlène Murris-Espin, pneumologues au CHU pour leurs précieuses explications sur le fonctionnement des poumons et les pathologies pulmonaires. Merci à Fanny Dardalhon qui a rejoint récemment le projet et qui enrichira le code de calcul que j'ai développé au cours de cette thèse.

Dans le cadre de ce projet, une collaboration avec David Sanchez a abouti à la rédaction d'un article et je lui exprime toute ma gratitude pour ses précieuses explications théoriques et sa détermination à faire tendre les epsilons vers zéro.

Ces trois ans de thèse m'ont également permis d'assurer une charge d'enseignement au département Génie Mathématique et Modélisation de l'INSA de Toulouse. Je remercie tous mes collègues d'enseignement qui ont rendu cet aspect de mon travail agréable et enrichissant. Merci donc à Alain Huard, Béatrice Laurent, Alain Liné, Cathy Maugis-Rabusseau, Olivier Mazet, Jérôme Morchain, Philippe Poncet, Géraldine Quinio, Aude Rondepierre, Adeline Rouchon et Sandrine Scott. J'ajoute un remerciement spécial à Adeline et Sandrine qui m'ont appris à apprécier les mathématiques lorsque j'étais étudiant.

Dans le cadre de mon activité d'enseignement j'ai encadré, en collaboration avec Philippe Poncet, deux projets avec des étudiants de quatrième année. Ces travaux plus ou moins en lien avec mon sujet de thèse ont permis d'éclaircir certains points et je remercie Jean-Michel Bart, Claire Boyer, Marie Cruz, Charlotte Emery et Benjamin Loubet pour leur travail.

Je remercie Florian, Ronan et Sophie, mes collègues qui pendant ces trois années ont su apporter de la bonne humeur dans notre bureau. Je remercie également Swen et Yves avec qui cela a toujours été un plaisir de partager un bon repas et

une bonne bouteille.

Je remercie également les copains qui n'ont pas participé activement à ce travail de thèse, mais qui, de par leur présence et leur soutien ont su me faire garder le sourire pendant ces trois années de labeur. Merci donc à Allison, Chopine, Chris, Dub, Fred, Ju, Lili, Marie, Marion, Matthias, Nathan, Odré, Patooze, Pauline, Pépé, Pfff, Pouletch, Ramou, Titi, Vince, Willo...et tous les autres. Parmi eux je remercie spécialement Nathan qui a en plus été un excellent collègue de bureau et d'enseignement.

Je remercie Herminie qui a pris soin de moi pendant ces trois années, pour avoir su me remonter le moral lorsque c'était nécessaire et simplement pour être encore là aujourd'hui...

Je remercie mes parents qui m'ont toujours soutenu tout au long de ces longues études.

Enfin, mes plus profonds remerciements vont à Philippe Poncet qui m'a encadré pendant ces trois années avec patience et dévouement. Il a évité tous les écueils qui auraient compliqué cette tâche, ce qui a créé un excellent cadre de collaboration scientifique. Il a toujours été à l'écoute de mes remarques, surtout lorsque j'avais tort, et a su apprécier à leur juste valeur les oscillations de mon caractère. J'espère que la relation privilégiée que nous avons eu et qui se transforme en amitié depuis quelques temps déjà, continuera longtemps.

Liste des contributions

ARTICLES DANS DES REVUES INTERNATIONALES AVEC COMITÉ DE LECTURE

- Chatelin Robin et Poncet Philippe : *A Hybrid Grid-Particle Method for Moving Bodies in 3D Stokes Flow with Variable Viscosity*, SIAM Journal on Scientific Computing, Août 2013, volume 35, pages B925-B949 [Chatelin et Poncet, 2013a]
- Chatelin Robin et Poncet Philippe : *Particle methods and Penalization : a Sherman-Morrison-Woodbury approach to compute 3D viscous flows using FFT*, 2013, Soumis [Chatelin et Poncet, 2013b]
- Chatelin Robin, Sanchez David et Poncet Philippe : *Analysis of penalized variable viscosity 3D Stokes equations coupled with diffusion and transport*, 2013, Soumis [Chatelin *et al.*, 2013]

ACTES DE CONGRÈS AVEC COMITÉ DE LECTURE

- Chatelin Robin, Poncet Philippe , Didier Alain, Murriss-Espin Marlène, Anne-Archard Dominique et Thiriet Marc : *Mucus and ciliated cells of human lung : splitting strategies for particle methods and 3D stokes flows*, 16 October 2012, IUTAM Symposium on Particle Methods in Fluid Mechanics, Lyngby, Danemark [Chatelin *et al.*, 2012]
- Chatelin Robin, Poncet Philippe et Tokman Mayya : *Computational aspects of mucus propulsion by ciliated epithelium*, 8 December 2010, 2nd European Microfluidics conference, Toulouse, France [Chatelin *et al.*, 2010]

AUTRES CONFÉRENCES

- Chatelin Robin et Poncet Philippe : *Méthodes hybrides grilles-particules pour l'écoulement 3D du mucus à viscosité variable*, 30 mai 2013, Congrès SMAI 2013 - Mini symposium Calcul Scientifique et Pathologies Pulmonaires, Seignosse, France.
- Chatelin Robin et Poncet Philippe : *Particle methods for 3D biological flows with variable viscosity*, 12 September 2012, European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012), Vienne, Autriche.
- Chatelin Robin, Sanchez David et Poncet Philippe : *Autour de la propulsion du mucus pulmonaire : modélisation, analyse et simulation numérique*, 23 mai 2012, Congrès d'Analyse Numérique (SMAI), Superbesse, France.

INTRODUCTION

Sommaire

1.1 POSITION DU PROBLÈME	2
1.1.1 Contexte	2
1.1.2 Problématique	2
1.1.3 Choix de modélisation	4
1.2 ÉTAT DE L'ART, CHOIX DES MÉTHODES DE DISCRÉTISA- TION ET DE RÉOLUTION	9
1.2.1 Méthodes de résolution pour les équations de convection	10
1.2.2 Méthodes de résolution pour l'interaction fluide-structure	11
1.2.3 Méthodes de résolution pour le problème de Stokes . . .	16
1.2.4 Méthodes de discrétisation	19
1.2.5 Applications aux fluides biologiques	19
1.3 CONTRIBUTIONS	19
1.4 ORGANISATION DU MANUSCRIT	21

1.1 POSITION DU PROBLÈME

1.1.1 Contexte

Le projet multidisciplinaire ANR BioFiReaDy¹ (Biological films and respiratory dysfunctions) rassemble des mathématiciens, des mécaniciens des fluides et des médecins. Depuis le début de l'année 2008 cette équipe de recherche étudie les films biologiques de mucus dans les poumons. Ce projet a plusieurs objectifs :

- Premièrement, développer des modèles et des méthodes numériques capables de simuler rapidement et précisément les écoulements de ces films de fluide dans les poumons, en particulier à l'échelle des cellules épithéliales ciliées localisées sur les parois bronchiques.
- Deuxièmement, utiliser ces simulations pour développer une plate-forme intégrative. Cet outils utiliseras une base de données de simulations pour prédire en temps réel l'évolution de l'écoulement en fonction de la modification des paramètres d'entrée du modèle numérique. Il s'agira notamment d'étudier des situations infectieuses liées aux pathologies pulmonaires comme la mucoviscidose ou la dyskinésie ciliaire. Il pourra être utilisé à terme par les médecins comme un outils complémentaire de diagnostique.
- Troisièmement, prélever des échantillons de mucus sur des patients atteints de mucoviscidose au Centre Hospitalier Universitaire Larrey pour analyser la rhéologie de ce fluide biologique complexe.

Ces deux volets, numérique et expérimental, sont étroitement liés, puisque les résultats expérimentaux seront ensuite utilisés pour calibrer le modèle numérique. Réciproquement les résultats numériques permettront de mettre en évidence des situations contradictoires méritants de nouvelles mesures.

1.1.2 Problématique

Le mucus est un fluide visqueux composé essentiellement d'eau et de protéines : les mucines. Il forme un film de quelques micromètres d'épaisseur qui recouvre les parois bronchiques où il sert de barrière pour éviter la contagion par les microbes, poussières, particules polluantes, ..., inhalées lors de la respiration. Sur les parois bronchiques, ce film de mucus interagit avec les cils des cellules épithéliales qui, en oscillant à des fréquences de 4 à 20Hz, propulsent le film de mucus depuis les voies respiratoires inférieures jusqu'à la trachée, où il est avalé dans l'estomac pour être éliminé. Plusieurs images de ces cils, prises à l'aide d'un microscope électronique, sont présentées sur la figure 1.1. Un schéma descriptif de l'écoulement autour de ces cils est donné sur la figure 1.2.

Plusieurs difficultés se posent pour modéliser ces écoulements de mucus en 3D :

1. <https://sites.google.com/site/biofiready/>

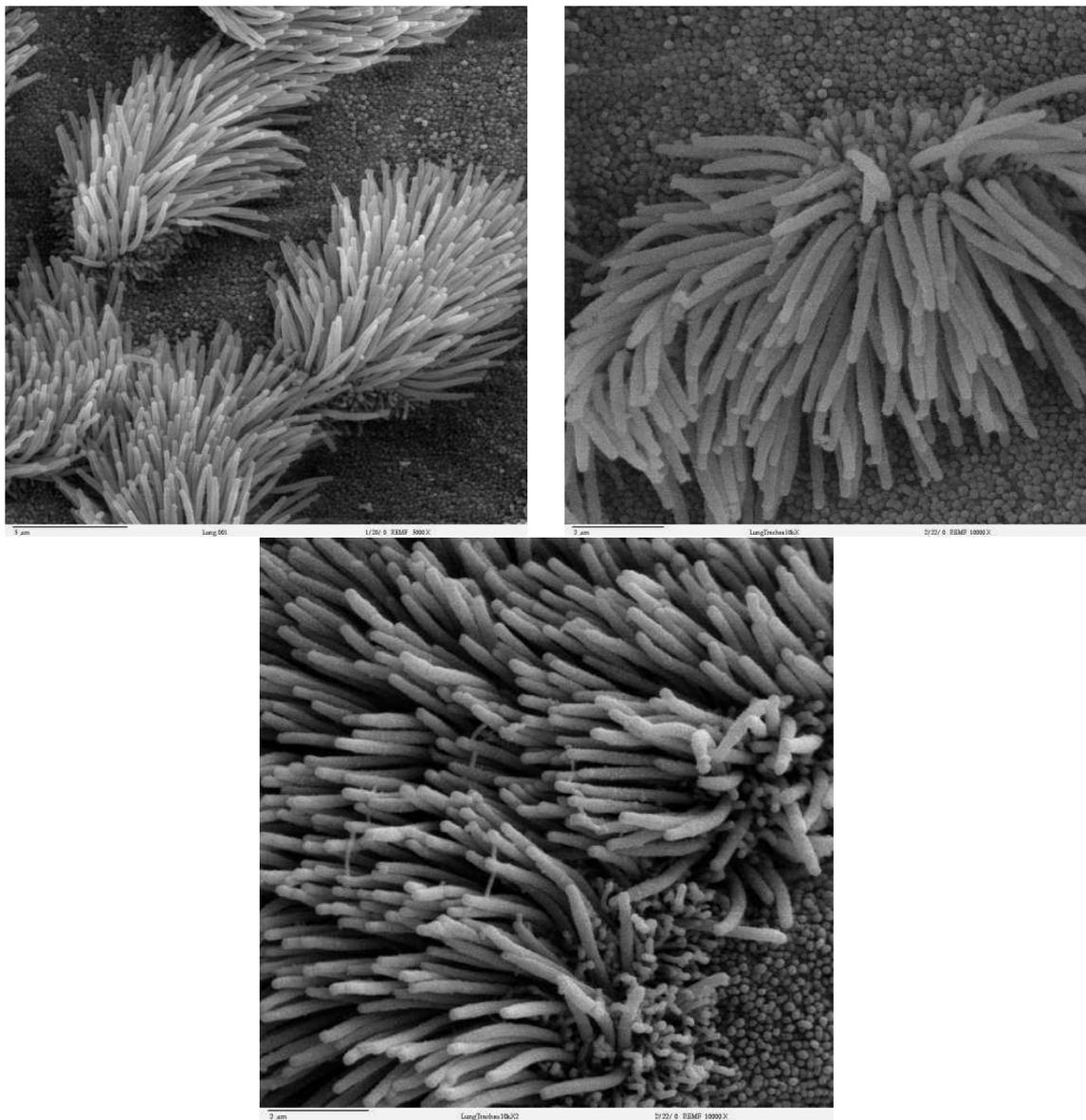


FIGURE 1.1 - Différentes vues des cils des cellules épithéliales du poumon. Images librement fournies par Dartmouth Electron Microscope Facility (<http://remf.dartmouth.edu/>).

- Tout d'abord, la composition du mucus n'est pas homogène et il faut développer un modèle qui tient compte de cette inhomogénéité. En particulier, certains termes s'ajoutent aux équations classiques de la mécanique des fluides homogènes, ce qui complique les modèles et leur résolution.
- Ensuite, il faut tenir compte de la géométrie complexe du problème, c'est à dire d'une part modéliser le mouvement des cils des cellules épithéliales, et d'autre part se donner une loi pour modéliser l'interaction avec le fluide environnant.
- Il faut également considérer le couplage entre l'écoulement du mucus et l'écoulement de l'air dans les voies respiratoires. Ces deux phénomènes en interaction constante ne sont pas de même nature en raison de leurs échelles

de temps caractéristiques : les cils battent à des fréquences de 4 à 20Hz alors que la fréquence de la respiration est de 0.25Hz. La difficulté de modélisation de ce phénomène réside dans le traitement de l'interface entre l'air et le film biologique.

- Enfin, une quatrième difficulté dans la modélisation des écoulements de films biologiques comme le mucus est le manque de mesures expérimentales in-vivo précises. Par exemple dans le cas des poumons il n'est pas possible de faire des mesures au delà de la sixième génération de bronches en raison de la géométrie complexe des voies respiratoires en arbre dyadique. Les mesures expérimentales ne sont d'ailleurs pas très précises car elles sont souvent invasives si elles sont faites in-vivo et se heurtent à un autre problème dans le cas in-vitro : la dégradation du matériel biologique vivant après les prélèvements. Ceci ajoute une difficulté supplémentaire à la modélisation : le calibrage des modèles avec des valeurs de paramètres physiques sont difficiles.

Le développement de la plate-forme intégrative est basé sur la création d'une base de données de simulations effectuées avec divers jeux de paramètres. Pour construire cette base il faut être capable de faire ces nombreuses simulations (plusieurs milliers). Cela requiert le développement d'algorithmes rapides, basés sur des méthodes numériques stables et précises. En particulier il sera impératif de ne pas assembler de matrice et de ne pas résoudre de systèmes linéaires dont les coûts de résolution sont élevés en 3D. La situation idéale étant le développement d'algorithmes efficaces de manière séquentielle, ce qui permettra, lors de la construction de la base de données, de lancer des simulations indépendantes sur chaque processeur d'un cluster de calcul.

1.1.3 Choix de modélisation

Pour modéliser ces écoulements de films biologiques plusieurs hypothèses doivent être faites et justifiées pour traiter les difficultés précédemment décrites. Pour chaque point de la liste précédente la modélisation choisie est détaillée, ainsi les hypothèses qui ont conduits à ces choix.

Modèle à viscosité variable

Les mucus ne sont pas des fluides homogènes : ils sont essentiellement composés d'eau, comme tous les fluides biologiques, ainsi que de plusieurs agents : protéines, particules inhalées, diverses cellules... Parmi ces agents, une protéine joue un rôle clé : la mucine. Elle est sécrétée par les cellules gobelets (elles aussi présentes sur la paroi bronchique) et est responsable de l'augmentation de la viscosité du fluide - voir figure 1.2 pour une illustration de l'écoulement de mucus autour des cils des cellules épithéliales (cette description sera reprise plus en détails au début du chapitre 6). À la surface, le film a tendance à être déshydraté par l'air qui circule dans les bronches, cela augmente localement la concentra-

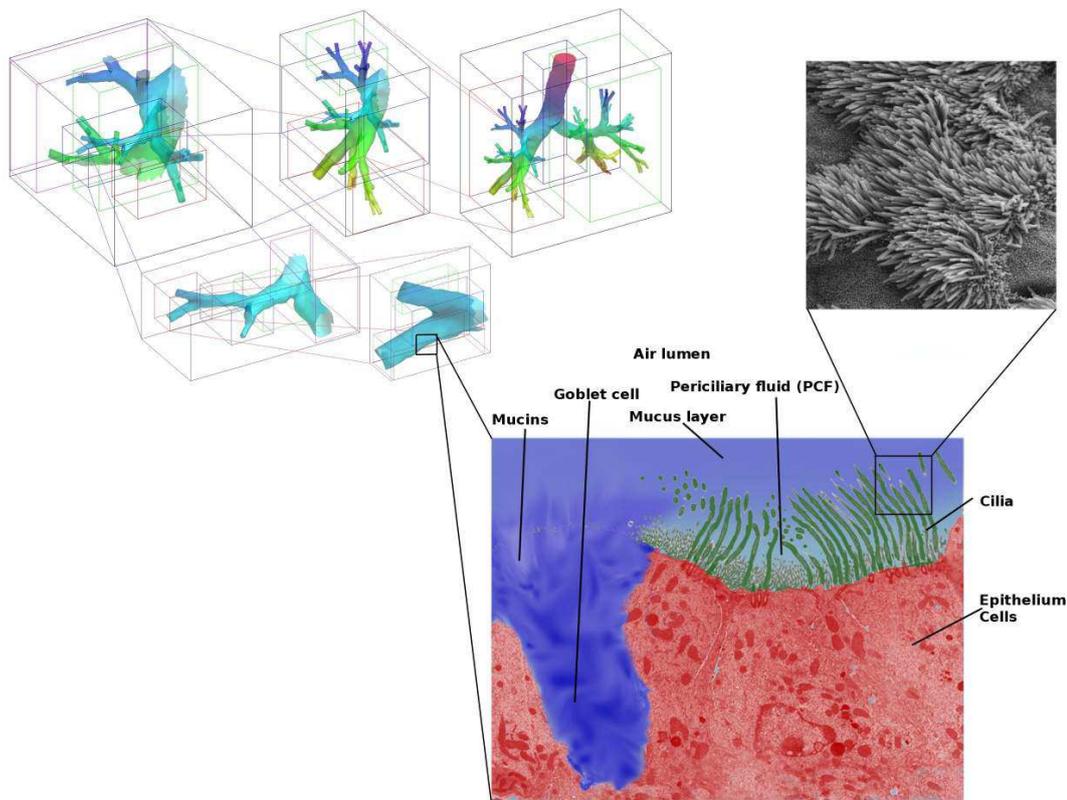


FIGURE 1.2 - Vue schématique multi-échelles des poumons humain, de la trachée et les premières générations de bronches ($\approx 1\text{cm}$) jusqu'aux cellules épithéliales ($\approx 5\mu\text{m}$).

tion de mucines et donc la viscosité. Certains auteurs considèrent d'ailleurs deux couches de fluide : la couche inférieure est appelée fluide périciliaire et la couche supérieure plus visqueuse garde l'appellation de mucus.

Ce choix de modélisation n'a pas été fait dans ce travail pour deux raisons. Compte tenu de la composition de ces deux fluides (mélange d'eau et de protéines), l'existence d'une interface (et donc de deux couches distinctes) n'est pas certaine. Dans l'hypothèse où elle existerait, elle serait extrêmement difficile à identifier et il n'y a pas de mesures expérimentales qui permettent d'ajuster convenablement ce modèle. Deuxièmement, même au sein de chacune de ces couches la composition du fluide reste non homogène et il semble que la transition entre un fluide périciliaire très aqueux et le mucus très visqueux soit continue. C'est sur cette non homogénéité que l'étude se concentrera.

Suite à des études expérimentales (détaillées plus loin dans ce manuscrit), d'autres auteurs ont cherché à modéliser les effets non newtoniens de cet écoulement. Bien que plusieurs équipes indépendantes aient fait plusieurs campagnes de mesure, l'identification de la loi de comportement du mucus reste un problème ouvert. Cela est dû notamment à la difficulté de faire des mesures expérimentales sur des matériaux vivants qui se dégradent dès qu'ils ne sont plus in-vivo.

Dans ce travail on s'intéressera notamment à l'influence de la variation de vis-

cosité des fluides biologiques sur les écoulements. En particulier, on ne considérera qu'une seule phase de fluide. La viscosité μ dépendra directement de la fraction massique α d'un certain agent responsable de ces variations de viscosité, dans le cas des mucus il s'agira de la fraction massique de mucines. Ainsi on introduira une loi du type :

$$\mu(t, x) = \Phi(\alpha(t, x)) \quad (1.1)$$

où α évoluera avec l'écoulement. Cette évolution est modélisée par une équation de convection-diffusion dans laquelle la convection domine car les mucines sont peu solubles dans l'eau.

Ce modèle est un bon compromis entre un modèle à viscosité constante et l'utilisation de lois de rhéologie non newtoniennes dont on ne connaît pas encore les domaines de validité pour ce type de fluide. Les développements effectués dans ce sens ne ferment pas la porte à un ajout ultérieur d'une loi de rhéologie non newtoniennes, comme par exemple $\mu(t, x) = \Phi(\alpha(t, x), D(u))$ (avec u la vitesse du fluide et D le tenseur des déformations).

Généralités sur le problème de Stokes

La modélisation de l'écoulement d'un fluide incompressible de viscosité μ , de masse volumique ρ est décrite par les équations de Navier-Stokes qui sont obtenues en appliquant le principe fondamental de la dynamique à un fluide :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u \right) - \operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p \\ \operatorname{div} u = 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \cdot \nabla \rho = 0 \end{cases} \quad (1.2)$$

Dans ce système u est la vitesse du fluide, p est la pression, $D(u) = (\nabla u + \nabla u^T)/2$ est le tenseur des déformations, f les forces externes exercées sur le fluide. La première équation décrit la conservation de la quantité de mouvement, la seconde équation est la contrainte d'incompressibilité et la dernière équation est la conservation de la masse.

Le nombre de Reynolds est une quantité adimensionnelle qui donne le rapport entre les forces d'inerties et les forces visqueuses qui interviennent dans l'écoulement. Son expression est la suivante :

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (1.3)$$

avec U et L les vitesses et longueurs caractéristiques. Dans le cas d'écoulements de films de mucus autour des cellules épithéliales on a $U \sim 10^{-6}$ m/s, $L \sim 10^{-6}$ m, $\rho \sim 1000$ kg/m³ et enfin $\mu \sim 10^{-3}$ Pa s. Soit :

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \sim 10^{-6} \quad (1.4)$$

Cela signifie que les forces visqueuses dominent nettement les forces d'inerties et les termes correspondants peuvent être négligés dans les équations de Navier-Stokes. Dans ce cas, on parle du problème de Stokes quasi-statique :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p \\ \operatorname{div} u = 0 \end{cases} \quad (1.5)$$

La masse volumique n'intervient plus dans l'équation de conservation de quantité de mouvement, c'est pour cela que l'équation de conservation de la masse n'a pas été réécrite. Elle peut néanmoins rester présente dans les forces externes, par exemple si on considère une force de gravité $f = \rho g$ (avec g l'accélération de la pesanteur).

Le temps t a également disparu de cette équation mais le problème peut en dépendre implicitement à travers les conditions aux limites du problème et éventuellement le second membre f .

Le problème de Stokes intervient dans de très nombreuses applications physiques dont les dimensions sont micrométriques, rassemblées sous l'appellation écoulements microfluidiques. Au-delà des écoulements de films biologiques, on citera par exemple les écoulements en milieux poreux, les écoulements dans des micro-canaux (avec de très nombreuses applications industrielles). Ces équations modélisent également des écoulements lents ; comme les écoulements gravitaires en géophysique et/ou des écoulements extrêmement visqueux (par exemple glaciers, boues, magmas, croûte terrestre, verre, goudrons, miel...).

L'une des grandes originalités du problème de Stokes est sa réversibilité en temps. Cela signifie qu'un nageur dans un fluide de Stokes doit briser la symétrie de son mouvement pour avancer. C'est ce que stipule le fameux théorème de la coquille Saint-Jacques introduit par Purcell [Purcell, 1977] à la fin des années 70 :

Théorème 1 (de la coquille Saint-Jacques). *Dans un écoulement de Stokes newtonien, une coquille Saint-Jacques ne peut pas avancer.*

En effet, pour nager, la coquille Saint-Jacques ne peut que ouvrir et fermer sa coquille. Dans un écoulement de Navier-Stokes, si l'ouverture et la fermeture ne se font pas à la même vitesse la convection fait avancer le mollusque ; dans un écoulement réversible il revient à sa position d'origine, peu importe le temps qu'il met à se refermer, voir figure 1.3.

Les applications numériques présentées dans ce manuscrit reprendront ce concept clé de non réversibilité intrinsèque au problème de Stokes linéaire.

Interaction entre le fluide et la géométrie en mouvement

Sur les parois bronchiques, les cils des cellules épithéliales oscillent à des fréquences de 4 à 20Hz. C'est ce battement qui met en mouvement le film de

Navier - Stokes :

$$-\nabla p + \eta \nabla^2 \vec{v} = \cancel{\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t}} + \cancel{\rho (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v}}$$

If $Q \ll 1$:

Time doesn't matter. The pattern of motion is the same, whether slow or fast, whether forward or backward in time.

The Scallop Theorem



FIGURE 1.3 - Illustration du théorème de la coquille Saint-Jacques de Purcell [Purcell, 1977]

mucus et l'interaction entre ce fluide et ce solide élastique doit être prise en compte. Deux degrés de complexité peuvent être distingués dans cette modélisation.

Le modèle le plus simple est le modèle dit "one-way" dans le sens où seule l'action du solide sur le fluide est prise en compte. L'action contraire n'est pas modélisée. Dans ce cas le champ de vitesse du solide et sa position sont prescrits, il est par exemple donné par la résolution d'équations de mécanique ou imposé de manière analytique.

Par opposition, d'autres modèles sont dits "two-ways" lorsque les deux sens de l'interaction sont modélisés. Les équations de mécanique du solide (rigide ou élastique) sont, dans ce cas, couplées aux équations de la mécanique des fluides, en terme de conditions aux limites et/ou de forces qui viennent enrichir les équations.

Contrairement aux solides rigides ou élastiques inertes, les cils sont "vivants" : ils utilisent de l'énergie interne qui leur permet d'entretenir un mouvement de battement. Il faut donc être capable de se donner une loi d'évolution de cette autopropulsion pour l'intégrer dans le couplage précédent.

Ce travail se cantonne à une interaction one-way : un modèle de battement ciliaire ad-hoc a été développé, on montrera qu'il est compatible avec les résultats

expérimentaux de la littérature. Ce battement se divise en deux phases distinctes : une phase de poussée (résultant de la polymérisation de microtubules) qui est suffisamment forte pour que l'hypothèse one-way soit valide, et une phase de récupération pour laquelle le module de Young du cil est moins important, dans ce cas le modèle one-way est plus discutable. Cette modélisation reste un bon compromis entre un simple batteur oscillant et un modèle two-ways plus complexe. Une extension à ce type de modèles sera abordée en conclusion.

Interaction entre le fluide et le cycle respiratoire

Comme cela a été dit précédemment, la fréquences de battement des cils pulmonaires et la fréquence du cycle respiratoire sont très différentes : la première est environ quatre cents fois plus importante que la seconde. Compte tenu de ces différences d'échelle temporelle, il est très difficile de simuler efficacement le couplage entre les deux phénomènes en raison de la petite taille des pas de temps à utiliser pour capter les battements de l'épithélium, et le grand nombre d'itérations à faire pour étudier la respiration.

Dans une étude préliminaire [Enault *et al.*, 2010] il a été montré que la respiration joue un rôle très faible sur le déplacement du film de mucus. Dans tout ce manuscrit, l'influence de l'air a été négligée et on supposera que la surface du film de mucus est parfaitement plane. Cela signifie que l'interface air-mucus n'est pas modélisée et qu'on ne résout pas la surface libre.

Le mouvement de la surface du film sera autorisé dans les directions tangentielles, c'est ce que l'on appellera la condition de surface libre plane qui ne tient pas compte de l'influence de la tension de surface (supposée très grande, ce qui supprime la courbure). Les détails de modélisation et d'implémentation de cette hypothèse seront discutés dans les chapitres 5 et 6.

1.2 ÉTAT DE L'ART, CHOIX DES MÉTHODES DE DISCRÉTISATION ET DE RÉOLUTION

Dans cette section un état de l'art des différentes méthodes numériques de résolution des précédents problèmes est dressé. Parmi ces méthodes, plusieurs datent des années 1970 et ont été largement réutilisées et perfectionnées depuis. La liste de références ci-après tâchera de faire apparaître des publications résumant ces différentes évolutions dans lesquelles le lecteur trouvera un exposé plus développé. Les avantages et inconvénients de ces différentes méthodes seront énumérés, ce qui permettra de choisir les méthodes les plus adaptées à la résolution de notre problème.

1.2.1 Méthodes de résolution pour les équations de convection

La résolution des équations de convection est un problème récurrent en mécanique des fluides, il peut s'agir de quantités scalaires (conservation de la masse par exemple) ou vectorielles (terme d'advection dans Navier-Stokes). Contrairement aux équations paraboliques ou elliptiques, il n'y a pas de termes régularisants et des méthodes robustes, stables et non oscillantes doivent être utilisées pour faire des calculs précis.

Deux approches peuvent être choisies pour résoudre ce type d'équations : une approche eulérienne utilisant une grille de discrétisation ou une approche lagrangienne utilisant une discrétisation particulaire.

L'utilisation de particules n'est pas une idée récente puisque dans [Rosenhead, 1931] des particules sont introduites et les calculs sont faits analytiquement pour étudier la déformation d'une feuille de vorticit . Son utilisation en vue d'applications num riques a  t  reprise par [Harlow, 1962] qui a introduit la technique Particle-in-Cell. Cette technique a re u de nombreuses am liorations depuis ce travail pr curseur, et a notamment  t  utilis e intens ment dans la communaut  des m thodes vortex par les  quipes de Anderson, Cottet, Leonard, Koumoutsakos, Winckelmans... Deux ouvrages rassemblent une bonne partie de ces r sultats [Cottet et Koumoutsakos, 2000; Koumoutsakos *et al.*, 2009].

Le cadre particulaire permet de transformer la r solution d'une  quation de convection en un syst me d' quations diff rentielles pos  sur des particules. Cela supprime les conditions de stabilit  de type CFL. Les r sultats de convergence datant des ann es 1980 [Anderson et Greengard, 1985; Beale et Majda, 1981, 1982; Cottet et Mas-Gallic, 1990] ont montr  que les constantes devant les termes d'erreurs sont faibles. Cela permet de faire de grands pas de temps en restant stable et pr cis. De plus le co t de cette m thode est lin aire par rapport au nombre de particules ce qui la rend tr s attractive pour des syst mes de grande dimension.

D'autres travaux se sont int ress s   la r solution des op rateurs de diffusion directement sur les particules [Degond et Mas-Gallic, 1989a,b] ou bien en d veloppant un strat gie hybride grille-particules [Couet *et al.*, 1981] performante en utilisant des op rateurs d'interpolation d'ordre  lev  et   support compact entre les deux discr tisations.

Le probl me des m thodes particuli res r side dans la d formation du nuage de particules avec le champ de vitesse, ce qui peut induire des pertes de recouvrement (c'est   dire des zones d'accumulation ou de rar faction de particules). Dans ce cas, de l'information est perdue et la solution est fauss e. Il faut donc p riodiquement r initialiser les particules pour garder le recouvrement. Cela est tr s naturel dans le cas hybride grille-particules gr ce aux interpolations.

Ces m thodes ont connus des extensions pour traiter des probl mes avec un maillage adaptatif [Bergdorf *et al.*, 2005], de la d composition de domaine [Cottet, 1990], des simulations multi- chelles [El Ossmani et Poncet, 2010], des probl mes   plusieurs milliards de degr s de libert  [Chatelain *et al.*, 2008], une impl mentation sur GPU [Rossinelli et Koumoutsakos, 2008], parmi d'autres exemples...

Contrairement aux méthodes lagrangiennes, les méthodes de résolution de la convection sur des grilles eulériennes sont contraintes par les conditions de stabilité CFL. De plus, des oscillations requièrent l'utilisation de schémas non oscillants (WENO par exemple [Jiang et Shu, 1996]) plus coûteux que les méthodes particulières qui seront utilisées dans ce travail.

1.2.2 Méthodes de résolution pour l'interaction fluide-structure

La modélisation et la simulation numérique de problèmes de mécanique des fluides couplés à des obstacles mobiles immergés a intéressé depuis de nombreuses années des scientifiques de plusieurs disciplines. De nombreuses directions de recherche ont été suivies pour augmenter la précision des solutions, faciliter l'implémentation numérique, raccourcir les temps de calcul... Une revue récente de ces résultats a été publiée [Hou *et al.*, 2012].

Maillage conforme

Une première idée pour gérer l'interaction entre une géométrie immergée en mouvement et le fluide environnant a été d'utiliser des maillages conformes. Cela signifie que le bord des obstacles est maillé de manière précise. En général des maillages triangulaires sont utilisés pour faciliter la génération des éléments près des bords, où les éléments souvent plus fins que dans le reste du domaine. Ces méthodes ont l'avantage de discrétiser uniquement le domaine fluide et l'interaction avec les obstacles se fait au niveau de l'interface en appliquant des conditions aux limites. Un exemple d'un tel maillage est donné sur la figure 1.4 pour une ellipse en 2D.

L'avantage de cette méthode est sa facilité d'implémentation lorsqu'on dispose de deux solveurs : l'un pour les équations fluides, l'autre pour la partie structure. Un couplage peut alors être envisagé et les informations sont échangées au niveau de l'interface.

Lorsque les obstacles sont mobiles, cette méthode impose un déplacement du maillage pour que le bord du maillage du fluide coïncide avec le bord des obstacles. Le maillage est alors déformé avec une formulation arbitraire lagrangienne eulérienne (ALE) qui a été développée dans les années 1970 [Hirt *et al.*, 1974]. De nombreuses améliorations ont été publiées depuis et [Hu *et al.*, 2001] rassemblent ces principaux résultats.

Lorsque le maillage est déplacé et que les éléments sont déformés, il faut régulièrement générer un nouveau maillage. Ce procédé peut s'avérer coûteux lorsque les simulations utilisent un raffinement élevé, particulièrement en 3D. De plus, pour bien approcher le bord du domaine, il faut utiliser de petits éléments au voisinage de l'interface, particulièrement lorsque des contacts entre obstacles sont étudiés [Mauray, 1999]. Cela contraint les conditions de stabilité des schémas numériques utilisés ensuite pour l'intégration. De plus, cette manière de gérer l'interface doit être combinée avec des méthodes qui s'adaptent bien sur ce type de maillage, à savoir la méthode des éléments finis ou la méthode des volumes

finis. Cela signifie qu'il faudra assembler un système linéaire et la contribution des petits éléments dégrade le conditionnement du système linéaire assemblé. Chaque fois que le maillage est modifié, ces systèmes linéaires doivent être ré-assemblés. La résolution de ces systèmes devient difficile en 2D et, compte tenu de la taille des problèmes, d'autres méthodes doivent être utilisées en 3D. C'est dans ce contexte que les méthodes de domaine fictif ont été étudiées.

Méthodes de frontières immergées

La méthode de frontières immergées a été introduite par Peskin [Peskin, 1977] pour modéliser les écoulements sanguins dans le coeur en interaction avec ses parois élastiques. Depuis cette première étude, de nombreux travaux sont venus améliorer la méthode, des résumés de ces différents résultats ont été publiés dans [Peskin, 2003; Mittal et Iaccarino, 2005].

Cette méthode consiste à utiliser une collection de particules lagrangiennes pour décrire le domaine fictif : la surface des obstacles immergés, et de résoudre dans un cadre eulérien les équations fluides sur un maillage fixe et non conforme, voir figure 1.5. Sur cette surface, chaque particule porte une force décrivant le mouvement de l'interface solide-fluide. Elle est en général calculée avec des lois de comportement de la mécanique des structures (élasticité ou mouvement rigide).

Ces forces, portées par les particules, sont ensuite utilisées dans le second membre de l'équation de quantité de mouvement. Cette contribution est une somme de masses de Dirac localisées sur chaque particule. Des techniques de régularisation sont ensuite utilisées pour étaler numériquement ces masses de

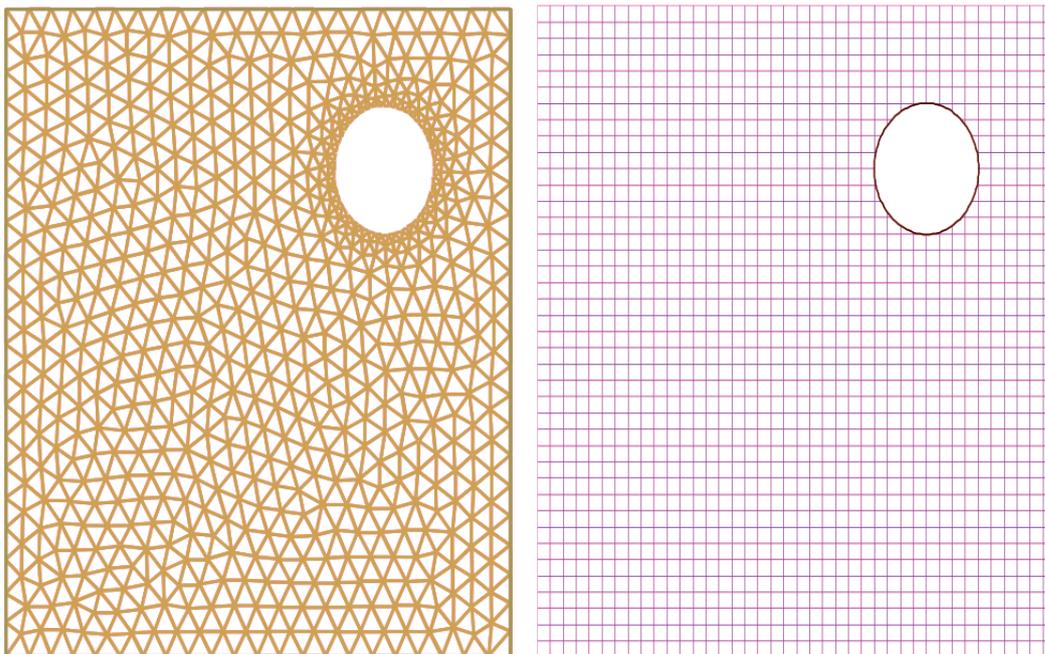


FIGURE 1.4 - Exemple de maillage conforme triangulaire et d'un maillage non conforme cartésien d'une ellipse en deux dimensions.

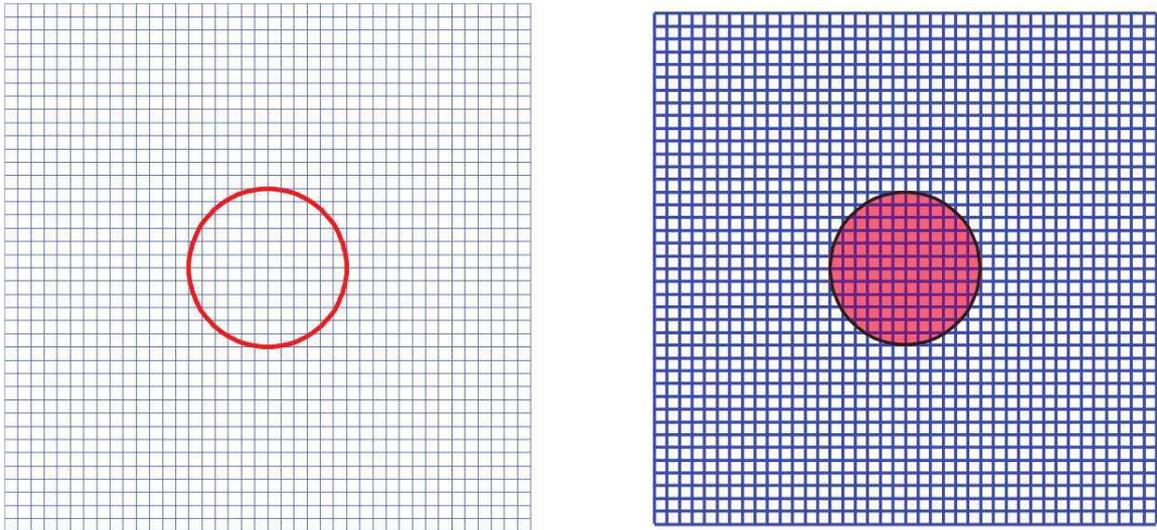


FIGURE 1.5 - Méthodes de domaines fictifs : différence entre la méthode de surface immergée à gauche et la méthode de domaine fictif volumique à droite, cas d'un disque en 2D. L'obstacle est repéré par la partie rouge dans chaque méthode.

Dirac sur les points du maillage eulérien qui ne coïncident pas avec les particules. Une fois le champ de vitesse fluide calculé, l'interface peut être déplacée.

Le point clé de cette méthode est le transfert des termes de forces des particules Lagrangiennes sur le maillage. Pour cela, un choix de régularisation de la masse de Dirac doit être fait. En général cela consiste à étaler l'interface sur quelques mailles de la grille [Poncet, 2009].

Dans [LeVeque et Li, 1994] une généralisation appelée méthode d'interfaces immergées vient résoudre ce problème en injectant directement les sauts des dérivées normales dans un schéma aux différences finies, dont les coefficients sont modifiés au voisinage de l'interface. Dans [Boffi et Gastaldi, 2003] les masses de Dirac sont traitées directement dans la formulation variationnelle associée à une discrétisation en élément finis.

Outre ce problème de gestion des termes singuliers au second membre, le coût de la méthode est proportionnel à la taille et au nombre d'obstacles. Avec de trop nombreux solides, le nombre de particules et de forces calculer augmente, de même lorsque le raffinement de l'interface devient plus fin.

Méthodes de domaine fictif volumique

La classe des méthodes de domaines fictifs volumiques regroupe un grand nombre de méthodes d'interaction entre le fluide et des obstacles immergés. Le point commun de toutes ces méthodes est qu'elles n'utilisent pas de maillages conformes mais considèrent l'interaction à travers un domaine solide $\mathcal{B}(t)$ qui évolue au cours du temps. Ces méthodes considèrent les obstacles de manière volumique et non de manière surfacique comme dans les méthodes de frontières immergées, voir figure 1.5. Cette méthode a d'ailleurs été introduite comme une

extension dans le volume des obstacles de la méthode de frontières immergées : dans [Glowinski *et al.*, 1994] les auteurs introduisent des multiplicateurs de Lagrange pour modéliser une condition de Dirichlet sur le bord des obstacles. Dans une série de papiers, résumés dans [Glowinski *et al.*, 2001], la même équipe a perfectionné la méthode en l'étendant sur le volume des obstacles et en intégrant un modèle pour les collisions entre obstacles rigides. Ces travaux ont été développés dans un contexte de sédimentation de particules sphériques.

Toujours dans un contexte de solides rigides, et toujours dans la même équipe de recherche, [Patankar *et al.*, 2000] applique une contrainte de rigidité dans les obstacles via un multiplicateur de Lagrange qui joue le rôle d'une force volumique. Enfin, une autre méthode a été de formuler une méthode de projection sur les mouvements rigides [Patankar, 2001; Sharma et Patankar, 2005].

Une autre méthode a été introduite dans [Angot *et al.*, 1999] : la méthode de pénalisation. Cette méthode permet de traiter efficacement des conditions de Dirichlet dans le volume des obstacles. Pour cela, un terme de pénalisation est rajouté dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement uniquement sur les noeuds qui se trouvent dans le domaine fictif volumique du solide. L'avantage de cette méthode est qu'elle nécessite simplement de connaître le champ de vitesse des obstacles et leur fonction caractéristique, ce qui rend son implémentation aisée.

Dans [Carbou et Fabrie, 2003], une analyse complète de couche limite est détaillée dans le cadre des équations de Navier-Stokes pour un fluide homogène. Les ordres de convergence observés numériquement dans [Angot *et al.*, 1999] y sont retrouvés. D'autres validations numériques ont été présentées dans [Khadra *et al.*, 2000] avec une pénalisation de type Brinkman (obstacles poreux). D'autres travaux d'analyses pour le problème de Stokes et la pénalisation de Brinkman ont été publiés dans [Angot, 1999].

L'analyse numérique de la méthode de pénalisation a été présentée dans [Maury, 2009] où il est montré que la méthode est d'ordre 1 en norme L^2 et d'ordre $\frac{1}{2}$ en norme H^1 car il n'y a pas de raccord des dérivées normales du champ de vitesse. Il est cependant possible de récupérer une précision à l'ordre optimale (correspondant à la méthode de discrétisation) : dans [Fabrèges et Maury, 2012] un prolongement du champs de vitesse à l'intérieur des obstacles est utilisé. Il est calculé en minimisant une fonction coût avec une méthode de gradient conjugué. Dans [Chantalat *et al.*, 2009] la solution est prolongée itérativement dans l'obstacle à l'aide de fonctions level-set et d'équations de transport. Dans [Sarhou *et al.*, 2008], une autre méthode est présentée : les auteurs modifient le champ de vitesse sur les points de grille à l'intérieur des obstacles et voisins de l'interface, avec des extrapolations d'ordre 2. Ces deux dernières méthode nécessitent de connaître précisément la position de cette interface, ce qui est naturel si les obstacles sont repérés par des fonctions level-set.

L'utilisation de fonctions level-set permet également de gérer un couplage two-ways avec des solides rigides à travers la pénalisation [Coquerelle et Cottet,

2008].

Cette méthode de pénalisation a également été utilisée avec succès dans la communauté des méthodes vortex où il est possible de pénaliser directement la vorticit   [El Ossmani et Poncet, 2010; Gazzola *et al.*, 2011] ou la vitesse [Rossinelli *et al.*, 2010] en utilisant un splitting ad  quat [Cottet et Koumoutsakos, 2000].

Enfin, une autre variante de cette m  thode de p  nalisation a   t   pr  sent  e pour g  rer des obstacles rigides [Janela *et al.*, 2005; Lefebvre, 2007]. Dans ces travaux, au lieu de p  naliser la vitesse, les auteurs p  nalisent les contraintes pour qu'elles s'annulent dans les obstacles. Cette m  thode marche bien mais elle couple la r  solution des trois composantes de la vitesse qui est calcul  e avec une m  thode d'  l  ments finis. Il a   t   not   que les termes p  nalis  s d  t  riorient le conditionnement, cette m  thode n'est pas forc  ment adapt  e    des calculs en 3D.

Il existe un troisi  me type de m  thodes, que l'on pourrait ranger entre les m  thodes de domaine fictif et les m  thodes de maillage conforme. La diff  rence avec ces m  thodes, dont les principes viennent d'  tre pr  sent  s, est la consid  ration d'une interface volumique entre le fluide et les obstacles.

La Fat Boundary Method [Maury, 2001; Bertoluzza *et al.*, 2005, 2011] utilise ce principe en d  finissant deux maillages. Le premier est r  gulier, non conforme, sur le domaine complet ce qui permet d'utiliser des solveurs rapides. Le second est beaucoup plus fin, d  finit au voisinages des obstacles et conforme, ce qui permet de r  soudre le probl  me plus finement o   l'erreur se concentre avec les m  thodes de type p  nalisation. Le couplage entre les deux maillages est fait d'une part    l'aide d'une m  thode it  rative de type d  composition de domaine, d'autre part en prescrivant un saut de d  riv  e normale port  e par l'interface, dans le probl  me global. Cette m  thode permet de retrouver un ordre de convergence optimal, mais les m  mes probl  mes d'impl  mentation se posent pour le maillage conforme (g  n  ration, d  placement et remaillage). Cette m  thode a pour l'instant   t   impl  ment  e en 2D avec des bons r  sultats de convergence pour plusieurs obstacles. L'impl  mentation 3D, et l'analyse des performance num  riques reste un probl  me ouvert.

Une autre approche est de consid  rer la m  thode de domaine fictif avec une interface diffuse, elle aussi volumique. Cette approche a   t   d  velopp  e dans [Ram  mi  re *et al.*, 2007] pour imposer des conditions limites sur un domaine complexe de calcul, r  solu num  riquement dans un domaine cart  sien plus grand, plus simple g  om  triquement et qui permet l   aussi d'utiliser des solveurs rapides. Les conditions limites de l'interface sont impos  es sur l'interface diffuse avec une m  thode de p  nalisation, en utilisant un maillage tr  s fin bas  e sur des m  thodes de raffinement de maillage adaptatif.

La m  thode de p  nalisation volumique de la vitesse a   t   choisie pour la mod  lisation de l'interaction fluide structure dans ce travail. Elle a l'avantage de ne pas avoir besoin d'une localisation pr  cise de l'interface, la fonction caract  ristique des solides   tant suffisante. De plus, elle utilise un maillage fixe, non conforme qui peut   ventuellement   tre choisit cart  sien. Cela permettra par la suite d'utiliser

des solveurs rapides compatibles avec cette discrétisation et qui ne nécessitent pas d'assemblage de matrices. Le coût de la méthode ne dépendra pas de la nature des obstacles (forme, taille...) si ces solveurs traitent facilement les termes pénalisés.

Méthodes lagrangiennes basées sur les solutions fondamentales

Enfin un quatrième type de méthode d'interaction fluide structure repose sur le développement des solutions en fonction des solutions fondamentales. Cette méthode adaptée aux écoulements de Stokes exploite la linéarité du problème lorsque la viscosité est constante. Cette méthode appelée Stokeslets a été introduite dans [Cortez, 2001] en 2D et dans [Cortez *et al.*, 2005] en 3D. La méthode repose sur le calcul de point de forces répartis dans les obstacles ou sur leurs interfaces à partir des solutions fondamentales du problème de Stokes à viscosité constante, basées sur les fonctions de Green. La méthode a été adaptée à des conditions aux limites périodiques [Leiderman *et al.*, 2013].

Deux arguments s'opposent à l'utilisation de cette méthode dans ce travail. Tout d'abord la méthode n'est valable qu'à viscosité constante ce qui n'est pas compatible avec le couplage non linéaire décrit précédemment. Deuxièmement, le coût de calcul dépend du nombre de points de force créés (en résolvant un système linéaire plein) et la méthode est limitée lorsqu'on s'intéresse à des géométries trop lourdes.

1.2.3 Méthodes de résolution pour le problème de Stokes

Plusieurs méthodes de résolution du problème de Stokes ont été développées dans la littérature. Une première méthode vient d'ailleurs d'être présentée : la méthode des Stokeslets que nous n'utiliserons pas (les raisons ont été exposées précédemment). La méthode choisie devra être transposable au cas à viscosité variable.

La principale difficulté dans la résolution de ce problème est le traitement de l'incompressibilité qui peut être vue comme une contrainte associée à un multiplicateur de Lagrange : la pression. Une manière directe mais coûteuse pour résoudre ce problème est d'utiliser une méthode de discrétisation spatiale du type différences/éléments/volumes finis sur le problème quasi-statique complet (1.5). Il s'agit dans ce cas de discrétiser les trois équations de quantité de mouvement et la contrainte d'incompressibilité. Un système linéaire est assemblé et résolu avec des méthodes adéquates. Le problème de ce procédé est, d'une part, la taille du système linéaire qui grandit vite en 3D et oblige à utiliser des méthodes massivement parallèles pour les résoudre. D'autre part, un second problème vient de la matrice en elle même, qui est très mal conditionnée, surtout lorsqu'on y ajoute des termes de pénalisation.

Une méthode utilisée avec succès pour résoudre les équations de Navier-Stokes, est la méthode vortex. Au lieu de résoudre les équations avec les inconnues (u, p) , la base de la méthode (et de ses variantes) est de prendre le rotationnel de l'équation

de quantité de mouvement, cela élimine la pression des équations et les inconnues sont la vitesse et la vorticité (u, ω) , liées par la relation $\omega = \text{curl}u$ (contraintes par $\text{div}u = 0$). Ces méthodes sont utilisées avec des méthodes de splitting pour séparer la résolution des phénomènes de convection et de diffusion. Un panorama des résultats fondateurs de ces méthodes peut être consulté dans [Cottet et Koumoutsakos, 2000]. Ces méthodes ont été très utilisées dans la communauté des méthodes particulières lagrangiennes ou hybrides grille-particules.

Cette méthode ne s'adapte pas très bien aux écoulements à viscosité variable : en prenant le rotationnel de l'équation de quantité de mouvement des dérivées secondes de la viscosité apparaîtront. Leur calcul peut devenir instable particulièrement si les champs de viscosité sont raides.

Une autre alternative (efficace à viscosité constante) peut être de prendre la divergence de l'équation de quantité de mouvement : dans ce cas, la vitesse est éliminée et la pression est la solution d'un problème de Poisson, la vitesse étant récupérée en résolvant ensuite l'équation de quantité de mouvement originale avec le gradient de pression au second membre.

Une troisième classe de méthodes, qui a été utilisée dans de nombreux travaux pour les problèmes de Stokes et Navier-Stokes, est la méthode de lagrangien augmenté [Fortin et Glowinski, 1983]. Elle repose sur la formulation du problème de Stokes sous la forme d'un problème d'optimisation d'une fonctionnelle sous contrainte (l'incompressibilité). La méthode utilise un multiplicateur de Lagrange pour enrichir la fonctionnelle et résoudre un problème de point-selle non contraint. Un terme d'augmentation qui s'annule quand la contrainte est satisfaite peut également être ajouté pour accélérer la convergence en régularisant la fonctionnelle. Dans les algorithmes de résolution, la contrainte d'incompressibilité $\text{div}u = 0$ est relaxée en $p^k = p^{k-1} - r \text{div}u^k$ (avec k l'indice itératif et r un paramètre de relaxation). Une des méthodes d'optimisation qui a été fréquemment utilisée pour résoudre ces problèmes est l'algorithme d'Uzawa.

D'une manière similaire, un terme $\lambda \nabla \text{div}u^k$ peut être ajouté dans l'équation de quantité de mouvement et traité de manière implicite, tout en utilisant une relaxation identique de la contrainte d'incompressibilité. Les méthodes de compressibilité artificielle peuvent être vues comme un cas particulier avec $\lambda = r$ [Chorin, 1967].

Ces méthodes permettent d'obtenir un champ de vitesse avec une divergence de l'ordre de $\mathcal{O}(1/r)$, mais souffrent de deux défauts. D'une part, le traitement implicite du terme supplémentaire dans l'équation de quantité de mouvement (ou la fonctionnelle) couple la résolution des trois composantes du champ de vitesse, ce qui implique l'assemblage et la résolution d'un grand système linéaire. D'autre part, le conditionnement de ce système est détérioré avec de grandes valeurs de r ; même si cela réduit le nombre d'itérations la résolution devient plus longue. Il faut donc faire un compromis entre la rapidité de la résolution et la précision de la contrainte. Un autre problème dans ces algorithmes est d'ajuster les paramètres de relaxation et d'augmentation, ce qui est souvent fait de manière empirique.

La gestion de l'incompressibilité peut également être traitée avec des méthodes à pas fractionnaire plus ou moins élaborées qui peuvent être rangées dans la classe des méthodes de projection. La première version de cette méthode a été introduite par [Chorin, 1968] et [Temam, 1969]. Elle consiste à estimer le champ de vitesse de l'écoulement en résolvant la conservation de la quantité de mouvement sans le terme de pression, cette solution est ensuite projetée sur les champs solénoïdaux avec un projecteur scalaire à partir duquel la pression peut être récupérée. Le principal problème de ces méthodes est le manque de précision sur la composante tangentielle du champ de vitesse projeté en raison de l'apparition d'une couche limite près des bords. Depuis ces travaux, de nombreuses versions de la méthode ont vu le jour pour la rendre la plus efficace et précise possible : on citera notamment une version incrémentale et une version rotationnelle incrémentale qui améliore nettement l'ordre de convergence en temps (et donc diminue l'erreur de la couche limite) en profitant des calculs effectués aux pas de temps précédents. D'autres méthodes utilisent une correction à l'envers, c'est à dire en résolvant la pression dans l'étape d'estimation, mais en tenant compte des termes visqueux seulement dans la correction. Tous ces résultats ont été regroupés dans [Brown *et al.*, 2001] et [Guermond *et al.*, 2006].

D'autres méthodes de projection ont été développées plus récemment par Angot et ses collaborateurs [Jobelin *et al.*, 2006] dans la lignée de [Shen, 1995] : les méthodes de projection-pénalisation. Cette méthode ressemble à la méthode de projection incrémentale, car le gradient de pression reconstruit au temps précédent est utilisé dans l'équation d'estimation. La particularité est l'ajout dans cette équation d'un terme de pénalisation de la divergence du champ estimé : $\lambda \nabla \text{div} u$ (avec λ le paramètre de pénalisation), dans le même esprit que les méthodes de compressibilité artificielle. L'analyse de la méthode a été présentée dans [Angot *et al.*, 2009]. Le principal défaut de ces méthodes est que l'ajout du terme de pénalisation couple la résolution des trois (deux en 2D) composantes du champ de vitesse et que le conditionnement de ce système grandit avec le terme de pénalisation. Les résultats de convergence sont néanmoins meilleurs que ceux des méthodes précédentes. Une extension de cette méthode a été de calculer un projecteur vectoriel (au lieu d'un scalaire dont on calcule le gradient pour corriger le champ estimé) qui vient compenser les erreurs commises à l'estimation [Angot *et al.*, 2011]. Cette méthode dépend d'un paramètre de pénalisation et d'un paramètre d'augmentation. Elle permet de s'affranchir du problème de couche limite, mais la divergence du champ corrigé dépend du paramètre de pénalisation.

Dans ce travail une méthode de ce type a été développée, il s'agit d'une méthode de projection scalaire adaptée au cas quasi-statique. Un grand soin sera apporté au traitement de la vitesse tangentielle résiduelle qui pose un problème critique dans ce cas : en raison de l'absence de dérivée temporelle dans l'équation de quantité de mouvement la version incrémentale n'est pas triviale. Cette méthode a l'avantage d'être compatible avec les discrétisations choisies et de faire apparaître des problèmes bien connus : Poisson ou Helmholtz dont la résolution sera également discutée.

1.2.4 Méthodes de discrétisation

Les différents choix qui ont été justifiés dans les paragraphes précédents nous amènent à considérer une discrétisation spatiale hybride utilisant à la fois une grille fixe et un nuage de particules. Pour transférer efficacement les informations entre la grille et les particules, des méthodes d'interpolations seront indispensables. Les méthodes particulières décrites précédemment ayant un coût de calcul linéaire, il faudra que la résolution du problème de Stokes soit rapide pour ne pas ruiner ce résultat.

Dans ce contexte de simulations 3D de grandes dimensions, la résolution de systèmes linéaires est bannie : les méthodes de résolution directes ont un coût quadratique et les résolutions itératives seront difficiles en raison du conditionnement des matrices (détérioré par les termes de pénalisation notamment). La discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement ne sera donc pas traitée avec une méthode d'assemblage basée sur une méthode d'éléments/différences/volumes finis.

L'algorithme à pas fractionnaire de projection permet de transformer la résolution de l'équation de conservation de la quantité de mouvement en une suite de problèmes elliptiques de Poisson ou de Helmholtz. Ces équations peuvent être résolues sans assemblage avec des solveurs rapides ou des méthodes sans maillage basées sur les fonctions de Green. Ici, les solveurs rapides seront utilisés car ces fonctions ont un support trop grand à faible nombre de Reynolds (ce point sera détaillé par la suite). Ces solveurs rapides, qui ne nécessitent pas d'assemblage, sont basés sur une connaissance a priori de la structure des opérateurs, discrétisés sur une grille cartésienne régulière. Cette technique est parfaitement compatible avec la méthode de pénalisation.

1.2.5 Applications aux fluides biologiques

Comme cela a été souligné dans les précédents paragraphes, les méthodes numériques développées sont destinées à simuler les écoulements de films de mucus autour des cellules épithéliales du poumon. Ces résultats sont présentés dans le chapitre 6 de ce document. Une présentation plus détaillée du problème biologique ainsi que les références bibliographiques sur l'état de l'art expérimental et numérique de ces problèmes précède ces résultats.

Les algorithmes développés dans le cadre de ces écoulements s'appliquent à d'autres situations biologiques, mais également à des écoulements plus généraux. Deux illustrations sont également données dans le chapitre 6 avec l'étude de la nage d'un spermatozoïde et des écoulements en milieux poreux.

1.3 CONTRIBUTIONS

L'écoulement du mucus pulmonaire, en interaction avec les cellules épithéliales du poumon n'avait pas encore été étudié en considérant des fluides non homo-

gènes en trois dimensions. Pour cela, il faut être capable de modéliser et simuler le battement des cils des cellules épithéliales, puis de coupler ce mouvement élastique avec les équations de la mécanique des fluides décrivant l'écoulement. La non homogénéité du fluide devra être prise en compte dans ces équations et les méthodes numériques devront être capables de résoudre le couplage entre tous ces éléments. Les algorithmes devront, autant que possible, avoir un coût de calcul peu dépendant des paramètres du modèle (non homogénéité, complexité de la géométrie), ce qui permettra de faire de nombreuses simulations pour étudier l'influence de ces paramètres sur l'écoulement biologique.

D'après les hypothèses de modélisation présentées dans les paragraphes précédents, on étudie un écoulement très visqueux modélisé par les équations de Stokes. Le fluide n'est pas homogène et il interagit avec des obstacles mobiles immergés. Le problème peut être mis en équation de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{ll} u = \bar{u} & \text{dans les obstacles} \\ -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p & \text{dans le fluide} \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans le fluide} \\ \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{partout dans le domaine de calcul} \\ \mu = \Phi(\alpha) & \text{partout dans le domaine de calcul} \end{array} \right. \quad (1.6)$$

où u est la vitesse du fluide, \bar{u} est la vitesse des obstacles, p est la pression, $D(u) = (\nabla u + \nabla u^T)/2$ est le tenseur des déformations, f un champ de forces externes, α est la fraction massique d'un certain agent dont la viscosité μ dépend à travers la loi Φ .

Ce travail se concentre sur le développement de méthodes de résolution rapides, stables et précises pour calculer numériquement la solution de ce problème, dont l'existence et l'unicité sont montrés. Les algorithmes utilisent des méthodes de splitting pour séparer la résolution des différents phénomènes. Cela permet de choisir une méthode de discrétisation adaptée pour chaque phénomène : méthodes lagrangiennes pour la convection et méthodes eulériennes pour la diffusion.

Les méthodes numériques utilisées pour développer l'algorithme sont les suivantes :

- une méthode de pénalisation pour traiter l'interaction du fluide avec les obstacles, cela s'adapte particulièrement bien avec une discrétisation sur une grille cartésienne régulière,
- une méthode de projection itérative pour séparer la résolution de la conservation de la quantité de mouvement et l'incompressibilité, en prenant soin d'annuler les vitesses tangentielles résiduelles,
- un splitting en temps pour séparer la résolution des phénomènes de transport et de diffusion dans l'équation de convection-diffusion,
- des interpolations d'ordre élevé pour le transfert d'informations entre la grille et particules.

La plupart de ces méthodes numériques ont été introduites dans le cadre des équations de Navier-Stokes instationnaires et plusieurs développements seront présentés pour les adapter à la résolution du problème (1.6). Une série de cas

tests sont présentés pour valider les ordres de convergence, la conservation et la stabilité des méthodes. Les performances de calcul sont très bonnes grâce à trois qualités de l'algorithme :

- les méthodes particulières ont un coût linéaire par rapport au nombre de degrés de liberté (notamment les méthodes de remaillage),
- la méthode de projection conduit à la résolution d'une suite de problèmes de Poisson et de Helmholtz. Des solveurs rapides sur grilles régulières sont particulièrement performants avec des coûts de calcul de l'ordre de $\mathcal{O}(N \log N)$. La résolution des problèmes de Helmholtz est ensuite remplacée par une méthode basée sur la formule de Sherman-Morrison-Woodbury et l'algorithme GMRES pour ne résoudre que des problèmes de Poisson, moins coûteux en temps de calcul et en occupation mémoire,
- le temps de calcul est ainsi peu dépendant du nombre d'obstacles immergés.

Le code de calcul construit à partir de ces différents éléments a été utilisé pour simuler des écoulements de films biologiques, l'application principale étant l'étude de la clairance mucociliaire dans les poumons humains. Des simulations autour de cellules composées d'un à plusieurs dizaines de cils sont présentées. Les bonnes performances détaillées précédemment permettent de faire des calculs de manière séquentielle avec plusieurs millions de points de grille, cela permet d'utiliser des clusters de calcul pour étudier l'influence des paramètres biologiques sur l'efficacité de la clairance mucociliaire : chaque processeur effectue une simulation avec un jeu de paramètres (différent pour chaque processeur). Il est ainsi possible d'identifier les paramètres qui jouent un rôle dominant dans ces phénomènes biologiques.

Comme cela a été souligné dans la section précédente, les algorithmes numériques et le code de calcul développés dans le cadre des écoulements de mucus pulmonaire s'appliquent à d'autres écoulements. Des simulations pour un autre fluide biologique seront présentées : la modélisation de la nage d'un spermatozoïde. Deux exemples d'écoulements en milieux poreux complètent la présentation.

1.4 ORGANISATION DU MANUSCRIT

Ce manuscrit est organisé en sept chapitres de la manière suivante :

Dans le chapitre 2, la méthode de résolution du problème couplé (1.6) est décrite. Ce chapitre est divisé en deux parties, d'une part le détail de la résolution de l'équation de convection-diffusion est présenté sans s'intéresser au champ de vitesse u qu'on suppose calculable. La deuxième partie se focalise justement sur le calcul de ce champ de vitesse, solution du problème de Stokes en interaction avec la géométrie complexe.

Le chapitre 3 regroupe plusieurs cas test de validation de chaque partie de l'algorithme à pas fractionnaire introduite au chapitre 2. Parmi ces validations, on étudie les ordres de convergence en temps et en espace des méthodes, la conservation des variables transportées et l'efficacité des algorithmes en terme de

temps de calcul.

Le chapitre 4 est consacré à la présentation d'améliorations des algorithmes présentés au chapitre 2. La première moitié reformule l'étape d'estimation du point fixe pour ne résoudre que des problèmes de Poisson et utiliser moins de mémoire et de temps CPU. La deuxième partie donne plusieurs méthodes pour réduire le coût de l'algorithme en accélérant la convergence.

Le chapitre 5 est consacré à l'analyse du problème (1.6) et de son homologue pénalisé. En particulier il est montré que la solution du problème de Stokes pénalisé, couplé à la convection-diffusion de la fraction massique, existe et est unique. Cette solution converge, lorsque le paramètre de pénalisation tend vers zéro, vers la solution du problème (1.6).

Dans le chapitre 6, des simulations numériques d'écoulements de fluides biologiques sont présentées. La principale application est l'écoulement de films de mucus autour des cellules épithéliales ciliées dans le poumon. Une étude préliminaire de l'influence des paramètres biologiques sur l'efficacité de l'écoulement est présentée. D'autres situations d'écoulements pour lesquels les hypothèses de modélisation restent valables sont également présentées : la nage d'un spermatozoïde et des écoulements en milieux poreux.

Enfin le chapitre 7 rappelle les différents résultats de ce travail et énumère plusieurs possibilités d'amélioration du modèle, ainsi que d'autres simulations numériques envisageables.

ALGORITHMES NUMÉRIQUES

Sommaire

2.1	MÉTHODES DE RÉOLUTION POUR L'ÉQUATION DE CONVECTION-DIFFUSION	24
2.1.1	<i>Méthode de splitting pour le problème de convection-diffusion</i>	25
2.1.2	<i>Intégration temporelle de la méthode de splitting</i>	27
2.1.3	<i>Discrétisation lagrangienne de la convection</i>	29
2.1.4	<i>Discussion sur les noyaux d'interpolation</i>	31
2.1.5	<i>Remaillage particulière</i>	35
2.1.6	<i>Résolution de la diffusion de la fraction massique</i>	36
2.2	ALGORITHME RAPIDE POUR LE PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ	37
2.2.1	<i>Méthode de pénalisation pour l'interaction fluide-structure</i>	37
2.2.2	<i>Une méthode de projection sur les champs à divergence nulle</i>	38
2.2.3	<i>Méthode de point fixe multi-critère</i>	40
2.2.4	<i>Traitement explicite des termes de viscosité non homogène</i>	42
2.2.5	<i>Implémentation numérique</i>	43
2.3	RÉSUMÉ DE L'ALGORITHME COMPLET DE RÉOLUTION	47

Ce chapitre est consacré à la présentation des algorithmes de résolution développés au cours de cette thèse. Le chapitre est divisé en deux sections : d'abord la méthode de résolution pour l'équation de convection-diffusion est présentée en faisant abstraction du champ de vitesse du fluide, considéré comme une donnée. La seconde partie détaille la méthode de calcul de ce champ de vitesse, la solution du problème de Stokes en interaction avec des solides immergés en mouvement.

Dans tout le chapitre on notera Ω , un ouvert qui correspond au domaine de calcul. C'est un parallélépipède maillé régulièrement de manière cartésienne. Les obstacles occupent à l'instant t le domaine $\mathcal{B}(t)$ et $\Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(t)}$ est le domaine occupé par le fluide visqueux incompressible. D'après les hypothèses de modélisation qui ont été présentées en introduction, le problème complet qui est traité dans ce chapitre est le suivant :

$$\begin{cases} u = \bar{u} & \text{dans } \mathcal{B}(t), \\ -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p & \text{dans } \Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(t)}, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } \Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(t)}, \\ \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{dans } \Omega, \\ \mu = \Phi(\alpha) & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (2.1)$$

2.1 MÉTHODES DE RÉOLUTION POUR L'ÉQUATION DE CONVECTION-DIFFUSION

Cette partie détaille la méthode de résolution qui a été développée pour résoudre l'équation de transport de la fraction massique α . Dans ce problème, le champ de transport u est la solution du problème de Stokes. L'algorithme permettant de résoudre ce problème sera présenté dans la seconde partie de ce chapitre. Pour le moment, on considère que ce champs est une donnée et le problème considéré est le suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{dans } \Omega \\ \mu = \Phi(\alpha) & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.2)$$

Les conditions aux limites de ce problème sont implicitement prescrites par la nature de l'écoulement. Intégrons par partie sur tout le domaine de calcul l'équation (2.2) :

$$\int_{\Omega} \partial_t \alpha + \int_{\Omega} u \cdot \nabla \alpha - \int_{\Omega} \eta \Delta \alpha = [\alpha u \cdot n + \eta \nabla \alpha \cdot n]_{\partial\Omega} = 0$$

La condition aux limites naturelle est donc une condition aux limites de type Robin homogène. Si la vitesse vérifie une condition aux limites de Dirichlet homogène dans la direction normale alors cette condition aux limite est de type Neumann. Dans le cas de conditions aux limites périodiques, la fraction massique vérifie également des conditions aux limites périodiques (les mêmes arguments sont utilisés avec exactement le même calcul).

Remarque 1. La viscosité μ est, elle aussi, la solution d'une équation de convection-diffusion, mais un terme supplémentaire est ajouté. En effet puisque $\mu = \Phi(\alpha)$ on a $\partial_t \mu = \Phi'(\alpha) \partial_t \alpha$ et de même $\partial_x \mu = \Phi'(\alpha) \partial_x \alpha$. Ainsi $\partial_{xx} \mu = \Phi'(\alpha) \partial_{xx} \alpha + \Phi''(\alpha) (\partial_x \alpha)^2 = \Phi'(\alpha) \partial_{xx} \alpha + \frac{\Phi''(\alpha)}{\Phi'(\alpha)^2} (\partial_x \mu)^2$. Et donc μ est solution de l'équation suivante :

$$\partial_t \mu + u \cdot \nabla \mu - \eta \Delta \mu = -\eta \frac{\Phi''(\alpha)}{\Phi'(\alpha)^2} \|\nabla \mu\|_2^2 \quad (2.3)$$

Et si Φ est affine, c'est-à-dire $\Phi'' = 0$, alors la viscosité et la fraction massique sont solutions de la même équation. Il en va de même si la diffusion de la fraction massique est négligée.

Dans le problème (2.2) la vitesse est une fonction de la viscosité (à travers le problème de Stokes), qui est elle même une fonction de la fraction massique α . Il est ainsi possible d'écrire ce problème sous la forme d'un système dynamique autonome non linéaire :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha + F(\alpha) \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{dans } \Omega \\ [\alpha u \cdot n + \eta \nabla \alpha \cdot n]_{\partial \Omega} = 0 & \text{sur } \partial \Omega \end{cases} \quad (2.4)$$

Ce système doit être complété par une condition initiale.

Dans la prochaine section, une méthode de splitting est introduite pour séparer la résolution de la convection et de la diffusion du problème (2.4). La première est traitée de manière lagrangienne et la seconde de manière eulérienne. Le point-clé de la méthode est l'utilisation d'un outil précis pour interpoler les champs entre le nuage de particules lagrangiennes et les grilles cartésiennes, c'est l'objet de la section 2.1.4. Enfin, de bonnes performances de calculs sont garanties par le choix d'un intégrateur temporel bien choisit.

2.1.1 Méthode de splitting pour le problème de convection-diffusion

Historiquement introduit pour le traitement des équations de Navier-Stokes avec des méthodes vortex, l'algorithme de splitting permet de séparer le calcul de la convection et celui de la diffusion. Ces méthodes ont été développées par Chorin [Chorin, 1973] dans les années 70 et analysées par Beale et Majda au début des années 80 [Beale et Majda, 1981], voir par exemple [Cottet et Koumoutsakos, 2000] et ses références pour un panorama.

Cas linéaire

On s'intéresse dans cette section au problème simplifié suivant :

$$\begin{cases} \partial_t Y - AY - BY = 0 \\ Y(0) = Y_0 \end{cases} \quad (2.5)$$

où A et B sont les discrétisations de deux opérateurs. Dans la suite A sera la discrétisation d'un opérateur de convection et B la discrétisation d'un opérateur de diffusion.

La solution générale de ce problème est donnée de manière formelle par la formule suivante :

$$Y(t) = e^{(A+B)t} Y_0 \quad (2.6)$$

De la même manière en utilisant une discrétisation temporelle avec un pas de temps δt et en notant $Y(n\delta t) = Y^n$, on a :

$$Y^{n+1} = e^{(A+B)\delta t} Y^n \quad (2.7)$$

La méthode de splitting consiste à résoudre les deux problèmes suivants :

$$\partial_t Y - AY = 0 \quad \partial_t Y - BY = 0 \quad (2.8)$$

de manière séquentielle :

$$\widetilde{Y}^{n+1} = e^{A\delta t} Y^n \quad Y^{n+1} = e^{B\delta t} \widetilde{Y}^{n+1} \quad \text{soit} \quad Y^{n+1} = e^{A\delta t} e^{B\delta t} Y^n \quad (2.9)$$

De manière générale $e^{A\delta t} e^{B\delta t} \neq e^{(A+B)\delta t}$ et l'erreur commise est d'ordre 1. En effet avec un développement de Taylor, si les matrices A et B ne commutent pas, on a :

$$e^{(A+B)\delta t} = e^{A\delta t} e^{B\delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2) \quad (2.10)$$

Il est alors possible de monter en ordre avec par exemple une formule de Strang :

$$Y^{n+1} = e^{B\delta t/2} e^{A\delta t} e^{B\delta t/2} Y^n \quad (2.11)$$

qui donne une erreur à l'ordre 2, c'est-à-dire en $\mathcal{O}(\delta t^3)$ [Strang, 1968].

Cette méthode s'applique directement au cas de la convection-diffusion de la fraction massique. Le même type de résultat est obtenu dans le cas non linéaire pour le splitting des parties convectives et diffusives dans les équations de Navier-Stokes. La difficulté dans ce cas est le traitement du terme non linéaire $u \cdot \nabla u$. Dans ce cas, l'analyse de la méthode est plus complexe mais la précision du résultat est identique [Cottet et Koumoutsakos, 2000].

Ce résultat est transposable à l'équation de convection-diffusion de la fraction massique.

Splitting du problème de convection-diffusion

De la même manière que dans le cas précédent, deux problèmes distincts sont introduits : l'un de pure convection (2.12) dont on note α^c la solution et le second de pure diffusion (2.13) dont la solution est notée α^d :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha^c + F(\alpha^c) \cdot \nabla \alpha^c = 0 & \text{dans } \Omega \\ \alpha^c(0, x) = \alpha_0^c(x) & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\begin{cases} \partial_t \alpha^d - \eta \Delta \alpha^d = 0 & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial \alpha^d(t, x)}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial \Omega \\ \alpha^d(0, x) = \alpha_0^d(x) & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (2.13)$$

On introduit formellement les opérateurs $\mathcal{C}(t)$ et $\mathcal{D}(t)$, qui permettent d'associer à une condition initiale, les solutions des problèmes (2.12) et (2.13) respectivement :

$$\alpha^c(t, x) = \mathcal{C}(t)\alpha_0^c(x) \quad \alpha^d(t, x) = \mathcal{D}(t)\alpha_0^d(x) \quad (2.14)$$

Et on utilise la même discrétisation temporelle : $\alpha^n = \alpha(n\delta t)$ que dans la section précédente.

La solution peut alors être calculée avec la méthode de splitting à l'ordre un :

$$(\alpha^c)^{n+1} = \mathcal{C}(t)\alpha^n \quad \alpha^{n+1} = \mathcal{D}(t)(\alpha^c)^{n+1} = \mathcal{D}(t)\mathcal{C}(t)\alpha^n \quad (2.15)$$

Ces deux problèmes sont traités séparément de manière explicite. La convection est calculée avec une méthode lagrangienne de type Particle-in-Cell, où le champ de transport correspond au champ de vitesse, la solution du problème de Stokes. Le problème de diffusion est résolu avec un schéma explicite aux différences finies standard. Ce choix se justifie par le fait que, dans le problème de convection-diffusion (2.2) la constante de diffusion massique η est assez petite pour ne pas poser de problèmes de stabilité (induits par la CFL de diffusion).

2.1.2 Intégration temporelle de la méthode de splitting

Dans le cas où le coefficient de diffusion η est nul, plusieurs schémas d'intégration temporelle ont été implémentés : une méthode de Runge-Kutta d'ordre 2 (point milieu) et deux méthodes d'Adams Bashforth d'ordre 2 et 3. Dans ce cas particulier il s'agit simplement d'intégrer un système d'EDO (2.27) qui est dérivé dans la section 2.1.3. Une discussion sur la précision, le temps de calcul et l'occupation mémoire de ces trois méthodes est présentée dans le chapitre suivant.

Avant de détailler la discrétisation particulière de l'équation de convection et la discrétisation de l'équation de la chaleur posées sur α , une méthode d'intégration temporelle explicite du problème de splitting est présentée ci-dessous. Elle permet de profiter des effets régularisants de la diffusion avant chaque calcul de convection.

En effectuant le splitting (2.15) une erreur à l'ordre un est commise mais la constante devant le terme d'erreur est faible. Cela signifie en pratique, que pour des pas de temps pas trop petits (ce qui est naturel avec les méthodes particulières

non contraintes par les CFL), une résolution de chaque sous-pas de (2.15) avec une méthode d'ordre deux, comme Runge-Kutta 2, donnera une précision numérique de cet ordre. L'utilisation d'une telle méthode pour la résolution de α^c induit deux calculs successifs du champs de vitesse u , solution du problème de Stokes, utilisé ensuite pour transporter les particules. Le problème de convection n'ayant pas de propriétés régularisantes, le second calcul de u est plus difficile, à cause des gradients de fraction massique (et donc de viscosité) plus raides. Ces calculs sont suivis par deux étapes de diffusion (venant de la résolution de α^d avec la même méthode) qui, elle, apporte une régularisation de α .

Il est dommage de ne pas pouvoir alterner la résolution de la convection et de la diffusion, ce qui permettrait de profiter, à chaque calcul du champs de vitesse, des effets régularisant de l'équation de la chaleur. C'est pour cela qu'un nouvel algorithme de splitting à l'ordre deux a été introduit.

Cet algorithme est basé sur la méthode du point milieu qui est une variante possible des méthodes de Runge-Kutta d'ordre 2. Cette méthode consiste, pour un système dynamique générique $y' = f(y)$, à approcher la solution par une suite y_n discrétisée au temps $t_n = n\delta t$, définie de manière récursive par les relations suivantes :

$$y_{n+1} = y_n + \delta t f(y_{n+1/2}) \quad \text{avec} \quad y_{n+1/2} = y_n + \frac{\delta t}{2} f(y_n) \quad (2.16)$$

Reprenons alors l'équation de convection-diffusion qui peut être réécrite de manière formelle, pour la consistance et la stabilité linéaire :

$$\alpha' = (\mathcal{D} + \mathcal{C})\alpha \quad (2.17)$$

Avec \mathcal{D} une approximation de l'opérateur de diffusion $\eta\Delta$ et \mathcal{C} une approximation de l'opérateur de transport $-u \cdot \nabla$ (\mathcal{C} et \mathcal{D} , n'ont pas la même signification que \mathcal{C} et \mathcal{D} dans le paragraphe précédent). Avec le même argument formel de la décomposition de l'exponentielle matricielle de l'opérateur $(\mathcal{D} + \mathcal{C})$ on a la proposition suivante

Proposition 1. *Un schéma numérique de résolution d'une telle équation différentielle linéaire est d'ordre deux si il satisfait :*

$$\alpha_{n+1} = \left[1 + \delta t (\mathcal{D} + \mathcal{C}) + \frac{\delta t^2}{2} (\mathcal{D} + \mathcal{C})^2 + \mathcal{O}(\delta t^3) \right] \alpha_n \quad (2.18)$$

L'algorithme explicite utilisé ici vérifie bien cette propriété. Cela est justifié par les calculs suivants sur un pas de temps $[t_n, t_{n+1}]$:

1. Au temps t_n le champ α_n est connu,
2. Une itération de transport est effectuée sur un demi pas de temps avec la condition initiale α_n et le champ de vitesse calculé au temps t_n , comme dans une méthode du point milieu classique :

$$\tilde{\alpha}_{n+1/2} = \alpha_n + \frac{\delta t}{2} \mathcal{C} \alpha_n \quad (2.19)$$

3. On effectue ensuite une itération de diffusion sur un demi pas de temps en utilisant la solution de l'étape précédente comme condition initiale :

$$\alpha_{n+1/2} = \tilde{\alpha}_{n+1/2} + \frac{\delta t}{2} \mathcal{D} \tilde{\alpha}_{n+1/2} \quad (2.20)$$

4. Une seconde itération de transport est effectuée sur un pas de temps complet en utilisant la condition initiale α_n mais avec le champ de vitesse calculé à partir de $\alpha_{n+1/2}$:

$$\tilde{\alpha}_{n+1} = \alpha_n + \delta t \mathcal{C} \alpha_{n+1/2} \quad (2.21)$$

5. On termine enfin l'algorithme par un pas de diffusion sur un pas de temps complet, en utilisant le résultat de l'étape 4 comme condition initiale, mais en diffusant le champ obtenu à l'étape 3 :

$$\alpha_{n+1} = \tilde{\alpha}_{n+1} + \delta t \mathcal{D} \alpha_{n+1/2} \quad (2.22)$$

Cet algorithme se résume de la manière suivante :

$$\alpha_{n+1/2} = \tilde{\alpha}_n + \frac{\delta t}{2} (\mathcal{D} + \mathcal{C}) \tilde{\alpha}_n + \frac{\delta t^2}{2} \mathcal{D} \mathcal{C} \tilde{\alpha}_n \quad (2.23)$$

Et donc finalement,

$$\alpha_{n+1} = \left[1 + \delta t (\mathcal{D} + \mathcal{C}) + \frac{\delta t^2}{2} (\mathcal{D} + \mathcal{C})^2 + \frac{\delta t^3}{4} (\mathcal{D} + \mathcal{C}) \mathcal{D} \mathcal{C} \right] \alpha_n \quad (2.24)$$

Ce qui prouve que cette méthode est d'ordre 2.

Remarque 2. Lors de la dernière étape de cet algorithme, si au lieu de diffuser $\alpha_{n+1/2}$ on diffuse $\tilde{\alpha}_{n+1}$, comme dans la plupart des algorithmes à pas fractionnaires utilisant un terme de régularisation, le terme quadratique du développement est $\mathcal{C}^2 + \mathcal{C} \mathcal{D} + 2 \mathcal{D} \mathcal{C} \neq (\mathcal{D} + \mathcal{C})^2$ et le schéma perd un ordre.

L'avantage de cet algorithme est qu'il permet de récupérer une précision à l'ordre deux en temps de manière beaucoup plus régulière qu'en utilisant une formule de Strang (équation (2.11)), mais également de manière plus économique puisque, pour récupérer de l'ordre 2 avec cette formule, chaque opérateur doit être calculé individuellement à l'ordre 2.

2.1.3 Discrétisation lagrangienne de la convection

Dans cette section le détail de l'algorithme lagrangien de résolution des équations est introduit. Il est basé sur la méthode Particle-in-Cell qui a été largement utilisée pour résoudre les termes de transports dans les équations de Navier-Stokes [Cottet et Koumoutsakos, 2000]. La méthode s'étend très naturellement aux équations de transport de masse, mais également aux transports de fonctions plus raides comme les fonctions level-set [Hieber et Koumoutsakos, 2005; Sethian,

1999] ou les surfaces libres [Osher et Fedkiw, 2003; Sethian et Smereka, 2003; Scardovelli et Zaleski, 1999].

Le problème (2.4) est réécrit sans le terme de diffusion qui est traité séparément grâce à la méthode de *splitting* présentée dans la section précédente. En utilisant la dérivée particulaire $\frac{D}{Dt}$ il vient :

$$\begin{cases} \frac{D\alpha}{Dt} = \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha = 0 & \text{dans } \Omega \\ \alpha u \cdot n + \eta \nabla \alpha \cdot n = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.25)$$

La méthode *Particle-in-Cell* est fondée sur une discrétisation spatiale des inconnues sur un nuage de particules. Ces particules, localisées aux points ξ_p , ont un volume v_p et transportent une fraction massique α_p . On peut alors écrire la discrétisation lagrangienne au temps t sur le nuage de \mathcal{P} particules :

$$\alpha(t) = \sum_{p=1}^{\mathcal{P}} \alpha_p(t) \delta_{\xi_p(t)} v_p(t) \quad (2.26)$$

À l'instant t chaque particule est advectée par l'écoulement du fluide avec une vitesse $u(\xi_p(t), t)$ qui est la solution du problème de Stokes. La résolution de l'équation de transport sur ce nuage de particules a l'avantage de transformer l'équation aux dérivées partielles (2.25) en un système d'équations différentielles sur chaque particule :

$$\begin{cases} \frac{d\xi_p}{dt} = u(\xi_p(t), t) \\ \frac{d\alpha_p}{dt} = 0 \\ \frac{dv_p}{dt} = 0 \end{cases} \quad (2.27)$$

Le second membre de la troisième équation de ce système est nul car le champ de vitesse u est la solution du problème de Stokes et l'incompressibilité implique que les particules ne changent pas de volume au cours du temps.

La résolution du système d'EDO (2.27) présente un très gros avantage par rapport à la résolution de l'EDP (2.25) : il n'y a pas de condition de stabilité de type CFL, et de grands pas de temps peuvent être utilisés, même avec une discrétisation explicite (ce qui n'est pas le cas pour la résolution explicite des équations de transport). Il a également été montré que les constantes, devant les termes d'erreurs de discrétisation en temps, sont petites, ce qui ne détériore pas les erreurs même avec de grands pas de temps [Beale et Majda, 1981].

Néanmoins il existe une limitation sur le pas de temps pour les écoulements fortement non-linéaires avec de forts gradients :

$$\delta t \leq C \frac{\|u\|}{\|\nabla u\|} \quad (2.28)$$

Cette condition impose aux trajectoires des particules de ne pas se croiser ce qui limite les phénomènes de raréfaction et d'accumulation de particules [Bergdorf *et al.*, 2005] dont il est également question dans la section 2.1.5 et dans les simulations du paragraphe 6.3. En pratique, la constante C est fixée de manière ad-hoc.

Néanmoins, la discrétisation sur un nuage de particules des inconnues à transporter nécessite de connaître le champ de transport sur ces particules, qui est ici le champ de vitesse du fluide solution du problème de Stokes. Or ce champ est discrétisé sur une grille cartésienne régulière et il faut l'interpoler de la grille vers les particules. Inversement, après le transport de la fraction massique, une étape d'interpolation des particules vers la grille doit être effectuée pour calculer μ , puis u sur la grille et enfin itérer en temps. La discussion sur le choix et l'efficacité des méthodes d'interpolation est détaillée dans la section suivante.

2.1.4 Discussion sur les noyaux d'interpolation

L'utilisation couplée de méthodes lagrangiennes pour la résolution des équations de transport et de méthodes eulériennes pour les problèmes de diffusion est assez naturelle grâce aux méthodes de splitting. Cependant, les champs définis sur le nuage de particule, comme la fraction massique, doivent également être connus sur la grille, pour calculer le champ de viscosité qui intervient ensuite dans le problème de Stokes. De même, le champ de vitesse solution du problème de Stokes doit être connu sur les particules pour pouvoir les transporter.

Choix des noyaux

Il faut donc disposer d'un outil robuste pour interpoler les champs de la grille vers les particules et réciproquement des particules vers la grille. Le choix du noyaux d'interpolation $\Lambda^\epsilon = \frac{1}{\epsilon^d} \Lambda\left(\frac{x}{\epsilon}\right)$ (qui est une approximation numérique de la masse de Dirac dans l'équation (2.26), avec $d = 3$ la dimension du problème) est important pour conserver une méthode numérique robuste, sans détériorer le coût de l'algorithme.

Si le noyau d'interpolation vérifie les propriétés suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int \Lambda(x) dx = 1 \\ \int x^i \Lambda(x) dx = 0 \quad \text{pour } i \leq r-1 \\ \int x^r \Lambda(x) dx < \infty \end{array} \right. \quad (2.29)$$

La précision de la méthode d'interpolation est d'ordre r . C'est-à-dire si α^ϵ est l'interpolé de α on a :

$$\|\alpha^\epsilon - \alpha\| = \mathcal{O}(\epsilon^r) \quad (2.30)$$

En principe la valeur de ϵ est la même que le pas de maillage ce qui fait que la méthode d'interpolation est d'ordre r en espace.

Dans toutes les simulations présentées, le noyau utilisé est une tensorialisation de M'_4 , un noyau construit à partir de B-splines et de leurs dérivées [Monaghan, 1985] :

$$\Lambda^\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon^3} M_4^{\otimes 3}(x/\epsilon) \quad (2.31)$$

L'expression de M'_4 est donnée par la formule suivante, il est représenté sur la figure 2.1.

$$M'_4(x) = \begin{cases} 1 - 5x^2/2 + 3|x|^3/2 & \text{si } |x| \leq 1 \\ (2 - |x|)^2(1 - |x|)/2 & \text{si } 1 \leq |x| \leq 2 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.32)$$

Ce noyau est d'ordre 3, il est de deux fois dérivable (sauf en zéro où il l'est seulement une fois) avec un support de taille 4. C'est à dire, si ϵ a la même valeur que le pas d'espace, il y a seulement quatre points de grille qui interagissent avec la particule dans chaque dimension, voir figure 2.2. Dans ce cas, les interpolations entre grille et particules sont rapides : le coût est en $\mathcal{O}(\mathcal{P})$ (avec \mathcal{P} le nombre de particules égale au nombre de points de grille). Le traitement particulière de la convection (incluant convection des particules et interpolations) a un coût linéaire, ce qui est très intéressant pour des calculs 3D avec un raffinement élevé.

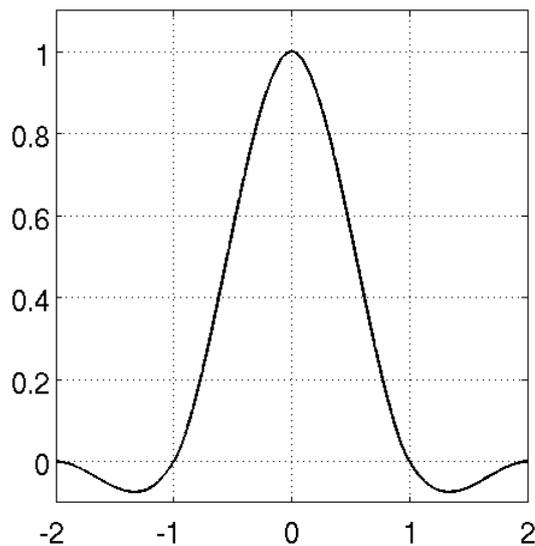


FIGURE 2.1 - Le noyau d'interpolation M'_4

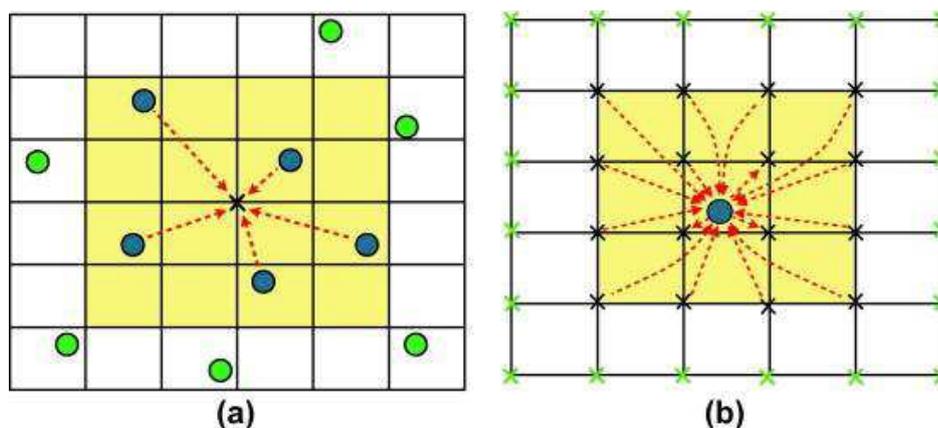


FIGURE 2.2 - Remaillage particule vers grille (a) et grille vers particule (b) en 2D avec le noyau M'_4 . Chaque particule interagit avec les points de grille situés au plus à une distance de deux points de grille d'elle (et réciproquement). Image tirée de [Buyukkececi *et al.*, 2013].

D'autres noyaux, plus récents, plus précis et d'ordre plus élevé existent dans la littérature, comme par exemple le noyau M'''_6 [Bergdorf et Koumoutsakos, 2006]. Cependant dans ce travail, les méthodes particulières lagrangiennes sont couplées à des méthodes eulériennes (présentées dans la première moitié de ce chapitre) utilisant des solveurs rapides à l'ordre 2 et la méthode de pénalisation garantit un ordre 1 de convergence. Dans ce cas, l'utilisation d'un noyau d'interpolation d'ordre trois est suffisant [Rossinelli *et al.*, 2010], les erreurs de discrétisation dominantes n'étant pas commises pendant les interpolations. De plus, l'utilisation du noyau M'_4 est un bon compromis entre régularité et précision, les noyaux d'ordres élevés pouvant s'avérer oscillants [Magni, 2011]. Dans ce même papier, des méthodes de splitting directionnel de l'interpolation permettent de simplifier la procédure 3D en une série (moins coûteuse) de trois interpolations 1D ; cela est particulièrement utile lorsque le support des noyaux devient trop grand, comme celui de M'''_6 . Dans l'algorithme développé au cours de cette thèse, la partie la plus coûteuse est le calcul du champs de vitesse (comme cela sera souligné dans le chapitre 3) et une implémentation de ce splitting directionnel n'améliorerait pas significativement les performances.

Enfin le noyau M'_4 possède par construction une propriété intéressante de B-spline :

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} \Lambda(x + j) = 1 \quad (2.33)$$

Cette propriété permet d'obtenir de bons résultats de conservation des quantités transportées, et donc de construire des schémas de transport peu diffusifs. Des illustrations numériques de ces résultats sont présentées dans le chapitre suivant.

Implémentation

L'implémentation de ces méthodes d'interpolation à l'intérieur du domaine est relativement simple. Le produit de convolution entre le champ à interpoler et le noyau d'interpolation ne pose problème que près des bords du domaine. En effet si une particule se trouve à moins d'un pas d'espace du bord, le support du noyau d'interpolation sort du domaine de calcul (voir figure 2.3).

Il existe deux possibilités pour pallier ce problème.

- La première consiste à utiliser une couche de points fantômes à l'extérieur du domaine. Leur utilisation est différente suivant le type d'interpolation :
 - > Lors d'une interpolation du nuage de particules vers la grille, les particules se trouvant à moins d'un pas d'espace du bord remplissent ces bandes lors du produit de convolution (voir figure 2.3, gauche). Il y a donc une perte d'information qu'il faut compenser à l'intérieur du domaine. En fait, l'erreur se localise dans les trois premières couches de points (compte tenu de la taille du support du noyau utilisé). La première couche de points est corrigée avec la condition aux limites. Les seconde et troisième couches sont corrigées par continuité entre le bord et l'intérieur du domaine. Les formules de correction utilisées sont à l'ordre 2, ce qui permet d'avoir une convergence de la méthode d'interpolation à l'ordre 2.5. L'utilisation de conditions aux limites périodiques est plus simple, puisqu'il suffit de rajouter la quantité portée par les points fantômes à leurs homologues de l'autre côté du domaine.
 - > Lors d'une interpolation de la grille vers le nuage de particules, l'idée est d'initialiser les points fantômes avant la convolution de sorte que la

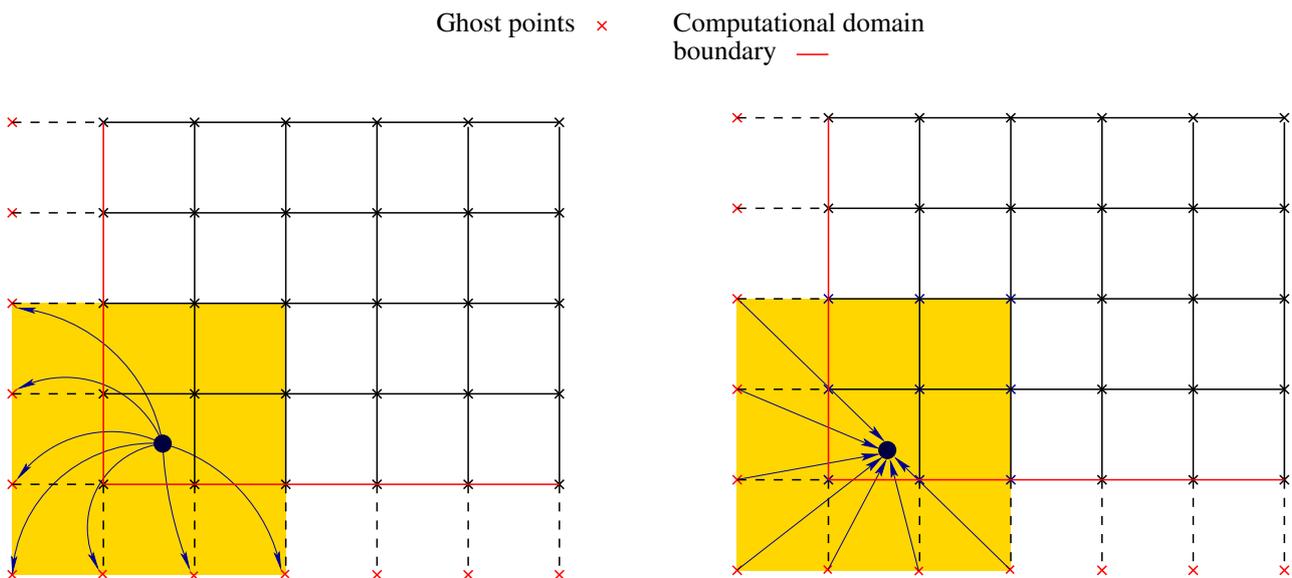


FIGURE 2.3 - Illustration 2D de l'utilisation de points fantômes près des bords dans les méthodes d'interpolations. Cela permet de traiter toutes les particules avec le même noyau.

“bonne” quantité soit portée par ces points (voir figure 2.3, droite). Cette initialisation est faite par périodicité ou par continuité comme ci dessus. L’initialisation “miroir” pour les conditions aux limites de Dirichlet ou “par recopie” pour les conditions aux limites de Neumann, donnent des résultats plus oscillants que le prolongement par continuité.

- Une autre solution consiste à utiliser un noyau décentré, comme par exemple ici à droite :

$$\Lambda_f(x) = \begin{cases} x^2 - 4x + \frac{14}{3} & \text{si } x \in [0, 2] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

La seule difficulté d’implémentation est de tester chaque particule, dans chaque direction, pour choisir le noyau à utiliser. Néanmoins le noyau Λ_f n’est que d’ordre 1 et la perte d’ordre est supérieure à la méthode des points fantômes. Des noyaux décentrés plus élaborés et avec des ordres supérieurs existent dans la littérature mais ils sont plus oscillants [Magni et Cottet, 2012].

La méthode des points fantômes a été choisie dans ce travail.

Calcul parallèle

La structure de calcul des routines d’interpolation entre la grille et les particules se prête bien au calcul parallèle. Pour chaque particule, il faut calculer la contribution des quatre points de grille les plus proches dans chaque direction (soit 64 voisins en 3D). Ce type de boucle est facilement parallélisable avec des directives OpenMP qui fonctionnent en mémoire partagée. C’est à dire que chaque particule peut accéder à tous les points de grille et il n’y a pas de communication à gérer entre les processeurs.

2.1.5 Remaillage particulière

Dans les méthodes purement particulières, la perte de recouvrement des particules est un problème récurrent. Dans les zones où le gradient de vitesse est fort, des phénomènes de raréfaction de particules (ou au contraire d’accumulation) sont constatés et il faut absolument éviter ce problème pour ne pas perdre d’information. La stratégie la plus directe consiste à recréer périodiquement un nouveau nuage de particules en effectuant deux interpolations successives, la première de l’ancien nuage de particules vers la grille, la seconde de la grille vers les nouvelles particules judicieusement ordonnées. En utilisant des noyaux d’interpolations d’ordre élevé et à support compact, le procédé n’est pas très coûteux et ajoute peu d’erreurs à la solution numérique. De plus, il est possible de combiner ce procédé à des méthodes de décomposition de domaine [Cottet, 1990] ou de maillage adaptatif [Bergdorf *et al.*, 2005].

Les méthodes de remaillage s’adaptent également très bien aux méthodes hybrides : entre les deux interpolations, le calcul de certaines quantités peut être effectué sur la grille. Notamment pour résoudre des problèmes elliptiques, comme

la reconstruction de la vitesse à partir de la vorticit  dans les m thodes Vortex-in-Cell ou la r solution d'op rateurs de diffusion, comme dans ce travail. Lorsque le remaillage est fait   chaque pas de temps la m thode est parfois appel e Particle Mesh Hydrodynamics [Chatelain *et al.*, 2007].

La cr ation d'un nouveau nuage de particules peut s'av rer tr s peu c teuse   partir d'une grille r guli re : en cr ant chaque particule exactement sur les points de grille, un seul coefficient est non nul (et  gal   un) dans le produit de convolution avec M'_4 .

2.1.6 R solution de la diffusion de la fraction massique

Gr ce   la m thode de splitting introduite dans le paragraphe 2.1.1, il a  t  possible de s parer la r solution de la convection et de la diffusion de la fraction massique. La convection est discr tis e de mani re lagrangienne avec une m thode Particle-in-Cell, comme cela a  t  pr sent  dans la section pr c dente. La r solution de la diffusion peut  tre faite de mani re explicite : le ph nom ne dominant dans cette  quation est la convection et l'explicitation du terme diffusif ne contraint pas la stabilit  de la m thode.

Pour cette discr tisation un sch ma aux diff rences finies standard   sept points est utilis . Le principal argument qui justifie ce choix est bien entendu sa facilit  d'impl mentation sur la grille cart sienne r guli re. Cela se combine tr s bien avec la m thode d'int gration temporelle d crite dans le paragraphe 2.1.2 puisque l'effet r gularisant de ce terme de diffusion est recherch  avant chaque calcul du champ de vitesse u , la solution du probl me de Stokes. Ce calcul est  galement effectu  sur la grille cart sienne et il n'y a pas besoin d'ajouter un transfert entre la grille et les particules.

Un autre choix possible aurait  t  d'utiliser une m thode dite "Particle Strength Exchange" (PSE) introduite par Degond et Mas-Gallic   la fin des ann es 1980 [Degond et Mas-Gallic, 1989a,b]. Cette m thode permet de r soudre les op rateurs de diffusion directement sur le nuage particulaire, ce qui permet de s'affranchir des interpolations r currentes entre la grille et les particules (mais pas des probl mes li s au remaillage particulaire, voir section 2.1.5). Une extension de cette m thode pour des op rateurs de d riv es spatiales quelconque a  t  introduite dans [Eldredge *et al.*, 2002b], qui ont  t  utilis es dans la communaut  des m thodes vortex ([Eldredge *et al.*, 2002a] par exemple).

Ces m thodes approchent l'op rateur de diffusion par une formule de quadrature faisant intervenir un noyau discret de diffusion. En pratique, il s'agit de faire interagir (  travers ce noyau de diffusion discr tis ) la quantit  port e par chaque particule avec les particules voisines. La taille du voisinage est directement li e   l'importance du coefficient de diffusion.

Bien que la m thode PSE soit un peu plus pr cise qu'une m thode aux diff rences finies standard [Poncet, 2006], il a  t  d cid  de ne pas utiliser cette m thode pour le calcul de la diffusion de la fraction massique. Le premier argument  tant que comme ce ph nom ne n'est pas dominant il n'est pas n cessaire

de le calculer avec la méthode la plus robuste. Le second argument a déjà été avancé : compte tenu du splitting et de la méthode d'intégration temporelle que nous avons développé, une méthode explicite de diffusion sur grille structurée s'adapte très bien et est peu coûteuse ; la méthode PSE est surtout très efficace sur des grilles non structurées où aucune hypothèse d'agencement des particules peut être faite, ce qui interdit l'utilisation de méthodes de différences finies et de solveurs rapides. Enfin, la méthode PSE est plus difficile et plus coûteuse à implémenter puisqu'elle demande des calculs de voisinages qui peuvent s'avérer très onéreux en 3D s'ils ne sont pas méticuleusement développés, en se basant sur des algorithmes de tri rapide notamment.

2.2 ALGORITHME RAPIDE POUR LE PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ

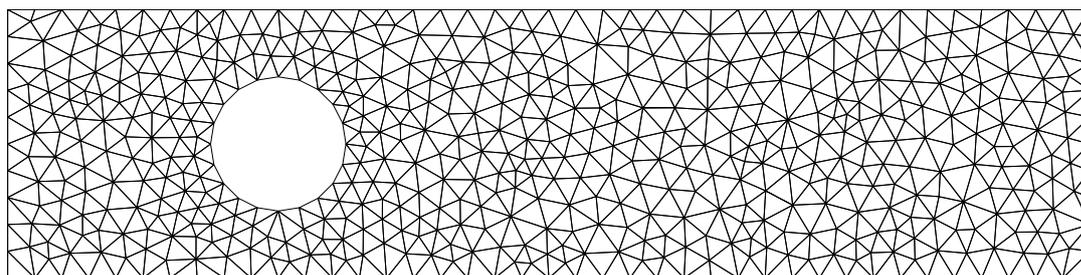
La seconde partie de ce chapitre est consacrée à la description de la méthode numérique de calcul du champ de vitesse u qui permet de convecter la fraction massique. On suppose ici que α est connu, ce qui permet de calculer la viscosité μ intervenant dans le problème de Stokes (cette supposition est naturelle puisque l'équation de convection-diffusion a été résolue de manière explicite). Ce problème dépend également de la présence d'obstacles mobiles immergés dans le fluide. On réécrit ici les équations auxquelles on s'intéresse avant de présenter la méthode numérique de résolution :

$$\begin{cases} u = \bar{u} & \text{dans les obstacles} \\ -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p & \text{dans le fluide} \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans le fluide} \end{cases} \quad (2.34)$$

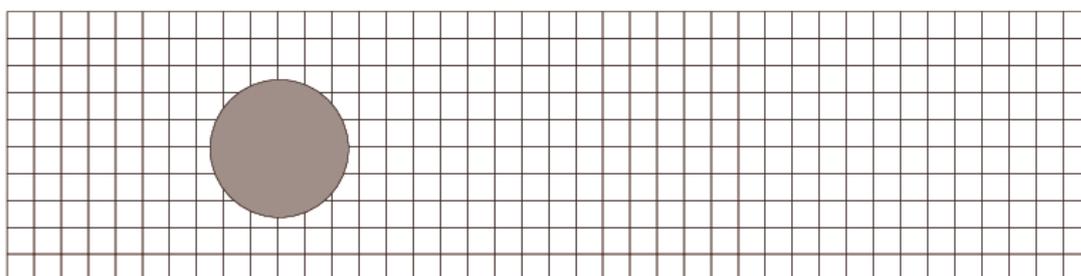
2.2.1 Méthode de pénalisation pour l'interaction fluide-structure

La méthode de pénalisation est une méthode de type volume fictif qui permet de tenir compte de l'interaction entre le fluide et des obstacles immergés en mouvement. Dans cette classe de méthodes les solides sont décrits de manière volumique (au contraire des méthodes de type frontière ou il est nécessaire d'avoir un maillage précis de la surface des obstacles portant les informations sur l'interaction) et le maillage du domaine n'a pas besoin d'être conforme (dont les éléments approximent les frontières du solide). Ceci est illustré par la figure 2.4 adaptée de [Boyer et Fabrie, 2013].

La méthode de pénalisation consiste à étendre le problème (2.34) dans tout le domaine de calcul avec une unique équation. Le domaine solide $\mathcal{B}(t)$ est repéré par sa fonction caractéristique χ (qui vaut un dans le solide et zéro à l'extérieur) et un paramètre de pénalisation $\varepsilon \ll 1$ est utilisé pour imposer au champ de vitesse d'être égal à \bar{u} (le champ de vitesse des obstacles) à l'intérieur de $\mathcal{B}(t)$. Ainsi le problème (2.34) est modifié en ajoutant un terme dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, alors posée sur tout le domaine de calcul Ω :



Triangular mesh of the fluid domain



Cartesian mesh of an artificial calculation domain and penalised obstacle

FIGURE 2.4 - Maillage triangulaire d'un domaine fluide autour d'une sphère et maillage cartésien du domaine complet avec le volume de la sphère pénalisé. Extrait de [Boyer et Fabrie, 2013].

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{\chi}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p & \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (2.35)$$

2.2.2 Une méthode de projection sur les champs à divergence nulle

Cette partie présente la méthode de projection utilisée pour le traitement de l'incompressibilité. On s'intéresse au problème de Stokes pénalisé que l'on rappelle ci-dessous :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{\chi}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p & \text{dans } \Omega \\ \operatorname{div} u = 0 \\ u^*(\cdot, t) = g(\cdot, t) & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.36)$$

Dans un premier temps les conditions aux limites considérées sont du type Dirichlet et une extension à d'autres types de conditions aux limites est traité par la suite.

L'algorithme de projection est basé sur la décomposition de Hodge qui stipule qu'un champ de vecteur peut être décomposé comme la somme d'un champ de vecteur à divergence nulle et d'un champ dérivant d'un potentiel. On a ainsi $L^2 = H + H^\perp$ avec $H = \{u \in L^2, \operatorname{div} u = 0\}$ et $H^\perp = \{\nabla \phi, \phi \in H^1\}$. Ces espaces étant en somme directe on introduit le projecteur de Leray [Leray, 1934] sur l'espace des champs à divergence nulle : \mathbb{P} .

La méthode de projection utilisée dans ce travail est une variante de la méthode introduite par Chorin [Chorin, 1968], adaptée au cas quasi-statique. Elle consiste à faire un splitting du problème de Stokes : on commence par résoudre le problème (2.36) sans le terme de pression et on note u^* sa solution. Pour l'instant, les termes résultants de la viscosité variable ne sont pas pris en compte : on suppose $\operatorname{div}(2\mu D(u)) = \mu \Delta u$ et $\mu = 1$ pour simplifier la présentation. Il s'agit donc de résoudre le problème de Helmholtz suivant :

$$\begin{cases} -\Delta u^* + \frac{\chi}{\varepsilon}(u^* - \bar{u}) = f & \text{dans } \Omega \\ u^*(\cdot, t) = g(\cdot, t) & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.37)$$

Ensuite, le champ u^* est projeté sur l'espace des champs à divergence nulle. Et on note u la solution ainsi corrigée :

$$u = \mathbb{P}(u^*) = u^* - \nabla \zeta \quad (2.38)$$

où le projecteur ζ est la solution du problème suivant.

$$\begin{cases} -\Delta \zeta = -\operatorname{div} u^* & \text{dans } \Omega \\ \frac{\partial \zeta}{\partial n} = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.39)$$

Ainsi on a :

$$\operatorname{div} u = \operatorname{div} u^* - \operatorname{div} \nabla \zeta = 0 \quad (2.40)$$

et la solution finale est bien à divergence nulle. De plus, en utilisant (2.38) on a $\mu \Delta u = \mu \Delta u^* - \mu \Delta \nabla \zeta = \mu \Delta u^* - \mu \nabla \Delta \zeta$ et on peut reconstruire le gradient de pression en posant :

$$\nabla p = \mu \nabla \Delta \zeta \quad (2.41)$$

Malheureusement après la correction (2.38) le champ u ne vérifie plus les conditions aux limites du problème (2.36). Il y a une couche limite qui apparaît au bord du domaine dans laquelle l'écoulement ne vérifie plus les équations [Guermond *et al.*, 2006]. En effet lors de l'étape de correction il n'y a aucun contrôle de la valeur de $\nabla \zeta$ dans les directions tangentielles et c'est sur ces composantes de la vitesse qu'il y a un manque de précision.

C'est pour pallier ce problème que plusieurs variantes de la méthode de projection de Chorin ont été introduites. Parmi elles, la forme incrémentale est bien

adaptée aux problèmes en temps (Navier-Stokes) puisqu'elle permet de récupérer les informations accumulées aux pas de temps précédents. D'autres méthodes plus élaborées (citées en introduction) sont également décrites dans [Guermond *et al.*, 2006].

Il est également possible, pour les problèmes en temps, de corriger a posteriori la couche limite où se concentre l'erreur. Cette classe de méthodes appelées parfois les méthodes de type panneaux, introduites dans [Hess, 1990], sont basées sur la résolution d'équations intégrées-différentielles dans une couche limite de taille $\sqrt{2\mu\delta t/\rho}$ [Poncet, 2007; Cottet et Koumoutsakos, 2000; Ploumhans et Winckelmans, 2000]. La solution de ces équations est calculée par un produit de convolution avec des noyaux dont le support est également lié à la taille de cette couche limite. Cette technique donne de bons résultats numériques pour les problèmes à haut nombre de Reynolds car la taille de cette couche limite est petite. Dès que l'écoulement devient trop visqueux la couche limite grossit jusqu'à remplir tout le domaine. Dans ce cas, la résolution des équations intégrées-différentielles devient laborieuse (car le support des noyaux est de la même taille, parfois plus grand, que le domaine de calcul) et cette méthode n'est plus adaptée.

De plus, une autre couche limite se développe pour les mêmes raisons autour des obstacles pénalisés dans le fluide : *a priori* la correction (2.38) est aussi faite dans le domaine solide et donc, après cette étape, la solution ne vérifie plus $u = \bar{u}$ dans le domaine solide. C'est pour pallier ce problème qu'un nouvel algorithme de projection a été développé avec une méthode de point fixe.

2.2.3 Méthode de point fixe multi-critère

Présentation de la méthode

La méthode consiste à impliciter les conditions aux limites du problème et le terme de pénalisation, pour se débarrasser du problème de couche limite. Après cette reformulation, le problème est résolu avec une méthode de point fixe. L'idée est d'ajouter à l'étape d'estimation de u^* exactement ce qui est enlevé à l'étape de correction.

1. $u_0^* = u_0$ est connu à l'initialisation,
2. Boucle de point fixe :
 - a) u_k^* est connu, de même que $u_k = \mathbb{P}(u_k^*)$ et $\nabla\zeta_k = u_k^* - \mathbb{P}(u_k^*)$,
 - b) **Estimation** : u_{k+1}^* est la solution du problème suivant :

$$\begin{cases} -\mu\Delta u_{k+1}^* + \frac{\chi}{\varepsilon}(u_{k+1}^* - \nabla\zeta_k - \bar{u}) = f & \text{dans } \Omega \\ u_{k+1}^* = g - \nabla\zeta_k & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.42)$$

- c) **Correction** : calcul du projecteur ζ_{k+1} et projection : $u_{k+1} = \mathbb{P}(u_{k+1}^*)$.
- d) Si un certain critère est satisfait (voir le détail de la convergence des résidus dans la section 3.1.1) aller à l'étape 3., sinon incrémenter k et recommencer l'étape 2.

3. La solution finale est donnée par u_{k+1}

Adaptation à d'autres conditions aux limites

Cette méthode n'est pas uniquement dédiée au traitement de conditions aux limites de type Dirichlet. Elle peut être adaptée à des conditions aux limites de type Neumann et périodiques.

Dans le cas de conditions aux limites périodiques, le problème de la couche limite n'est pas présent près du bord si le projecteur $\nabla\zeta$ admet lui aussi des conditions aux limites périodiques. Il suffit alors de calculer le projecteur ζ avec des conditions aux limites périodiques, ce qui garantit la périodicité de son gradient. Dans ce cas, l'itération de point fixe traite seulement le problème de la couche limite autour et dans le solide et les termes associés à la viscosité non homogène (voir section suivante).

En revanche, dans le cas de conditions aux limites de type Neumann il faut réécrire le problème et faire une disjonction de cas, selon si la condition est appliquée à une composante de la vitesse normale ou tangentielle au bord.

Considérons d'abord le cas où l'on cherche à résoudre le problème (2.42) pour la première composante de la vitesse avec la condition aux limites de Neumann non homogène $\frac{\partial u_x^*}{\partial n} = g$ posée sur la face $y = y_m$ de la boîte de calcul. Après la projection, le champ $u = \mathbb{P}(u^*)$ vérifie :

$$\frac{\partial u_x}{\partial n} = \frac{\partial u_x^*}{\partial n} - \frac{\partial}{\partial n} \partial_x \zeta = g - \partial_y \partial_x \zeta = g - \partial_x \partial_y \zeta = g \quad (2.43)$$

car $\partial_y \zeta = 0$ sur toute la face $y = y_m$.

Ainsi, comme dans le cas périodique, aucune couche limite ne se développe près du bord de la boîte de calcul.

Si maintenant on s'intéresse au même problème, en posant la condition aux limites de Neumann sur la face $x = x_m$ il vient :

$$\frac{\partial u_x}{\partial n} = \frac{\partial u_x^*}{\partial n} - \frac{\partial}{\partial n} \partial_x \zeta = g - \partial_x \partial_x \zeta = g - \partial_{xx} \zeta \quad (2.44)$$

Pour conserver la consistance des conditions aux limites du problème d'estimation (2.42) avec les conditions aux limites du problème global (2.36), il faut utiliser la condition aux limites suivante à l'étape d'estimation :

$$\frac{\partial (u_x)_{k+1}^*}{\partial n} = g + \partial_{xx} \zeta_k \quad \text{sur la face } x = x_m \quad (2.45)$$

2.2.4 Traitement explicite des termes de viscosité non homogène

Dans ce travail, on s'intéresse à des fluides biologiques qui ont des propriétés fortement non homogènes comme par exemple le film de mucus qui recouvre les parois des bronchiques dans les poumons. La surface du film, en contact avec l'air, est déshydratée et la viscosité y est plus importante qu'au contact des parois. Dans ce cas, le terme de diffusion du problème (2.36) n'est pas réduit à un laplacien et on a :

$$\operatorname{div}(2\mu D(u)) = \mu\Delta u + 2D(u)\nabla\mu + \mu\nabla\operatorname{div}u \quad (2.46)$$

Le dernier terme de cette expression s'annule en le combinant à la contrainte d'incompressibilité. En écrivant $u = u^* - \nabla\zeta$, cette équation peut être réécrite ainsi :

$$\operatorname{div}(2\mu D(u)) = \mu\Delta(u^* - \nabla\zeta) + 2D(u)\nabla\mu = \mu\Delta u^* - \mu\nabla\Delta\zeta + 2D(u)\nabla\mu \quad (2.47)$$

Ensuite en développant $\mu\nabla\Delta\zeta = \nabla(\mu\Delta\zeta) - \Delta\zeta\nabla\mu$, en reconstruisant la pression $p = -\mu\Delta\zeta$ et en utilisant le fait que $\Delta\zeta = \operatorname{div}u^*$ on écrit :

$$\operatorname{div}(2\mu D(u)) - \nabla p = \mu\Delta u^* + \operatorname{div}u^*\nabla\mu + 2D(u)\nabla\mu \quad (2.48)$$

L'algorithme de point fixe doit être modifié pour tenir compte de ces termes dus à la non-homogénéité du fluide. L'avantage de cette méthode est la possibilité de traiter ces termes de manière explicite dans le point fixe. Cela a le gros avantage de découpler la résolution des trois composantes de la vitesse et de faire apparaître des problèmes de Helmholtz. Pour la résolution de ces derniers, des solveurs rapides existent. Leur utilisation est détaillée dans la section 2.2.5. La résolution du problème (2.42) de l'étape 2b est remplacée par la résolution du problème suivant :

$$\begin{cases} -\mu\Delta u_{k+1}^* + \frac{\chi}{\varepsilon}(u_{k+1}^* - \nabla\zeta_k - \bar{u}) = f - [2D(u_k) + (\operatorname{div}u_k^*)\operatorname{Id}]\nabla\mu & \text{dans } \Omega \\ u_{k+1}^* = g - \nabla\zeta_k & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (2.49)$$

Pour cette étape de point fixe, il est très important de conserver le traitement du terme $\chi\varepsilon^{-1}u_{k+1}^*$ implicite. Ceci introduit la difficulté de résoudre un problème Helmholtz avec de larges sauts (de zéro à $1/\varepsilon$ dans les coefficients) mais un traitement explicite de ce terme détruit complètement la convergence de l'algorithme. Dans la section 4.1, une autre méthode de résolution est présentée pour se débarrasser de ce terme raide dans le problème de Helmholtz et ne résoudre que des problèmes de Poisson.

Contrairement aux méthodes d'éléments finis et de volumes finis, le développement du terme $\operatorname{div}(2\mu D(u))$ ajoute un terme à discrétiser. En effet, dans ces méthodes la formulation variationnelle associée à l'équation de quantité de

mouvement est utilisée. Le terme correspondant, intégré par partie, s'écrit alors $\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \mu d\lambda$ où $\mu d\lambda$ peut être vu comme une mesure puisque $\mu > 0$. Dans ce cas, la résolution à viscosité variable est similaire à la résolution à viscosité constante.

Comme la viscosité μ dépend du champ de vitesse u de manière non linéaire à travers une équation de convection-diffusion on ne peut pas écrire analytiquement une fonction $\mu = \mathcal{F}(u)$, contrairement aux lois non newtoniennes viscoplastique, comme par exemple les lois de puissance. Cela empêche l'utilisation de méthodes numériques de résolution plus rapides que le point fixe (par exemple gradient conjugué ou Newton-Raphson). La taille des problèmes considérés proscrit l'utilisation de méthodes du type quasi-Newton.

2.2.5 Implémentation numérique

Les choix de splitting détaillés dans la section précédente ont permis de transformer la résolution du problème de Stokes incompressible à viscosité variable en un problème de point fixe faisant intervenir des problèmes de Helmholtz et de Poisson.

La résolution des équations de Navier-Stokes avec les méthodes vortex conduit à la reconstruction de la vitesse u à partir de la vorticité $\omega = \text{curl}u$ à l'aide de la fonction courant ψ , définie telle que $u = \text{curl}\psi$; soit $\omega = \text{curlcurl}\psi = \nabla \text{div}\psi - \Delta\psi$. Cette méthode de reconstruction conduit à la résolution de problèmes de Poisson. Néanmoins il faut s'assurer que $\text{div}\psi = 0$ pour que le calcul $-\Delta\psi = \omega$ ait un sens. Cette condition est satisfaite en utilisant des conditions aux limites bien choisies [Poncet, 2004], qui impliquent $\text{div}\psi = 0$; ainsi on a bien $\text{curl curl}\psi = -\Delta\psi$ et comme $u = \text{curl}\psi$, $\text{div}u = 0$.

Dans la littérature consacrée à ces méthodes, plusieurs discussions ont cherché à mettre en évidence la manière la plus rapide de résoudre des problèmes de Poisson. Est-il préférable d'utiliser des méthodes de type Biot-Savard [Greengard et Rokhlin, 1987] directement sur les particules, basées sur des convolutions avec des fonctions de Green, et couplées à des méthodes multipôles [Salmon et Warren, 1994; Li *et al.*, 2009; Morra *et al.*, 2008]; ou bien d'utiliser des méthodes hybrides grille/particules [El Ossmani et Poncet, 2010; Cottet et Koumoutsakos, 2000; Poncet, 2009] avec des solveurs basés sur des méthodes de Transformées de Fourier Rapides (FFT) ou multigrilles, mais qui requièrent l'utilisation d'interpolations entre grille et particules [Cottet et Magni, 2009; Monaghan, 1985]? Ces deux classes de méthodes ont été largement étudiées ces dernières années et une réponse unique et universelle à cette question n'existe évidemment pas.

Pour l'écoulement de Stokes à viscosité variable, il n'existe pas de fonctions de Green associées à l'opérateur $-\text{div}(\mu\nabla u)$ car, comme dans notre cas la viscosité est une fonction de la fraction massique qui est advectée et diffusée, aucune hypothèse de structure ne peut être faite sur le champ de viscosité. L'utilisation de méthode de type Stokeslet n'était donc pas possible de manière directe. Il aurait néanmoins été possible de calculer les termes liés à la viscosité variable explicitement avec un point fixe identique à celui présenté ici, mais les performances de calcul auraient

été dégradées. De plus, le coût de l'algorithme de Stokeslet pour le couplage fluide-structure croît avec la complexité de la géométrie ce qui est incompatible avec le champ d'applications visé. Enfin, l'utilisation de conditions aux limites périodiques avec ces méthodes n'est pas triviale [Leiderman *et al.*, 2013].

En revanche, l'utilisation de solveurs rapides se prête beaucoup plus à l'application de l'algorithme présenté précédemment puisque des méthodes d'interpolation très performantes, avec un coût de calcul linéaire, ont été développées pour utiliser une grille cartésienne régulière adaptée à la résolution des opérateurs de diffusion. Ces solveurs sont décrits dans le paragraphe suivant.

Solveurs utilisés

Pour résoudre numériquement ce problème de point fixe, deux solveurs rapides sont utilisés. Le premier s'appelle MUDPACK, c'est un solveur multigrille qui permet de résoudre des problèmes elliptiques non séparables à coefficients variables sur une grille régulière cartésienne. Compte tenu de la régularité de la grille, la discrétisation de l'opérateur elliptique est connue *a priori* et il n'y a pas besoin d'assembler de matrice. Ceci permet de gagner un temps précieux, particulièrement pour les problèmes de grande dimension. Plusieurs stratégies de résolution multigrille peuvent être adoptées et MUDPACK dispose de plusieurs options avec notamment un choix de cycles de réduction en "V" ou en "W", plusieurs choix de pré et post-relaxation et différents opérateurs d'interpolation entre les grilles. Comme la majorité des solveurs multigrille, MUDPACK est assez rigide sur la taille des grilles et il faut un nombre de points de grille dans chaque direction de la forme $a \times 2^p + 1$. Les performances étant optimales avec $a = 2$. Le choix $a = 3$ ou 5 reste acceptable mais de plus grandes valeurs ralentissent la convergence [Adams, 1989; Sweet, 1988].

Ce solveur multigrille permet de traiter le terme $\frac{\chi}{\varepsilon} u_{k+1}^*$ et une viscosité non constante directement avec le Laplacien, même si l'opérateur elliptique n'est pas séparable. En revanche, les termes croisés (faisant apparaître les autres composantes de la vitesse et leurs dérivées) ne peuvent pas être traités implicitement avec ce type solveur.

Le second solveur utilisé est FISHPACK : un solveur de problèmes de Poisson basé sur des transformées de Fourier rapides (FFT) [Swarztrauber et Sweet, 1975]. Tout comme le précédent, il est fait pour travailler sur des grilles régulières cartésiennes et il permet de résoudre uniquement des problèmes de la forme $-\Delta u + au = f$, à coefficients constants. Il n'est donc pas adapté à la résolution de l'étape d'estimation du point fixe, mais il permet de calculer le projecteur. L'avantage de ce solveur est qu'il utilise très peu de mémoire en raison de la forme récursive du calcul de FFT, et les temps de calculs sont extrêmement courts (ce point sera à nouveau discuté au chapitre 4). Pour les mêmes raisons que MUDPACK, il s'affranchit de l'assemblage de matrice.

L'utilisation combinée de ces deux solveurs permet d'avoir de très bons temps de calcul, comme cela est montré dans le chapitre 3. Une reformulation de l'étape

d'estimation du point fixe sera présentée dans le chapitre 4, cela permettra de ne résoudre que des problèmes de Poisson et d'utiliser uniquement le solveur FISHPACK.

Projection et grilles décalées

D'un point de vue numérique, l'implémentation des méthodes de projection doit se faire sur des grilles décalées, c'est-à-dire que les différentes composantes de la vitesse ne doivent pas être définies sur les mêmes maillages. En effet, sur les maillages en collocation, la discrétisations des opérateurs Δ et $\text{div}\nabla$ ne coïncide pas. Par exemple sur un maillage différences finies régulier à une dimension la discrétisation centrée d'ordre 2 de l'opérateur $\text{div}\nabla$ fait apparaître une synchronisation entre les noeuds pairs et impairs du maillage, ce qui n'est pas le cas de celle de Δ . On introduit ainsi quatre grilles différentes sur lesquelles ces opérateurs coïncident. On pose $\Omega = [x_m, x_M] \times [y_m, y_M] \times [z_m, z_M]$ le domaine de calcul parallélépipédique discrétisé par N_x, N_y et N_z points dans chaque direction et on introduit les pas de maillage δ_x, δ_y et δ_z .

Cette technique de grille décalée a été popularisée par les méthodes MAC (marker and cell) introduites par [Welch *et al.*, 1966] et qui ont été largement utilisées depuis, voir par exemple [Peyret *et al.*, 1986]. La première grille, sur laquelle sont discrétisés les champs scalaires correspond à la grille en collocation classique : les inconnues sont localisées aux points (x_i, y_j, z_k) avec $x_i = x_m + (i - 1)\delta_x$ et $i \in \llbracket 1, N_x \rrbracket$ (et de même pour y_j et z_k). La seconde grille est utilisée pour discrétiser la première composante de la vitesse (et d'une manière générale la première

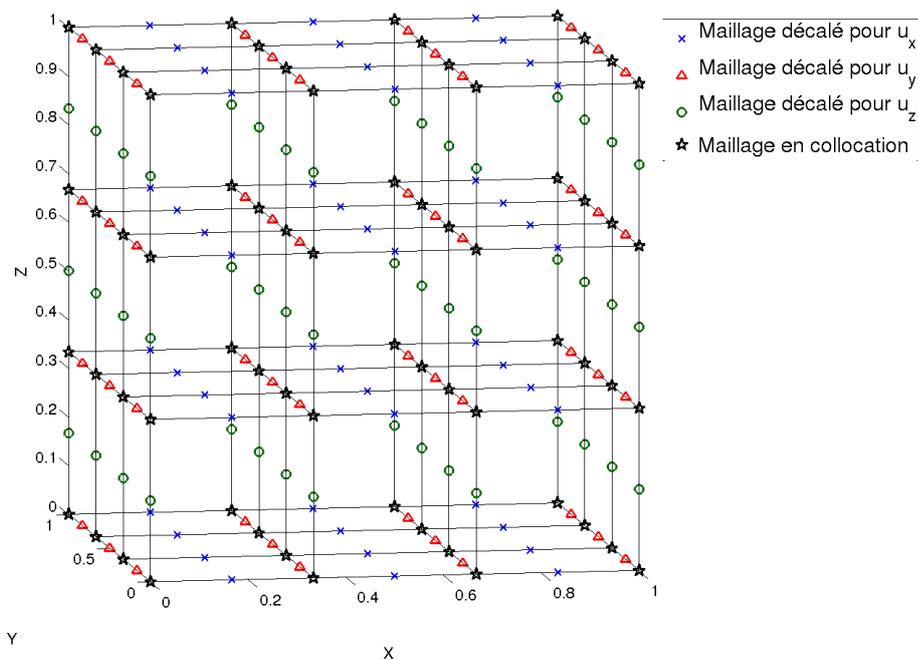


FIGURE 2.5 - Maillage décalé du cube $[0, 1]^3$ avec quatre points de grille utilisés (trois dans les directions décalées).

composante de n'importe quel champ de vecteur). Les inconnues de cette grille sont localisées aux points $(x_{i+\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$: il y a un décalage d'un demi pas d'espace dans la direction x . De même, la troisième (respectivement quatrième) grille sert à discrétiser la seconde (respectivement troisième) composante des champs de vecteur et les inconnues sont localisées aux points $(x_i, y_{j+\frac{1}{2}}, z_k)$ (respectivement $(x_i, y_j, z_{k+\frac{1}{2}})$). La figure 2.5 présente ce maillage sur le cube $[0, 1]^3$ maillé avec quatre points de grille dans chaque direction.

Ces maillages se prêtent très bien à l'utilisation de formules de différence finies centrées et, par exemple, la dérivée $\partial_x u_x$ sera approchée entre deux points de discrétisation, c'est-à-dire sur le maillage en collocation. Le calcul de dérivées se fait avec des demi-pas de discrétisation ce qui permet de gagner de la précision. Par contre la dérivée $\partial_y u_x$ n'aura du sens que sur le milieu du segment joignant deux points u_x dans la direction y : au milieu d'une face d'un parallélépipède élémentaire de la figure 2.5, ce qui impose d'introduire encore d'autres maillages décalés (cette fois ci dans deux directions).

Plusieurs inconvénients sont liés à l'utilisation de ces grilles décalées, le principal étant que le bord des grilles ne coïncide pas (dans la direction du décalage) avec le bord du domaine et que les conditions aux limites doivent être imposées de manière artificielle. Par exemple une condition aux limites de Dirichlet au bord d'une grille en collocation est interpolée en une condition aux limites de Robin sur le bord décalé.

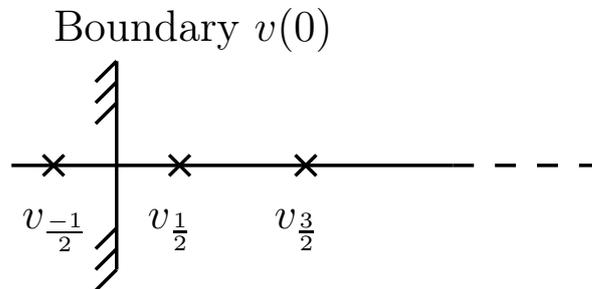


FIGURE 2.6 - Maillage décalé 1D au bord du domaine. La condition aux limites physique de Dirichlet est donnée en $x = 0$ et elle doit être interpolée sur les noeuds $\frac{\pm 1}{2}$.

En effet, en utilisant les notations de la figure 2.6, on peut écrire avec une formule de Taylor à l'intérieur du domaine :

$$v(0) = v\left(\frac{\delta x}{2}\right) - \frac{\delta x}{2} \frac{dv}{dx}\left(\frac{\delta x}{2}\right) + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\delta x}{2}\right)^2\right) = v_{\frac{1}{2}} - \frac{\delta x}{2} v'_{\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\delta x^2)$$

ou bien à l'extérieur

$$v(0) = v\left(-\frac{\delta x}{2}\right) + \frac{\delta x}{2} \frac{dv}{dx}\left(-\frac{\delta x}{2}\right) + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\delta x}{2}\right)^2\right) = v_{-\frac{1}{2}} + \frac{\delta x}{2} v'_{-\frac{1}{2}} + \mathcal{O}(\delta x^2)$$

La condition aux limites de Dirichlet sur le bord physique est transformée en une condition aux limites de Robin sur le bord du maillage avec une erreur de

discrétisation à l'ordre deux. On préférera la première écriture car elle conserve le bon signe devant le terme de flux, ce qui garantit la coercivité de la formulation variationnelle associée au problème aux limites. La conséquence immédiate est que le nombre de points de discrétisation n'est pas égale dans la direction de décalage et dans les deux autres directions. Si u_x est discrétisé avec N_x points de discrétisation dans la direction x (direction du décalage), u_y sera discrétisé avec N_x+1 points (dans cette même direction) et on ne peut pas avoir à la fois $N_x = 2^p + 1$ et $N_x + 1 = 2^p + 1$. Cette interpolation de conditions aux limites à l'intérieur du domaine n'est pas compatible avec l'utilisation du solveur multigrilles.

L'étape d'estimation du champ u^* dans la méthode de point fixe est effectuée sur un maillage en collocation pour permettre l'utilisation des solveurs précédemment présentés, tout en s'affranchissant de l'interpolation de conditions aux limites. Cela permet de donner un sens à tous les termes du tenseur des déformations $D(u)$ sur un seul maillage. Après l'estimation, il y a une étape d'interpolation entre le maillage en collocation et les grilles décalées sur lesquelles la projection est réalisée. Il y a donc deux étapes d'interpolation qui se rajoutent à chaque itération du point fixe : pour interpoler les champs de vitesse estimés de la grille en collocation vers les grilles décalées d'une part, une interpolation des champs corrigés des grilles décalées vers la grille en collocation d'autre part.

Calcul parallèle

Le solveur MUDPACK dispose de directives OpenMP qui permettent de faire les calculs plus rapidement en utilisant plusieurs processeurs. Ce procédé est intéressant lorsqu'un grand nombre de points de grille est utilisé. L'utilisation est très simple : il suffit de compiler avec les bonnes options, la parallélisation est transparente pour l'utilisateur.

Néanmoins il est important de signaler que le l'accélération est sous-linéaire : on a par exemple un gain temps d'un facteur cinq sur huit processeurs pour un maillage 256^3 .

Dans l'optique d'utiliser massivement ce code pour l'étude paramétrique des écoulements de mucus pulmonaires, c'est-à-dire d'effectuer de nombreuses simulations pour étudier l'influence des données, il sera plus efficace de lancer n simulations séquentielles sur n processeurs que de faire du calcul parallèle, d'autant que les temps de calcul séquentiels sont acceptables (voir chapitre suivant).

2.3 RÉSUMÉ DE L'ALGORITHME COMPLET DE RÉOLUTION

Pour clore ce chapitre, l'algorithme complet de résolution qui vient d'être exposé par morceaux est résumé. La méthode d'intégration en temps qui a été retenue pour la présentation est la méthode du point milieu (adaptée avec le splitting présenté au paragraphe 2.1.2 pour traiter la diffusion à l'ordre deux). Cette méthode présente l'avantage, par rapport à la méthode des trapèzes notamment, d'avoir la constante en facteur du terme d'erreur la plus faible des méthodes de

Runge-Kutta du second ordre [Butcher, 2008]). On montrera dans le chapitre suivant quels sont les avantages par rapport aux méthodes multi-pas explicites d'Adams-Bashforth.

Deux algorithmes distincts sont donnés, le premier résume le processus de calcul du champ de vitesse, solution quasi-statique du problème de Stokes. C'est une brique élémentaire qui est utilisée ensuite dans le second algorithme qui décrit la résolution du couplage complet.

Algorithme 1 : Fonction permettant de résoudre le problème de Stokes quasi-statique à viscosité variable en fonction des paramètres d'entrée. Cette fonction est ensuite appelée par l'algorithme 2.

Fonction StokesSolveur($t, \mu(t), \bar{u}(t), \chi(t), f(t)$)

Tolérance de point fixe ϵ donnée

initialisation : $\nabla\zeta_0 = u_0 = u_0^* = 0, k = 0$

while $\|u_k - g(\cdot, t)\|_{\partial\Omega} > \epsilon$ et $\|u_k - \bar{u}\|_{B(t)} > \epsilon$ et $\|D(u_k) - D(u_{k-1})\|_{\Omega} > \epsilon$ **do**

Estimation : Résoudre avec MURPACK sur la grille en collocation :

$$\begin{cases} -\mu\Delta u_{k+1}^* + \frac{\chi(t)}{\epsilon}(u_{k+1}^* - \nabla\zeta_k - \bar{u}) = f - [2D(u_k) + (\operatorname{div}u_k^*)\operatorname{Id}]\nabla\mu \\ u_{k+1}^* = g - \nabla\zeta_k \end{cases}$$

Interpolation de u_{k+1}^* sur les grilles décalées

Calcul de $\operatorname{div}u_{k+1}^*$ sur grilles décalées

Calcul du projecteur : Résoudre avec FISHPACK :

$$\begin{cases} -\Delta\zeta_{k+1} = -\operatorname{div}u_{k+1}^* \\ \frac{\partial\zeta_{k+1}}{\partial n} = 0 \end{cases}$$

Calcul de $\nabla\zeta_{k+1}$ sur grilles décalées

Projection : Calculer $u_{k+1} = \mathbb{P}(u_{k+1}^*) = u_{k+1}^* - \nabla\zeta_{k+1}$ sur grilles décalées

Interpolation de u_{k+1} sur la grille en collocation

Incrémentation : $k = k + 1$

end

return $u(t) = u_k$

Algorithme 2 : Algorithme complet de résolution du couplage entre le problème de Stokes à viscosité variable et l'équation de convection-diffusion de la fraction massique.

input : α_0 et \bar{u}_0 connus sur la grille, N_T : nombre de pas de temps, δt : pas de temps

initialisation : Calculer $\mu_0 = \Phi(\alpha_0)$, le second membre f et $u_0 = \text{StokesSolveur}(0, \mu_0, \bar{u}_0, f)$

// Abus de notation: $\alpha(\xi_p(t), \cdot)$ est la fraction massique portée par les particules au point $\xi_p(t)$, constante par rapport à t

begin

for $n \leftarrow 0$ **to** $N_T - 1$ // Itération sur chaque pas de temps

do

input : α_n et u_n sur la grille

$t^{n+1/2} = (n + 1/2)\delta t$

 Remaillage : création d'un nuage de particules sur les point de grilles portant les quantités $\alpha(\xi_p(t^n), \cdot)$ et $u(\xi_p(t^n), t^n)$

 Advection explicite des particules d'un demi pas de temps :

$\xi_p(t^{n+1/2}) = \xi_p(t^n) + (\delta t/2)u(\xi_p(t^n), t^n)$

$\tilde{\alpha}_{n+1/2} = \text{Interpolation particules} \rightarrow \text{grille de } \alpha(\xi_p(t^{n+1/2}), \cdot)$

$\alpha_{n+1/2} = \text{Diffusion avec différences finies de } \tilde{\alpha}_{n+1/2} \text{ sur un demi pas de temps}$

 Calcul de $\mu_{n+1/2} = \Phi(\alpha_{n+1/2})$, $\bar{u}_{n+1/2}$, $\chi_{n+1/2}$ et f

$u_{n+1/2} = \text{StokesSolveur}(t^{n+1/2}, \mu_{n+1/2}, \bar{u}_{n+1/2}, \chi_{n+1/2}, f)$

$u(\xi_p(t^{n+1/2}), t^{n+1/2}) = \text{Interpolation grille} \rightarrow \text{particules de } u_{n+1/2}$

$t^{n+1} = (n + 1)\delta t$

 Advection explicite des particules d'un pas de temps complet :

$\xi_p(t^{n+1}) = \xi_p(t^n) + \delta t u(\xi_p(t^{n+1/2}), t^{n+1/2})$

$\tilde{\alpha}_n = \text{Interpolation particules} \rightarrow \text{grille de } \alpha(\xi_p(t^{n+1}), \cdot)$

$\alpha_{n+1} = \text{Diffusion avec différences finies de } \tilde{\alpha}_n \text{ sur un demi pas de temps à partir de } \alpha_{n+1/2}$

 Calcul de $\mu_{n+1} = \Phi(\alpha_{n+1})$, \bar{u}_{n+1} , χ_{n+1} et f

$u_{n+1} = \text{StokesSolveur}(t^{n+1}, \mu_{n+1}, \bar{u}_{n+1}, \chi_{n+1}, f)$

output : α_{n+1} et u_{n+1} sur la grille

end

end

VALIDATIONS

Sommaire

3.1	TOURBILLON DE GREEN-TAYLOR	52
3.1.1	<i>Convergence de l'algorithme de point fixe</i>	53
3.1.2	<i>Ordre de la méthode</i>	54
3.1.3	<i>Temps de calcul</i>	54
3.2	CAS TEST DE LA SPHÈRE DANS UN ÉCOULEMENT INCIDENT	55
3.3	CONVERGENCE EN TEMPS ET DISCUSSION SUR LES IN- TÉGRATEURS TEMPORELS	58
3.4	CONSERVATION DE LA MASSE	61
3.5	TEMPS DE CALCUL POUR LE PROBLÈME COMPLET	65

Ce chapitre rassemble plusieurs simulations utilisées pour valider la précision et les performances du code de calcul qui a été développé à partir des algorithmes présentés au chapitre précédent.

Le premier cas test est défini par une solution analytique : une généralisation 3D à viscosité variable du tourbillon de Green-Taylor qui permet de tester la convergence de la méthode de point fixe, et donc la méthode de projection. Ce problème permet également de mesurer les performances du solveur quasi-statique, c'est à dire le problème de Stokes seul, non couplé à la convection-diffusion de la fraction massique.

Le second cas test est un écoulement qui est également calculable de manière analytique : une sphère immobile dans un écoulement de Stokes incident à l'infini. Cette simulation est permet de tester les ordres de convergence de la méthode de pénalisation.

Enfin le troisième cas test présenté n'a pas de solution analytique. Il s'agit d'une sphère qui tourne à vitesse constante dans un fluide initialement stratifié. Ce mouvement de rotation mélange le fluide non homogène, ce qui permet de mesurer la conservation du champ transporté. Ce problème est un bon exemple pour mesurer les performances de du solveur complet.

3.1 TOURBILLON DE GREEN-TAYLOR

Le premier cas test présenté est le tourbillon de Green-Taylor. Il s'agit d'une solution analytique du problème de Stokes qui a été adaptée dans un cas de la viscosité variable en trois dimensions. La vitesse est définie comme un produit de fonctions trigonométriques qui vérifie la contrainte d'incompressibilité. La pression s'exprime également comme un produit de sinus. La solution analytique sera écrite dans toute la suite avec des caractères droits :

$$\begin{aligned} u_x(x, y, z) &= 2(\cos(2\pi x) - 1)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z) \\ u_y(x, y, z) &= -(\cos(2\pi y) - 1)\sin(2\pi x)\sin(2\pi z) \\ u_z(x, y, z) &= -(\cos(2\pi z) - 1)\sin(2\pi x)\sin(2\pi y) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} p(x, y, z) &= \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z) \\ \mu(x, y, z) &= 1 + \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\sin(2\pi z) \end{aligned}$$

La solution est ensuite calculée en forçant le second membre de l'équation (2.36) par la solution exacte :

$$f = -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \nabla p \quad (3.2)$$

Ce procédé permet de tester efficacement l'algorithme de projection car, en raison de la présence du terme ∇p dans le second membre, la vitesse estimée à la première étape de l'algorithme de point fixe n'est pas à divergence nulle. Le test est effectué en pénalisant $\bar{u} = u$ à l'intérieur d'une sphère au centre du domaine. Dans

ce cas, l'ordre de la méthode doit être compatible avec l'ordre des discrétisations utilisées (ordre deux) car aucune couche limite ne se développe autour de l'obstacle pénalisé. En effet, la solution et ses dérivées, restent parfaitement régulières en traversant la frontière du solide.

Cette solution analytique permet de tester un large panel de conditions aux limites : u est périodique sur $[0, 1]^3$ (en fait sur n'importe quel domaine de calcul de longueur entière), u admet des conditions aux limites de Dirichlet homogènes sur $[0, 1]^3$ et non homogènes sur $[-1/2, 1/2]^3$. Enfin, cet écoulement admet des conditions aux limites de Neumann homogènes dans les directions normales sur $[0, 1]^3$ et dans les directions tangentielles sur $[-1/4, 3/4]^3$ et non homogènes sur $[-1/2, 1/2]^3$.

Dans les sections suivantes, l'évolution des résidus de l'algorithme de point fixe est présentée ainsi que l'ordre de la méthode.

3.1.1 Convergence de l'algorithme de point fixe

Dans l'algorithme de point fixe, plusieurs résidus sont utilisés pour quantifier la convergence :

- la divergence du champ de vitesse $\|\operatorname{div} u_k\|_Q$,
- la vitesse tangentielle résiduelle $\|u_k - g(\cdot, t)\|_{\partial Q}$,
- la vitesse résiduelle dans le solide $\|u_k - \bar{u}\|_{B(t)}$,
- les déformations résiduelles $\|D(u_k) - D(u_{k-1})\|_Q$.

L'évolution de l'ensemble de ces résidus est présentée sur la figure 3.1 pour une simulation sur le domaine de calcul $[-1/2, 1/2]^3$ avec une combinaison de

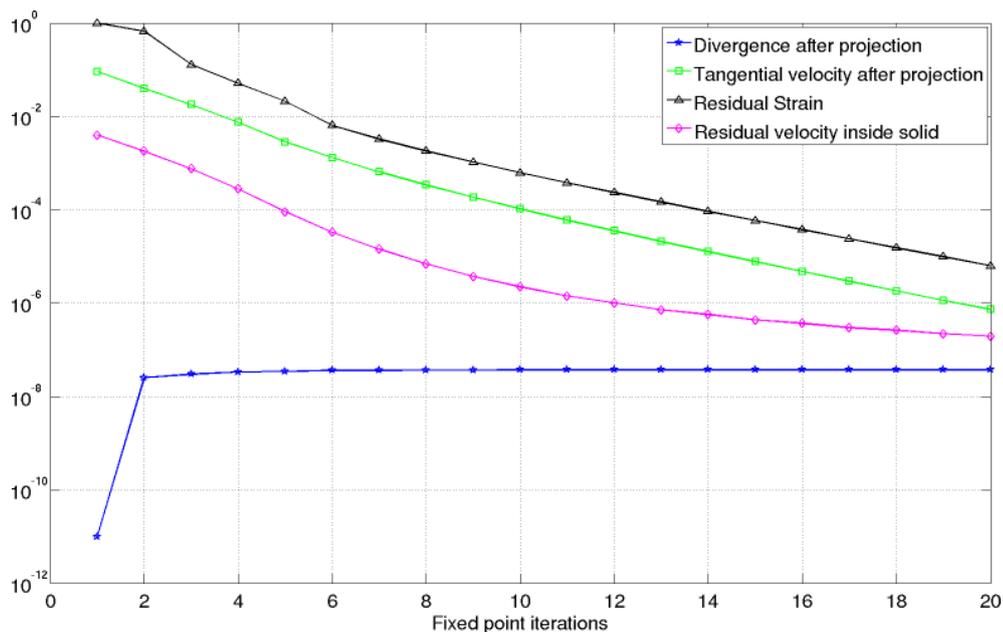


FIGURE 3.1 – Évolution des résidus de l'algorithme de point fixe pour une simulation du tourbillon de Green-Taylor avec un raffinement 256^3 .

conditions aux limites de Dirichlet (dans les direction y et z) et périodiques (dans la direction x). 256 points de discrétisation sont utilisés dans chaque direction.

La convergence de l'algorithme est rapide puisqu'à partir d'une douzaine d'itérations, les résidus atteignent une valeur de 10^{-4} . En pratique il n'est pas nécessaire (et cela n'a d'ailleurs pas de sens) de faire converger le procédé à une valeur inférieure à l'erreur de discrétisation.

Dans le chapitre 4, plusieurs améliorations sont proposées pour accélérer la convergence de cette méthode itérative.

3.1.2 Ordre de la méthode

Sur la figure 3.2 l'erreur en norme deux est présentée en fonction de la discrétisation utilisée. On retrouve bien une pente voisine de 2 ce qui montre une bonne cohérence avec les méthodes de discrétisation utilisées.

Dans ce cas, aucune couche limite ne se développe au bord de l'obstacle pénalisé. Ceci est dû au fait que la solution analytique est également forcée à l'intérieur de l'obstacle. Dans la section suivante un autre cas test (cette fois ci à viscosité constante) mettra en évidence cette couche limite.

3.1.3 Temps de calcul

Les performances de cet algorithme ont également été étudiées sur ce cas test. Pour différents raffinements, le temps nécessaire pour calculer une itération de

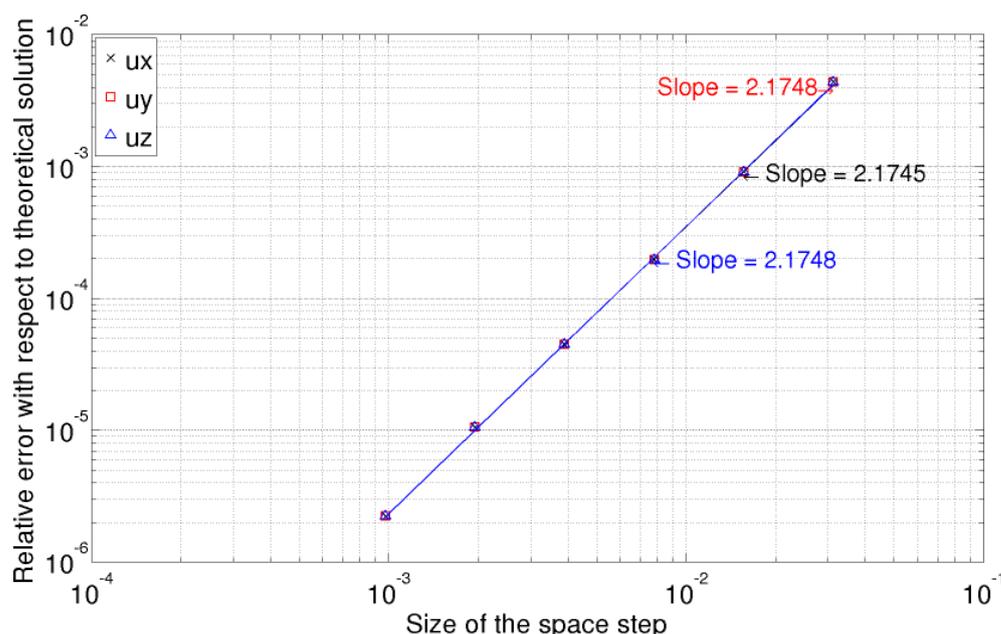


FIGURE 3.2 - Erreur relative par rapport à la solution exacte pour la simulation du tourbillon de Green-Taylor en fonction du raffinement.

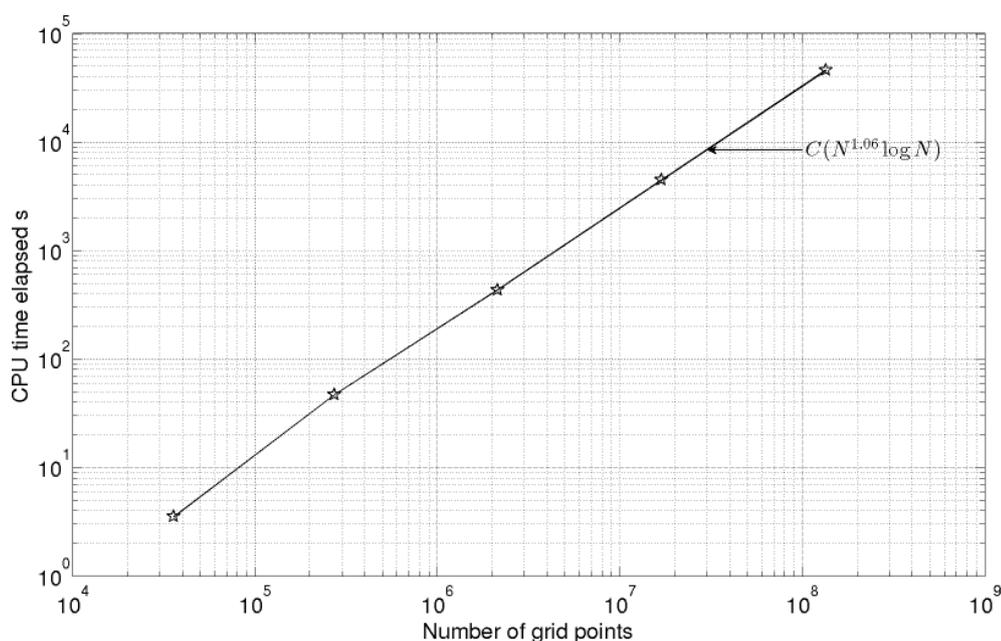


FIGURE 3.3 - Temps de calcul pour une itération de point fixe du problème de Green-Taylor jusqu'à une valeur de résidus de 10^{-4} . Calcul effectué sur un processeur Intel Xeon X5450 (calcul séquentiel).

point fixe, jusqu'à une valeur de résidus de 10^{-4} , est étudié. Les résultats sont présentés sur la figure 3.3.

Le comportement de la courbe est bien en $\mathcal{O}(N \log N)$, conformément à ce que l'on pouvait espérer, car les méthodes multigrilles sur lesquelles le solveur MUDPACK est basé, ainsi que les méthodes de transformées de Fourier rapides de FISHPACK, partagent cette propriété.

Ce résultat garantit une croissance de coût de l'algorithme bien inférieur aux méthodes basées sur l'assemblage de matrices et la résolution de systèmes linéaires qui sont en général en $\mathcal{O}(N^2)$ pour les solveurs directs et pour lesquels la parallélisation est incontournable. Ici, par exemple, avec deux millions de points de grille, une itération de point fixe prend environ 6min40s. Nous verrons dans le chapitre suivant que plusieurs méthodes permettent d'accélérer notablement la convergence de cet algorithme itératif.

3.2 CAS TEST DE LA SPHÈRE DANS UN ÉCOULEMENT INCIDENT

Le second cas test permet de tester la méthode de pénalisation. La simulation présentée calcule le champ de vitesse induit autour une sphère immobile par un écoulement incident. À l'infini, le champ de vitesse est dirigé uniquement suivant $-e_z$ (le troisième vecteur de la base canonique). Le calcul de la solution analytique de cet écoulement repose sur le développement des champs de vitesse et de pression sous la forme de puissances de quotients en coordonnées sphériques. Il suffit ensuite de forcer les conditions aux limites par la solution exacte et de

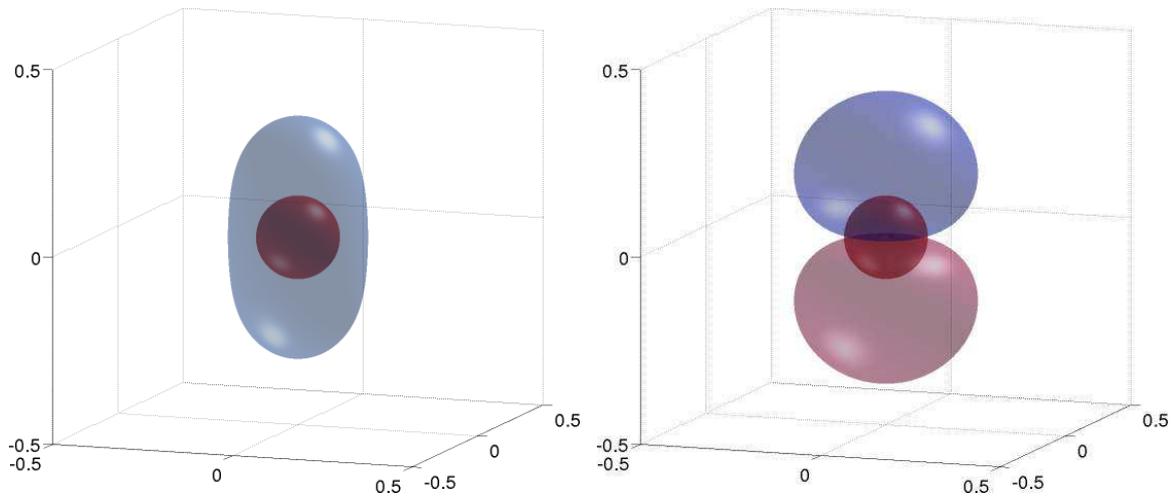


FIGURE 3.4 - Solution exacte de l'écoulement de Stokes autour d'une sphère de rayon 0.1 centrée dans le domaine de calcul $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$. Isosurface de norme de vitesse au niveau 0.55 à gauche ; isosurfaces de pression aux niveaux 1 (en rouge) et -1 (en bleu) à droite.

pénaliser la sphère avec une vitesse nulle, pour pouvoir la comparer avec la solution numérique. L'intensité du champ incident est U_0 , R est le rayon de la sphère. Dans ce cas, la viscosité du fluide est considérée constante (égale à 1). Cette solution est donnée par les expressions suivantes, illustrée sur la figure 3.4. On retrouve la forme caractéristique d'amande de l'isosurface de vitesse autour de la sphère immobile.

$$\begin{cases} u_r = U_0 \cos(\theta) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{R}{r} + \frac{1}{2} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right) \\ u_\theta = U_0 \sin(\theta) \left(1 - \frac{3}{4} \frac{R}{r} - \frac{1}{4} \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right) \\ u_\phi = 0 \\ p = \mu U_0 \cos(\theta) \frac{-3R}{2r^2} \end{cases} \quad (3.3)$$

Dans ce cas, le second ordre n'est pas atteint (figure 3.5) conformément aux travaux d'analyse numérique de la littérature [Maury, 2009]. Une couche limite se développe au bord de l'obstacle pénalisé qui permet seulement de récupérer de l'ordre 1.

Il est possible de récupérer un ordre deux de convergence en utilisant une méthode itérative décrite dans [Chantalat *et al.*, 2009]. Cette méthode consiste un problème de poisson par dimension et une équation de transport pour modifier le champ \bar{u} , avec un prolongement régulier de la solution à l'intérieur des obstacles. Cela permet de raccorder les dérivées normales du champ de vitesse de manière continue au bord du domaine pénalisé. Une autre méthode à l'ordre deux basée également sur une modification du champ \bar{u} , mais seulement sur les noeuds voisins de l'interface, a été développée dans [Sarhou *et al.*, 2008]. Une troisième

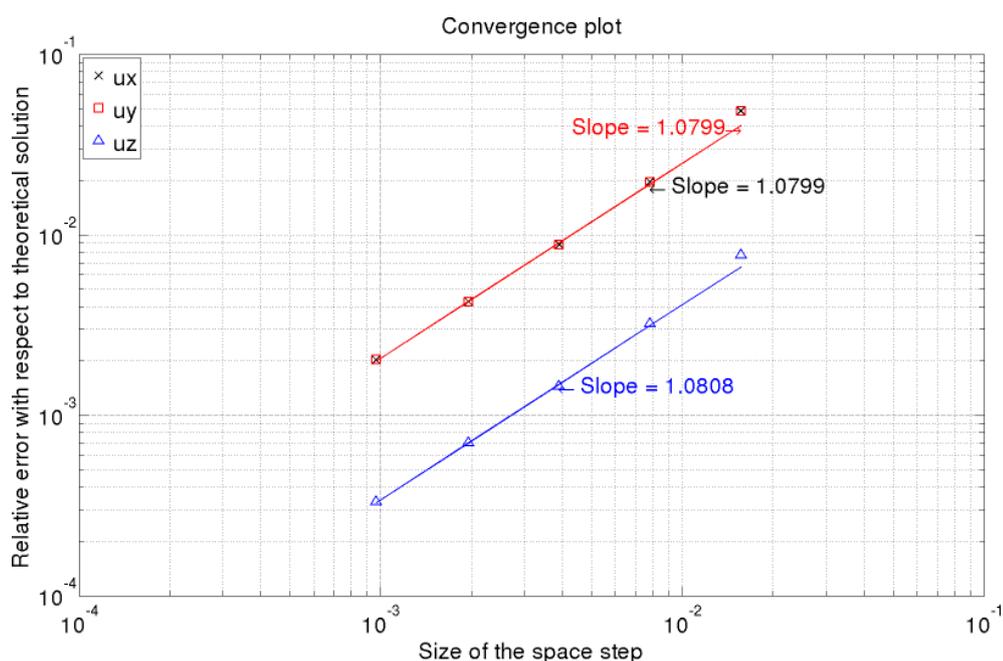


FIGURE 3.5 - Erreur relative par rapport à la solution exacte en fonction du raffinement pour la simulation d'une sphère immobile dans un écoulement incident dirigé à l'infini selon $-e_z$.

méthode d'ordre optimal a été développée dans [Fabrèges et Maury, 2012] où le prolongement est calculé en minimisant une fonction coût avec un algorithme de gradient conjugué.

Dans ce travail, ces corrections n'ont pas été implémentées car l'ajout d'une seconde méthode itérative à chaque étape de point fixe aurait été coûteuse dans la cas de problèmes de dimensions trois. De plus, les algorithmes de Chantalat *et al.* et Sarthou *et al.* sont adaptés à une gestion du solide à travers des fonctions level-set, ceci n'est pas implémenté dans ce travail. Dans toutes les applications présentées, les mouvements solides et la fonction caractéristique sont calculés directement à partir des équations d'évolution solide. Enfin, l'algorithme de gradient conjugué de Fabrège *et al.* requiert la résolution d'un problème de Stokes à chaque itération, ce qui s'avérerait coûteux, puisque l'algorithme de Stokes à viscosité variable utilisé ici est déjà itératif. Cette méthode requiert aussi une connaissance précise de la localisation de l'interface.

Un second test de convergence consiste à faire varier la valeur du paramètre de pénalisation et à mesurer l'erreur commise par rapport à la solution exacte. Ce test est fait sur cet écoulement et non sur le précédent car, en raison de la pénalisation exacte dans l'obstacle pour le tourbillon de Green-Taylor, aucune couche limite ne se développe, et l'erreur ne varie pas en fonction de ε , seulement en fonction de la discrétisation.

Ce test de convergence en fonction de ε est effectué en utilisant le maillage 256^3 et les résultats sont présentés sur la figure 3.6. L'erreur varie comme $\sqrt{\varepsilon}$, conformément aux développements asymptotiques [Carbou et Fabrie, 2003], jus-

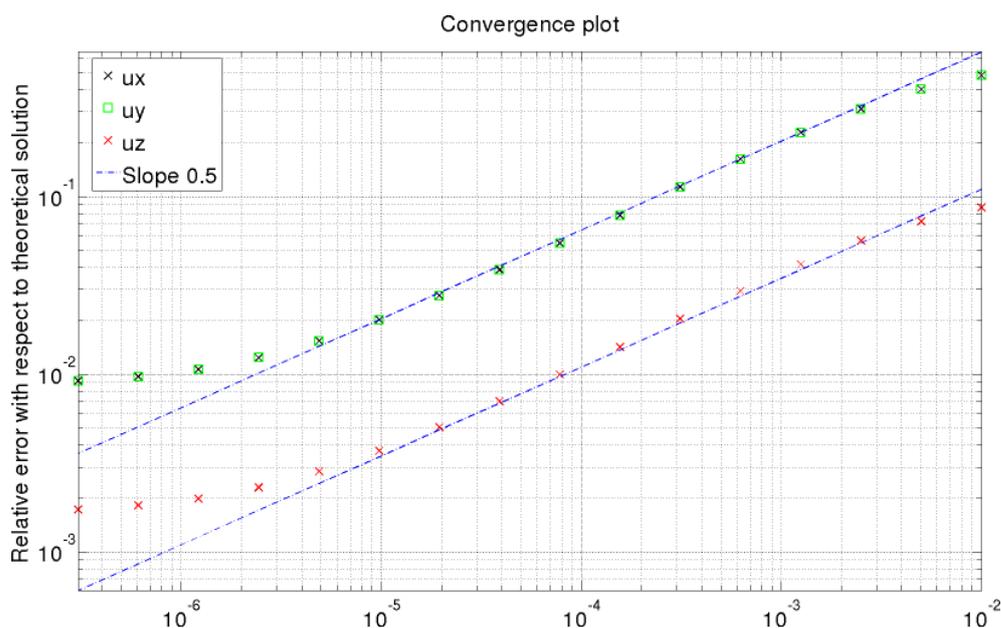


FIGURE 3.6 - Erreur relative par rapport à la solution exacte en fonction du paramètre de pénalisation en utilisant un raffinement constant, simulation de la sphère immobile dans un écoulement incident dirigé à l'infini selon $-e_z$. L'erreur évolue comme $\sqrt{\varepsilon}$ conformément aux développements asymptotiques, jusqu'à ce que l'erreur de discrétisation domine.

qu'à ce que l'erreur de discrétisation domine. Il faut donc utiliser un paramètre de pénalisation suffisamment petit, compte tenu de la décroissance de cette erreur en fonction de ε .

En pratique la valeur de ε doit être fixée en fonction de différents paramètres et l'inégalité $\varepsilon \ll 1$ n'est pas assez précise. La valeur à donner à ce paramètre dépend du problème traité et notamment des paramètres d'adimensionnement ou du jeu d'unités choisi. Le terme de pénalisation peut être vu comme un forçage de l'équation $u = \bar{u}$ dans le domaine pénalisé. Pour que cela ait du sens, il faut avoir sur le problème $-\mu\Delta u + \frac{\chi}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = 0$:

$$\mu\Delta u < \frac{\chi}{\varepsilon}(u - \bar{u}) \quad \text{soit} \quad \varepsilon\mu < \frac{\|u\|}{\|\Delta u\|} \quad (3.4)$$

L'ordre de convergence des erreurs par rapport à la discrétisation et la pénalisation sont cohérents avec les résultats théoriques de la littérature.

3.3 CONVERGENCE EN TEMPS ET DISCUSSION SUR LES INTÉGRATEURS TEMPORELS

Un troisième cas test est présenté dans ce chapitre afin de valider la convergence de l'algorithme lagrangien de transport de la fraction massique. Dans les sections précédentes, nous avons testé l'algorithme de projection à viscosité variable pour

le problème de Stokes et la méthode de pénalisation. Comme il n'est pas possible de trouver une solution analytique permettant de tester à la fois le transport et tous les éléments précédents, des hypothèses simplificatrices ont été faites pour cette simulation. Tout d'abord, on considère que la viscosité du fluide est constante (pas de dépendance par rapport à la fraction massique). L'écoulement se fait entre deux plaques sur lesquelles le champ de vitesse est nul en $z = z_m$ et $z = z_M$, dans les autres directions le champ de vitesse est périodique. Enfin, le second membre dans le problème de Stokes est un champ de force oscillant en temps (et constant en espace) dirigé uniquement selon x . La solution de ce problème est l'écoulement de Poiseuille, dont le profil de vitesse est parabolique. Il est donné par les équations (3.5). Le calcul analytique utilise la méthode des caractéristiques, cela permet d'exprimer α pour tout temps t à partir de la condition initiale α_0 .

$$\left\{ \begin{array}{l} Q = [x_m, x_M] \times [y_m, y_M] \times [z_m, z_M] \\ u(x, y, z, t) = \begin{cases} \theta(t)(z - z_m)(z - z_M) \\ 0 \\ 0 \end{cases} \\ \nabla p(x, y, z) = 0 \quad \mu = 1 \\ \alpha(x, y, z, t = 0) = \alpha_0(x, y, z) = 2 + \sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \\ \alpha(x, y, z, t) = \alpha_0(x_0(t), y_0(t), z_0(t)) \\ x_0(x, y, z, t) = x - \Theta(t)(z - z_m)(z - z_M) \quad \text{with } \Theta'(t) = \theta(t) \\ y_0(x, y, z, t) = y \quad z_0(x, y, z, t) = z \end{array} \right. \quad (3.5)$$

La figure 3.7 présente l'évolution de l'erreur commise en fonction du pas de temps δt . Plusieurs schémas d'intégration temporelle sont utilisés : Runge-Kutta 2, Adams-Bashforth 2 et Adams-Bashforth 3. L'expression de ces trois schémas est donnée ci-dessous pour la discrétisation de l'EDO $\frac{d\xi}{dt} = u(\xi(t), t)$ (pour les deux autres EDO du système (2.27), le second membre est nul et la quantité est simplement conservée le long des trajectoires des particules et il n'y a aucun calcul à faire, une fois les particules transportées, seulement une interpolation vers la grille) :

RK 2	$\xi^{n+1/2} = \xi^n + \frac{\delta t}{2} u(\xi^n, n\delta t)$ $\xi^{n+1} = \xi^n + \delta t u(\xi^{n+1/2}, (n+1/2)\delta t)$
AB 2	$\xi^{n+1} = \xi^n + \frac{\delta t}{2} (3u(\xi^n, n\delta t) - u(\xi^{n-1}, n\delta t))$
AB 3	$\xi^{n+1} = \xi^n + \frac{\delta t}{12} (23u(\xi^n, n\delta t) - 16u(\xi^{n-1}, (n-1)\delta t) + 5u(\xi^{n-2}, (n-2)\delta t))$

TABLE 3.1 - Expression des différents schémas d'intégration temporelle utilisés

Si la discrétisation spatiale est trop grossière, l'erreur correspondante domine (cette erreur est majoritairement commise lors du calcul du champ de vitesse u , mais également lors des interpolations, de u et α , entre la grille et le nuage

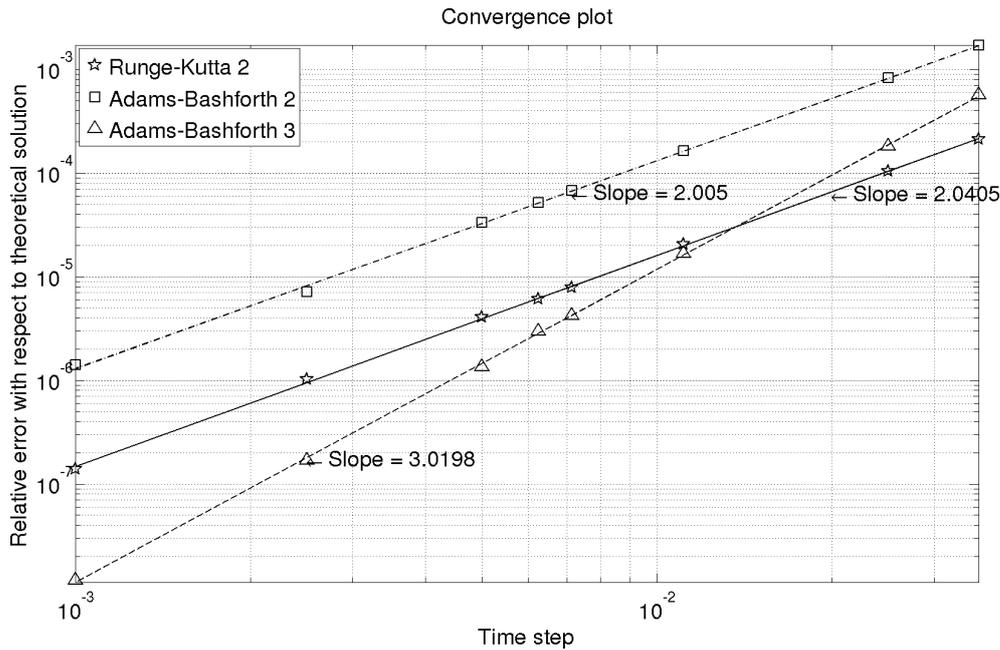


FIGURE 3.7 - Évolution de l'erreur de discrétisation par rapport au pas de temps δt pour les trois intégrateurs temporels présentés dans cette section.

particules). Avec un pas d'espace suffisamment petit, on retrouve bien une convergence à l'ordre 2 pour les méthodes d'Adams-Bashforth 2 et Runge-Kutta, pour Adams-Bashforth 3 la pente est bien de 3.

Dans le tableau 3.2, une comparaison du nombre d'appels au Solveur de Stokes, du nombre d'interpolations et de la quantité de mémoire occupée pour stocker les différents tableaux de l'algorithme, est présentée. Compte tenu du fait que l'on utilise une méthode de remaillage avec une initialisation des particules sur les points de grille, le coût de l'interpolation correspondante est négligeable car un seul coefficient d'interpolation est non nul. En revanche, il faut calculer tous les coefficients (4^d au total, avec d la dimension d'espace) pour les interpolations particules vers grille de la fraction massique qui suivent une étape de transport ou pour l'interpolation du champ de vitesse de la grille vers les particules advectées d'un demi-pas de temps (voir les détails dans l'algorithme complet pour RK2 page 47).

Dans le système d'EDO (2.27), il n'est pas nécessaire de résoudre l'équation de volume. Comme les particules sont initialisées sur les points de grille lors de chaque remaillage, le volume de chaque particule est égale au produit $\delta x \delta y \delta z$ et reste constant. Il n'y a donc pas besoin de stocker ce tableau en mémoire. Pour le stockage des autres quantités il faut noter que α est une quantité scalaire, et compte dans ce cas pour 1 dans quantité de mémoire occupée du tableau 3.2, et ξ et u sont des champs vectoriels donc occupent d en mémoire. L'algorithme RK2 nécessite d interpolations de plus que les schémas d'Adams : il s'agit de l'interpolation du champ de vitesse u , calculé au temps $(n+1/2)\delta t$, sur les particules situées en $\xi^{n+1/2}$, c'est-à-dire sur les particules déjà transportées d'un demi pas de temps. Enfin, les

deux schémas multi-pas d'Adams-Bashforth ne font qu'un seul appel au solveur de Stokes par itération alors que la méthode de Runge-Kutta en a besoin de deux.

	Évaluation de u	Interpolations	Mémoire occupée
RK2	2	$2+d$	3d
AB2	1	1	3d
AB3	1	1	4d

TABLE 3.2 - Occupation mémoire, nombre d'interpolations et nombre d'appels au solveur de Stokes pour un pas de temps. Comparaison des trois schémas d'intégration temporelle utilisés dans cette section. d est la dimension d'espace.

Sur la figure 3.7 on voit clairement que Runge-Kutta et Adams-Bashforth 2 sont toutes les deux des méthodes d'ordre 2, mais la constante devant le terme d'erreur est dix fois plus petite pour Runge-Kutta 2. Dans la table 3.2 on constate que l'occupation mémoire pour ces deux méthodes est similaire mais le temps de calcul pour une itération de Runge-Kutta 2 est environ deux fois plus grand que pour Adams 2, compte tenu du nombre d'appels au solveur de Stokes (en fait un peu plus que deux à cause des interpolations de u sur les particules advectées, mais l'étape la plus coûteuse est le calcul du champ de vitesse comme cela est exposé dans la section 3.5). En effectuant une simulation avec un coût de calcul équivalent entre ces deux méthodes, un pas de temps deux fois plus fin est utilisé avec Adams 2 ; ce qui diminue l'erreur par 4. Dans ce cas, Runge-Kutta 2 reste une meilleure méthode puisque l'erreur est bien inférieure.

Comme Adams 3 est une méthode d'ordre 3, elle devient intéressante à condition d'utiliser un pas de temps suffisamment petit, ce qui n'est pas forcément la stratégie adoptée avec les méthodes Lagrangiennes.

Un résultat bien connu pour les méthodes d'Adams [Butcher, 2008] est leur manque de précision lorsque la dérivée par rapport au temps du second membre de l'EDO change de signe. Plusieurs méthodes existent pour pallier ce problème inhérent aux méthodes multi-pas. Il s'agit des méthodes dites PC (prédiction correction) ou encore PECE (prédiction estimation correction estimation) où des sous-pas d'Adams-Bashforth sont combinés avec des sous-pas d'Adams-Moulton, la principale difficulté étant que les schémas d'Adams-Moulton sont implicites.

Enfin il est possible d'utiliser des méthodes explicites d'ordre supérieur comme Runge Kutta 4 et ainsi de monter en ordre. La seule contrainte de ce procédé est l'occupation mémoire, le temps de calcul étant compensé par le gain de précision.

Dans toutes les simulations qui sont présentées dans ce manuscrit, l'intégration temporelle sera calculée avec un schéma de Runge-Kutta 2 adapté avec le splitting de la section 2.1.1.

3.4 CONSERVATION DE LA MASSE

La simulation numérique des problèmes de transport est contrainte par la conservation de la quantité transportée. L'utilisation de schémas numériques

peu robustes induit une perte de masse qui, sur de longues simulations, peut complètement fausser les résultats. Ce phénomène porte le nom de diffusion numérique.

Il est donc très important de quantifier précisément sur des simulations simples ce phénomène avant de traiter des cas réalistes plus complexes. Une simulation d'une sphère micrométrique de rayon $R = 1\ \mu\text{m}$ tournant à vitesse constante dans un fluide stratifié a été implémentée. La position et la vitesse de la sphère sont définies analytiquement par les équations (3.6), avec $L = 15\ \mu\text{m}$ la largeur du cube de calcul.

$$\bar{X}(t) = \left(\frac{L}{4} \cos 2\pi t, 0, \frac{L}{4} \sin 2\pi t \right) \quad \text{et} \quad \bar{u}(t) = \left(-\frac{L\pi}{2} \sin 2\pi t, 0, \frac{L\pi}{2} \cos 2\pi t \right) \quad (3.6)$$

Le champ de viscosité est choisi stratifié comme une fonction linéaire de la hauteur, il est égal à la viscosité de l'eau en bas de la boîte de calcul et est deux fois plus grande à la surface :

$$\mu(x, y, z, t = 0) = \mu_0(x, y, z) = \mu_{eau}(1 + z) \quad (3.7)$$

Pour ce cas test, la diffusion de la fraction massique est négligée ($\eta = 0$), pour étudier la diffusion numérique de la méthode particulaire. Dans ce cas la fraction massique α et la viscosité μ sont les solutions de la même équation de transport. La fraction massique moyenne dans le domaine de calcul $\Xi(t)$ doit être conservée au cours du temps :

$$\Xi(t) = \frac{1}{\text{meas}(Q)} \int_Q \alpha(x, y, z, t) dx dy dz \quad (3.8)$$

On étudie le ratio $(\Xi(t) - \Xi(0))/\Xi(0)$ à chaque pas de temps de la simulation.

Plusieurs images de cette simulation sont présentées sur la figure 3.9. La viscosité initialement stratifiée est mélangée au cours du calcul. Ceci entraîne l'augmentation des gradients de viscosité qui rendent le calcul du champ de vitesse plus difficile en raison de la perte de régularité du second membre de l'équation d'estimation dans l'algorithme de point fixe. L'isosurface de vitesse présentée sur la figure a encore la forme caractéristique d'amande mais elle est déformée par l'influence des gradients de viscosité et les conditions aux limites.

Les résultats de conservation présentés sur la figure 3.8 sont très bons, même avec un raffinement grossier. Ceci est un avantage des méthodes particulières qui, si elles sont combinées avec des noyaux d'interpolation peu diffusifs, donnent de très bons résultats, même avec de grands pas de temps. Ici la CFL de transport théorique (c'est-à-dire si une discrétisation de l'équation de transport avait été effectuée) est de 10.5 environ (elle varie légèrement au cours de la simulation) et des pas de temps beaucoup plus petits auraient été requis avec une méthode de résolution eulérienne.

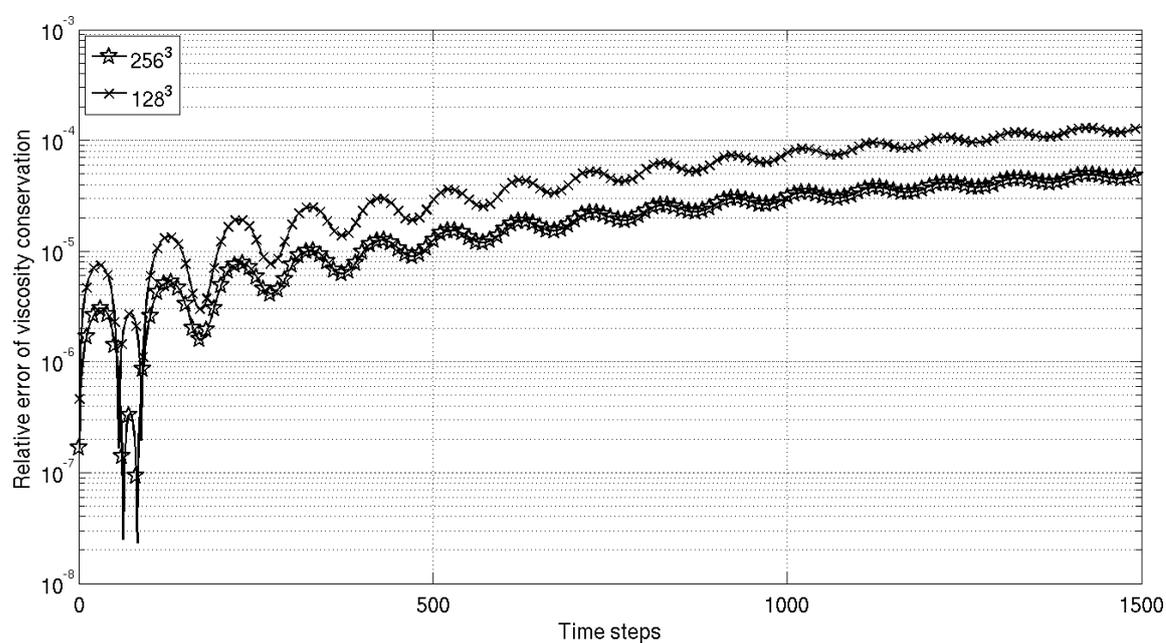


FIGURE 3.8 - Évolution de la quantité $(\Xi(t) - \Xi(0))/\Xi(0)$ au cours de la simulation de la sphère qui tourne. Le pas de temps est fixé à $\delta t = 0.01s$ et la sphère effectue 15 tours à vitesse constante sans changer de sens.

3. VALIDATIONS

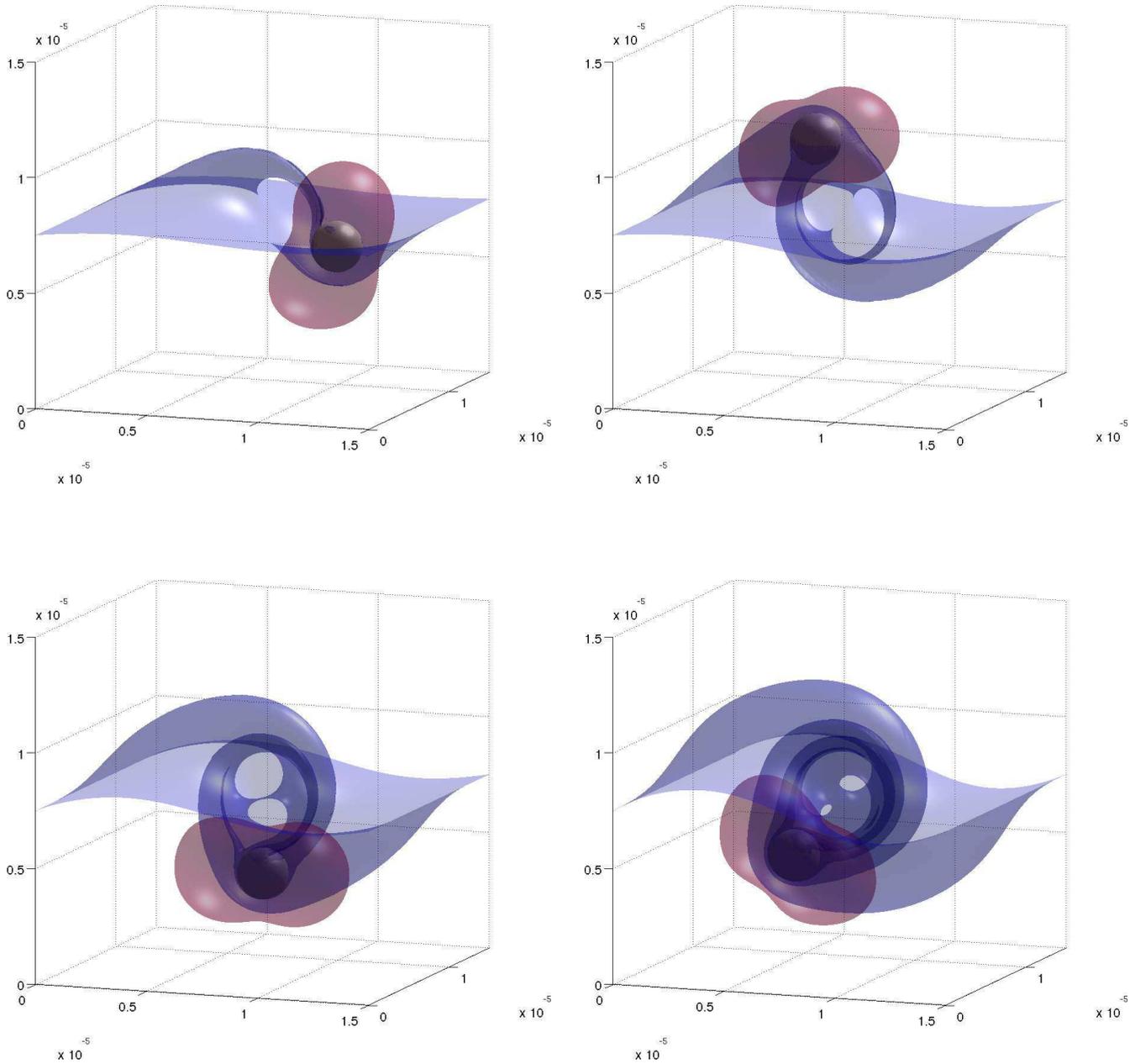


FIGURE 3.9 - Illustrations de la simulation de la sphère micrométrique qui tourne dans un fluide à viscosité variable. À l'initialisation, le champ de viscosité est stratifié (deux fois plus visqueux en haut de la boîte de calcul qu'en bas) et le mouvement de la sphère mélange le fluide. En bleu est représentée une isosurface de viscosité à 1.5×10^{-3} Pa.s. Et en rouge une isosurface de norme de vitesse à $5 \mu\text{m/s}$.

3.5 TEMPS DE CALCUL POUR LE PROBLÈME COMPLET

Dans cette section on reprend le cas test qui vient d'être présenté : une sphère qui tourne dans un champ de viscosité initialement stratifié . On s'intéresse aux performances de calcul, toujours pour des simulations séquentielles, de l'algorithme complet de résolution. Différents degrés de raffinement sont utilisés et les résultats sont présentés sur la figure 3.10.

Tout d'abord on remarque que le comportement du coût global de l'algorithme est toujours en $\mathcal{O}(N \log N)$ ce qui est rassurant puisqu'on a simplement rajouté des méthodes à coût linéaire autour des appels au solveur de Stokes. C'est d'ailleurs pour cela que la puissance de N a été abaissée (la constante C a, elle, été augmentée). Si on compare cette courbe à celle de la figure 3.3, on constate que le coût sur cette figure est quasiment égal à deux fois le coût présenté sur la courbe 3.3. En effet environ 90% du temps de calcul est passé dans le calcul du champ de vitesse u , d'où l'intérêt de s'affranchir des conditions de stabilité associées à la convection.

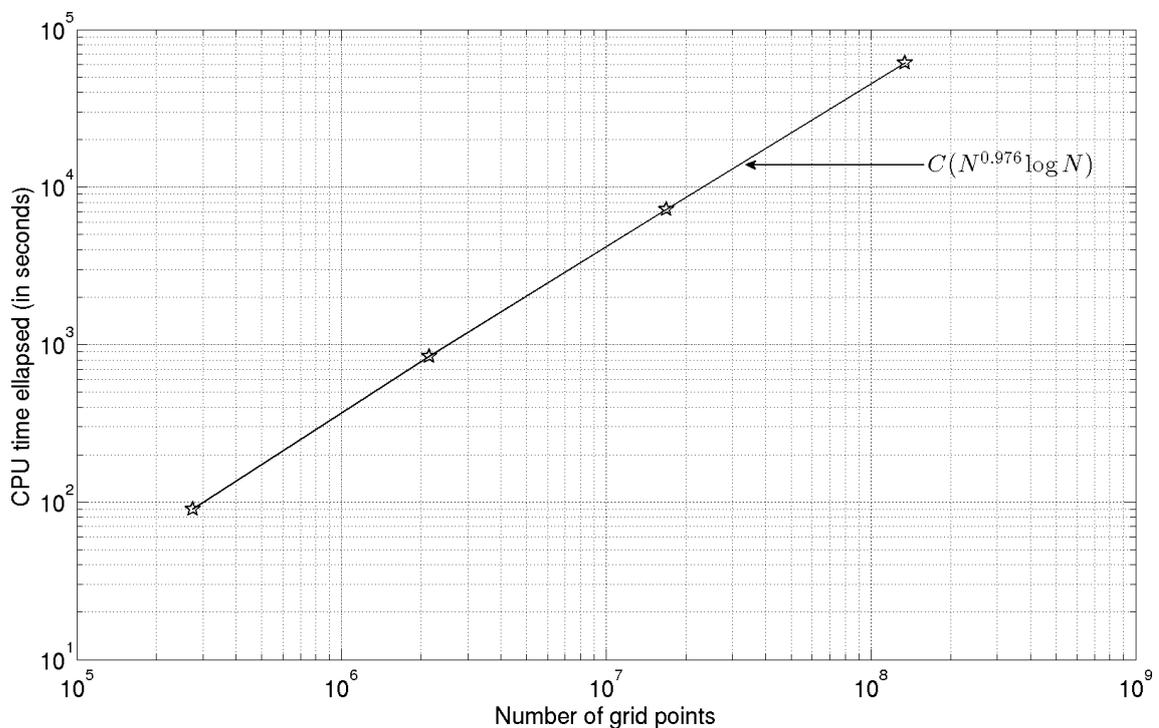


FIGURE 3.10 - Temps de calcul nécessaire pour calculer une itération du problème couplé, avec l'algorithme du point milieu (comprenant deux appels au solveur de Stokes, des interpolations et du transport ; la diffusion massique est nulle), en fonction du nombre de points de grille.

AMÉLIORATIONS DES ALGORITHMES DE RÉSOLUTION

Sommaire

4.1	APPROCHE SHERMANN-MORRISON-WOODBURY POUR LA PÉNALISATION	68
4.1.1	<i>La formule de Sherman-Morrison-Woodbury</i>	68
4.1.2	<i>Présentation pour un problème de Poisson pénalisé . . .</i>	69
4.1.3	<i>Application au problème de Stokes pénalisé</i>	75
4.1.4	<i>Extension aux équations de Navier-Stokes</i>	79
4.2	ACCÉLÉRATION DE LA CONVERGENCE DU POINT FIXE . .	80
4.2.1	<i>Préconditionnement multigrille</i>	81
4.2.2	<i>Extrapolation de Richardson des conditions aux limites .</i>	81
4.2.3	<i>Améliorations des temps de calcul</i>	83
4.3	RÉGULARISATION DE LA FONCTION CARACTÉRISTIQUE .	84
4.4	RAFFINEMENT DOUBLÉ DES VARIABLES TRANSPORTÉES	85

Dans ce chapitre, plusieurs méthodes sont proposées pour améliorer les performances de calcul de l'algorithme qui a été présenté et validé dans les chapitres précédents.

La première partie de ce chapitre présente une méthode alternative à l'utilisation du solveur MUDPACK pour résoudre l'étape d'estimation du champ de vitesse u^* dans l'algorithme de point fixe. Ensuite, une méthode de préconditionnement multigrille de l'algorithme de point fixe est décrite pour réduire le nombre d'itérations. La vitesse de convergence peut également être améliorée en utilisant une relaxation de la vitesse résiduelle dans les conditions aux limites. Enfin, on présente une méthode de régularisation de la fonction caractéristique χ et une description fine des variables transportées pour atténuer les gradients et donner une meilleure lisibilité aux sorties numériques.

Toutes les améliorations qui sont présentées dans ce chapitre peuvent être couplées entre elles, ce qui permet d'améliorer nettement les performances de calcul.

4.1 APPROCHE SHERMANN-MORRISON-WOODBURY POUR LA PÉNALISATION

Cette partie développe une approche originale pour résoudre l'équation pénalisée de l'étape d'estimation du point fixe qui est un problème de Helmholtz à coefficients variable.

La méthode est basée sur la formule de Sherman-Morrison-Woodbury. L'étape clé de cette résolution utilise une méthode itérative de type GMRES qui permet de s'affranchir de l'assemblage de matrices, résolvant uniquement des problèmes de Poisson avec des solveurs rapides basés sur les FFT dont les performances de calcul sont supérieures aux solveurs multigrilles. En domaine ouvert et périodique, pour un problème de Helmholtz à coefficients constants, une approche différente basée également sur des FFT a été présentée dans [Chatelain et Koumoutsakos, 2010].

On montrera que cette méthode permet de calculer plus rapidement la solution du problème tout en utilisant moins de mémoire. De plus, cette méthode de résolution s'avère moins dépendante de la complexité de la géométrie du problème physique sous-jacent, que l'utilisation directe du solveur multigrille utilisé pour les simulations précédentes.

4.1.1 La formule de Sherman-Morrison-Woodbury

Proposition 2. *La formule de Sherman-Morrison-Woodbury (SMW) permet de calculer l'inverse d'une matrice carrée A perturbée :*

$$(A + E^T C E)^{-1} = A^{-1} - A^{-1} E^T (C^{-1} + E A^{-1} E^T)^{-1} E A^{-1} \quad (4.1)$$

où A est une matrice de taille $n \times n$. On dira que la perturbation $E^T C E$ est de rang p , si E est de taille $p \times n$ avec $p \leq n$, C est une matrice $p \times p$ qui contient les valeurs des perturbations et qui est de rang p .

Historiquement, cette formule a été présentée pour une perturbation de rang un par Sherman et Morrison en 1950 [Sherman et Morrison, 1950] et généralisée par Woodbury pour les perturbations de rang p quelconque [Woodbury, 1950].

Cette formule a été très largement utilisée dans la littérature. Par exemple pour la résolution de systèmes linéaires très mal conditionnés mais dont la structure est proche de systèmes linéaires avec un conditionnement faible. Cette formule a été aussi utilisée lors d'assemblage de problèmes aux limites discrétisés : une modification des conditions aux limites peut être vue comme une perturbation de faible rang du système linéaire résultant. On peut également citer des applications pour les méthodes quasi-newton ou les factorisations de matrices (Cholesky par exemple). Un panorama de différentes applications de cette formule a été dressé dans [Hager, 1989].

4.1.2 Présentation pour un problème de Poisson pénalisé

Réécriture du problème pour faire apparaître la formule SMW

La méthode est d'abord présentée pour un problème de Poisson pénalisé. Cela permet de présenter facilement les idées de la méthode, avant de l'étendre aux problèmes de mécanique des fluides visqueux traités dans ce travail. En fait, l'adaptation au problème de Stokes fera exactement apparaître ces résolutions de problèmes de Poisson, ce qui permettra d'utiliser les mêmes solveurs rapides. On introduit le problème classique suivant :

$$\begin{cases} -\Delta u + \frac{\chi}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.2)$$

avec toujours les mêmes notations que dans les chapitres précédents : χ est la fonction caractéristique d'un domaine compact $\mathcal{B} \subset \Omega$, $\varepsilon \ll 1$ est le paramètre de pénalisation.

Ce problème peut être réécrit de manière plus générale :

$$\begin{cases} -\Delta u + cu = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.3)$$

où c est une fonction à support dans \mathcal{B} (potentiellement non continue et admettant de larges variations). f a été modifié par rapport au problème (4.2) pour rester consistant dans les notations.

On introduit ensuite une discrétisation générique du domaine de calcul Ω suffisamment arbitraire pour s'adapter à toutes les dimensions : $\{x_i\}_{i=1..N}$. On suppose que K points sont compris à l'intérieur du domaine \mathcal{B} et on introduit le

mapping ϕ de $1..K$ tel que $\{\phi(k)\}_{k=1..K}$ représente le sous ensemble de points de Ω qui sont à l'intérieur du domaine \mathcal{B} .

En utilisant le symbole de Kronecker, la matrice de restriction E des points de Ω localisés à l'intérieur de \mathcal{B} s'écrit :

$$E_{ik} = \delta_{\phi(i),k} \quad (4.4)$$

qui est une matrice de taille $K \times N$. Sa transposée E^T est bien entendu une matrice $N \times K$ qui représente l'inclusion des points de \mathcal{B} à l'intérieur de Ω . C'est-à-dire que $\{x_{\phi(k)}\}_{k=1..K}$ est l'ensemble des points x_i de Ω qui sont à l'intérieur de \mathcal{B} .

Le problème (4.3) peut être difficile à résoudre numériquement, particulièrement si la fonction c présente de très grandes variations ou de nombreuses discontinuités. Cela conduit à des instabilités numérique difficiles à gérer, à l'utilisation de nombreuses itérations si des méthodes itératives sont utilisées, ou encore à une détérioration du conditionnement dans le cas d'assemblage de matrice. Bien entendu, ces problèmes sont d'autant plus importants que la dimension du problème est élevée, notamment donc en dimension trois.

On introduit alors le problème de Poisson standard :

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega \\ u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.5)$$

pour lequel on suppose qu'un solveur rapide est à disposition. Cela signifie qu'en utilisant la discrétisation $\{x_i\}_{i=1..N}$, on peut écrire le problème (4.5) à la manière d'un système linéaire $AU = B$, avec U la solution discrétisée et B la discrétisation du second membre. Par abus de notation peut ainsi écrire $U = A^{-1}B$ qui signifie que l'on inverse l'opérateur Laplacien avec le solveur rapide, par exemple FISHPACK [Swarztrauber et Sweet, 1975] (utilisé ici) ou FFTW [Frigo et Johnson, 2005].

Si l'on revient maintenant au problème pénalisé (4.3), on remarque qu'il s'agit exactement d'un problème de Poisson (4.5) perturbé par le terme cu (sur lequel aucune hypothèse de régularité n'a été faite) sur le sous domaine \mathcal{B} de Ω . Toujours en utilisant la discrétisation de Ω et en supposant que K points sont contenus dans \mathcal{B} , on peut construire la matrice diagonale C définie telle que $C_{ii} = c(x_i)$. Et donc, en reprenant les matrices E et E^T définies précédemment, la discrétisation du problème (4.3) s'écrit :

$$(A + E^T C E)U = F \quad (4.6)$$

En utilisant la formule de Sherman-Morrison-Woodbury (4.1), la solution s'écrit :

$$U = A^{-1}F - A^{-1}E^T (C^{-1} + EA^{-1}E^T)^{-1} EA^{-1}F \quad (4.7)$$

Dans cette écriture, il y a besoin d'inverser la matrice C qui est diagonale et de la taille de la perturbation (et donc potentiellement petite tant que la mesure du support de la fonction c est inférieure à la mesure de Ω), et la matrice $(C^{-1} + EA^{-1}E^T)$ plus difficile à inverser directement.

Remarque 3. *La formule de SMW est une formule algébrique, ce qui signifie que son utilisation dans un algorithme numérique n'ajoute pas d'erreur à la solution. Seules les erreurs liées aux discrétisations doivent être prises en compte. Cela signifie que les perturbations c potentiellement larges et non régulières n'interviennent pas dans ces calculs d'erreur. De plus il est tout à fait possible d'utiliser une perturbation c variable en espace, pas seulement un créneau entre 0 et $1/\varepsilon$ et donc par exemple une fonction caractéristique régularisée comme présenté dans la section 4.3.*

Dans l'équation (4.7), nous avons réussi à réécrire le problème pénalisé sous une forme discrétisée faisant apparaître presque uniquement des résolutions de problèmes de Poisson standards, et il est possible d'utiliser les solveurs rapides correspondants. Le point clé de l'algorithme est le traitement du terme $C^{-1} + EA^{-1}E^T$ qui doit être inversé. Comme cet algorithme s'inscrit dans le cadre du calcul rapide des solutions de grands problèmes, l'assemblage de matrices est prohibé et une approche itérative est développée dans la section suivante.

Approche itérative de type GMRES et couplage avec les solveurs FFT

On reprend dans cette section les mêmes notations que dans les paragraphes précédents avec A et E^TCE les matrices résultant de la discrétisation des opérateurs Laplacien et de perturbation (c'est-à-dire cu).

Rappelons que l'objectif est de faire apparaître uniquement des résolutions de systèmes linéaires faisant intervenir la matrice A , et d'utiliser `FISHPACK` à la place. Le seul verrou qui reste à lever dans cet algorithme est l'inversion de :

$$Q = C^{-1} + EA^{-1}E^T \tag{4.8}$$

Dès que ce calcul est résolu, la solution du problème perturbé discrétisé (4.7) se calcule en résolvant les deux problèmes de Poisson $AW = F$ et $AU = E^TQ^{-1}EW$. La solution finale étant la différence entre ces deux solutions.

Décomposons le système linéaire $AU = E^TQ^{-1}EW$, en notant $AU = E^TZ$, avec Z la solution du système linéaire $QZ = EW$. Il n'est pas possible de résoudre directement ce système linéaire sans assembler la matrice A^{-1} . En revanche il est possible d'utiliser une méthode itérative du type GMRES [Saad et Schultz, 1986] sur le problème $QZ = EW$. Cet algorithme consiste à minimiser le résidu $|QZ - EW|$ et seul le produit QZ a besoin d'être calculé. Cela peut être fait sans calculer A^{-1} , en deux étapes qui doivent donc être calculées à chaque itération de Krylov.

L'algorithme global s'écrit alors de la manière suivante :

1. Résoudre le problème de Poisson $AW = F$

2. Résoudre itérativement le problème $QZ = EW$ avec $Q = C^{-1} + EA^{-1}E^T$. Pour cela on utilise la méthode GMRES, ce qui requiert l'évaluation du produit $Z \rightarrow QZ$, calculé de la manière suivante :
 - a) Résoudre le problème de Poisson suivant $A\Theta = E^T Z$
 - b) Poser $QZ = C^{-1}Z + E\Theta$
3. Résoudre le dernier problème de Poisson $AY = E^T Z$
4. Calculer la solution finale $U = W - Y$

Comme les étapes 2a et 2b sont calculées à chaque itération de Krylov, le nombre total de problèmes de Poisson résolus est $2 + N_{Kry}$ avec N_{Kry} la taille maximale de l'espace de Krylov. Du point de vue du temps de calcul, les autres étapes de cet algorithme sont négligeables : C est une matrice diagonale donc le calcul de son inverse est immédiat et les matrices E et E^T ne sont pas assemblées. Les restrictions et inclusions peuvent être déduites directement de la fonction caractéristique χ à partir du mapping ϕ .

L'algorithme qui a été présenté ci-dessus pour des conditions aux limites de type Dirichlet homogènes, mais il est complètement transposable à d'autres types de conditions aux limites. Pour des conditions aux limites périodiques, il n'y a rien de spécial à faire : tous les problèmes de Poisson résolus doivent l'être avec des conditions aux limites périodiques. Si le problème pénalisé admet des conditions aux limites (de Dirichlet ou Neumann) non homogènes, il faut calculer la solution du problème de Poisson de l'étape 1 avec ces conditions aux limites non homogènes. Quant aux problèmes de Poisson des étapes 2a et 3, ils doivent être calculés avec des conditions aux limites homogènes de même type. Cela assure la compatibilité entre les conditions aux limites du problème de départ et la solution finale.

Temps de calcul et occupation mémoire, comparaison avec MUDPACK

Dans cette section une comparaison entre l'algorithme basé sur la formule SMW couplée à la méthode GMRES, et le solveur MUDPACK est présentée. Comme cela a été expliqué dans la section 2.2.5, MUDPACK permet de résoudre directement un problème de Poisson pénalisé, puisqu'il est capable de traiter des problèmes elliptiques à coefficients variables. Son algorithme de résolution est basé sur une méthode multigrille.

Pour comparer l'utilisation mémoire, les mêmes notations que dans la section précédentes sont utilisées. Pour simplifier, la boîte de calcul est supposée cubique avec le même nombre de points de discrétisation dans chaque direction. On note N le nombre total de points de grille (et donc $N^{1/3}$ le nombre de points de grille dans chaque direction). Ainsi, la taille de la variable U est N . K est toujours le nombre de points pénalisés, c'est la taille des variables Z et EU . Dans la suite la variable F , qui est le second membre (et donc une donnée), n'est pas comptée car elle est commune aux trois méthodes comparées.

Pour calculer la solution du problème (4.6) avec le solveur MUDPACK, il faut stocker la solution U dans une variable différente du second membre F (contra-

rement aux solveurs FFT). Les coefficients de l'équation aux dérivées partielles elliptique n'ont pas besoin d'être stockés en mémoire, ils sont calculés à chaque appel par une routine séparée. Enfin MUDPACK a besoin d'un tableau de travail pour stocker les différents résultats à chaque cycle de décomposition, la taille de ce tableau est $30N + 180N^{2/3} + 360N^{1/3}$ (plus des puissances inférieures de N).

Avec le solveur FISHPACK, il n'y a pas besoin de stocker la solution U qui l'est directement dans le second membre F . Cette caractéristique intéressante vient du calcul récursif des FFT qui permettent d'écraser le second membre. Ceci économise une variable de taille N . Cela signifie que pour calculer l'étape 1 de l'algorithme, il n'y a que la variable W à sauvegarder en mémoire jusqu'à l'étape 3. A l'étape 2, il faut conserver en mémoire deux tableaux de taille K (pour les variables Z et $E\Theta$) et une variable de taille N qui contient successivement $E^T Z, \Theta, E^T Z$ et Y . Enfin à chaque étape d'orthogonalisation de la base de Krylov, il faut stocker les valeurs successives des nouveaux vecteurs de la base : $QZ - EW$, ce qui correspond au plus à un tableau de taille $N_{Kry} \times K$, dont la taille maximale est K^2 mais qui en pratique est plus petit compte tenu du bon conditionnement de l'opérateur associé (voir section 4.1.3). La solution finale est sauvegardée dans le vecteur W . Enfin FISHPACK a également besoin d'un tableau de travail, mais sa taille est bien inférieure à celui de MUDPACK, toujours grâce au caractère récursif des calculs : $15N^{1/3}$ (plus des puissances inférieures de N).

L'assemblage de la matrice du Laplacien avec une méthode de différences finies à l'ordre deux classique en 3D (ou bien avec des éléments finis Q_2 sur la même grille régulière) donne une matrice creuse de taille $N \times N$ à stocker avec sept coefficients non nuls par ligne plus la solution U qui n'est pas stockée dans le second membre. De plus, il faut en général stocker de l'ordre de N^2 nombres pour des méthodes de résolutions de type LU (ou plus élaborées). Des méthodes itératives (comme GMRES) peuvent conduire à un certain gain mémoire si la matrice est bien conditionnée, ce qui n'est pas forcément le cas des matrices pénalisées. Le coût en mémoire sera en $\mathcal{O}(N)$ avec une constante assez grande (le nombre de vecteur de Krylov pour GMRES, qui grandit avec le conditionnement).

MUDPACK	SMW-GMRES et FISHPACK	Assemblage matrice
$31N + 180N^{2/3} + 360N^{1/3}$	$N + 15N^{1/3} + (1 + N_{Kry})K$	$8N + \mathcal{O}(N^2 \text{ ou } N)$

TABLE 4.1 - Mémoire utilisée pour calculer la solution du problème (4.6) avec le solveur MUDPACK, l'algorithme SMW-GMRES avec le solveur FISHPACK et un assemblage standard de la matrice du problème de Poisson pénalisé avec une résolution de type LU ou itérative du type GMRES. N est le nombre de points de grille.

Dans la table 4.1 les résultats de mémoire occupée pour ces trois méthodes sont synthétisés. Le calcul de la solution avec le solveur MUDPACK nécessite 31 fois plus de mémoire que la méthode couplant SMW et GMRES, nous économisons également de la mémoire par rapport au seul assemblage de la matrice du Laplacien pénalisé, et encore plus si on considère l'étape de résolution. Sur la figure 4.1 a été tracé en diagramme log log le nombre de kb à stocker en fonction du nombre de

points de grille. Ces résultats sont directement calculés avec les formules données dans la table 4.1 sachant qu'un réel double précision occupe 64b.

Pour comparer le temps de calcul entre le solveur MUDPACK et notre nouvel algorithme un cas test numérique simple est introduit : on considère le problème (4.2) avec $\bar{u} = 1$ et $f = 0$. Le domaine de calcul est le cube unité en trois dimensions et un raffinement identique est utilisé dans chaque direction : $N^{1/3} = 2^r + 1$ (d'après la convention de MUDPACK). Différentes valeurs de l'exposant r sont utilisées. Le domaine pénalisé \mathcal{B} est une sphère de rayon 0.1, au centre de la boîte de calcul. La comparaison entre les temps de calcul de ces deux méthodes est présenté sur la figure 4.1. Ce calcul séquentiel est fait sur une architecture Intel Xeon X5450.

L'utilisation du couplage entre la formule SMW et GMRES permet d'utiliser des solveurs FFT qui sont beaucoup plus rapides que le solveur multigrille. Même si plusieurs problèmes doivent être calculés (au plus $N_{Kry} + 2$ avec $N_{Kry} = 50$ ici), la résolution de ce problème avec MUDPACK est deux fois plus longue.

Le temps de calcul n'a pas été comparé avec l'assemblage du système linéaire et sa résolution car, pour des simulations 3D de ces tailles, il faut utiliser des algorithmes parallélisés. Comme ici MUDPACK, GMRES et FISHPACK sont utilisés de manière séquentielle, la comparaison n'aurait pas été pertinente. D'autant que les termes de pénalisation détériorent le conditionnement de la matrice.

A travers cet exemple numérique et la figure 4.1 nous avons montré que

FIGURE 4.1 - Temps de calcul consommé et mémoire utilisée pour résoudre le problème (4.2) avec $\bar{u} = 1$ et $f = 0$ pour différents raffinements. Cette figure compare la résolution directe avec MUDPACK et avec l'algorithme SMW-GMRES (la dimension de l'espace de Krylov est 50), FISHPACK est utilisé pour les problèmes de Poisson.

l'algorithme de résolution développé à partir de la formule de Sherman-Morrison-Woodbury couplé à une méthode itérative GMRES et des solveurs rapides de problèmes de Poisson est efficace pour résoudre des problèmes de pénalisation. Le gain d'utilisation mémoire et de temps de calcul par rapport à un solveur multigrille est très profitable. Dans la prochaine section l'extension à la résolution du problème de Stokes et à d'autres problèmes de mécanique des fluides sont proposés.

4.1.3 Application au problème de Stokes pénalisé

Reformulation de l'étape d'estimation

Les résultats présentés dans la section précédente s'adaptent immédiatement à l'algorithme de point fixe qui a été détaillé au chapitre 2. Cet algorithme repose sur une méthode itérative en trois étapes : une étape d'estimation, une étape de calcul d'un projecteur et une dernière étape de correction qui consiste à projeter l'estimé sur les champs à divergence nulle. C'est dans la première étape de ce point fixe que l'algorithme dérivé dans la section précédente va pouvoir être appliqué. Pour rappel, l'étape d'estimation est rappelée ci-dessous dans son écriture complète (avec les termes de viscosité non homogènes).

$$\begin{cases} -\mu\Delta u_{k+1}^* + \frac{\chi}{\varepsilon}(u_{k+1}^* - \nabla\zeta_k - \bar{u}) = f - [2D(u_k) + (\operatorname{div}u_k^*)\operatorname{Id}]\nabla\mu & \text{dans } \Omega \\ u_{k+1}^* = g - \nabla\zeta_k & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.9)$$

A partir de là, il est possible d'écrire (car $\mu > 0$) :

$$G(u_k^*) = \left(f + 2D(u_k)\nabla\mu + \operatorname{div}u_k^*\nabla\mu + \frac{\chi}{\varepsilon}(\nabla\zeta_k + \bar{u}) \right) / \mu \quad (4.10)$$

de telle sorte que le problème (4.9) se réécrit :

$$\begin{cases} -\Delta u_{k+1}^* + \frac{\chi}{\varepsilon\mu}u_{k+1}^* = G(u_k^*) & \text{dans } \Omega \\ u_{k+1}^* = g - \nabla\zeta_k & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (4.11)$$

On retrouve ainsi un problème de Poisson pénalisé qui est de la même forme que (4.3). L'algorithme basé sur la formule de Sherman-Morrison-Woodbury et la méthode itérative GMRES s'appliquent immédiatement au calcul d'écoulements très visqueux avec les méthodes développées aux chapitres précédents. De plus, il n'y a pas de limitation au cas de la viscosité constante puisque la méthode a été dérivée avec un terme de perturbation potentiellement raide et variable en espace.

L'utilisation de ce nouvel algorithme pour l'étape d'estimation permet de n'utiliser que le solveur FISHPACK. Ce dernier était déjà utilisé pour le calcul du projecteur si bien que l'économie de mémoire dans l'algorithme est substantielle. Dans le paragraphe suivant l'influence de la complexité de la géométrie (et donc du domaine pénalisé \mathcal{B}) sur les performances de l'algorithme sont étudiées.

Étude des performances en fonction de la géométrie

Plusieurs tests sont effectués sur différents écoulements de Stokes pour étudier l'influence de la géométrie du domaine pénalisé sur les performances de l'algorithme.

Trois cas tests d'écoulements sont utilisés, il s'agit d'écoulements de Stokes à viscosité variable pour lesquels la viscosité est initialisée avec un profil stratifié. Le premier est le cas test de la sphère qui tourne dans un écoulement de Stokes stratifié et qui a déjà été présenté au chapitre 3, dans la section 3.4. Les deux autres cas test sont présentés dans le chapitre 6 : il s'agit de la modélisation de la nage d'un spermatozoïde et de l'écoulement d'un mucus pulmonaire autour de cellules épithéliales ; l'important dans cette section n'étant pas les applications physiques et biologiques, ni la capacité du modèle à représenter l'écoulement réel, le lecteur pourra se référer au chapitre 6 où ces discussions ont été regroupées. Ici on se cantonne à l'analyse des performances de l'algorithme SMW-GMRES.

Les trois écoulements considérés ici avec les géométries correspondantes sont présentés sur la figure 4.2. Les obstacles mobiles sont représentés en gris : il s'agit d'une sphère, de quatre cellules épithéliales (composées de 19 cils chacune) battant de manière asynchrone et d'un spermatozoïde (composé d'une tête elliptique et d'un flagelle). Dans les trois cas le profil de viscosité est stratifié.

Dans un premier temps, on étudie les performances des itérations effectuées avec la méthode de GMRES. Le coût de l'algorithme dépend directement du nombre de vecteurs construits pour enrichir la base de Krylov ; le calcul de chaque vecteur comprend un appel à un solveur de Poisson. Il est donc souhaitable de garder ce nombre le plus petit possible même lorsque le raffinement utilisé est élevé. Ce nombre de vecteurs à calculer dans la base de Krylov est directement lié au conditionnement de la matrice, qui est défini comme le quotient de la plus grande sur la plus petite valeur propre du système linéaire associé. Pour calculer ce conditionnement il faut donc assembler la matrice $Q = C^{-1} + EA^{-1}E^T$ qui est de taille $K \times K$.

L'objectif même de l'algorithme développé ici est de s'affranchir de l'assemblage de matrice. Pour l'analyse, il est néanmoins possible, en étant patient, de réaliser une fois cette assemblage en effectuant K fois le produit Qe_i avec les K vecteurs e_i de la base canonique. En effet le produit Qe_i est égal à la $i^{\text{ème}}$ colonne de la matrice Q .

Cette matrice a été calculée pour les trois géométries précédemment décrites et pour différents raffinements. Toutes ces matrices Q sont des matrices pleines et les valeurs propres sont présentées sur la figure 4.3 en haut. Dans tous les cas Q est une matrice symétrique puisque ses valeurs propres sont réelles et elles décroissent logarithmiquement ce qui permet d'avoir un conditionnement faible compte tenu de la dimension du problème.

Ce bon résultat de conditionnement permet d'utiliser des tailles d'espace de Krylov faibles, typiquement $N_{Kry} = 50$ à 100 pour ces simulations et il n'y a pas besoin d'augmenter cette valeur quand la taille du problème augmente.

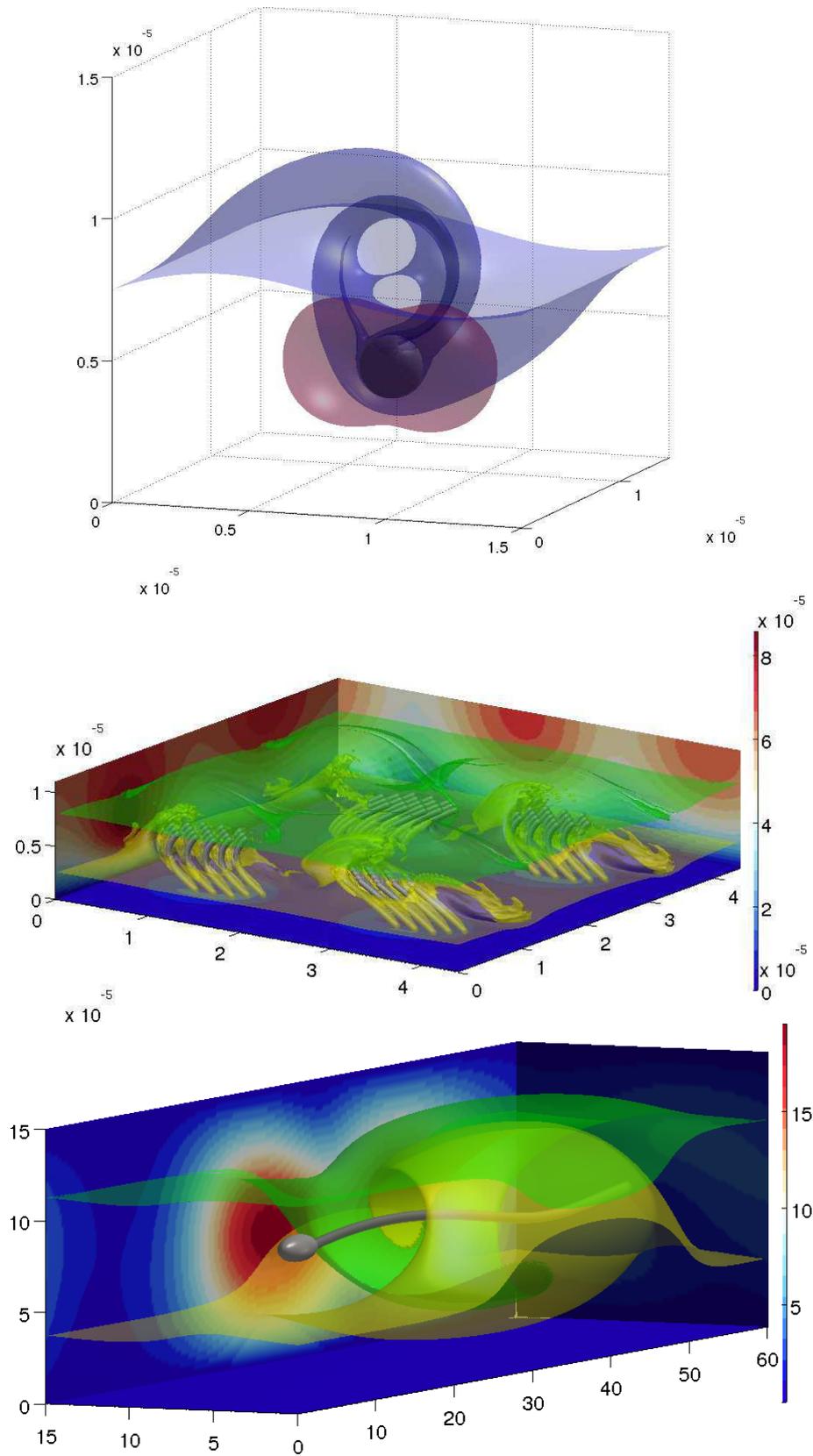


FIGURE 4.2 - Illustration des trois configurations d'écoulements de Stokes en interaction avec des obstacles mobiles qui sont utilisées pour étudier l'algorithme SMW-GMRES.

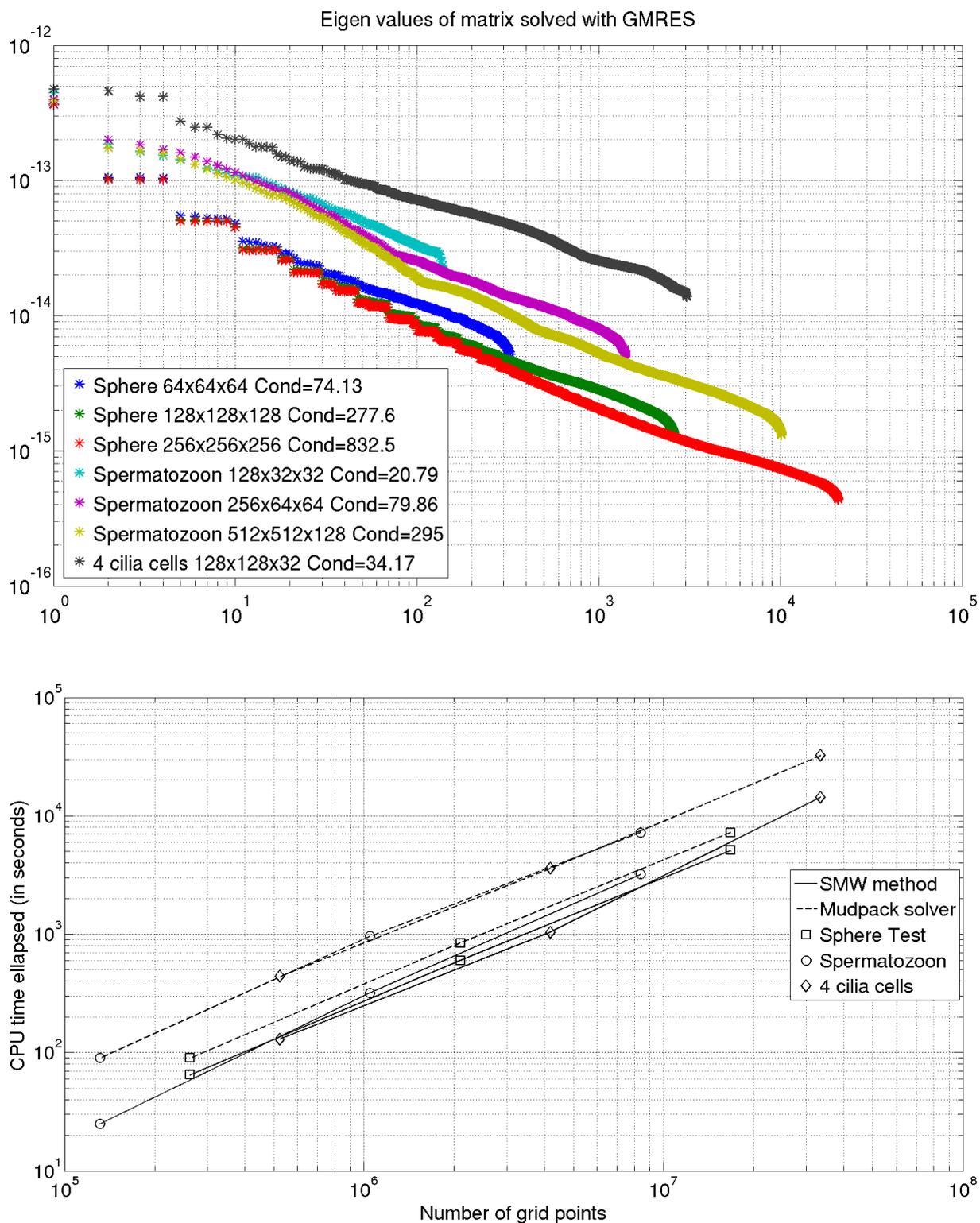


FIGURE 4.3 - (Haut) Valeurs propres et conditionnement de la matrice Q résolue avec la méthode de GMRES pour les trois géométries et différentes résolutions. (Bas) Temps de calcul pour une itération du problème de Stokes, comparaison entre MUDPACK et SMW-GMRES pour les trois géométries.

Comme l'algorithme de calcul des transformées de Fourier rapides est en $\mathcal{O}(N \log N)$ et que la méthode qui a été développée est une succession de résolutions de problèmes de Poisson, l'algorithme complet est également en $\mathcal{O}(N \log N)$. Les autres étapes du calcul comme la convection Lagrangienne et le remaillage particulière sont en $\mathcal{O}(N)$. On obtient bien un coût de calcul qui croît de manière similaire à celui de la méthode multigrille.

Sur la figure 4.3, en bas, sont présentés les temps de calcul nécessaires pour effectuer une étape complète de l'algorithme en utilisant le solveur MUDPACK et SMW-GMRES avec le solveur FISHPACK, en fonction du nombre de points de grille. Les deux méthodes sont bien en $\mathcal{O}(N \log N)$, mais la constante n'est pas la même pour les deux méthodes. On retrouve le résultat que nous avons trouvé sur le premier exemple : la méthode SMW-GMRES est plus rapide que la résolution directe avec MUDPACK, même si le nombre de problèmes de Poisson à résoudre est élevé. Pour le cas test de la sphère, il permet d'économiser 30% de temps de calcul, pour les autres géométries plus complexe on retrouve 50% d'économies.

L'algorithme développé dans cette section a été validé sur un cas test simple, mais également sur des cas plus réalistes d'écoulements de Stokes en géométrie complexe. Il permet d'économiser à la fois du temps de calcul et de l'occupation mémoire par rapport à une méthode multigrille, utilisée par exemple par le solveur MUDPACK.

4.1.4 Extension aux équations de Navier-Stokes

De la même manière que cela a été décrit pour l'écoulement de Stokes, il est tout à fait possible d'utiliser une méthode de pénalisation pour les équations de Navier-Stokes. C'est d'ailleurs dans ce contexte que la méthode a été introduite [Angot *et al.*, 1999]. Un terme est ajouté dans l'équation de conservation de quantité de mouvement pour forcer une vitesse \bar{u} à l'intérieur d'un domaine compact \mathcal{B} de fonction caractéristique χ :

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \cdot \nabla u - \operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{\chi}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p \quad (4.12)$$

Avec les mêmes notations que précédemment : u est la vitesse du fluide, p la pression, $D(u) = (\nabla u + \nabla u^T)/2$ le tenseur des contraintes, μ la viscosité et ε le paramètre de pénalisation qui doit être choisi petit. La vitesse solide \bar{u} peut être prescrite, ce qui est supposé dans tout ce travail, mais elle peut également dépendre de la vitesse du fluide u . Dans ce cas, on dit que le couplage fluide-structure est two ways, comme cela a été abordé en introduction.

L'utilisation de cet algorithme de résolution est justifiée dans le cas des équations de Navier-Stokes, pour les problèmes où l'opérateur de diffusion est calculé de manière implicite, c'est-à-dire pour des écoulements dont le nombre de Reynolds n'est pas trop élevé (l'écoulement de Stokes dont il a été question dans la section précédente étant le cas limite). Sinon, rien ne justifie un calcul implicite. Dans ce cas, l'algorithme présenté précédemment est adaptable pour calculer le

terme de pénalisation également de manière implicite. Cela permet de profiter des effets régularisants du Laplacien en même temps que l'on résout le terme pénalisé.

En appliquant au problème (4.12) une discrétisation temporelle, et un schéma explicite pour les termes de convection (comme par exemple un schéma de Lax-Wendroff), le problème de Navier-Stokes pénalisé s'écrit après discrétisation :

$$u^{n+1} - \mu\delta t\Delta u^{n+1} + \chi\varepsilon^{-1}\delta t u^{n+1} = F \quad (4.13)$$

Ce problème doit être complété par des conditions aux limites classiques pour les problèmes de mécanique des fluides dont on ne parle pas ici.

On peut alors réécrire ce problème en posant $c = \frac{\chi}{\mu\varepsilon}u^{n+1}$

$$-\Delta u^{n+1} + \frac{1}{\mu\delta t}u^{n+1} + c(u^{n+1}) = F \quad (4.14)$$

Dans le cas où la viscosité est constante, au lieu de retrouver un problème de Poisson perturbé comme dans le cas de l'écoulement de Stokes, c'est un problème de Helmholtz avec des coefficients constants, qui est perturbé. Compte tenu du fait que certains solveurs rapides pour le problème de Poisson permettent également de résoudre ces problèmes de Helmholtz, la méthode développée ci-dessus reste valable.

En revanche dans le cas Navier-Stokes à viscosité variable l'algorithme SMW-GMRES trouvera ses limites car, soit on considère un problème de Helmholtz à coefficients variables et dans ce cas autant considérer la perturbation directement, soit on considère $c = \frac{\chi}{\mu\varepsilon}u^{n+1} + \frac{1}{\mu\delta t}u^{n+1}$ et dans ce cas le support de la perturbation remplit tout le domaine. Ce cas n'a pas été testé numériquement mais le problème résolu par GMRES serait probablement de trop grande dimension (égale à la dimension du problème 3D complet, ce qui implique de longs calculs pour les orthogonalisations d'Arnoldi), ainsi que des espaces de Krylov à choisir beaucoup plus grands. Cela reste une supposition, puisque l'implémentation n'a pas été faite.

Enfin, il est à noter que la méthode est également compatible avec un schéma implicite de traitement des termes de convection, ainsi qu'avec un traitement lagrangien de la convection (en utilisant un splitting de la partie convective avec une méthode Particle-in-Cell par exemple). Chaque schéma conduisant à une expression différente de la discrétisation (4.13).

4.2 ACCÉLÉRATION DE LA CONVERGENCE DU POINT FIXE

Deux méthodes sont maintenant proposées pour d'une part réduire le nombre d'itérations de point fixe, d'autre part accélérer la décroissance des résidus.

4.2.1 Préconditionnement multigrille

Une possibilité pour réduire le nombre d'itérations de point fixe est développée dans cette section. On rappelle ici le problème résolu à chaque étape d'estimation de la vitesse u^* pour le cas à viscosité variable (directement avec le solveur MUDPACK ou avec la méthode présentée au début de ce chapitre) :

$$\begin{cases} -\mu\Delta u_{k+1}^* + \frac{\lambda}{\varepsilon}(u_{k+1}^* - \nabla\zeta_k - \bar{u}) = f - [2D(u_k) + (\operatorname{div}u_k^*)\operatorname{Id}]\nabla\mu & \text{dans } Q \\ u_{k+1}^* = g - \nabla\zeta_k & \text{sur } \partial Q \end{cases} \quad (4.15)$$

La méthode de point fixe présentée au chapitre 2 conduit au calcul de deux suites (ζ_k) et (u_k) minimisant les résidus après la projection. Il est possible de diminuer le nombre d'itérations de la méthode si une valeur initiale (ζ_0, u_0) de qualité est fournie. Une manière économique est de calculer la solution du problème sur une grille grossière, d'interpoler ensuite les champs (ζ_k) et (u_k) sur la grille fine et de les utiliser pour initialiser le point fixe.

L'opération peut être répétée de manière récursive, par exemple pour une résolution fine avec 256^3 points de grille, le problème est résolu sur une grille 64^3 puis sur une grille 128^3 et enfin sur la grille 256^3 .

Comme le coût de l'algorithme est en $\mathcal{O}(N \log N)$ le temps de calcul d'une itération de point fixe sur la grille fine est du même ordre de grandeur (en fait légèrement supérieur) que le temps de calcul de 8 itérations de point fixe sur une grille grossière (avec la moitié de points de grille dans chaque direction). Ainsi, si on utilise des noyaux d'interpolation suffisamment précis pour récupérer la solution sur la grille fine, le gain de temps de calcul n'est pas négligeable.

La figure 4.4 compare l'évolution de deux des résidus de la méthode. Le cas test utilisé est le tourbillon de Green Taylor (dont les résidus ont déjà été présentés sur la figure 3.1) pour une résolution 256^3 . Cette fois, les résidus sont tracés en fonction du temps de calcul écoulé, il s'agit toujours d'une simulation séquentielle sur un processeur Intel Xeon X5450. La figure compare les performances de l'algorithme en utilisant ou non le preconditionnement avec huit itérations sur chaque niveau de grille grossière, en partant d'une grille 32^3 .

Pour atteindre une valeur de résidus de 10^{-5} il faut une vingtaine d'itérations pour le problème non preconditionné alors que l'utilisation du preconditionneur permet de limiter ce nombre à huit. Ainsi la simulation est 2.3 fois plus rapide : ce gain n'est pas du tout négligeable, et particulièrement intéressant pour des problèmes avec un grand nombre de degrés de liberté. Enfin la figure met bien en évidence le fait que le preconditionnement sur trois niveaux de grille grossière est légèrement plus rapide qu'une itération de point fixe sur la grille fine.

4.2.2 Extrapolation de Richardson des conditions aux limites

Une autre possibilité pour accélérer la convergence de la méthode de point fixe est d'effectuer une relaxation des conditions aux limites. Au lieu d'utiliser seule-

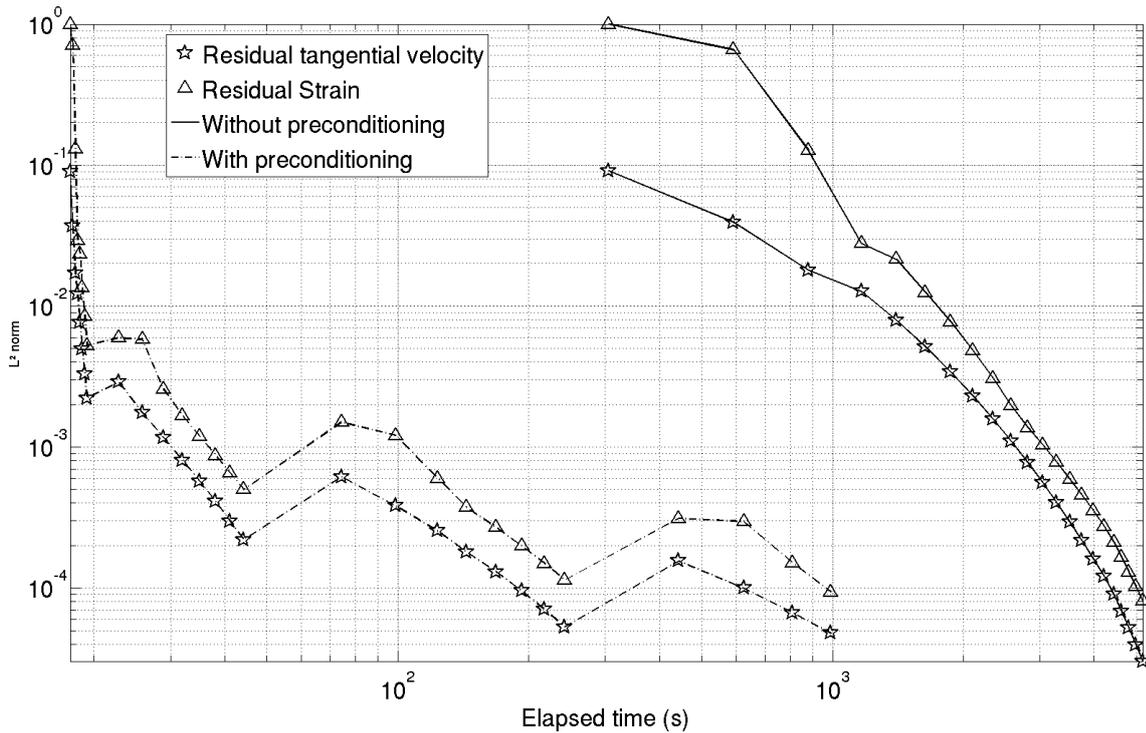


FIGURE 4.4 - Évolution des résidus de l'algorithme de point fixe en fonction du temps de calcul. Comparaison entre la méthode originale présentée au chapitre précédent et la méthode préconditionnée sur trois niveaux de grilles grossières. La simulation préconditionnée est 2.3 fois plus rapide pour atteindre la tolérance fixée.

ment les informations de l'étape k pour calculer u_{k+1}^* , on utilise une pondération de $\nabla\zeta_k$ et $\nabla\zeta_{k-1}$. Dans ce cas, le problème de l'étape d'estimation de l'algorithme de point fixe se réécrit :

$$\begin{cases} -\mu\Delta u_{k+1}^* + \frac{\chi}{\varepsilon}(u_{k+1}^* - (\theta\nabla\zeta_k + (1-\theta)\nabla\zeta_{k-1}) - \bar{u}) = f \\ \quad - [2D(u_k) + (\text{div}u_k^*)\text{Id}] \nabla\mu \quad \text{dans } Q \\ u_{k+1}^* = g - (\theta\nabla\zeta_k + (1-\theta)\nabla\zeta_{k-1}) \quad \text{sur } \partial Q \end{cases} \quad (4.16)$$

Cette méthode empirique n'accélère pas l'algorithme pour toutes les valeurs de θ . Il a été constaté que si $\theta > 1$ la convergence est plus rapide que pour $\theta = 1$. En revanche le choix $\theta < 1$ ralentit la convergence. La courbe 4.5 présente l'évolution des résidus au cours des itérations de point fixe pour différentes valeurs de ce paramètre. La valeur optimale de l'accélération est constatée pour $\theta = 1.8$. Avec cette valeur, un résidus de 10^{-4} est atteint au bout de 13 itérations au lieu de 20 dans le cas $\theta = 1$. Enfin pour $\theta = 2$ une stagnation de la contrainte résiduelle apparaît au bout de plusieurs itérations.

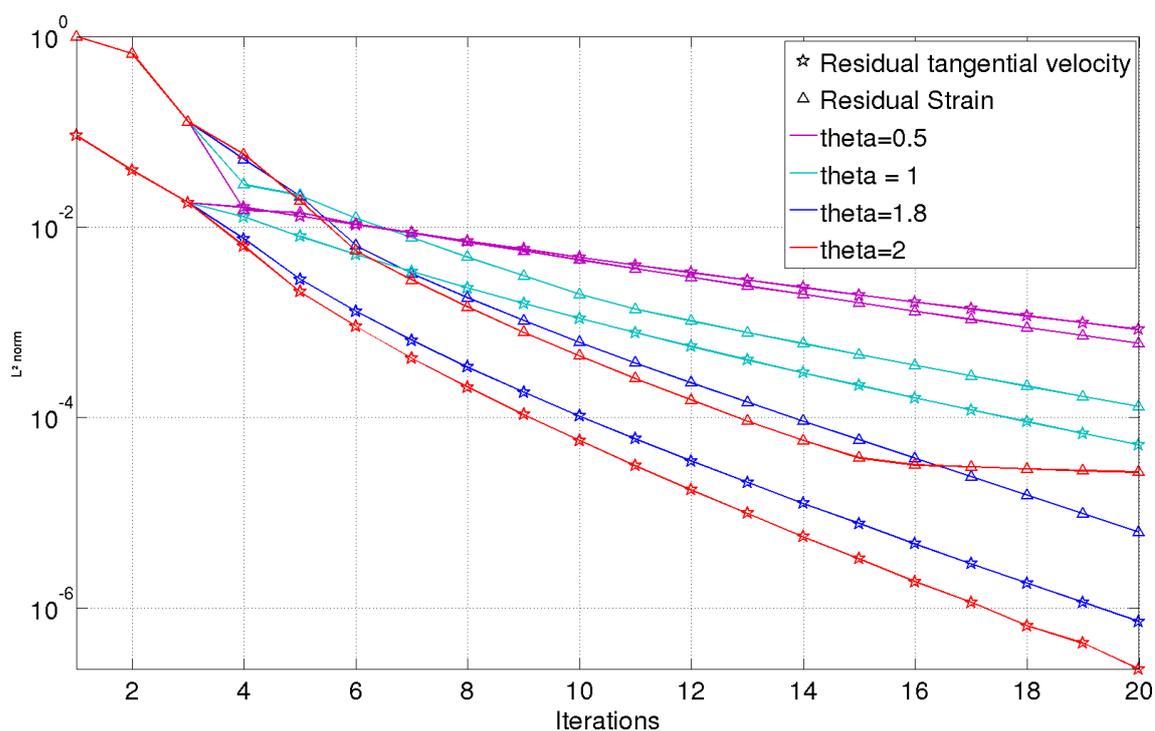


FIGURE 4.5 - Comparaison de l'évolution des résidus de l'algorithme de point fixe pour différentes valeurs du paramètre de relaxation θ .

4.2.3 Améliorations des temps de calcul

Pour clore cette section, les performances de l'algorithme de point fixe, modifié avec les deux précédentes méthodes d'accélération, sont présentées. Il s'agit encore du cas test du tourbillon de Green-Taylor, l'étape d'estimation est calculée avec MUDPACK. Quatre situations sont comparées sur la figure 4.6 :

- Le point fixe original dont les résultats ont déjà été présentés à la section 3.1.3
- Un point fixe utilisant l'extrapolation de Richardson des conditions aux limites avec $\theta = 1.8$ (valeur optimale empirique).
- Un point fixe utilisant un préconditionnement multigrille jusqu'à un raffinement grossier de référence 32^3
- Un point fixe combinant ces deux méthodes d'accélération

Cette figure montre que la plus efficace des améliorations est le préconditionnement multigrille, qui permet de gagner jusqu'à un ordre de grandeur pour un maillage 512^3 . L'accélération dû à la méthode d'extrapolation est moins impressionnante mais reste néanmoins intéressante.

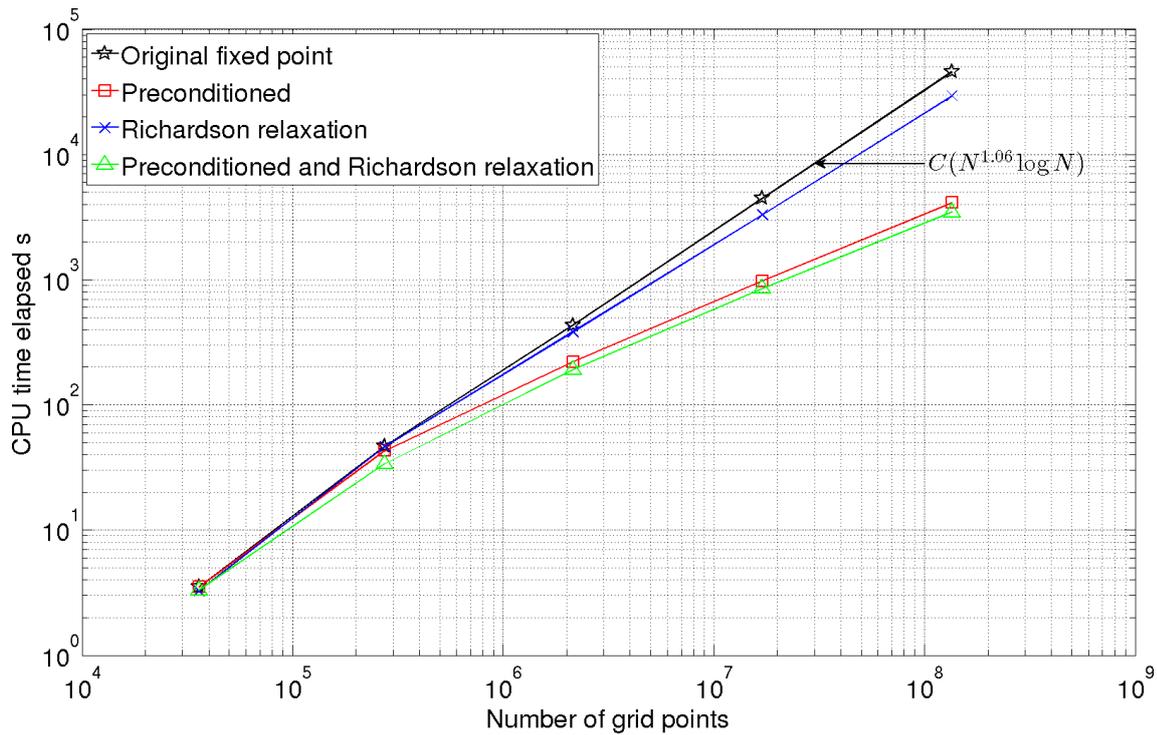


FIGURE 4.6 - Temps de calcul pour une itération de point fixe du problème de Green-Taylor jusqu'à une valeur de résidus de 10^{-4} . Calcul effectué sur un processeur Intel Xeon X5450 (calcul séquentiel). Comparaison entre l'algorithme original présenté dans le chapitre précédent, l'utilisation du préconditionnement multigrille seul, l'extrapolation de Richardson seule et enfin l'utilisation des deux techniques d'accélération.

4.3 RÉGULARISATION DE LA FONCTION CARACTÉRISTIQUE

Une autre amélioration possible dans l'algorithme est d'utiliser une fonction caractéristique régularisée. C'est-à-dire au lieu d'utiliser une fonction indicatrice qui passe de zéro à un, on choisit une fonction qui donne une transition continue et plus régulière.

Dans [Gazzola *et al.*, 2011; Rossinelli *et al.*, 2010] les auteurs utilisent une régularisation basée sur des fonctions trigonométriques de la distance signée à l'obstacle. Bien entendu, ce choix n'est pas unique. Dans ce travail nous avons décidé d'utiliser une approche similaire avec des gaussiennes car les géométries qui sont traitées sont toutes basées sur des sphères ou des empilements de sphères.

Pour une sphère de rayon R , centrée au point (x_s, y_s, z_s) , la fonction caractéristique régularisée au point (x, y, z) est calculée de la manière suivante :

$$\chi_{reg}(x, y, z) = \max\left(0, \frac{\exp(-(x-x_s)^2 - (y-y_s)^2 - (z-z_s)^2)}{2s^2} - G_R\right) \quad (4.17)$$

$$G_R = \frac{\exp(-x_s^2 - y_s^2 - z_s^2)}{2s^2} \quad \text{et} \quad s = R/4$$

Le paramètre s est ajusté de manière empirique. Plus sa valeur est faible, plus la transition entre zéro et un sera brutale.

Comme cela a été énoncé dans la section 4.1, la méthode SMW-GMRES n'est pas limitée à des fonctions caractéristiques constantes par morceaux et cette amélioration est compatible avec cette partie de l'algorithme.

Néanmoins, cela améliore assez peu les performances numériques. Elles sont parfois même moins bonnes sur certaines simulations avec un ralentissement de la convergence des résidus.

4.4 RAFFINEMENT DOUBLÉ DES VARIABLES TRANSPORTÉES

Il est possible, pour la résolution de l'équation de transport, d'utiliser un raffinement plus fin des variables. Dans ce cas, on dit que la vitesse est sous-résolue par rapport à la fraction massique. Ce procédé [Cottet *et al.*, 2009] a plusieurs avantages lorsqu'il est utilisé dans l'algorithme qui a été présenté dans les sections précédentes. Dans cette présentation, on se restreindra au cas d'une sous résolution deux fois plus grossière mais la méthode s'étend sur plusieurs niveaux de sous-résolution.

- Le premier de ces avantages est la diminution des erreurs commises par les méthodes de remaillage, lors des interpolations entre grilles et particules. La conséquence directe est une meilleure conservation de la masse comme cela a été présenté sur la figure 3.8 page 63.
- De plus, cela accroît également la précision des calculs de gradients de fraction massique (et donc de viscosité). Ces termes sont utilisés dans le calcul du second membre de l'équation de Stokes qui devient plus précis.
- Enfin le troisième avantage d'un tel procédé est qu'il donne une meilleure lisibilité des tracés graphiques, notamment pour les isosurfaces. Une comparaison est présentée sur la figure 4.7 où on voit qu'une grille trop grossière donne une texture granulaire à la surface. On parle dans ce cas de phénomènes d'aliasing.

L'implémentation de cette méthode est relativement simple puisqu'elle nécessite simplement des interpolations entre grilles fines et grossières (pour calculer le champ de transport sur la grille fine et les gradients de viscosité sur la grille grossière). Ces interpolations sont également utilisées pour la méthode de pré-conditionnement ce qui rend l'utilisation de cette méthode directe, une fois les améliorations précédentes implémentées.

D'un point de vue du temps de calcul, l'utilisation de cette méthode dégrade peu les résultats. Comme le coût des méthodes particulières est linéaire et le coût de la résolution de Stokes avec le point fixe est en $\mathcal{O}(N \log N)$, la majorité du temps de calcul est passée dans le calcul du champ de vitesse. Ce résultat est illustré par la figure 4.8 qui reprend le cas test de la sphère dans un champ de viscosité stratifié, dont les performances de calcul ont déjà été présentées à la section 3.5. On y retrouve bien ce résultat : la courbe rouge est quasiment une translatée

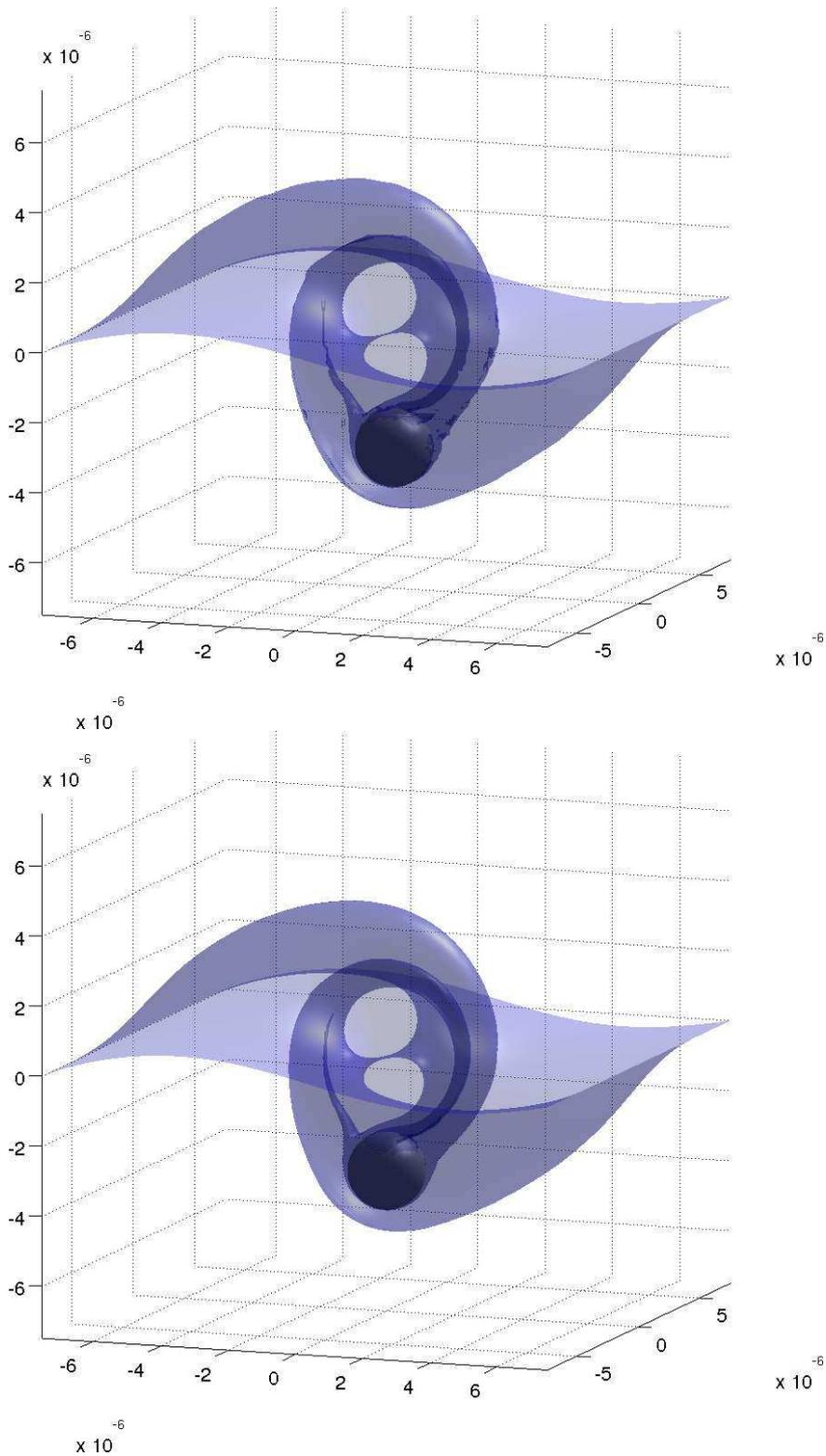


FIGURE 4.7 - Comparaison de l'affichage d'une isosurface de viscosité dans le cas test de la sphère qui tourne à vitesse constante dans un fluide initialement stratifié, voir section 3.4. En bas un raffinement doublé de la fraction massique (et de la viscosité) est utilisé, ce qui rend l'affichage de l'isosurface beaucoup plus lisse.

horizontale de la courbe noire ; il y a quand même un léger décalage vertical correspondant aux calculs supplémentaires de transport et d'interpolation.

Dans le cas d'un raffinement des variables transportées bien supérieur à celui de la vitesse, des pertes de performances seront constatées. Une manière de pallier ce problème est de calculer le transport et les interpolation sur architectures GPU [Rossinelli *et al.*, 2010], éventuellement combiné avec un splitting directionnel qui a été mentionné dans le chapitre 2.

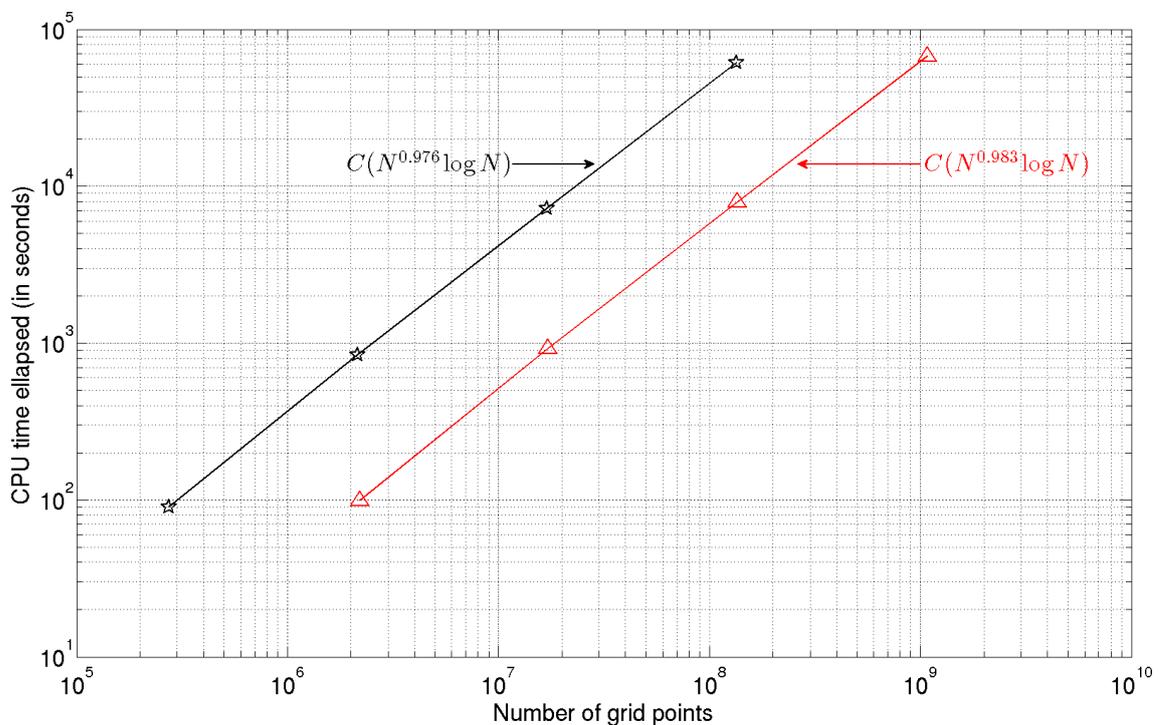


FIGURE 4.8 - Comparaison des temps de calcul en utilisant (rouge) ou non (noire) un raffinement doublé pour les variables transportées. L'axe des abscisses indique le nombre de points sur la grille fine.

RÉSULTATS D'EXISTENCE ET D'UNICITÉ POUR LE PROBLÈME PÉNALISÉ

Sommaire

5.1	NOTATIONS ET DÉFINITIONS PRÉLIMINAIRES	90
5.2	ÉNONCÉ DU RÉSULTAT PRINCIPAL	92
5.3	ARGUMENTS TECHNIQUES	94
5.4	ANALYSE DU PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ	95
5.4.1	<i>Existence et unicité</i>	95
5.4.2	<i>Prolongement "harmonique" de \bar{u}</i>	97
5.4.3	<i>Estimations sur (u, p)</i>	98
5.4.4	<i>Régularité de la solution</i>	99
5.5	PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ DANS UN DOMAINE DÉPENDANT DU TEMPS	99
5.6	RÉSULTATS POUR LE PROBLÈME DE CONVECTION-DIFFUSION	101
5.7	ÉTUDE DU COUPLAGE ENTRE LE PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ ET LE PROBLÈME DE CONVECTION-DIFFUSION	102
5.8	PREUVE DU THÉORÈME 2	106
5.9	PREUVE DU THÉORÈME 3	107
5.9.1	<i>Étude de α</i>	107
5.9.2	<i>Étude de μ</i>	107
5.9.3	<i>Étude de (u, p)</i>	108
5.9.4	<i>Unicité</i>	108

Ce chapitre est consacré à l'étude des propriétés de la solution du problème de Stokes pénalisé, couplé à l'équation de convection-diffusion de la fraction massique. Ce travail est le fruit d'une collaboration avec David Sanchez.

Le problème pénalisé est rappelé ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{ll} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{\mathbf{1}_{\mathcal{B}(t)}}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } \Omega, \\ \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{dans } \Omega, \\ \mu = \Phi(\alpha) & \text{dans } \Omega, \end{array} \right. \quad (5.1)$$

Dans ce chapitre on note $\chi(t) = \mathbf{1}_{\mathcal{B}(t)}$ pour faciliter la lecture car d'autres fonctions indicatrices interviendront.

En particulier, on montre l'existence et l'unicité de la solution de (5.1) et sa convergence vers la solution du problème physique (5.2) lorsque ε tend vers zéro :

$$\left\{ \begin{array}{ll} u = \bar{u} & \text{dans le solide,} \\ -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p & \text{dans le fluide,} \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans fluide,} \\ \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{dans le domaine de calcul,} \\ \mu = \Phi(\alpha) & \text{dans le domaine de calcul} \end{array} \right. \quad (5.2)$$

En vue de faire des simulations numériques dans le contexte de la clairance mucociliaire, trois types de conditions aux limites sont étudiées pour le champ de vitesse u :

- Des conditions aux limites de type Dirichlet homogènes sur une partition du bord qui sera appelée Γ_D ,
- des conditions aux limites périodiques compatibles,
- une combinaison de conditions aux limites de type Neumann sur les composantes tangentiels de la vitesse et une condition aux limites de Dirichlet homogène sur la composante normale. Cette combinaison de conditions aux limites est une condition de surface libre plane, cela s'écrit (dans le cas de la face supérieure) : $u \cdot \nu = u_3 = 0$ et $\partial_3 u_1 = \partial_3 u_2 = 0$. La justification de cette condition aux limites dans le cas d'applications à la clairance mucociliaire est détaillée dans la section 6.2.4 page 120.

Les démonstrations présentées dans ce chapitre ne dépendent pas de ce troisième type de condition aux limites. La seule contrainte pour que les résultats suivants restent valables est que la mesure surfacique de Γ_D soit non nulle.

5.1 NOTATIONS ET DÉFINITIONS PRÉLIMINAIRES

Soit $T > 0$. On note $\Gamma = [0, L_1] \times [0, L_2]$ et $\Omega = \Gamma \times [0, L]$ le domaine de calcul. On note également $\Gamma_0 = \Gamma \times \{0\}$ et $\Gamma_L = \Gamma \times \{L\}$ les bords haut et bas de la boîte de calcul Ω et (Γ_N, Γ_D) une partition de $\Gamma_0 \cup \Gamma_L$ en ensembles réguliers tels que la mesure surfacique de Γ_D est strictement positive.

Le domaine \mathcal{B} dépend du temps $t \in [0, T]$, puisque l'on s'intéresse à des obstacles mobiles, et il faut tenir compte de cette dépendance dans l'analyse des solutions. On est alors ramené à l'étudier dans les espaces suivants :

$$\begin{aligned} O &= [0, T] \times \Omega \text{ le domaine complet dans l'espace-temps,} \\ O_p &= \{(t, x) \in [0, T] \times \Omega, \forall t \in [0, T], x \in \mathcal{B}(t)\} \text{ le domaine pénalisé,} \\ O_p^c &= \{(t, x) \in [0, T] \times \Omega, \forall t \in [0, T], x \in \Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(t)}\} = O \setminus \overline{O_p}. \end{aligned}$$

Le problème (5.2) peut alors être réécrit dans ces espaces :

$$\begin{cases} u = \bar{u} \text{ dans } O_p, \\ -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p \text{ dans } O_p^c, \\ \operatorname{div} u = 0 \text{ dans } O, \\ \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 \text{ dans } O, \\ \mu = \Phi(\alpha) \text{ dans } O \end{cases} \quad (5.3)$$

avec les conditions aux limites et initiales suivantes :

$$\begin{cases} u = 0 \text{ sur } [0, T] \times \Gamma_D \\ u = \bar{u} \text{ sur } \partial O_p, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 \text{ sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ u \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial \Gamma \times [0, L], \\ \frac{\partial \alpha}{\partial \nu} = 0 \text{ sur } [0, T] \times (\Gamma_0 \cup \Gamma_L), \\ \alpha \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial \Gamma \times [0, L], \\ \alpha(0, \cdot) = \alpha_0 \text{ dans } \Omega, \end{cases} \quad (5.4)$$

avec $\eta > 0$ le coefficient de diffusion massique, $\Phi \in W^{3,\infty}(\mathbb{R})$ et on suppose qu'il existe $0 < \mu_0$ un réel tel que pour tous $\alpha \in \mathbb{R}$ $\mu_0 \leq \phi(\alpha)$.

De la même manière le problème pénalisé peut être réécrit dans ces espaces :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{\mathbf{1}_{\mathcal{B}(t)}}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p & \text{dans } O, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } O, \\ \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 & \text{dans } O, \\ \mu = \Phi(\alpha) & \text{dans } O, \end{cases} \quad (5.5)$$

avec les conditions initiales et les conditions aux limites correspondantes qui viennent directement du système d'équations (5.4).

$$\left\{ \begin{array}{ll} u = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_D, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ u \text{ est périodique} & \text{sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L], \\ \frac{\partial \alpha}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } [0, T] \times (\Gamma_0 \cup \Gamma_L), \\ \alpha \text{ est périodique} & \text{sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L], \\ \alpha(0, \cdot) = \alpha_0 & \text{dans } \Omega. \end{array} \right. \quad (5.6)$$

Enfin on introduit les espaces fonctionnels suivants qui vont nous servir dans la suite des calculs.

Définition 1.

$$\begin{aligned} L_0^2(\Omega) &= \left\{ v \in L^2(\Omega), \int_{\Omega} v \, dx = 0 \right\} \\ V(\Omega) &= \left\{ v \in H^1(\Omega), \operatorname{div} v = 0 \text{ sur } \Omega, u = 0 \text{ sur } \Gamma_D, \right. \\ &\quad \left. u \cdot \nu = 0 \text{ sur } \Gamma_N, u \text{ admet des conditions périodiques sur } \partial\Gamma \times [0, L] \right\} \end{aligned}$$

$V(\Omega)$ est muni de la norme- H^1 classique.

D'après l'inégalité de Poincaré généralisée (voir par exemple [Boyer et Fabrie, 2005]), il existe deux constantes qui dépendent uniquement du domaine Ω telles que

$$c_1 \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} \leq \|v\|_{H^1(\Omega)} \leq c_2 \|\nabla v\|_{L^2(\Omega)}.$$

5.2 ÉNONCÉ DU RÉSULTAT PRINCIPAL

Définition 2. (u, p, α) est une solution faible du problème pénalisé (5.5)-(5.6) si elle satisfait les propriétés suivantes :

- $u \in L^q(0, T; V(\Omega)), p \in L^q(0, T; L_0^2(\Omega))$ avec $2 \leq q \leq +\infty, \alpha \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega) \cap H^1(0, T; H^1(\Omega)))$
- pour tout $v \in \mathcal{C}_c(0, T; V(\Omega)),$

$$\iint_{(0, T) \times \Omega} 2\mu D(u) : D(v) \, dx \, dt + \frac{1}{\varepsilon} \iint_{O_p} (u - \bar{u}) \cdot v \, dx \, dt = \iint_{(0, T) \times \Omega} f \cdot v \, dx \, dt$$

- α est solution de (5.13).
- $\mu = \Phi(\alpha)$

Théorème 2. Soit $0 < \mu_0$ et $\varepsilon > 0$ un paramètre fixé. Soit $\alpha_0 \in H^2(\Omega)$ et $\Phi \in W^{2, \infty}(\mathbb{R})$ tel que $\forall x \in \mathbb{R}, \mu_0 \leq \Phi(x)$. Pour tout $t > 0$, soit $\mathcal{B}(t)$ un ouvert de Ω tel que pour tout $T > 0, O_p = \{(t, x), t \in (0, T) \text{ et } x \in B_t\}$ est un ouvert de $(0, T) \times \Omega$ de classe \mathcal{C}^3 .

Pour tout $T > 0$, soit $f \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ et $\bar{u} \in H^3(O_p)$. Il existe une unique solution faible (u, p, α) du problème pénalisé (5.5) telle que

$$\begin{cases} \alpha \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega)) \cap H^1(0, T; H^1(\Omega)), \\ u \in L^q(0, T; V(\Omega)) \text{ pour tout } 2 \leq q \leq +\infty, \\ p \in L^q(0, T; L_0^2(\Omega)) \text{ pour tout } 2 \leq q \leq +\infty. \end{cases}$$

Définition 3. (u, p, α) est une solution faible du problème (5.3) avec les conditions aux limites (5.4) si elle vérifie les conditions suivantes :

- Pour tout $2 \leq q \leq +\infty$, $u \in L^q(0, T; V(\Omega))$, $p \in L^q(0, T; L_0^2(\Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(\cdot)}))$ et $\alpha \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega)) \cap H^1(0, T; H^1(\Omega))$,
- $u = \bar{u}$ dans O_p
- $(u, p) \in L^q(0, T; H^1(\Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(\cdot)})) \times L^q(0, T; L_0^2(\Omega \setminus \overline{\mathcal{B}(\cdot)}))$, avec $2 \leq q \leq +\infty$ est l'unique solution du problème :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p \text{ dans } O_p^c, \\ \operatorname{div} u = 0 \text{ dans } O_p^c, \\ u|_{[0, T] \times \Gamma_0} = 0, \\ u|_{\partial O_p} = \bar{u}|_{\partial O_p}, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 \text{ sur } [0, T] \times \Gamma_L, \\ u \text{ admet des conditions périodiques sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L], \end{cases}$$

- α est solution du problème suivant

$$\begin{cases} \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 \text{ dans } [0, T] \times \Omega, \\ \frac{\partial \alpha}{\partial \nu} = 0 \text{ sur } [0, T] \times (\Gamma_0 \cup \Gamma_L), \\ \alpha \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L], \\ \alpha(0, \cdot) = \alpha_0 \text{ dans } \Omega, \end{cases}$$

- et $\mu = \Phi(\alpha)$.

Théorème 3. Soit $0 < \mu_0$. On suppose $\alpha_0 \in H^2(\Omega)$ et $\phi \in W^{3, \infty}(\mathbb{R})$ tel que $\forall x \in \mathbb{R}$, $\mu_0 \leq \phi(x)$.

Pour tout $T > 0$, on pose $O_p = \{(t, x), t \in [0, T] \text{ et } x \in \mathcal{B}(t)\}$ un ouvert de $[0, T] \times \Omega$ de classe \mathcal{C}^3 . Soit $f \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ et $\bar{u} \in H^3(O_p)$. Il existe une unique solution faible (u, p, α) du problème (5.3)-(5.4). De plus la solution faible $(u^\varepsilon, p^\varepsilon, \alpha^\varepsilon)$ de (5.5)-(5.6) converge faiblement vers la solution (u, p, α) lorsque ε tend vers zéro.

Dans un premier temps, plusieurs égalités sur les espaces de Sobolev et des propriétés d'injections entre ces espaces sont présentées. Ensuite, on s'intéresse aux solution du problème de Stokes pénalisé lorsque le temps est fixé, l'existence et l'unicité de ces solution est démontrée. Le résultat est ensuite généralisé lorsque le domaine pénalisé dépend du temps. Plusieurs résultats classiques pour le problème de convection diffusion sont ensuite énoncés avant de s'intéresser au problème couplé. On montre alors avec un théorème de point-fixe le théorème 2. Une suite de solutions indexées par le paramètre de pénalisation est ensuite introduite et sa convergence vers la solution de (5.3)-(5.4) permet de montrer le théorème 3.

5.3 ARGUMENTS TECHNIQUES

Lemme 1. Soit $m \in \mathbb{N}^*$. Il existe une constante C dépendant seulement de Ω et m telle que pour tout $v \in H^m(\Omega)$ on a

$$\|v\|_{H^m(\Omega)} \leq C \left(\|v\|_{L^2(\Omega)} + \|\operatorname{div} v\|_{H^{m-1}(\Omega)} + \|\operatorname{curl} v\|_{H^{m-1}(\Omega)} + \|v \cdot \nu\|_{H^{m-1/2}(\partial\Omega)} \right)$$

Avec ν la normale unitaire sortante sur le bord $\partial\Omega$.

Il existe une constante C dépendant seulement de Ω et m telle que pour tout $v \in H^m(\Omega)$ admettant des conditions aux limites périodiques sur $\partial\Gamma \times [0, L]$ on a

$$\|v\|_{H^m(\Omega)} \leq C \left(\|v\|_{L^2(\Omega)} + \|\operatorname{div} v\|_{H^{m-1}(\Omega)} + \|\operatorname{curl} v\|_{H^{m-1}(\Omega)} + \|v \cdot \nu\|_{H^{m-1/2}(\partial\Gamma \times [0, L])} \right)$$

Démonstration. La preuve peut être consultée dans [Foias et Temam, 1978]. La version périodique est déduite de [Duvaut et Lions, 1972] \square

Lemme 2. Soit $v \in H^2(\Omega)$ tel que v admet des conditions aux limites périodiques sur $\partial\Gamma \times [0, L]$ et $\frac{\partial v}{\partial \nu} = 0$ sur $\Gamma_0 \cup \Gamma_L$. Alors il existe une constante C dépendant seulement de Ω telle que,

$$\|v\|_{H^2(\Omega)} \leq C \left(\|v\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta v\|_{L^2(\Omega)} \right)$$

De plus, si $v \in H^3(\Omega)$, il existe une autre constante C dépendant également de Ω telle que

$$\|\nabla v\|_{H^2(\Omega)} \leq C \left(\|\nabla v\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta v\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla \Delta v\|_{L^2(\Omega)} \right)$$

Démonstration. La première inégalité découle de la régularité de l'opérateur $A = I - \Delta$ associé au domaine :

$$D(A) = \left\{ u \in H^2(\Omega), \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \cup \Gamma_L, u \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L] \right\}.$$

(Voir [Dautray et Lions, 2000] par exemple). La seconde inégalité est déduite du Lemme 1. \square

Proposition 3. Soit Ω un ouvert régulier de \mathbb{R}^3 . Soit $v \in H^1(\Omega)$. Il existe une constante C dépendant seulement de Ω telle que

$$\|v\|_{L^3(\Omega)} \leq C \|v\|_{L^2(\Omega)}^{1/2} \|v\|_{H^1(\Omega)}^{1/2}.$$

Soit $v \in H^2(\Omega)$. Il existe une constante C dépendant elle aussi de Ω telle que

$$\|v\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \|v\|_{H^1(\Omega)}^{1/4} \|v\|_{H^2(\Omega)}^{3/4}$$

Démonstration. Ces deux inégalités sont déduites des injections de $H^{1/2}(\Omega)$ dans $L^3(\Omega)$ d'une part, et de $H^{7/4}(\Omega)$ dans $L^\infty(\Omega)$ d'autre part (voir par exemple [Adams et Fournier, 2003]); ainsi que des estimations des normes $H^{1/2}(\Omega)$ et $H^{7/4}(\Omega)$ d'après la théorie d'espace d'interpolation [Lions et Magenes, 1972]. \square

Théorème 4. Soit V et W deux espaces de Hilbert, alors :

$$E_{2,2} = \left\{ v \in L^2(0, T; V), \frac{dv}{dt} \in L^2(0, T; W) \right\}$$

s'injecte continûment dans $C^0([0, T]; [V, W]_{\frac{1}{2}})$, où $[V, W]_{\frac{1}{2}}$ est l'espace interpolé d'ordre $\frac{1}{2}$ de V et W .

Démonstration. Voir [Lions et Magenes, 1972; Boyer et Fabrie, 2005]. \square

5.4 ANALYSE DU PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ

On s'intéresse dans cette section au problème de Stokes pénalisé, avec le temps t et le paramètre de pénalisation ε fixés, qui est rappelé ci dessous :

$$\begin{cases} -2\operatorname{div}(\mu D(u)) + \frac{1_B}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } \Omega, \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma_D, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } \Gamma_N, \\ u \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \end{cases} \quad (5.7)$$

avec $\varepsilon > 0$, $\mu \in \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{R}^+)$, B est un ouvert de Ω , $\bar{u} \in \mathcal{F}(B; \mathbb{R}^3)$ et satisfait $\operatorname{div} \bar{u} = 0$, $f \in \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{R}^3)$ sont des données du problème. $D(u) = \frac{1}{2}(\nabla u + (\nabla u)^T)$ avec $u \in \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{R}^3)$ et $p \in \mathcal{F}(\Omega; \mathbb{R})$ les inconnues, enfin (Γ_N, Γ_D) est une partition de $\Gamma_0 \cup \Gamma_L$ en ensembles réguliers tels que la mesure surfacique de Γ_D est positive.

Remarque 4. On suppose que la donnée \bar{u} satisfait les mêmes conditions aux limites que u sur les bords si $\mathcal{B}(t)$ est en contact avec $\partial\Omega$.

5.4.1 Existence et unicité

Définition 4. On associe au problème de Stokes (5.7) la formulation variationnelle suivante pour tout $v \in V(\Omega)$,

$$\int_{\Omega} 2\mu D(u) : D(v) dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_B (u - \bar{u}) \cdot v dx = \int_{\Omega} f v dx. \quad (5.8)$$

Théorème 5. Soit $\varepsilon > 0$, $\mu_0 > 0$ et $\mu \in L^\infty(\Omega)$ tels que $\mu_0 \leq \mu(x)$ presque partout dans Ω . Soit B un ouvert de Ω et $\bar{u} \in L^2(B)$ et $f \in L^2(\Omega)$. Il existe un unique couple $(u, p) \in V(\Omega) \times L_0^2(\Omega)$ solution de (5.7).

Démonstration. Cette preuve est inspirée de différents résultats de [Boyer et Fabrie, 2005].

Grâce aux inégalités de Korn et Poincaré on a

$$\int_{\Omega} 2\mu|D(u)|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_B |u|^2 dx \geq 2\mu_0 \|D(u)\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq 2\mu_0 \|u\|_{H^1(\Omega)}^2$$

Ce qui garantit la coercivité de la formulation variationnelle. On applique ensuite le théorème de Lax-Milgram qui nous donne l'existence de $u \in V(\Omega)$, vérifiant la formulation variationnelle (5.8).

Ceci implique que $g = -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{1}{\varepsilon}(u - \bar{u}) - f$ appartient à $H^{-1}(\Omega)$. En testant cette fonction contre $\phi \in H^1(\Omega)$, vérifiant $\operatorname{div}\phi = 0$, on obtient :

$$\langle g, \phi \rangle_{H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)} = \int_{\Omega} 2\mu D(u) : D(\phi) dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_B (u - \bar{u})\phi dx - \int_{\Omega} f\phi dx = 0.$$

Le théorème de De Rahm implique l'existence d'une fonction $p \in L_0^2(\Omega)$ telle que $g = -\nabla p$. Il reste alors à vérifier que la dernière condition aux limites est satisfaite. La fonction $g + \nabla p$ s'écrit :

$$g + \nabla p = -\operatorname{div}(2\mu D(u) - pI) + \frac{1}{\varepsilon}(u - \bar{u}) - f = 0.$$

On en déduit que $2\mu D(u) - pI$ appartient à $H(\operatorname{div}) = \{v \in L^2(\Omega), \operatorname{div}v \in L^2(\Omega)\}$ et admet une trace normale dans $H^{-1/2}(\partial\Omega)$. Ainsi, pour tout $\phi \in V(\Omega)$,

$$\begin{aligned} \langle g + \nabla p, \phi \rangle_{H^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)} &= \int_{\Omega} (2\mu D(u) : D(\phi) - p \operatorname{div}\phi) dx \\ - &\int_{\partial\Omega} (2\mu D(u) \cdot \nu \phi - p \nu \cdot \phi) d\sigma + \frac{1}{\varepsilon} \int_B (u - \bar{u})\phi dx \\ - &\int_{\Omega} f\phi dx \\ = &0 \end{aligned}$$

Puisque $\operatorname{div}\phi = 0$ et en utilisant la fonction test $v = \phi$ dans la formulation variationnelle (5.8) et d'après les conditions aux limites vérifiées par u et ϕ , on a

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_N} (2\mu D(u) - pI) \nu \cdot \phi d\sigma &= \langle (2\mu D(u) - pI) \cdot \nu, \phi \rangle_{H^{-1/2}(\Gamma_N), H^{1/2}(\Gamma_N)} \\ &= \langle \mathcal{P}(2\mu D(u) \cdot \nu), \phi \rangle_{H^{-1/2}(\Gamma_N), H^{1/2}(\Gamma_N)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

pour tout $\phi \in V(\Omega)$ avec \mathcal{P} la projection orthogonale sur $\nu^\perp = e_3^\perp$, c'est-à-dire la face supérieure du domaine de calcul.

Soit $\psi \in (H^{1/2}(\Gamma_N))^2$. Il existe un relèvement $\phi \in V(\Omega)$ tel que $\phi = (\psi, 0)$ sur Γ_N (voir [Boyer et Fabrie, 2005] par exemple). Alors pour tout $\psi \in (H^{1/2}(\Gamma_N))^2$, on obtient, grâce à ce relèvement dans $V(\Omega)$, le résultat suivant

$$\langle 2\mu D(u) \cdot \nu, \phi \rangle_{(H^{-1/2}(\Gamma_N))^3, (H^{1/2}(\Gamma_N))^3} = \langle \mathcal{P}(2\mu D(u) \cdot \nu), \psi \rangle_{(H^{-1/2}(\Gamma_N))^2, (H^{1/2}(\Gamma_N))^2} = 0,$$

et donc on obtient

$$\mathcal{P}(2\mu D(u) \cdot \nu) = 0 \text{ dans } (H^{-1/2}(\Gamma_N))^2.$$

ceci se réécrit

$$\mu(\partial_1 u_3 + \partial_3 u_1) = \mu(\partial_2 u_3 + \partial_3 u_2) = 0 \text{ dans } H^{-1/2}(\Gamma_N).$$

et comme on a supposé $\mu \geq \mu_0 > 0$, $u \cdot \nu \in H^{1/2}(\Gamma_N)$ et $u \cdot \nu = u_3 = 0$ sur Γ_N , on a donc $\partial_1 u_3 = \partial_2 u_3 = 0$ et $\partial_3 u_1 = \partial_3 u_2 = 0$ sur Γ_N .

On conclut alors que $(u, p) \in V(\Omega) \times L_0^2(\Omega)$ est la solution du problème de Stokes (5.7). \square

5.4.2 Prolongement "harmonique" de \bar{u}

Pour obtenir une estimation précise de (u, p) on a besoin d'un prolongement \tilde{u} de \bar{u} dans le domaine complet Ω . Pour le construire on s'intéresse au problème :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(\tilde{u})) = -\nabla \tilde{p} & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B}, \\ \operatorname{div} \tilde{u} = 0 & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B}, \\ \tilde{u} = 0 & \text{sur } \Gamma_D, \\ \tilde{u} \cdot \nu = \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial \nu} = \frac{\partial \tilde{u}_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } \Gamma_N, \\ \tilde{u} \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \\ \tilde{u} = \bar{u} & \text{sur } \partial B. \end{cases} \quad (5.9)$$

Théorème 6. Soit B un ouvert de Ω de classe \mathcal{C}^2 . Soit $\mu_0 > 0$ et $\mu \in L^\infty(\Omega \setminus \bar{B})$ tel que $\mu_0 \leq \mu(x)$ presque partout dans $\Omega \setminus \bar{B}$. Soit $\bar{u}|_{\partial B} \in H^{3/2}(\partial B)$. Il existe une unique solution faible (\tilde{u}, \tilde{p}) de (5.9) avec $\tilde{u} \in H^1(\Omega \setminus \bar{B})$ et $\tilde{p} \in L_0^2(\Omega \setminus \bar{B})$.

De plus, il existe une constante C dépendant seulement de $\Omega \setminus \bar{B}$ telle que

$$\|\tilde{u}\|_{H^1(\Omega \setminus \bar{B})} + \|\tilde{p}\|_{L_0^2(\Omega \setminus \bar{B})} \leq C \|\bar{u}\|_{H^{3/2}(\partial B)}.$$

Démonstration. Puisque $\bar{u}|_{\partial B} \in H^{3/2}(\partial B)$, il existe un relèvement $\phi \in H^2(\Omega \setminus \bar{B})$ tel que $\phi|_{\partial B} = \bar{u}$ sur ∂B , $\phi|_{\partial\Gamma_D} = 0$, $\phi \cdot \nu = \phi_3 = \frac{\partial \phi_1}{\partial \nu} = \frac{\partial \phi_2}{\partial \nu} = 0$ sur Γ_N et ϕ admet des conditions aux limites périodiques sur $\partial\Gamma \times [0, L]$. On pose $\tilde{u} = w + \phi$ avec w , la solution du problème de Stokes suivant :

$$\begin{cases} -2\operatorname{div}(\mu D(w)) = -\nabla \tilde{p} + 2\operatorname{div}(\mu D(\phi)) & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B}, \\ \operatorname{div} w = -\operatorname{div} \phi & \text{dans } \Omega \setminus \bar{B}, \\ w = 0 & \text{sur } \Gamma_0, \\ \tilde{w} \cdot \nu = \frac{\partial w_1}{\partial \nu} = \frac{\partial w_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } \Gamma_L, \\ w \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \\ w = 0 & \text{sur } \partial B. \end{cases}$$

L'existence et les estimations pour ce problème sont des résultats classiques (voir [Boyer et Fabrie, 2005] et la preuve du théorème 5). \square

Proposition 4. *Soit B un ouvert de Ω de classe C^2 . Soit $\bar{u} \in H^2(B)$ tel que \bar{u} satisfait les mêmes conditions aux limites que u sur $\partial\Gamma \cap \partial B$ et $\operatorname{div} \bar{u} = 0$ dans B . Soit $P(\bar{u}) = \mathbf{1}_B \bar{u} + \mathbf{1}_{\Omega \setminus \bar{B}} \tilde{u}$. Alors $P(\bar{u}) \in V(\Omega)$ et il existe une constante C dépendant de B et Ω telle que*

$$\|P(\bar{u})\|_{H^1(\Omega)} \leq C \|\bar{u}\|_{H^2(B)}.$$

5.4.3 Estimations sur (u, p)

Sous les hypothèses des théorèmes 5 et 6 on note (u, p) l'unique solution faible du problème (5.7) donnée par le théorème 5. En utilisant la formulation variationnelle (5.8) avec la fonction test $v = u - P(\bar{u})$, on obtient alors :

$$2\mu_0 \|D(u)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{\varepsilon} \|u - \bar{u}\|_{L^2(B)}^2 \leq \|f\|_{L^2(\Omega)} \left(\|u\|_{L^2(\Omega)} + \|P(\bar{u})\|_{L^2(\Omega)} \right) + 2\|\mu\|_{L^\infty(\Omega)} \|D(P(\bar{u}))\|_{L^2(\Omega)} \|D(u)\|_{L^2(\Omega)},$$

d'où

$$\mu_0 \|D(u)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{\varepsilon} \|u - \bar{u}\|_{L^2(B)}^2 \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)} \|\bar{u}\|_{H^2(B)} + C' \left(\|f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\mu\|_{L^\infty(\Omega)}^2 \|\bar{u}\|_{H^2(B)}^2 \right). \quad (5.10)$$

En utilisant (5.7), on déduit

$$\begin{aligned} \|\nabla p\|_{H^{-1}(\Omega)} &\leq \|f\|_{H^{-1}(\Omega)} + \|\operatorname{div}(2\mu D(u))\|_{H^{-1}(\Omega)} + \frac{1}{\varepsilon} \|\mathbf{1}_B(u - \bar{u})\|_{H^{-1}(\Omega)} \\ &\leq \|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\mu\|_{L^\infty(\Omega)} \|D(u)\|_{L^2(\Omega)} + \frac{1}{\varepsilon} \|u - \bar{u}\|_{L^2(B)}. \end{aligned}$$

Puisque la pression p peut être choisie à moyenne nulle, le lemme de Poincaré donne

$$\|p\|_{L_0^2(\Omega)} \leq C \left(\|f\|_{L^2(\Omega)} + \|\mu\|_{L^\infty(\Omega)} \|D(u)\|_{L^2(\Omega)} + \frac{1}{\varepsilon} \|u - \bar{u}\|_{L^2(B)} \right).$$

5.4.4 Régularité de la solution

Théorème 7. *Sous les hypothèses du théorème 5, complétées par $\mu \in W^{1,\infty}(\Omega)$, l'unique solution (u, p) de (5.7) appartient à $H^2(\Omega) \times H^1(\Omega)$ et il existe une constante C dépendant du domaine Ω telle que*

$$\|u\|_{H^2(\Omega)} + \left\| \frac{p}{\mu} \right\|_{H^1(\Omega)} \leq C \|g\|_{L^2(\Omega)},$$

$$\text{avec } g = \frac{1}{\mu} \left(2D(u)\nabla\mu + f - \frac{1_B}{\varepsilon}(u - \bar{u}) + p \frac{\nabla\mu}{\mu} \right).$$

Démonstration. La solution u du problème (5.7) est aussi solution du problème suivant

$$\begin{cases} -2\operatorname{div}(D(u)) = g - \nabla p' & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0, & \text{dans } \Omega, \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma_0, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } \Gamma_L, \\ u \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \end{cases}$$

$$\text{avec } g = \frac{1}{\mu} \left(2D(u)\nabla\mu + f - \frac{1_B}{\varepsilon}(u - \bar{u}) + p \frac{\nabla\mu}{\mu} \right) \in L^2(\Omega) \text{ et } p' = \frac{p}{\mu}.$$

En suivant le même schéma de démonstration que pour les résultats de régularité pour le problème de Stokes (voir [Boyer et Fabrie, 2005]), on obtient $(u, p') \in H^2(\Omega) \times H^1(\Omega)$ et finalement $(u, p) \in H^2(\Omega) \times H^1(\Omega)$ ainsi que les inégalités annoncées. \square

5.5 PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ DANS UN DOMAINE DÉPENDANT DU TEMPS

Dans cette section, les résultats précédents sont étendus au cas d'un domaine de pénalisation dépendant du temps. La différence réside dans le choix des espaces de Sobolev utilisés. Ici on travaille en espace-temps dans les espaces définis au début de la section 5.1.

Soit $T > 0$. Le domaine pénalisé B dépend du temps $t \in [0, T]$ et cette dépendance doit être mise en évidence, en particulier pour les constantes qui apparaissent dans les estimations d'énergie.

Théorème 8 (Relèvement "harmonique" dépendant du temps). *Soit O_p un ouvert de $(0, T) \times \Omega$ de classe \mathcal{C}^3 . Soit $\mu_0 > 0$ une donnée du problème et $\mu \in L^\infty(O_p^c)$ tel que $\mu_0 \leq \mu(t, x)$ presque partout dans O_p^c . Soit $\bar{u}|_{\partial O_p} \in H^{5/2}(\partial O_p)$. Il existe une unique solution faible (\tilde{u}, \tilde{p}) au problème*

$$\begin{cases} -2\operatorname{div}(\mu D(\tilde{u})) = -\nabla \tilde{p} & \text{dans } O_p^c, \\ \operatorname{div} \tilde{u} = 0 & \text{dans } O_p^c, \\ \tilde{u} = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_D, \\ \tilde{u} \cdot \nu = \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial \nu} = \frac{\partial \tilde{u}_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ \tilde{u} \text{ has periodic conditions} & \text{sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L], \\ \tilde{u} = \bar{u} & \text{sur } \partial O_p, \end{cases} \quad (5.11)$$

avec $\tilde{u} \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega \setminus \bar{B}(\cdot)))$ et $\tilde{p} \in L^\infty(0, T; L_0^2(\Omega \setminus \bar{B}(\cdot)))$. De plus il existe une constante C dépendant de O_p^c telle que pour tout $1 \leq q \leq +\infty$

$$\|\tilde{u}\|_{L^q(0, T; H^1(\Omega \setminus \bar{B}(\cdot)))} + \|\tilde{p}\|_{L^q(0, T; L_0^2(\Omega \setminus \bar{B}(\cdot)))} \leq C \|\bar{u}\|_{H^{5/2}(\partial O_p)}.$$

Démonstration. Comme $\bar{u}|_{\partial O_p} \in H^{5/2}(\partial O_p)$, il existe un relèvement $\phi \in H^3(O_p^c)$ tel que $\phi|_{\partial O_p} = \bar{u}$ sur ∂O_p , et pour tout $t \in [0, T]$, $\phi|_{\partial\Gamma_0} = 0$, $\phi \cdot \nu = \phi_3 = \frac{\partial \phi_1}{\partial \nu} = \frac{\partial \phi_2}{\partial \nu} = 0$ sur Γ_L et ϕ admet des conditions aux limites périodiques sur $\partial\Gamma \times [0, L]$ et il existe deux constantes C_1 et C_2 qui dépendent seulement de O_p^c telles que

$$\|\phi\|_{L^\infty(0, T; H^2(\Omega \setminus \bar{B}(\cdot)))} \leq C_1 \|\phi\|_{H^3(O_p^c)} \leq C_2 \|\bar{u}\|_{H^{5/2}(\partial O_p)},$$

et $\phi \in \mathcal{C}(0, T; H^2(\Omega \setminus \bar{B}(\cdot)))$. Comme dans la preuve du théorème 6, on obtient pour tout $t \in [0, T]$ l'existence d'une unique solution \tilde{u} au problème (5.11) qui vérifie

$$\|\tilde{u}(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega \setminus \bar{B}(t))} + \|\tilde{p}(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega \setminus \bar{B}(t))} \leq \|\bar{u}(t, \cdot)\|_{H^{3/2}(\partial B(t))} \leq \|\bar{u}\|_{H^{5/2}(\partial O_p)} \quad \forall t \in [0, T],$$

□

Proposition 5. Soit O_p un ouvert de $(0, T) \times \Omega$ de classe \mathcal{C}^3 . Soit $\bar{u} \in H^3(O_p)$ tel que \bar{u} satisfait les mêmes conditions aux limites que u sur $[0, T] \times (\partial\Gamma \cap \partial B)$ et $\operatorname{div} \bar{u} = 0$ dans O_p . Soit $P(\bar{u}) = \mathbf{1}_{O_p} \bar{u} + \mathbf{1}_{O_p^c} \tilde{u}$.

Alors $P(\bar{u}) \in L^\infty(0, T; V(\Omega))$ et il existe une constante C qui dépend de O_p et O_p^c telle que pour tout $1 \leq q \leq +\infty$,

$$\|P(\bar{u})\|_{L^q(0, T; H^1(\Omega))} \leq C \|\bar{u}\|_{H^3(O_p)}.$$

En utilisant le même schéma de démonstration que dans la section 5.4 le théorème suivant est obtenu :

Théorème 9. Soit $\mu_0 > 0$, $\varepsilon > 0$ et $T > 0$. Soit $\mu \in L^\infty([0, T] \times \Omega)$ tel que $\mu_0 \leq \mu(t, x)$ presque partout dans $[0, T] \times \Omega$. Soit $f \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ et $\bar{u} \in H^3(O_p)$. Il existe une unique solution faible (u, p) au problème

$$\left\{ \begin{array}{l} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) + \frac{\mathbf{1}_{B(t)}}{\varepsilon}(u - \bar{u}) = f - \nabla p \quad \text{dans } [0, T] \times \Omega, \\ \operatorname{div} u = 0 \quad \text{dans } [0, T] \times \Omega, \\ u = 0 \quad \text{sur } [0, T] \times \Gamma_D, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 \quad \text{sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ u \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L], \end{array} \right. \quad (5.12)$$

De plus cette solution satisfait

$$(u, p) \in L^q([0, T], V(\Omega)) \times L^q([0, T]; L_0^2(\Omega))$$

Pour tout $2 \leq q \leq +\infty$. Enfin, les inégalités suivantes sont satisfaites :

$$\begin{aligned} \mu_0 \|D(u)\|_{L^\infty([0, T]; L^2(\Omega))}^2 &+ \frac{1}{\varepsilon} \|u - \bar{u}\|_{L^\infty([0, T]; L^2(B(\cdot)))}^2 \\ &\leq C \|f\|_{L^\infty([0, T]; L^2(\Omega))} \|\bar{u}\|_{H^3(O_p)} \\ &\quad + C' \left(\|f\|_{L^\infty([0, T]; L^2(\Omega))}^2 + \|\mu\|_{L^\infty([0, T] \times \Omega)}^2 \|\bar{u}\|_{H^3(O_p)}^2 \right). \\ \mu_0 \|D(u)\|_{L^2([0, T]; L^2(\Omega))}^2 &+ \frac{1}{\varepsilon} \|u - \bar{u}\|_{L^2([0, T]; L^2(B(\cdot)))}^2 \\ &\leq C \|f\|_{L^2([0, T]; L^2(\Omega))} \|\bar{u}\|_{H^3(O_p)} \\ &\quad + C' \left(\|f\|_{L^2([0, T]; L^2(\Omega))}^2 + \|\mu\|_{L^2([0, T]; L^\infty(\Omega))}^2 \|\bar{u}\|_{H^3(O_p)}^2 \right). \end{aligned}$$

Pour finir, si $\mu \in L^2(0, T; W^{1, \infty}(\Omega))$,

$$(u, p) \in L^2([0, T], H^2(\Omega)) \times L^2([0, T]; H^1(\Omega)).$$

5.6 RÉSULTATS POUR LE PROBLÈME DE CONVECTION-DIFFUSION

Théorème 10. Soit $\eta > 0$ et $u \in L^q(0, T; V(\Omega))$ pour tout $2 \leq q \leq +\infty$ tels que $u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0$ sur Γ_N . Soit $\alpha_0 \in H^1(\Omega)$. Il existe une unique solution $\alpha \in L^\infty(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^2(\Omega)) \cap H^1(0, T; L^2(\Omega))$ au problème

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \alpha + u \cdot \nabla \alpha - \eta \Delta \alpha = 0 \quad \text{dans } \Omega, \\ \frac{\partial \alpha}{\partial \nu} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_0 \cup \Gamma_L, \\ \alpha \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \\ \alpha(0, \cdot) = \alpha_0 \quad \text{dans } \Omega. \end{array} \right. \quad (5.13)$$

De plus, si $\alpha_0 \in H^2(\Omega)$ alors $\alpha \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega)) \cap H^1(0, T; H^1(\Omega))$ et il existe des constantes C qui dépendent seulement de Ω telles que pour tout $t \in [0, T]$:

$$\begin{aligned} \|\alpha(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)} &\leq \|\alpha_0\|_{H^2(\Omega)} \exp\left(C \int_0^t (\|u(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^4 + \|u(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^8) ds\right), \\ \|\alpha\|_{L^2(0,t;H^3(\Omega))} &\leq \|\alpha_0\|_{H^2(\Omega)} \exp\left(C \int_0^t (\|u(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^4 + \|u(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^8) ds\right). \end{aligned}$$

Démonstration. Ces résultats classiques sont obtenus en utilisant une décomposition de Galerkin et des estimations d'énergie. \square

5.7 ÉTUDE DU COUPLAGE ENTRE LE PROBLÈME DE STOKES PÉNALISÉ ET LE PROBLÈME DE CONVECTION-DIFFUSION

Pour prouver l'existence d'une solution à ce problème couplé non linéaire, on introduit la suite (α^n, u^n, p^n) définie par :

- (i) $\alpha^0 = \alpha_0$,
- (ii) $\mu^n = \Phi(\alpha^n)$,
- (iii) (u^n, p^n) est la solution du problème :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu^n D(u^n)) + \frac{\mathbf{1}_{B(t)}}{\varepsilon}(u^n - \bar{u}) = f - \nabla p^n & \text{dans } \Omega, \\ \operatorname{div} u^n = 0 & \text{dans } \Omega, \\ u^n = 0 & \text{sur } \Gamma_D, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } \Gamma_N, \\ u^n \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \end{cases}$$

- (iv) α^{n+1} est la solution du problème :

$$\begin{cases} \partial_t \alpha^{n+1} + u^n \cdot \nabla \alpha^{n+1} - \eta \Delta \alpha^{n+1} = 0 & \text{dans } \Omega, \\ \frac{\partial \alpha^{n+1}}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } \Gamma_0 \cup \Gamma_L, \\ \alpha^{n+1} \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \\ \alpha^{n+1}(0, \cdot) = \alpha_0 & \text{dans } \Omega, \end{cases}$$

On pose $\alpha^{n+1} = G(\alpha^n)$

La suite de la démonstration consiste à utiliser un argument de point fixe pour montrer que la suite (α^n, u^n, p^n) converge. Pour cela il faut montrer que G est une contraction dans un espace bien choisit.

Soit $E = L^\infty(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^2(\Omega))$ et $F = L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega))$. L'opérateur G envoie E dans E et F dans F grâce aux théorèmes 9 et 10. Soit $(\alpha, \alpha') \in F^2$ deux champs qui admettent des conditions aux limites périodiques sur $\partial\Gamma \times [0, L]$ et des conditions de Neumann homogènes sur $\Gamma_0 \cup \Gamma_L$.

Soit $\mu = \Phi(\alpha)$ et $\mu' = \Phi(\alpha')$. $(\mu, \mu') \in (L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega)))^2$.

5.7. Étude du couplage entre le problème de Stokes pénalisé et le problème de convection-diffusion

Proposition 6. *Il existe une constante C dépendant de Ω et $\|\Phi\|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}$ telle que pour tout $t \in [0, T]$,*

$$\|(\mu - \mu')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} \leq C(1 + \|\alpha'\|_{L^\infty(0,T;H^2(\Omega))})\|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}.$$

De même il existe une constante C dépendant de Ω et $\|\Phi\|_{W^{3,\infty}(\mathbb{R})}$ telle que pour tout $t \in [0, T]$,

$$\|(\mu - \mu')(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)} \leq C(1 + \|\alpha\|_{L^\infty(0,T;H^2(\Omega))})(1 + \|\alpha'\|_{L^\infty(0,T;H^2(\Omega))})\|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)}.$$

Démonstration.

$$\begin{aligned} \|\mu(t, \cdot) - \mu'(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} &\leq \|\nabla\Phi\|_{L^\infty(\mathbb{R})}\|\alpha(t, \cdot) - \alpha'(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \\ \|\nabla\mu(t, \cdot) - \nabla\mu'(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} &= \|\Phi'(\alpha)\nabla\alpha - \Phi'(\alpha')\nabla\alpha'\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|\Phi'(\alpha)\nabla(\alpha - \alpha')\|_{L^2(\Omega)} + \|(\Phi'(\alpha) - \Phi'(\alpha'))\nabla\alpha'\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|\Phi\|_{W^{1,\infty}(\mathbb{R})}\|\nabla(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|\Phi\|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}\|\alpha(t, \cdot) - \alpha'(t, \cdot)\|_{L^6(\Omega)}\|\nabla\alpha'(t, \cdot)\|_{L^3(\Omega)} \\ &\leq \|\Phi\|_{W^{1,\infty}(\mathbb{R})}\|\nabla(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + C\|\Phi\|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}\|\alpha(t, \cdot) - \alpha'(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}\|\alpha'(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Puisque $\alpha' \in F$, il existe une constante $C > 0$ dépendant seulement de Ω et $\|\Phi\|_{W^{2,\infty}(\mathbb{R})}$ telle que

$$\|(\mu - \mu')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} \leq C(1 + \|\alpha'\|_{L^\infty(0,T;H^2(\Omega))})\|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}.$$

De la même manière

$$\begin{aligned} \|\nabla^2(\mu - \mu')\|_{L^2(\Omega)} &= \|\Phi''(\alpha)\nabla\alpha(\nabla\alpha)^t + \Phi'(\alpha)\nabla^2\alpha - \Phi''(\alpha')\nabla\alpha'(\nabla\alpha')^t \\ &\quad - \Phi'(\alpha')\nabla^2\alpha'\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|(\Phi''(\alpha) - \Phi''(\alpha'))\nabla\alpha(\nabla\alpha)^t\|_{L^2(\Omega)} + \|\Phi''(\alpha')\nabla(\alpha - \alpha')(\nabla\alpha)^t\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|\Phi''(\alpha')\nabla\alpha'(\nabla(\alpha - \alpha'))^t\|_{L^2(\Omega)} + \|\Phi'(\alpha)\nabla^2(\alpha - \alpha')\|_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \|(\Phi'(\alpha) - \Phi'(\alpha'))\nabla^2\alpha\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \|\Phi^{(3)}\|_{L^\infty(\mathbb{R})}\|\alpha - \alpha'\|_{L^\infty}\|\nabla\alpha\|_{L^4}\|\nabla\alpha'\|_{L^4} \\ &\quad + \|\Phi''\|_{L^\infty(\mathbb{R})}\|\nabla(\alpha - \alpha')\|_{L^4}\|\nabla\alpha\|_{L^4} + \|\Phi''\|_{L^\infty(\mathbb{R})}\|\nabla(\alpha - \alpha')\|_{L^4}\|\nabla\alpha'\|_{L^4} \\ &\quad + \|\Phi'\|_{L^\infty(\mathbb{R})}\|\nabla^2(\alpha - \alpha')\|_{L^2} + \|\Phi''\|_{L^\infty(\mathbb{R})}\|\alpha - \alpha'\|_{L^\infty}\|\nabla^2\alpha'\|_{L^2} \\ &\leq C\|\Phi\|_{W^{3,\infty}(\mathbb{R})}(\|\alpha\|_{H^2(\Omega)}\|\alpha'\|_{H^2(\Omega)} + \|\alpha\|_{H^2(\Omega)} \\ &\quad + \|\alpha'\|_{H^2(\Omega)} + 1)\|\alpha - \alpha'\|_{H^2(\Omega)} \end{aligned}$$

□

Soit u et u' deux solutions de (5.12) avec des viscosités μ et μ' respectivement.

Proposition 7. *Il existe une constante C dépendant de Ω , telle que pour presque tout $t \in [0, T]$*

$$\|(u - u')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} \leq C\|u'(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)}\|(\mu - \mu')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}$$

Démonstration. La quantité $(u - u')$ est solution du problème suivant :

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u - u')) - \operatorname{div}(2(\mu - \mu')D(u')) + \frac{1}{\varepsilon}(u - u') = -\nabla(p - p') \text{ dans } [0, T] \times \Omega, \\ \operatorname{div}(u - u') = 0 \text{ dans } [0, T] \times \Omega, \\ (u - u') = 0 \text{ sur } [0, T] \times \Gamma_D, \\ (u - u') \cdot \nu = \frac{\partial}{\partial \nu}(u - u')_1 = \frac{\partial}{\partial \nu}(u - u')_2 = 0 \text{ sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ (u - u') \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L]. \end{cases}$$

En prenant le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$ de $(u - u')$ pour presque tout $t \in [0, T]$ et en utilisant les injections entre espaces de Sobolev, on obtient :

$$\begin{aligned} 2 \int_{\Omega} \mu |D(u - u')|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \|u - u'\|_{L^2(\Omega)}^2 &= - \int_{\Omega} 2(\mu - \mu')D(u') : D(u - u') dx \\ &\leq 2\|\mu - \mu'\|_{L^6(\Omega)} \|D(u')\|_{L^3(\Omega)} \|D(u - u')\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C\|\mu - \mu'\|_{H^1(\Omega)} \|u'\|_{H^2(\Omega)} \|D(u - u')\|_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Ce résultat implique qu'il existe une constante C dépendant seulement de Ω telle que pour presque tout $t \in [0, T]$,

$$\|D(u - u')(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|u'(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)} \|(\mu - \mu')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}$$

□

Soit α et α' deux solutions de (5.13) avec des champs de transport u et u' respectivement.

Proposition 8. *Il existe une constante C dépendant seulement de Ω , $\|\alpha_0\|_{H^2(\Omega)}$, f , \bar{u} , $\|\mu\|_{L^\infty(\Omega)}$ telle que pour tout $t \in [0, T]$*

$$\|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))}^2$$

et

$$\|\alpha - \alpha'\|_{L^2(0,t;H^2(\Omega))}^2 \leq C \|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))}^2$$

Dans la suite de ce chapitre, on note $\beta = \alpha - \alpha'$.

Démonstration. Cette fonction β satisfait :

$$\begin{cases} \partial_t \beta + u \cdot \nabla \beta - \eta \Delta \beta = -(u - u') \cdot \nabla \alpha' \text{ dans } \Omega, \\ \frac{\partial \beta}{\partial \nu} = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \cup \Gamma_L, \\ \beta \text{ est périodique sur } \partial\Gamma \times [0, L], \\ \beta(0, \cdot) = 0 \text{ dans } \Omega. \end{cases} \quad (5.14)$$

Estimation L^2 : En prenant le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$ de (5.14) contre la fonction test β on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\beta\|_{L^2(\Omega)}^2 + \eta \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 &= - \int_{\Omega} (u - u') \cdot \nabla \alpha' \beta \, dx \\
&= \int_{\Omega} (u - u') \cdot \nabla \beta \alpha' \, dx \\
&\leq \|\alpha'\|_{L^3(\Omega)} \|u - u'\|_{L^6(\Omega)} \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq C(\Omega) \|\alpha'\|_{H^1(\Omega)} \|u - u'\|_{H^1(\Omega)} \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq C(\Omega) \|\alpha'\|_{H^1(\Omega)} \|u - u'\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{\eta}{2} \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)}^2
\end{aligned}$$

Estimation H^1 : En prenant le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$ de (5.14) contre la fonction test $-\Delta \beta$ on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 + \eta \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_{\Omega} u \cdot \nabla \beta \Delta \beta \, dx + \int_{\Omega} (u - u') \cdot \nabla \alpha' \Delta \beta \, dx \\
&\leq \|u\|_{L^6(\Omega)} \|\nabla \beta\|_{L^3(\Omega)} \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)} + \\
&\quad \|u - u'\|_{L^6(\Omega)} \|\nabla \alpha'\|_{L^3(\Omega)} \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)} \\
&\leq C(\Omega) (\|u\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u\|_{H^1(\Omega)}^4) \|\beta\|_{H^1(\Omega)}^2 + \\
&\quad C(\Omega) \|\alpha'\|_{H^2(\Omega)}^2 \|u - u'\|_{H^1(\Omega)}^2 + \frac{\eta}{2} \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)}^2
\end{aligned}$$

Cela implique que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \|\beta\|_{H^1(\Omega)}^2 + \eta (\|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)}^2) &\leq C(\Omega) (\|u\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u\|_{H^1(\Omega)}^4) \|\beta\|_{H^1(\Omega)}^2 + \\
&\quad C(\Omega) \|\alpha'\|_{H^2(\Omega)}^2 \|u - u'\|_{H^1(\Omega)}^2
\end{aligned}$$

Soit $y = \|\beta\|_{H^1(\Omega)}^2$ et $y_1 = \|\nabla \beta\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|\Delta \beta\|_{L^2(\Omega)}^2$. D'après les résultats de régularité précédents sur u , il existe $k \in L^1(0, T)$ et une constante C dépendant de Ω , $\|\alpha_0\|_{H^2(\Omega)}$, f , \bar{u} , $\|\Phi\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ telle que pour tout $0 \leq t \leq T$,

$$y' + \eta y_1 \leq k(t)y + C\|u - u'\|_{H^1(\Omega)}^2.$$

Et puisque $y(0) = 0$, en utilisant un lemme de Gronwall pour tout $t \in [0, T]$,

$$\begin{aligned}
y(t) + \eta \int_0^t y_1(s) \, ds &\leq \int_0^t C \|(u - u')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 \exp\left(\int_s^t k(s') \, ds'\right) \, ds \\
&\leq C \exp(\|k\|_{L^1(0, T)}) \|u - u'\|_{L^2(0, t; H^1(\Omega))}^2 \\
&\leq C' \|u - u'\|_{L^2(0, t; H^1(\Omega))}^2
\end{aligned}$$

□

Proposition 9. *Il existe un temps T^* dépendant de T , Ω , $\|\alpha_0\|_{H^2(\Omega)}$, f , \bar{u} et Φ tel que*

$$\|G(\alpha) - G(\alpha')\|_{L^\infty(0, T^*; H^1(\Omega))} \leq \frac{1}{2} \|\alpha - \alpha'\|_{L^\infty(0, T^*; H^1(\Omega))}$$

Démonstration. Ce résultat est une conséquence des propositions 6, 7 et 8 : pour tout $t \in [0, T]$ on a

$$\begin{aligned}
 \|(G(\alpha) - G(\alpha'))(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} &\leq C \|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))} \\
 &\leq C \left(\int_0^t \|u'(s, \cdot)\|_{H^2(\Omega)}^2 \|(\mu - \mu')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds \right)^{1/2} \\
 &\leq C \|u'\|_{L^2(0,t;H^2(\Omega))} \|\mu - \mu'\|_{L^\infty(0,t;H^1(\Omega))} \\
 &\leq C(1 + \|\alpha'\|_{L^\infty(0,T;H^2(\Omega))}) \|u'\|_{L^2(0,t;H^2(\Omega))} \|\alpha - \alpha'\|_{L^\infty(0,t;H^1(\Omega))}.
 \end{aligned}$$

D'après les propositions 10 et 9, α' est borné dans $L^\infty(0, T; H^2(\Omega))$ et u' appartient à $L^2(0, T; H^2(\Omega))$. Il existe alors un temps $0 < T^* < T$ tel que pour tout $0 \leq t \leq T^*$,

$$\|(G(\alpha) - G(\alpha'))(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{1}{2} \|\alpha - \alpha'\|_{L^\infty(0, T^*; H^1(\Omega))}.$$

De plus, T^* ne dépend que de $T, \Omega, f, \bar{u}, \alpha_0$ et $\|\Phi\|_{L^\infty(\mathbb{R})}$. □

5.8 PREUVE DU THÉORÈME 2

La suite $(\alpha^n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie dans la section 5.7 est bornée dans $L^\infty(0, T; H^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^3(\Omega)) \cap H^1(0, T; H^1(\Omega))$, de même que $(u^n)_{n \in \mathbb{N}}$ dans $L^\infty(0, T; V(\Omega))$, p^n dans $L^2(0, T; L_0^2(\Omega))$ et $(\mu^n)_{n \in \mathbb{N}}$ dans $L^\infty(0, T; H^1(\Omega))$.

Comme l'application G est contractante sur $L^\infty(0, T^*; H^1(\Omega))$, la suite $(\alpha^n)_{n \in \mathbb{N}}$ définie dans la section 5.7 converge fortement dans $L^\infty(0, T^*; H^1(\Omega))$, et d'après les propositions 6 et 7, les suites $(\mu^n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(u^n)_{n \in \mathbb{N}}$ sont des suites de Cauchy et convergent fortement vers $\mu \in L^\infty(0, T^*; H^1(\Omega))$ et $u \in L^\infty(0, T^*; V(\Omega))$ respectivement.

Ces suites étant bornées, il existe des sous-suites de $(\alpha^n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(p^n)_{n \in \mathbb{N}}$ que l'on nomme également $(\alpha^n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(p^n)_{n \in \mathbb{N}}$ qui satisfont :

$$\begin{aligned}
 \alpha^n &\rightharpoonup \alpha && \text{faible} - \star \text{ dans } L^\infty(0, T^*; H^2(\Omega)), \\
 \alpha^n &\rightharpoonup \alpha && \text{faible dans } L^2(0, T^*; H^3(\Omega)), \\
 \alpha^n &\rightharpoonup \alpha && \text{faible dans } H^1(0, T^*; H^1(\Omega)), \\
 p^n &\rightharpoonup p && \text{faible dans } L^2(0, T^*; L_0^2(\Omega))
 \end{aligned}$$

En prenant la limite lorsque n tend vers $+\infty$ de la suite (u^n, p^n, α^n) définie dans le paragraphe 5.7 on obtient que (u, p, α) est une solution faible de (5.5) sur le domaine $(0, T^*) \times \Omega$.

Enfin, ce temps T^* ne dépend que des données du problème à travers les estimations obtenues pour $\alpha \in L^\infty(0, T; H^2(\Omega))$. Puisque $\alpha \in L^2(0, T; H^3(\Omega))$ et $\frac{\partial \alpha}{\partial t} \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ on a alors $\alpha \in \mathcal{C}([0, T^*]; H^2(\Omega))$ d'après le théorème 4. Cela implique que $\alpha(0, \cdot) = \alpha_0 \in H^2(\Omega)$ et que $\alpha(T^*, \cdot) \in H^2(\Omega)$. Il est alors possible

d'utiliser les mêmes estimations à partir du temps T^* ce qui donne le même résultat d'existence et d'unicité sur $(T^*, 2T^*)$. Le processus est alors répété pour étendre ce résultat à $(0, T)$.

5.9 PREUVE DU THÉORÈME 3

D'après le théorème 2 on a

- α^ε est bornée indépendamment de ε dans $L^\infty(0, T; H^2(\Omega))$, $L^2(0, T; H^3(\Omega))$ et $H^1(0, T; H^1(\Omega))$. Cela implique également que α^ε et $\nabla\alpha^\varepsilon$ sont bornées dans $H^1((0, T) \times \Omega)$,
- u^ε est bornée dans $L^q(0, T; V(\Omega))$ pour tout $2 \leq q \leq +\infty$,
- $\varepsilon^{-1} \|u^\varepsilon - \bar{u}\|_{L^q(0, T; \mathcal{B}(\cdot))}^2$ est borné pour tout $2 \leq q \leq +\infty$.

Il existe alors une sous-suite toujours notée $(u^\varepsilon, p^\varepsilon, \alpha^\varepsilon)$ qui vérifie les propriétés de convergence suivante

$$\begin{aligned}
 \alpha^\varepsilon &\rightharpoonup \alpha && \text{faible } -\star \text{ dans } L^\infty(0, T; H^2(\Omega)), \\
 \alpha^\varepsilon &\rightharpoonup \alpha && \text{faible dans } L^2(0, T; H^3(\Omega)), \\
 \alpha^\varepsilon &\rightharpoonup \alpha && \text{faible dans } H^1(0, T; H^1(\Omega)), \\
 \alpha^\varepsilon &\rightarrow \alpha && \text{fortement dans } L^q((0, T) \times \Omega) \text{ pour tout } 2 \leq q \leq 4, \\
 \nabla\alpha^\varepsilon &\rightarrow \nabla\alpha && \text{fortement dans } L^q((0, T) \times \Omega) \text{ pour tout } 2 \leq q \leq 4, \\
 u^\varepsilon &\rightharpoonup u && \text{faible dans } L^q(0, T; V(\Omega)) \text{ pour tout } 2 \leq q < +\infty, \\
 u^\varepsilon &\rightharpoonup u && \text{faible } -\star \text{ dans } L^\infty(0, T; V(\Omega)), \\
 u^\varepsilon &\rightarrow \bar{u} && \text{fortement dans } L^q(0, T; L^2(\mathcal{B}(\cdot))) \text{ pour tout } 2 \leq q \leq +\infty,
 \end{aligned}$$

5.9.1 Étude de α

D'après la convergence forte de $\nabla\alpha^\varepsilon$ dans $L^4((0, T) \times \Omega)$ et la convergence faible de u^ε dans $L^4((0, T) \times \Omega)$ $u^\varepsilon \cdot \nabla\alpha^\varepsilon$ converge faiblement vers $u \cdot \nabla\alpha$ dans $L^2((0, T) \times \Omega)$. Cela implique qu'il est possible de passer à la limite dans la formulation variationnelle de l'équation de convection-diffusion.

Comme α^ε converge faiblement vers α dans $H^1(0, T; H^1(\Omega))$, $\alpha^\varepsilon(0, \cdot)$ converge faiblement vers $\alpha(0, \cdot)$ dans $H^1(\Omega)$ ce qui implique que $\alpha(0, \cdot) = \alpha_0 \in H^2(\Omega)$ au sens de la trace.

5.9.2 Étude de μ

On s'intéresse à la convergence de $\mu^\varepsilon = \Phi(\alpha^\varepsilon)$. D'après la convergence forte de α^ε vers α dans $L^4((0, T) \times \Omega)$, μ^ε converge fortement vers $\mu = \Phi(\alpha)$ dans $L^4((0, T) \times \Omega)$. De plus comme α^ε est borné, μ^ε et $\nabla\mu^\varepsilon$ le sont aussi dans $H^1((0, T) \times \Omega)$. Cela implique que μ^ε converge fortement vers μ dans $L^4(0, T; W^{1,4}(\Omega))$ et donc dans $L^4(0, T; L^\infty(\Omega))$.

5.9.3 Étude de (u, p)

D'après la convergence faible de u^ε vers u dans $L^2(0, T; V(\Omega))$ et la convergence forte de u^ε vers \bar{u} dans $L^2(O_p)$, $u = \bar{u}$ dans O_p .

Dans O_p^c , $(u^\varepsilon, p^\varepsilon)$ est une solution faible de

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu^\varepsilon D(u^\varepsilon)) = f - \nabla p^\varepsilon & \text{dans } O_p^c, \\ \operatorname{div} u^\varepsilon = 0 & \text{dans } O_p^c, \\ u^\varepsilon = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_D, \\ u^\varepsilon \cdot \nu = \frac{\partial u_1^\varepsilon}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2^\varepsilon}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ u^\varepsilon \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L]. \end{cases}$$

Puisque $\mu^\varepsilon = \Phi(\alpha^\varepsilon)$ converge fortement vers $\mu = \Phi(\alpha)$ dans $L^4(0, T; L^\infty(\Omega))$ et d'après la convergence faible de u^ε vers u dans $L^4(0, T; H^1(\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(\cdot)))$, $2\mu^\varepsilon D(u^\varepsilon)$ converge faiblement vers $2\mu D(u)$ dans $L^2(O_p^c)$. De même, ∇p^ε converge faiblement vers ∇p dans $L^2(0, T; H^{-1}(\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(\cdot)))$ et donc p^ε converge faiblement vers p dans $L^2(0, T; L_0^2(\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(\cdot)))$.

D'après la convergence faible de u^ε vers u dans $L^q(0, T; V(\Omega))$ pour tout $2 \leq q \leq +\infty$, on déduit que (u, p) satisfait

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(2\mu D(u)) = f - \nabla p & \text{dans } O_p^c, \\ \operatorname{div} u = 0 & \text{dans } O_p^c, \\ u = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_D, \\ u \cdot \nu = \frac{\partial u_1}{\partial \nu} = \frac{\partial u_2}{\partial \nu} = 0 & \text{sur } [0, T] \times \Gamma_N, \\ u \text{ est périodique sur } [0, T] \times \partial\Gamma \times [0, L]. \end{cases}$$

Puisque $u \in L^2(0, T; V(\Omega)) \subset L^2(0, T; H^1(\Omega))$ alors $u|_{\partial\mathcal{B}(\cdot)} \in L^2(0, T; H^{1/2}(\partial\mathcal{B}(\cdot)))$. Enfin comme $u = \bar{u}$ sur O_p avec $\bar{u} \in H^3(O_p)$, on a $u|_{\partial\mathcal{B}(\cdot)} = \bar{u}|_{\partial\mathcal{B}(\cdot)}$ dans $L^2(0, T; H^{1/2}(\partial\mathcal{B}(\cdot)))$.

5.9.4 Unicité

Soit (u, p, α) et (u', p', α') deux solutions faibles de (5.3). Les inégalités que nous avons obtenues sur $\alpha - \alpha'$ avec la proposition 8 restent valables pour tout $t \in [0, T]$:

$$\begin{aligned} \|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} &\leq C \|u - u'\|_{L^2(0, t; H^1(\Omega))} \\ \|\alpha - \alpha'\|_{L^2(0, t; H^2(\Omega))} &\leq C \|u - u'\|_{L^2(0, t; H^1(\Omega))} \end{aligned}$$

En utilisant les estimations de la proposition 7, on peut écrire pour presque tout $t \in [0, T]$,

$$\int_{\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(t)} 2\mu |D(u - u')|^2(t, x) dx \leq C \|\mu - \mu'\|_{L^\infty(\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(t))} \|u'\|_{H^1(\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(t))} \|D(u - u')\|_{H^1(\Omega \setminus \bar{\mathcal{B}}(t))}.$$

Et puisque $u - u' = 0$ sur $\mathcal{B}(t)$ pour presque tout $t \in [0, T]$, en utilisant le lemme 2, on obtient :

$$\begin{aligned} \|D(u - u')(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} &\leq C \|u'\|_{H^1(\Omega)} \|\mu - \mu'\|_{L^\infty(\Omega)} \\ &\leq C \|u'\|_{H^1(\Omega)} \|\mu - \mu'\|_{H^1(\Omega)}^{1/4} \|\mu - \mu'\|_{H^2(\Omega)}^{3/4} \end{aligned}$$

D'après les bornes que nous avons obtenues sur u , u' , α et α' et la proposition 6, on obtient pour presque tout $t \in [0, T]$,

$$\|D(u - u')(t, \cdot)\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^{1/4} \|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^2(\Omega)}^{3/4}$$

En combinant toutes ces inégalités, on a :

$$\begin{aligned} \|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))}^2 &\leq C \int_0^t \|(\alpha - \alpha')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^{1/2} \|(\alpha - \alpha')(s, \cdot)\|_{H^2(\Omega)}^{3/2} ds \\ &\leq C \left(\int_0^t \|(\alpha - \alpha')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds \right)^{1/4} \|\alpha - \alpha'\|_{L^2(0,t;H^2(\Omega))}^{3/2} \\ &\leq C \left(\int_0^t \|(\alpha - \alpha')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds \right)^{1/4} \|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))}^{3/2} \end{aligned}$$

d'où

$$\|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))}^2 \leq C \int_0^t \|(\alpha - \alpha')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds$$

et

$$\|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq C \|u - u'\|_{L^2(0,t;H^1(\Omega))}^2 \leq C \int_0^t \|(\alpha - \alpha')(s, \cdot)\|_{H^1(\Omega)}^2 ds$$

Finalement en utilisant un lemme de Gronwall on a pour tout $t \in [0, T]$

$$\|(\alpha - \alpha')(t, \cdot)\|_{H^1(\Omega)} = 0,$$

et $u = u'$ et $p = p'$.

Ce qui achève la démonstration.

APPLICATIONS AUX FLUIDES BIOLOGIQUES

Sommaire

6.1 GÉNÉRALITÉS SUR LES FLUIDES BIOLOGIQUES	112
6.2 TRANSPORT DU MUCUS PULMONAIRE PAR LES CILS DES CELLULES ÉPITHÉLIALES	114
6.2.1 <i>Position du problème</i>	114
6.2.2 <i>Modélisation de la rhéologie du mucus</i>	116
6.2.3 <i>Dynamique d'oscillation de la cellule épithéliale</i>	117
6.2.4 <i>Conditions aux limites pour l'écoulement du fluide</i>	120
6.2.5 <i>Simulation autour d'un cil</i>	121
6.2.6 <i>Simulations autour de différentes cellules</i>	125
6.2.7 <i>Influence des paramètres biologiques</i>	137
6.3 EXEMPLE D'UN MICRO-NAGEUR : LE SPERMATOZOÏDE	148
6.3.1 <i>Contexte et position du problème</i>	148
6.3.2 <i>Modélisation du mouvement de battement</i>	150
6.3.3 <i>Simulations numériques</i>	150
6.4 CALCULS D'ÉCOULEMENTS DANS LES MILIEUX POREUX	154
6.4.1 <i>Position du problème</i>	154
6.4.2 <i>Transport dans les milieux poreux</i>	156

Dans ce chapitre, des simulations numériques d'écoulements dont le calcul est basé sur les algorithmes développés aux chapitres précédents sont présentées. La majorité de ces simulations est dédiée à l'étude de l'écoulement du mucus pulmonaire autour d'une cellule épithéliale du poumon. Ces simulations ont été faites dans le cadre du projet ANR BioFiReaDy pour étudier le phénomène de clairance mucociliaire.

Après avoir présenté l'écoulement, la justification de l'utilisation des algorithmes et l'état de l'art dans ce champ d'application, la dynamique d'oscillation des cils vibratiles de la paroi bronchique est mise en équation. Il s'agit de résoudre une équation de transport 1D posée le long d'une courbe paramétrée, ce qui permet de calculer le champs de vitesse de ces obstacles immergés $\bar{u}(t)$ en tout temps t . Plusieurs simulations basées sur ce modèle battement sont ensuite présentées.

La première simulation autour d'un seul cil permet de présenter l'écoulement dans un cas simplifié et d'introduire le diagnostic quantifiant l'efficacité de la clairance mucociliaire. La seconde simulation est faite autour d'une cellule constituée de seize cils, augmentant ainsi la complexité de la géométrie. Une troisième simulation est basée sur une adaptation du modèle de battement au cas non planaire. Enfin, une dernière simulation d'un tapis de cils permet de présenter le concept de synchronisation métachronale qui asynchronise le battement.

Un protocole d'étude systématique de l'influence des paramètres du modèle sur l'efficacité de la clairance mucociliaire est ensuite présentée. On montre notamment que le caractère rapide et séquentiel des algorithmes est un atout pour ces études, ce qui permet de lancer de nombreuses simulations indépendantes en parallèle, chacune avec un jeu de paramètres, et d'étudier leur influence sur l'écoulement.

Dans une seconde partie une autre application biologique est présentée : la nage d'un spermatozoïde. Ce problème est en réalité très proche de l'écoulement du mucus autour de la cellule épithéliale : notamment du point de vue des petites échelles spatiales, de la composition des fluides, et du mouvement de la géométrie (cils pulmonaires ou flagelle du spermatozoïde).

Enfin, une troisième application est dédiée à la modélisation d'écoulements en milieux poreux. Il s'agit ici d'une adaptation directe de notre algorithme au problème de Stokes-Brinkman qui modélise l'écoulement d'un fluide à travers un réseau de micro-pores. Les écoulements en milieux poreux interviennent dans de nombreux contextes : biologie, écologie, procédés industriels...

6.1 GÉNÉRALITÉS SUR LES FLUIDES BIOLOGIQUES

D'une manière générale, l'appellation fluides biologiques englobe tous les liquides qui sont fabriqués par un organisme vivant et en particulier le corps humain. Ces fluides peuvent être divisés en deux classes : ceux qui s'écoulent en circuit fermé comme par exemple le sang et la lymphe ; ou au contraire ceux qui s'écoulent en circuit ouvert sur l'extérieur comme les mucus, la salive, le liquide lacrymal ou le sperme. Bien qu'ils soient très différents de par leurs fonctions,

couleurs, aspects... tous ces fluides ont un point commun : ils sont essentiellement constitués d'eau et d'une certaine quantité d'autres composants spécifiques à chaque fluide : protéines, cellules, nutriments, déchets...

C'est cette variation de composition qui rend chaque fluide biologique différent des autres. De plus, la composition de ces fluides n'est pas constante et dépend de nombreux facteurs : par exemple, il y a une augmentation de la quantité de globules blancs dans le sang pendant une inflammation, un changement de consistance du mucus pulmonaire pendant un rhume ou après avoir consommé du tabac, une modification des propriétés du mucus génital en fonction du cycle menstruel...

L'utilisation de la simulation numérique pour l'étude de ces fluides est actuellement en plein essor. La principale raison est la récente amélioration des capacités de calcul des ordinateurs et des algorithmes de résolution qui permettent de simuler des écoulements de plus en plus complexes et avec plus de précision. La simulation devient ainsi de moins en moins coûteuse et apporte un bon complément aux études expérimentales in-vivo et in-vitro. Par extension, certains auteurs parlent d'ailleurs d'études in-silicio. Dans le cas particulier du poumon, il n'est pas possible de procéder à des mesures au delà de la sixième génération de bronches et l'étude des générations suivantes ne peut, pour le moment, pas être faite de manière expérimentale. De plus, les mesures à l'échelle des cellules épithéliales (ou d'un spermatozoïde) ne peuvent pas être réalisées de manière non invasive (et donc avec assez de précision) en raison des petites dimensions caractéristiques de ces écoulements.

Compte tenu de la variation possible de composition des fluides biologiques, un modèle d'écoulement avec des propriétés constantes n'est pas un bon cadre, l'un des objectifs étant justement de regarder en quoi ces variations influencent l'écoulement et donc le bon fonctionnement biologique. Il faut donc être capable de tenir compte de variations de viscosité et de densité dans le modèle. C'est à cette fin que nous avons développé le modèle basé sur une viscosité μ variable, définie comme une fonction d'une fraction massique α , qui représente la concentration d'un certain agent dans le fluide aqueux. Dans le cas du mucus, il s'agit de la concentration de mucines (une protéine qui donne au mucus cet aspect de gel). Dans le cas du sperme, il s'agira de la concentration en liquide séminal, ou de mucines si on s'intéresse à la progression dans les voies génitales. Comme les applications considérées sont micrométriques, les forces de gravité sont négligeables à cette échelle et la masse volumique n'apparaît pas dans les équations. Cependant, il est tout à fait possible de définir de la même manière, la masse volumique comme une fonction de la fraction massique.

Le modèle à viscosité variable transportée par une équation de convection-diffusion est un bon compromis entre l'utilisation de lois rhéologiques non-newtoniennes, dont les résultats ne font pas forcément l'unanimité dans la communauté (voir section 6.2.2 pour une discussion sur le mucus) et le modèle newtonien à viscosité constante qui est beaucoup plus simple mais ne tient pas compte de l'inhomogénéité du fluide, et donc de la dynamique non linéaire sous-jacente. Ce modèle suppose à minima, que la composition du fluide influence directement sa

viscosité et que cette composition évolue avec l'écoulement.

6.2 TRANSPORT DU MUCUS PULMONAIRE PAR LES CILS DES CELLULES ÉPITHÉLIALES

6.2.1 Position du problème

Dans les poumons, les bronches sont recouvertes d'un film de mucus qui a un rôle protecteur - voir figure 6.1 : lors de la respiration, de nombreuses particules sont inhalées (poussières, particules de pollution, agents pathogènes, ...) et le mucus empêche ces corps étrangers d'entrer en contact avec les parois bronchiques et de contaminer l'organisme. Pour les éliminer, le film de mucus s'écoule en permanence depuis les voies respiratoires inférieures vers la trachée, jusqu'à la jonction avec l'œsophage où il est avalé dans l'estomac. Ce phénomène naturel porte le nom de clairance mucociliaire.

Deux types de cellules sont présentes sur les parois bronchiques : les cellules gobelets et les cellules épithéliales - voir figure 6.1. Les premières sont des cellules qui sécrètent les mucines, des glycoprotéines qui influencent directement les paramètres rhéologiques du mucus. Les cellules épithéliales sont dotées de cils vibratiles de quelques micromètres de long qui battent en permanence à des fréquences de 4 à 20Hz et mettent en mouvement le film de mucus.

Plusieurs maladies affectent directement la clairance mucociliaire. C'est le cas de la mucoviscidose, une maladie génétique affectant les épithéliums glandulaires de nombreux organes et particulièrement les poumons. La conséquence de cette mutation est une altération de la protéine CFTR qui provoque une augmentation de la viscosité du mucus. La clairance mucociliaire est directement affectée par cette modification de la rhéologie et des phénomènes de stagnation, d'accumulation et d'infections respiratoires chroniques sont observés cliniquement.

Une seconde maladie génétique moins connue impacte également la clairance mucociliaire : il s'agit de la dyskinésie ciliaire primitive. Cette maladie altère les fonctions de certaines protéines responsables de la polymérisation des cils vibratiles qui deviennent inactifs et donc inefficaces. Des infections pulmonaires secondaires se développent de la même manière que dans le cas de la mucoviscidose.

L'étude la clairance mucociliaire, et donc de l'écoulement du mucus autour des cils des cellules épithéliales, est importante pour mieux comprendre ces maladies. Compte tenu des échelles spatiales et de la structure du poumon les études expérimentales in-vivo sont limitées. Quelques travaux in-vitro sur des cultures de cils de lapin [Sanderson et Sleight, 1981; Matsui *et al.*, 1998] ou avec des cils artificiels [Yu *et al.*, 2006; Hussong *et al.*, 2011a] donnent de bonnes bases pour les études numériques.

Dans le cadre du projet ANR BioFiReaDy, des simulations numériques de l'écoulement du film de mucus autour des cils vibratiles sont utilisées pour étudier

séparément les différents mécanismes impliqués dans le phénomène de clairance mucociliaire. L'objectif est de quantifier ces impacts dans le contexte des maladies respiratoires présentées précédemment.

Bien que la modélisation numérique de l'écoulement d'un film de mucus autour des cellules épithéliales ait déjà été largement étudiée dans la littérature, cette thématique reste un challenge pour la recherche moderne. Plusieurs problèmes se posent compte tenu de la complexité du problème : prise en compte de la géométrie mobile, de l'interface entre l'air et le mucus, de l'interaction entre les parois bronchiques et le mucus (sécrétions de mucines et de divers agents), prise en compte des propriétés non homogènes et non newtoniennes du fluide, influence des agents inhalés ou de surfactants (étroitement liés à l'effet Marangoni). Cette complexité rend le modèle numérique complet hors de portée des scientifiques [Causey, 2007] mais plusieurs directions complémentaires ont été choisies par différents auteurs pour étudier la clairance mucociliaire - voir [Smith *et al.*, 2008] pour une synthèse plus complète de plusieurs travaux.

Certains auteurs se focalisent sur l'étude des effets non newtoniens avec des simulations de fluides viscoélastiques ou viscoplastiques, sans tenir compte de la géométrie en mouvement. Celle-ci est remplacée par une condition aux limites qui imite le mouvement de propulsion avec une condition d'adhérence sur un bord

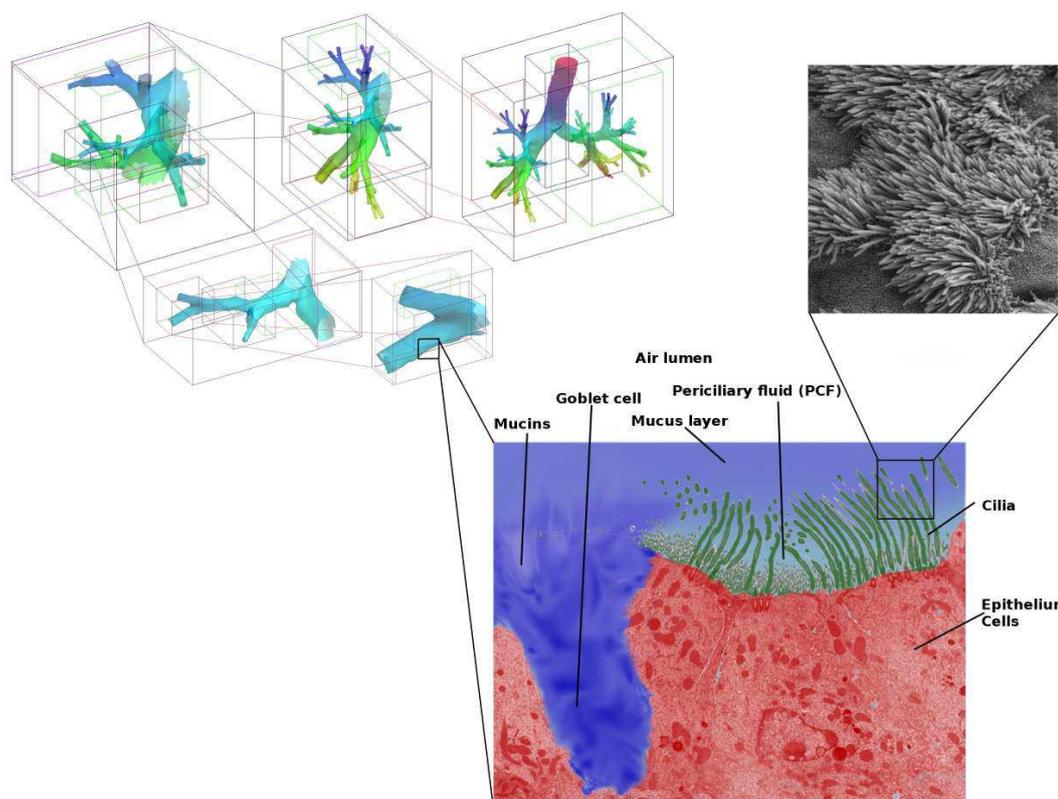


FIGURE 6.1 - Vue schématique multi-échelles des poumons humains, de la trachée et les premières générations de bronches ($\approx 1\text{cm}$) jusqu'aux cellules épithéliales ($\approx 10\mu\text{m}$).

mobile [Blake, 1972]. Dans le même esprit, le mouvement des cils a été remplacé par une force volumique au voisinage de la paroi bronchique, en considérant un mucus homogène [Keller et Wu, 1977; Blake et Winet, 1980]. D'autres études considèrent cette géométrie en 2D avec un fluide homogène [Lee *et al.*, 2011] ou des modèles non newtoniens [Smith *et al.*, 2007b].

Un papier original de [Matar et Spelt, 2005] étudie en 2D un modèle où la viscosité serait la solution d'une équation de réaction-advection-diffusion faisant intervenir la température, mais la modélisation de l'écoulement est très simplifiée. Outre cette étude, le modèle à viscosité variable a pour le moment été exploité seulement en absence de géométrie ciliée [Enault *et al.*, 2010] ou à l'échelle des bronches avec un modèle de fluide de Bingham [Mauroy *et al.*, 2011]. Enfin, à ma connaissance, seulement quelques travaux considèrent le battement de la géométrie ciliaire en 3D : dans [Jayathilake *et al.*, 2012; Smith *et al.*, 2007a], les auteurs utilisent une rhéologie constante, le premier de ces travaux utilise des méthodes de surfaces immergées, le second une méthode de type Stokeslets avec un couplage entre un modèle 2D loin de cils et 3D près d'eux. Dans [Mitran, 2007] un modèle 3D de poutre élastique pour les cils est utilisé avec un fluide viscoélastique. Enfin un autre axe d'étude a également été abordé : l'étude des surfactants en étroit lien avec l'effet Marangoni [Craster et Matar, 2000; Matar *et al.*, 2002; Halpern *et al.*, 2004] à la surface du film.

6.2.2 Modélisation de la rhéologie du mucus

Les études rhéologiques qui ont été réalisées sur le mucus pulmonaire tendent à s'accorder sur le fait que ce n'est pas un fluide newtonien. Cependant de fortes variations existent entre ces résultats. Certains auteurs pensent qu'il s'agirait plutôt d'un fluide viscoélastique [Puchelle *et al.*, 1987; Mitran, 2007] à mémoire de forme alors que d'autres études ont conclu à un comportement viscoplastique [Edwards et Yeates, 1992; Craster et Matar, 2000]. Dans une revue récente, les auteurs ne tranchent pas sur ce point [Lai *et al.*, 2009]. De nouvelles campagnes de mesure de la rhéologie du mucus, qui viendront par la suite enrichir le modèle, sont prévues dans le cadre du projet ANR BioFiReaDy . Ce point sera abordé dans les perspectives de ce travail.

Il a été observé que le mucus est plus hydraté au voisinage de la paroi bronchique qu'à la surface du film où l'air a tendance à le déshydrater. La fraction de mucines est donc plus importante à cet endroit. La partie inférieure du film, la plus hydratée, est appelée fluide périciliaire, voir figure 6.1. Certains travaux numériques considèrent un modèle à deux fluides : une couche de fluide périciliaire en dessous d'une couche plus visqueuse riche en mucines [Smith *et al.*, 2007b]. La principale difficulté dans ce modèle consiste à régler la hauteur (et les lois de comportement) de l'interface entre les deux phases ; cette interface est difficile à identifier compte tenu du fait que les deux fluides sont essentiellement composés d'eau. Le modèle à viscosité variable est une bonne alternative à ces problèmes puisqu'il n'impose pas de suivre de cette interface, tout est piloté par la fraction massique.

Dans ce travail, nous avons décidé de ne pas étudier les effets non newtoniens en raison de cette incertitude dans le choix du modèle à utiliser. Ce point sera repris dans les perspectives, dans le dernier chapitre de ce manuscrit. Notre étude s'est focalisée sur le problème 3D en étudiant l'influence de la viscosité variable, avec une description précise de la géométrie ciliaire. Ce point n'ayant pas encore été abordé dans la littérature.

6.2.3 Dynamique d'oscillation de la cellule épithéliale

Les cils vibratiles des cellules épithéliales sont localisés sur les parois bronchiques. Ils font quelques micromètres de long (entre cinq et dix) et entre 100 et 500 nanomètres de diamètre. Une vue en coupe d'un cil - figure 6.2 - montre leur structure interne. Elle s'organise autour d'une paire de nanotubules appelée l'axonème et entourée de neuf autres paires de nanotubules. Cette structure 9+2 est caractéristique des cils vibratiles. Au contraire, les cils primaires localisés sur la plupart des cellules de l'organisme (rétine, intestins, cellules du rein et du foie, neurones, ...) ne battent pas et ont une structure similaire sans axonème central (dite en 9+0).

La modélisation complète de la polymérisation du cil reste un problème ouvert. D'un point de vue biologique, ce sont les dynéines qui génèrent ce mouvement. Il s'agit de grosses protéines fixées aux nanotubules en périphérie d'un axonème. Elles font glisser les nanotubules entre eux en utilisant de l'énergie apportée par l'ATP, ce qui provoque la courbure des cils. La coordination entre nanotubules permet de générer le mouvement. Plusieurs travaux mathématiques ont cherché à modéliser et simuler ce phénomène complexe, voir [Brokaw, 2005].

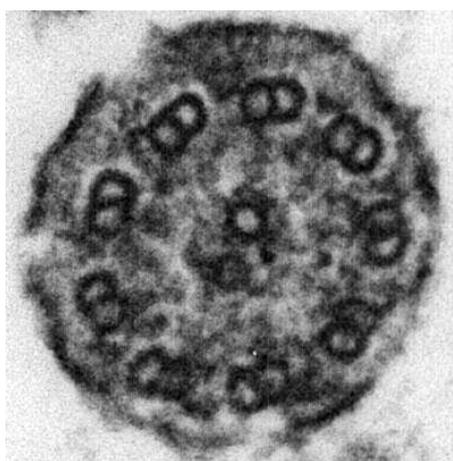


FIGURE 6.2 - Vue en coupe d'un cil vibratile (gauche) et vue schématique (droite). Chaque cil est construit autour d'un complexe central, l'axonème, constituée d'une paire centrale de nanotubules entourée de neuf autres paires espacées autour de lui. Le battement est généré par des réactions chimiques dans ces nanotubules qui font intervenir plusieurs protéines.

Pour modéliser le battement d'un cil pulmonaire, nous utilisons un modèle très simplifié qui reproduit qualitativement le mouvement observé expérimentalement. Cette dynamique d'oscillation est générée en résolvant une équation de transport 1D posée le long d'une courbe paramétrée. Les modèles précédemment décrits impliqueraient la prise en compte de nombreuses réactions chimiques au sein de ce réseau de nanotubules et le modèle serait très complexe et difficile à paramétrer.

On appelle $P(\zeta, t)$ la position de la courbe qui décrit le cil au temps t à une distance normalisée ζ de la base du cil, $P :]0, 1[\rightarrow \mathbb{R}^3$. L'équation de transport n'est pas posée sur P , mais sur sa dérivée $L = \partial_\zeta P$.

$$\frac{\partial L}{\partial t} + v(t) \frac{\partial L}{\partial \zeta} = 0 \quad (6.1)$$

La solution de cette équation est également la solution de l'équation des ondes suivante :

$$\frac{\partial^2 L}{\partial t^2} - v(t)^2 \frac{\partial^2 L}{\partial \zeta^2} = -v'(t) \frac{\partial L}{\partial \zeta} \quad (6.2)$$

Cette seconde équation aux dérivées partielles permet d'identifier le paramètre $v(t)^2$ comparable à un module de Young, quantifiant l'élasticité du matériau. Pour cette application $v(t) = (1 + 8 \cos^2(\pi(t + 0.25T)/T))/T$. Ce sont les conditions aux limites combinées à ce module de Young qui permettent de générer le battement :

$$\begin{cases} P(0, t) = 0 \\ L(0, t) = \partial_\zeta P(0, t) = g(t) = (2 \cos(2\pi t/T), 0, 1) \end{cases} \quad (6.3)$$

La première condition impose que l'extrémité du cil soit encastree dans la paroi bronchique. La seconde condition crée le battement à la base, qui est ensuite transporté le long de la courbe paramétrée par le module d'élasticité. Cette combinaison garantit que l'extrémité du cil, qui n'est pas encastree, est libre. Ce problème est bien posé : il n'y a pas besoin de conditions aux limites sur le bord sortant d'une équation de convection si le champ de transport reste de signe constant (ce qui est le cas avec cette expression de $v(t)$).

La résolution de cette équation de transport 1D est très rapide comparée aux calculs 3D du champ de vitesse, même avec un raffinement très fin. Une discrétisation complètement implicite avec un schéma up-wind est utilisée. Le battement généré nous donne un angle de $\frac{2\pi}{3}$ entre les deux extrémités du battement ce qui est cohérent avec les modèles numériques et expérimentaux de la littérature.

Pour donner du volume à cette courbe paramétrée monodimensionnelle "tube" est construit comme une suite de sphères définies à chaque point de discrétisation. Le rayon de chaque sphère est égal à celui d'un cil et plus les sphères s'intersectent, plus le résultat sera semblable à un tube. L'avantage d'un tel modèle réside également dans la décomposition du calcul de la fonction caractéristique de chaque cil en une suite de calcul de fonctions caractéristiques de sphères. Grâce à cette modélisation, il n'y a pas besoin de tester tous les points de grilles pour

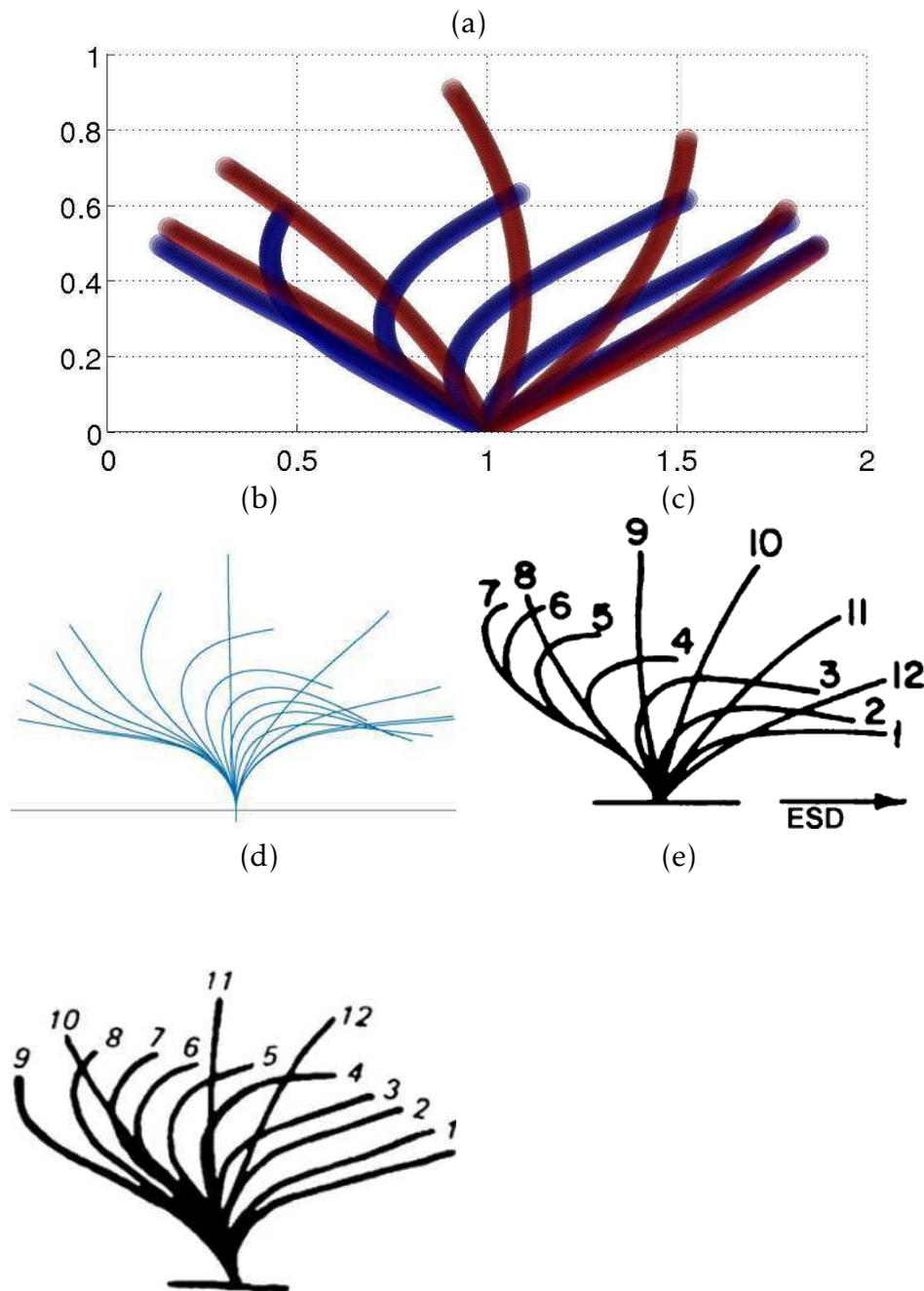


FIGURE 6.3 - Trajectoire suivie par différents modèles de battement ciliaire de la littérature. Le modèle développé à partir de la courbe paramétrée est la figure (a). En bleu, la phase de récupération : lorsque le cil bat vers l'arrière (c'est-à-dire dans la direction opposée à l'écoulement), et en rouge la phase de poussée effective qui correspond au mouvement inverse (lors de cette phase le sommet du cil est légèrement plus haut dans le film de mucus). Notre modèle est comparé aux résultats obtenus par Fauci et Dillon (étude numérique) [Fauci et Dillon, 2006] (b), Gheber et Priel (étude numérique et expérimentale) [Gheber et Priel, 1997] (c), Sanderson et Sleight (étude expérimentale sur des cultures de cils de lapin) [Sanderson et Sleight, 1981] (d) et Mitran (modèle numérique 3D de poutres élastiques) [Mitran, 2007].

chaque sphère de chaque cil (ce qui deviendrait rapidement très coûteux pour une cellule composée de plusieurs cils), mais seulement dans un voisinage de chaque sphère.

La figure 6.3 présente le battement généré par ce modèle, comparé avec plusieurs travaux expérimentaux et numériques de plusieurs auteurs. Le mouvement élastique (la longueur du cil n'est pas conservée au cours du temps) généré par notre simple modèle 1D reproduit bien les résultats de la littérature.

Dans cette section un mouvement planaire a été présenté : la poussée effective et la récupération sont faites dans le même plan. Un second mouvement de battement sera présenté dans les sections suivantes.

6.2.4 Conditions aux limites pour l'écoulement du fluide

Compte tenu de la géométrie du problème physique, l'utilisation de conditions aux limites périodiques dans les directions x et y est justifiée. Cela signifie que lors d'un calcul d'écoulement autour d'une cellule, on suppose qu'une cellule identique est située devant et derrière elle, dans chaque direction de périodicité. Le bas de la boîte de calcul est assimilé à la paroi bronchique où on impose une adhérence du fluide à la paroi. La courbure de la paroi bronchique est négligée, cette approximation est naturelle compte tenu des dimensions du problème : un cil fait quelques micromètres de long alors que les bronches ont un diamètre de plusieurs centimètres. Enfin, la condition aux limites que l'on choisit sur la face supérieure de la boîte de calcul est une condition de surface libre plane. Classiquement, la condition de surface libre consiste à raccorder les contraintes normales à l'interface entre deux fluides non miscibles (dans notre cas, le mucus et l'air), ce qui s'écrit :

$$[(2\mu D(u) - pI)] \cdot \nu = c\kappa \quad \text{à travers la surface libre} \quad (6.4)$$

avec ν la normale à la surface libre, c la tension de surface, κ la courbure de la surface et $[.]$ l'opérateur de saut à travers la surface. Le mouvement de la surface libre est en général modélisé par une équation de transport. Dans ce travail, le traitement complet de l'interface air-mucus n'a pas été considéré, comme cela a été argumenté en introduction. Quelques commentaires sur la pertinence de son intégration future dans le modèle et sa résolution numérique seront énumérés dans le dernier chapitre.

La condition de surface libre qui a été choisie reprend ce concept en ajoutant une hypothèse forte : on suppose que la surface libre est stationnaire et parfaitement plane et donc assimilable à la face supérieur de la boîte de calcul où la vitesse verticale est nulle. Cela permet de s'affranchir de la résolution de l'équation de transport de la surface libre et de simplifier les conditions (6.4), tout en autorisant un déplacement du fluide dans les directions tangentielles. Dans ce cas, la courbure de la surface est nulle ce qui fait disparaître la tension de surface des équations. Il est alors possible de choisir $p = 0$ à l'interface, puisque la pression est définie à une constante près. On obtient :

$$\begin{aligned} [(2\mu D(u) - pI)] \cdot \nu &= 0 \quad \text{sur } \Gamma_N \\ u_3 &= 0 \quad \text{sur } \Gamma_N \end{aligned}$$

En réécrivant ces équations sur chaque composante, on obtient la condition de surface libre plane suivante :

$$\begin{aligned} \partial_3 u_1 = \partial_3 u_2 &= 0 \quad \text{sur } \Gamma_N \\ u_3 &= 0 \quad \text{sur } \Gamma_N \end{aligned} \tag{6.5}$$

La justification du choix des conditions aux limites pour l'équation de diffusion-transport de la fraction massique a été discuté au début de la section 2.1. On utilise des conditions aux limites périodiques dans les directions de périodicité et une condition aux limites de Neumann homogène dans les autres cas, car il n'y a pas de flux de masse à travers la surface libre et la paroi bronchique.

6.2.5 Simulation autour d'un cil

Le premier exemple numérique présenté modélise l'écoulement d'un film de mucus autour d'un unique cil. A l'initialisation la fraction massique est stratifiée selon la hauteur, égale à zéro en bas de la boîte de calcul et un sur la face supérieure. La viscosité est définie comme une fonction affine de la fraction massique (de telle sorte que μ et α sont solutions de la même équation, voir chapitre 2). Tout cela s'exprime de la manière suivante :

$$\mu_0(x, y, z) = \Phi(\alpha_0(z)) = \mu_{eau}(1 + \alpha_0(z)) = \mu_{eau}\left(1 + \frac{z}{L_z}\right) \tag{6.6}$$

Les principaux paramètres utilisés pour cette simulation sont regroupés dans la table 6.1. La simulation est faite sur six périodes de battement, c'est-à-dire pendant 0.6s. Le cil est encastré dans la paroi bronchique au centre de la boîte de calcul qui admet les conditions aux limites présentées dans le paragraphe précédent. Dans les sections suivantes l'influence de différents paramètres du modèle sera étudiée.

Pour étudier l'efficacité de la clairance mucociliaire, on intègre les composantes tangentielles de la vitesse sur la face supérieure de la boîte de calcul. Cela nous donne une vitesse moyennée en espace, à chaque instant. On peut alors moyenner en temps pour calculer une vitesse moyenne à la surface sur les six périodes de battement. On ne s'intéresse qu'à la première composante car c'est la direction de la trachée dans laquelle l'écoulement se développe.

Sur les figures 6.4 et 6.5, une illustration de cette simulation est présentée à plusieurs instants. Deux isosurfaces de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s (en jaune) et 1.75×10^{-3} Pa s (en vert) sont affichées. La carte de couleur représente la norme de la vitesse sur les bords de la boîte de calcul, dans les directions de périodicité. Les isosurfaces permettent de bien se rendre compte des phénomènes de transport.

L'efficacité de la clairance mucociliaire est reportée sur la figure 6.6. On constate que lorsque le cil bat de gauche à droite, ce qui correspond aux illustrations

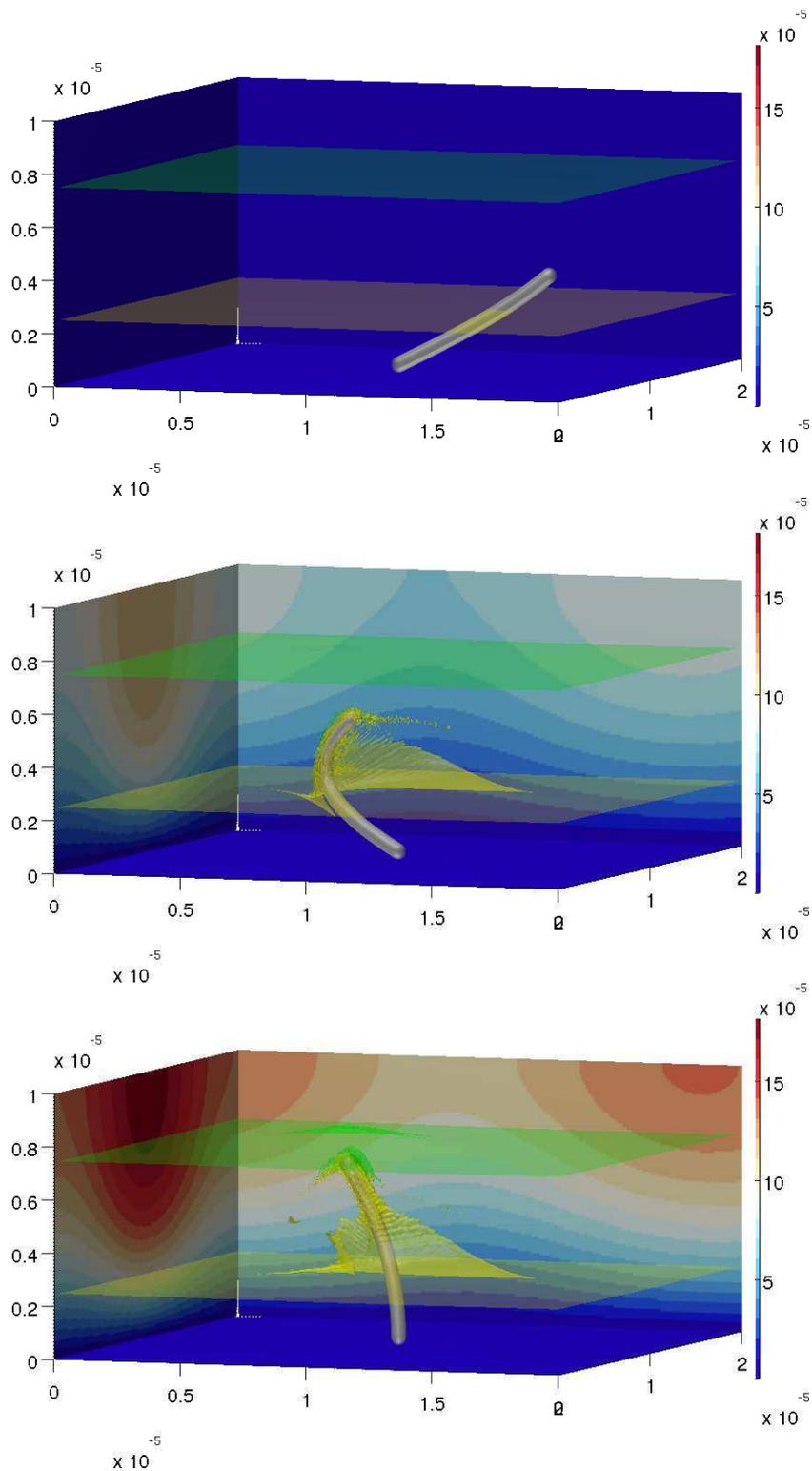


FIGURE 6.4 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'un cil (à $t = 0, 0.042$ et 0.075 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau $1.25 \times 10^{-3} \text{Pa s}$ et en vert une isosurface de viscosité de niveau $1.75 \times 10^{-3} \text{Pa s}$.

6.2. Transport du mucus pulmonaire par les cils des cellules épithéliales

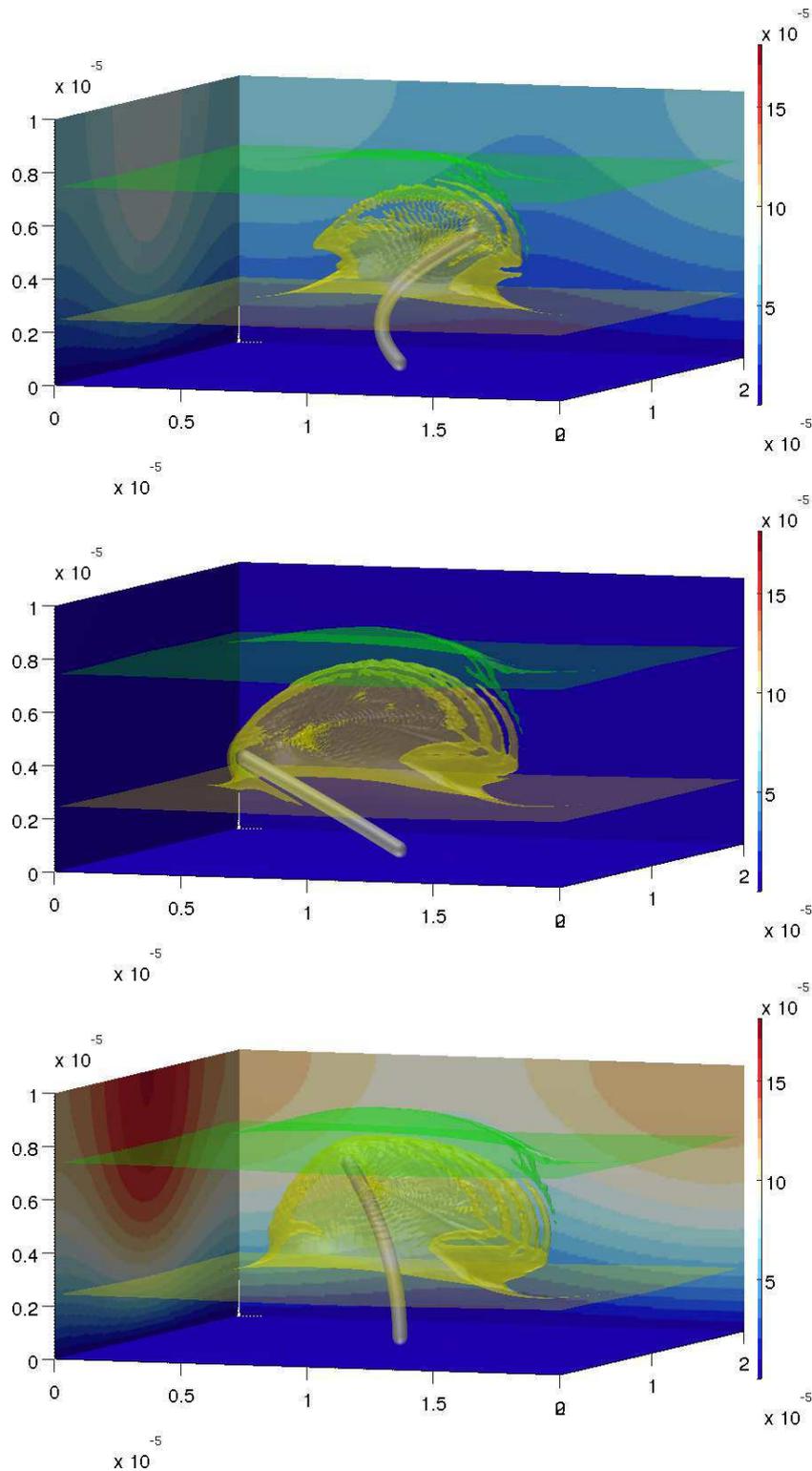


FIGURE 6.5 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'un cil (à $t = 0.233, 0.458$ et 0.575 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

Description	Symbole	Valeur
Viscosité de l'eau	μ_{eau}	10^{-3}Pa s
Hauteur du film (et de la boîte de calcul)	L_z	$10 \mu\text{m}$
Longueur de la boîte de calcul	L_x	$20 \mu\text{m}$
Largeur de la boîte de calcul	L_y	$20 \mu\text{m}$
Fréquence de battement	f_b	10Hz
Nombre de périodes		6
Longueur des cils	L_{cil}	$7 \mu\text{m}$
Rayon des cils	R_{cil}	$0.3 \mu\text{m}$
Distance entre deux cils		$1.75 \mu\text{m}$

TABLE 6.1 - Paramètres utilisés pour la simulation de l'écoulement du film de mucus autour d'une cellule épithéliale. Sauf mention contraire, ces paramètres conserveront cette valeur dans les prochaines simulations.

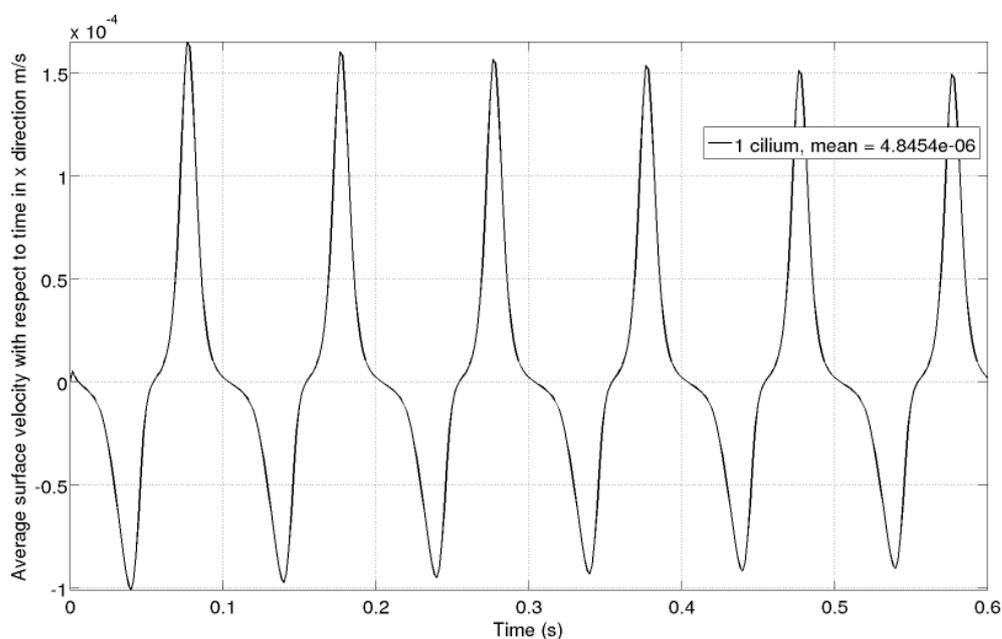


FIGURE 6.6 - Vitesse moyennée sur la surface de la boîte de calcul en fonction du temps. Le résultat de la légende est la moyenne en temps sur la simulation complète.

rouges de la figure 6.3(a), la vitesse du film est plus importante que lors du mouvement retour. C'est cette différence qui permet de récupérer un écoulement à moyenne positive, c'est-à-dire une clairance mucociliaire efficace. Cette première simulation valide le modèle de battement, puisque ce résultat est compatible, tout en étant bien inférieur puisqu'on ne considère qu'un seul cil, avec les mesures expérimentales [Thiriet, 2012].

Des simulations autour de cellules de plus en plus complexes sont présentées dans le paragraphe suivant avant de se focaliser sur la faisabilité d'une étude paramétrique du modèle.

6.2.6 Simulations autour de différentes cellules

Cellule à seize cils

La deuxième simulation présentée dans le cadre de l'écoulement du mucus autour des cellules épithéliales ciliées se fait cette fois avec seize cils organisés de manière régulière sur motif 4×4 , avec une distance de $1.75 \mu\text{m}$ entre les centres de deux cils adjacents, soit $1.15 \mu\text{m}$ d'espace entre les deux. Les autres paramètres de la simulation restent identiques et sont rassemblés dans la table 6.1.

Sur les figures 6.4 et 6.5, une illustration à plusieurs instants de cette simulation est présentée. Deux isosurfaces de viscosité de niveau $1.25 \times 10^{-3} \text{Pa s}$ (en jaune) et $1.75 \times 10^{-3} \text{Pa s}$ (en vert) sont affichées. La carte de couleur représente la norme de la vitesse sur les bords de la boîte de calcul, dans les directions de périodicité.

Cette carte de couleur montre que la vitesse est plus importante qu'avec un seul cil : d'un facteur 2.5. Si on s'intéresse à la vitesse moyennée sur la surface et en temps, voir figure 6.9, on se rend compte que le facteur est moindre : "seulement" 1.75. Cette atténuation s'explique par le fait que si on fait le rapport (en valeur absolue) entre le maximum (atteint pendant le mouvement du cil vers l'avant) et le minimum (atteint pendant le mouvement du cil vers l'arrière), on trouve 1.6 avec un cil et 1.33 avec 16 cils. En proportion le mouvement de retour est plus important pour cette cellule et la moyenne (en temps) est multipliée par un facteur moindre.

Cette cellule à seize cils a été retenue comme configuration de base pour la plupart des calculs d'influence des paramètres biologiques présentés dans la section 6.2.7. Le principal argument qui justifie ce choix est la simplicité relative de cette géométrie : plus complexe et réaliste que le cas à un cil, cette configuration reste néanmoins plus simple que d'autres simulations qui sont présentées dans les deux sections suivantes où la géométrie est décrite avec plus de paramètres.

Cellule de forme elliptique et battement circulaire

Ce paragraphe est l'occasion de présenter une autre géométrie de cellule, ainsi qu'une variante du mouvement de battement.

Pour cette cellule épithéliale les cils ne sont plus disposés de manière régulière comme c'était le cas dans le paragraphe précédent, ils sont agencés en quinconce selon une forme elliptique dans le but de s'approcher des images de culture de cils, issues d'études au microscope électronique à balayage, comme celles présentées en introduction. La taille des cils reste constante par rapport aux simulations précédentes. Les cils ne sont plus parallèles comme dans la simulation précédente mais sont disposés comme un "bouquet", voir figure 6.10.

Par ailleurs le mouvement battement a été modifié pour cette simulation : la phase de retour (en bleu sur la figure 6.3 page 119) ne se fait pas dans le même plan que la phase de poussée effective (en rouge sur cette même figure) : les cils reviennent en tournant par le côté, créant ainsi un mouvement dans la direction y . De plus le mouvement de poussée dure $1/3$ de la période de battement, et

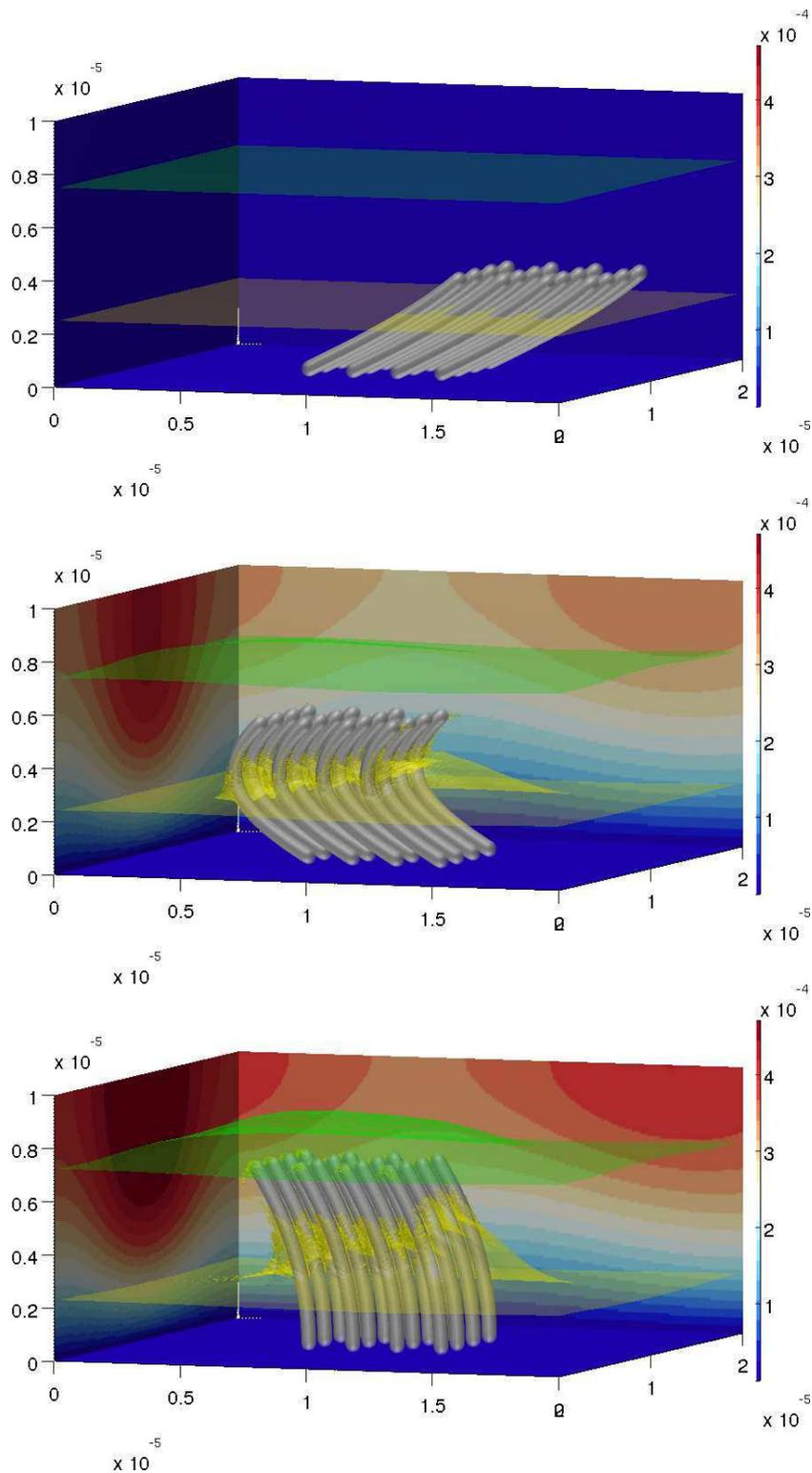


FIGURE 6.7 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'une cellule composée de 16 cils (à $t = 0, 0.042$ et 0.075 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau $1.25 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$ et en vert une isosurface de viscosité de niveau $1.75 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$.

6.2. Transport du mucus pulmonaire par les cils des cellules épithéliales

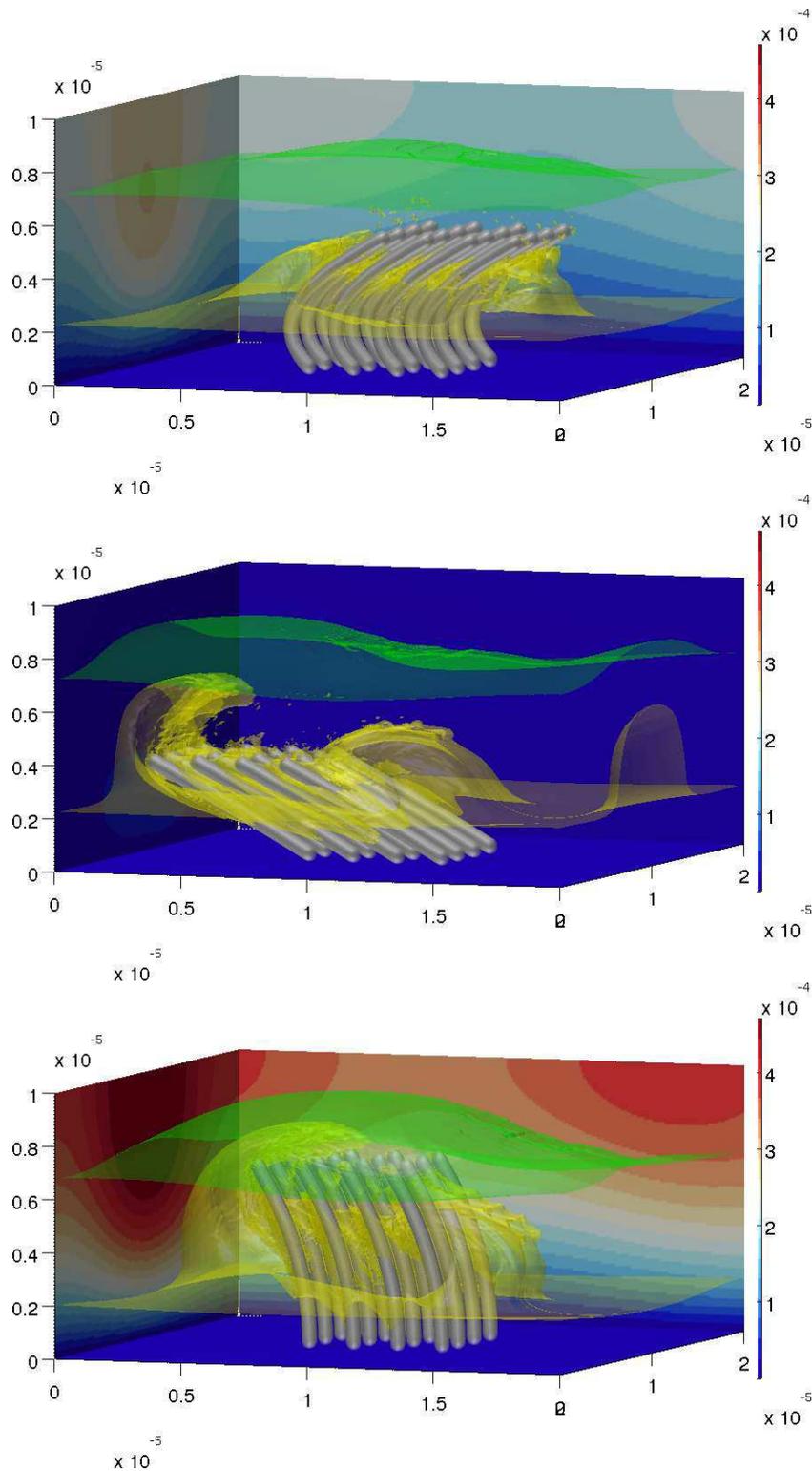


FIGURE 6.8 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'une cellule composée de 16 cils (à $t = 0.233, 0.458$ et 0.575 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

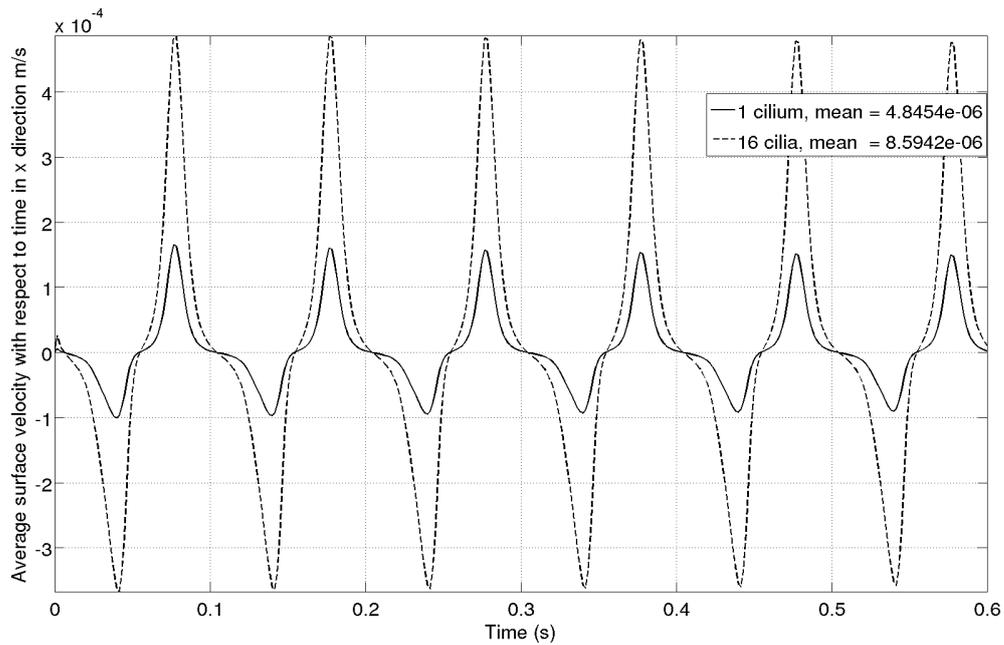


FIGURE 6.9 - Vitesse selon x , moyennée sur la surface de la boîte de calcul en fonction du temps. Le résultat de la légende est la moyenne en temps sur la simulation complète. Comparaison des simulations à un et seize cils.

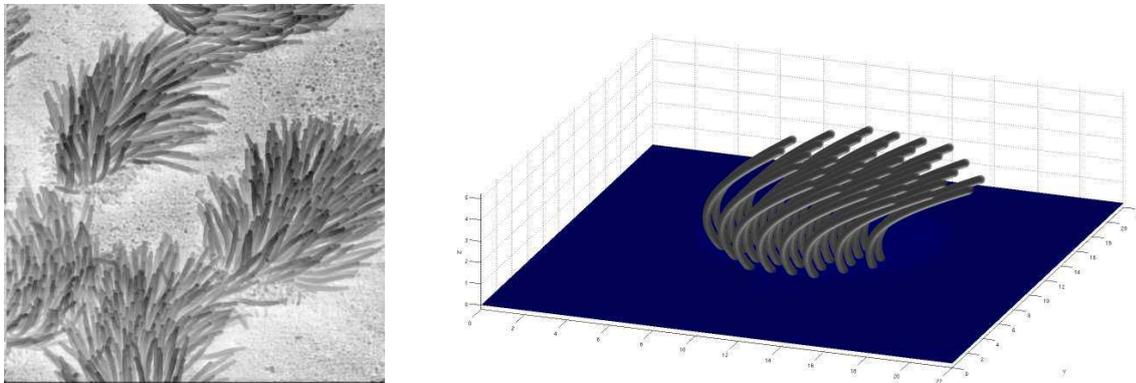


FIGURE 6.10 - (Gauche) Image de cils captée par un microscope électronique à balayage, images librement fournies par Dartmouth Electron Microscope Facilita (<http://remf.dartmouth.edu/>). (Droite) une cellule elliptique avec les cils organisés en quinconce générée par notre méthode.

non plus la moitié comme dans le mouvement précédent. Mathématiquement cela se traduit par la modification des variables v et g qui interviennent dans les équations (6.2) et (6.3). Dans ces équations \tilde{t} est le reste de la division de t par la période de battement T_b et on note $T'_b = \frac{2T_b}{3}$ et $T''_b = \frac{T_b}{3}$.

$$\begin{aligned}
 g(t) &= \begin{cases} (2 \cos(\pi \tilde{t}/T'_b), -2 \sin^2(\pi \tilde{t}/T'_b), 1) & \text{si } \tilde{t} < T'_b \\ (2 \cos(-3\pi(\tilde{t}/T_b - 1)), 0, 1) & \text{si } \tilde{t} > T'_b \end{cases} \\
 v(t) &= \begin{cases} (5 + 20 \sin^2(\pi \tilde{t}/T'_b))/T_b & \text{si } \tilde{t} < T'_b \\ (5 + 20 \sin^2(\pi \tilde{t}/T''_b))/T_b & \text{si } \tilde{t} > T'_b \end{cases}
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

D'après certaines études expérimentales, ce mouvement semble être plus proche du battement réel des cils pulmonaires [Sanderson et Sleight, 1981; Nonaka *et al.*, 2005] même si tous les auteurs ne s'accordent pas sur ce point [Chilvers et O'Callaghan, 2000]. Ces études sont notamment basées sur l'observation de traceurs à la surface du film qui avancent en faisant des sortes de boucles. L'objet principal de cette section est de montrer que le battement 1D, basé sur la résolution de l'équation de transport le long de la courbe paramétrée, s'adapte bien à ce battement de retour circulaire.

Plusieurs images de cette simulation sont présentées sur les figures 6.11 et 6.12 où l'on constate que le rapport entre la vitesse du fluide pendant le mouvement de poussée effective et pendant le mouvement de retour est plus important que pour les simulations précédentes. Ceci s'explique par le fait que le mouvement de retour se fait plus près de la paroi bronchique, où la condition d'adhérence ralentit l'écoulement ; mais également par le fait que le mouvement de poussée effectue le même trajet que précédemment en un temps plus court. La conséquence est donc un gain d'efficacité de la clairance mucociliaire.

Ce résultat se constate aussi en regardant la première composante de la vitesse moyennée à la surface, sur la figure 6.13. Le battement circulaire génère également un mouvement significatif dans la direction y , mais la moyenne temporelle est nulle. La direction privilégiée de l'écoulement est bien la même qu'avec les précédents modèles de battement.

Dans la suite de ce manuscrit, seul le battement planaire a été étudié. Néanmoins ce modèle de battement a montré son efficacité, et un paramètre quantifiant l'asymétrie planaire du mouvement mériterait d'être étudié. Plus précisément, ce paramètre prendra la place de la constante 2, devant le \sin^2 , dans la première équation du système (6.7). Cela sera fait dans de prochains travaux, lors du développement de la plate-forme intégrative.

Tapis de cils et synchronisation métachronale

Une autre simulation a été faite en augmentant sensiblement le nombre de cils : on considère ici un "tapis" de cils vibratiles. La boîte de calcul a été agrandie : dans cette simulation elle mesure $40 \times 20 \times 10 \mu\text{m}^3$. Cela permet de considérer un plus grand nombre de cils : 112 organisés régulièrement avec un motif 7×16 .

La particularité de cette simulation est que l'on modélise le phénomène de synchronisation métachronale : au lieu d'avoir un mouvement parfaitement coordonné, les cils ont un battement déphasé. Deux cas sont distingués : lorsque ce sont les cils les plus à droite (proches de la trachée) qui sont en avance, on

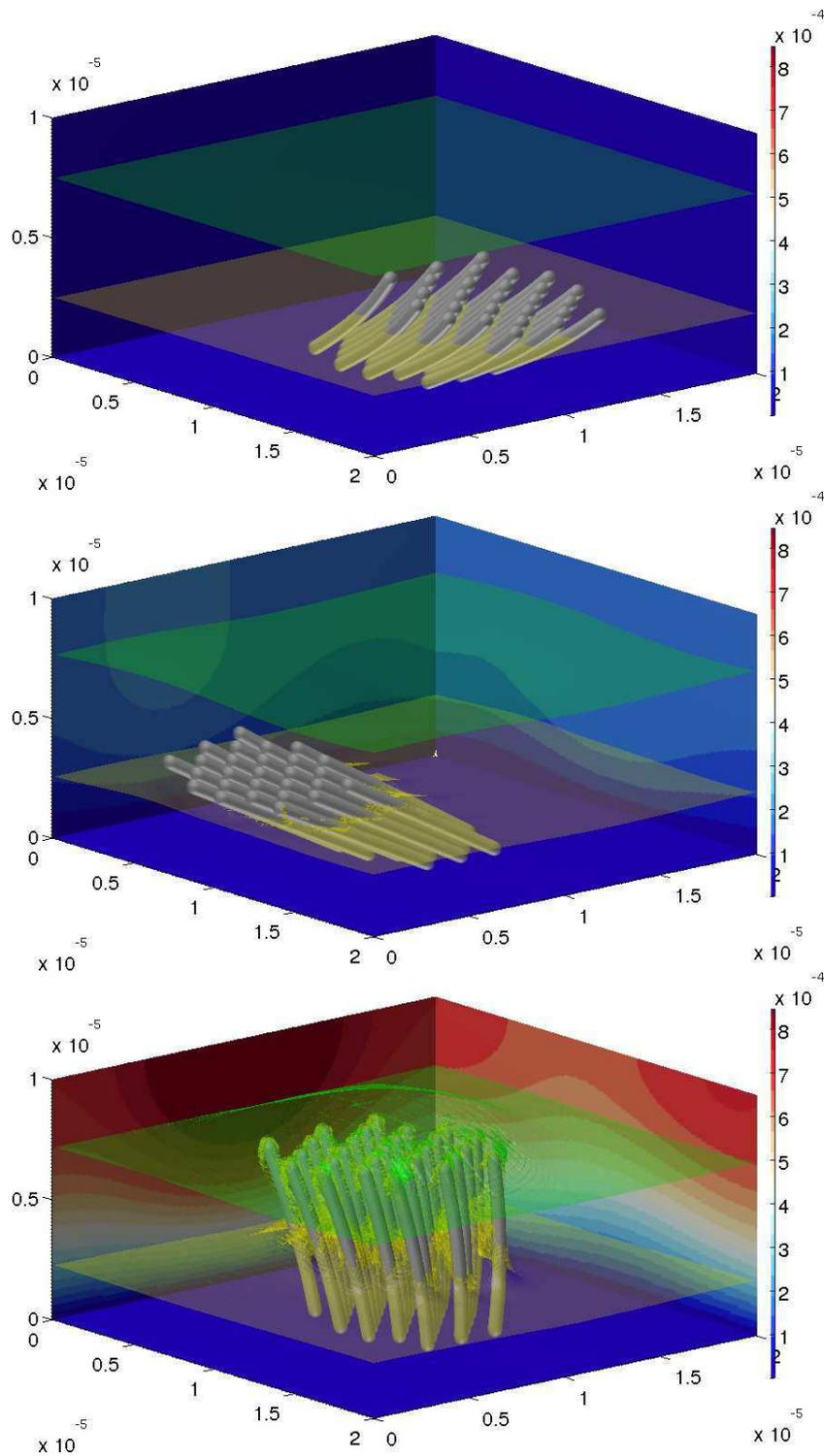


FIGURE 6.11 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'une cellule composée de 16 cils (à $t = 0, 0.042$ et 0.084 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau $1.25 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$ et en vert une isosurface de viscosité de niveau $1.75 \times 10^{-3} \text{ Pa s}$.

6.2. Transport du mucus pulmonaire par les cils des cellules épithéliales

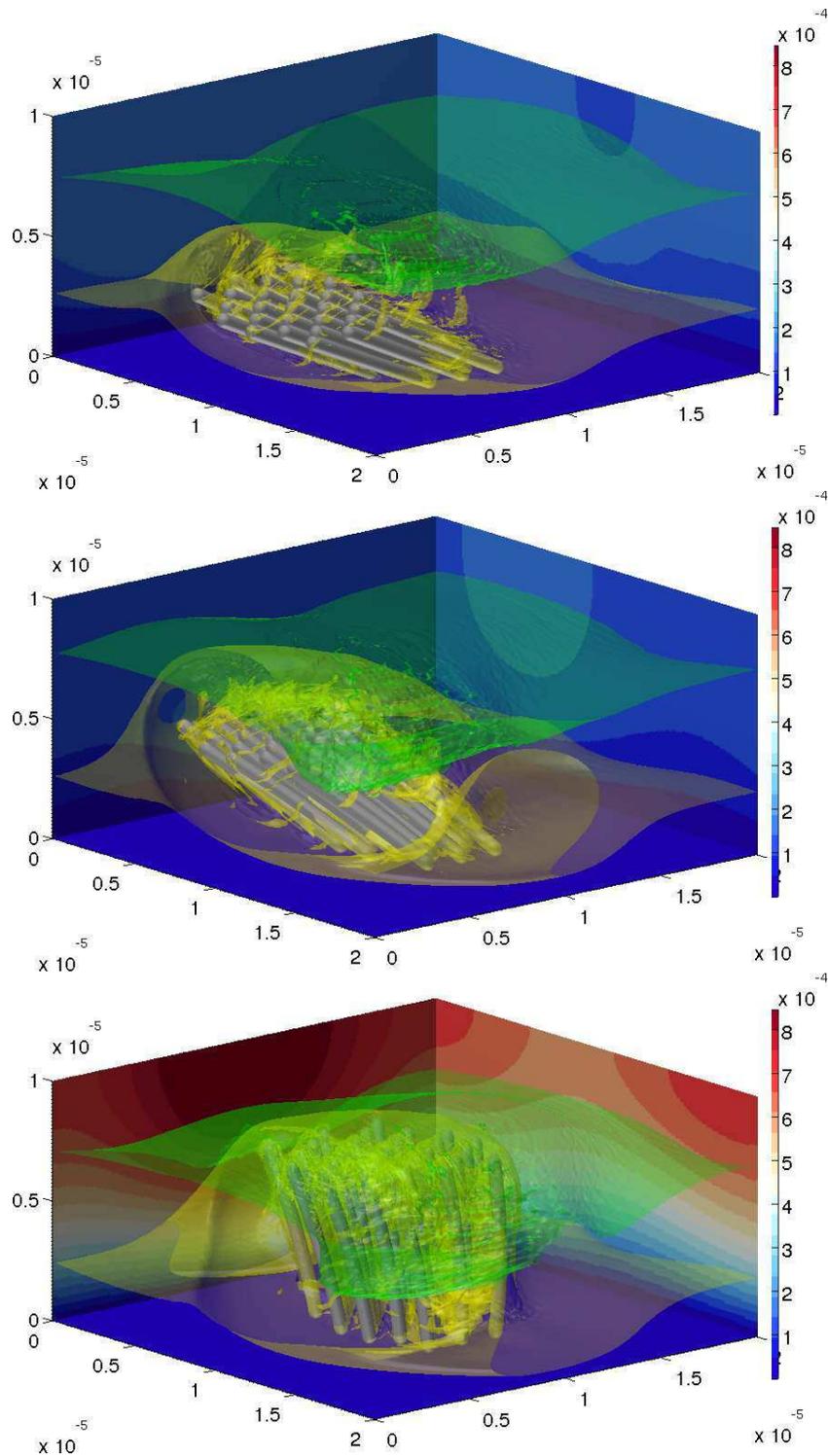


FIGURE 6.12 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'une cellule composée de 16 cils (à $t = 0.233, 0.458$ et 0.585 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

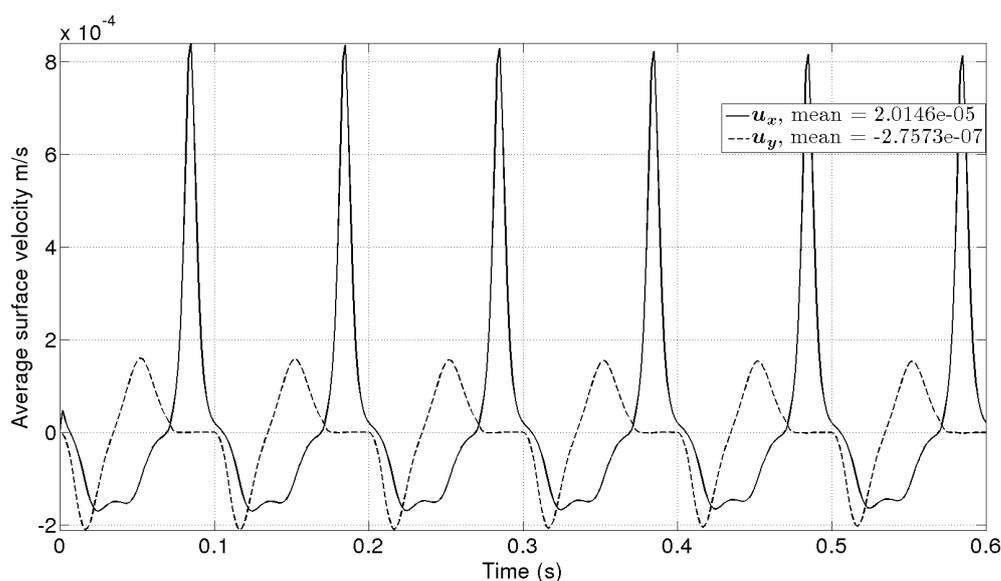


FIGURE 6.13 - Vitesse moyennée sur la surface de la boîte de calcul en fonction du temps, dans les directions x et y . Le résultat de la légende est la moyenne en temps sur la simulation complète.

parle dans ce cas de synchronisation positive et lorsqu'ils sont en retard, on parle d'une synchronisation négative. Par analogie on dira que la synchronisation métrachronale est nulle si tous les cils battent en phase. Dans [Hussong *et al.*, 2011b], l'onde générée par l'enveloppe des cils a été étudiée avec un modèle réduit (2D et équations fluides moyennées). L'origine de cette synchronisation est bio-chimique, déclenchée par des signaux biologiques. Le lecteur intéressé par ces mécanismes bio-chimiques (non modélisés ici) pourra lire [Braiman et Priel, 2008] notamment.

Sur les figures 6.14 et 6.15 plusieurs illustrations de cette simulation présentent ce déphasage. La résolution de la simulation est $512 \times 256 \times 128$ pour la vitesse (doublée pour la viscosité et la fraction massique). Les mêmes quantités que précédemment sont affichées sur ces figures où l'on constate que la vitesse instantanée n'est pas plus importante que dans la simulation à 16 cils.

Sur la figure 6.16, le même diagnostic que précédemment pour quantifier l'efficacité de la clairance mucociliaire est affiché. Bien que la vitesse instantanée ne soit pas plus importante que dans la simulation à 16 cils, la clairance mucociliaire est bien plus efficace dans cet exemple. Grâce au battement asynchrone, le mouvement de poussée (u_x positif) est plus long que lorsque la synchronisation métrachronale est nulle. D'autre part la vitesse est moins importante lorsqu'elle est négative, ce qui nous donne un meilleur résultat en moyenne. Le phénomène de synchronisation métrachronale semble jouer un rôle important dans le modèle et une étude plus poussée sera présentée dans la section suivante.

Cette simulation a permis de présenter un autre mécanisme qui intervient dans la clairance mucociliaire et ajoute de la complexité dans le modèle. Cela illustre le fait que le code de calcul est capable de considérer de nombreux cils vibratiles, et que le nombre de phénomènes impliqués dans cet écoulement est important. Il est

6.2. Transport du mucus pulmonaire par les cils des cellules épithéliales

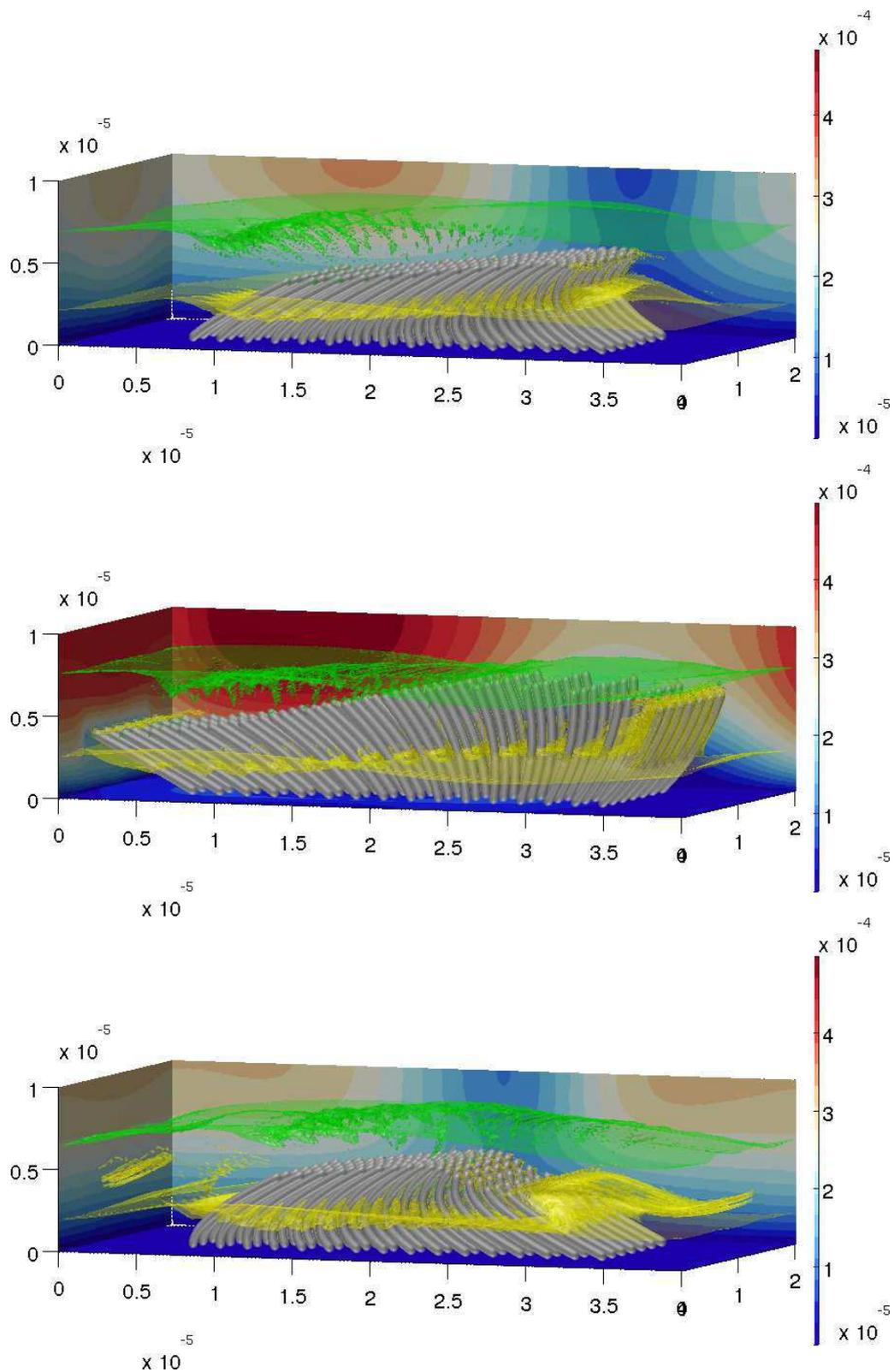


FIGURE 6.14 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'un tapis de 112 cils (à $t = 0.042, 0.084$ et 0.15 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

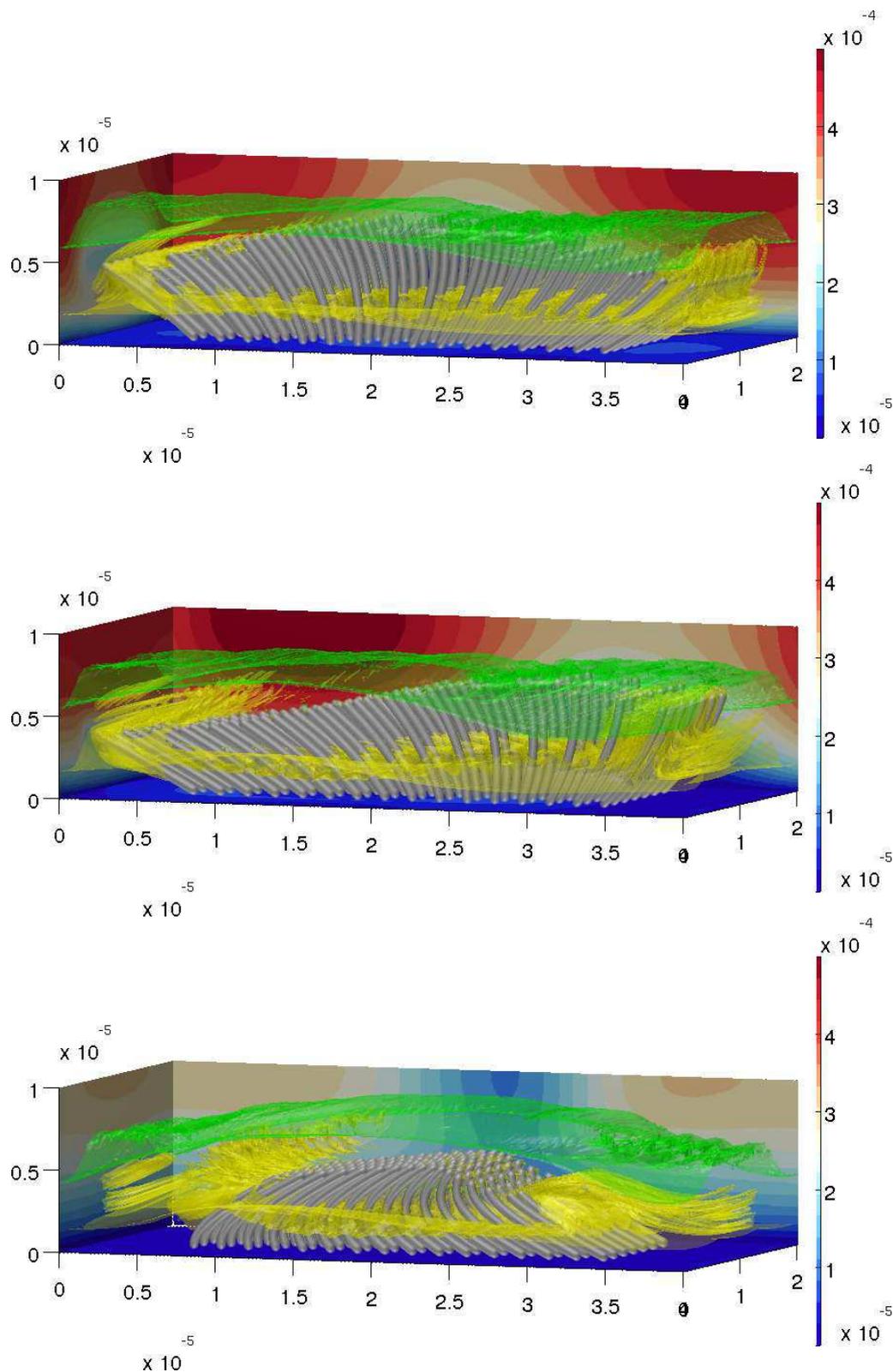


FIGURE 6.15 - Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour d'un tapis de 112 cils (à $t = 0.29, 0.38$ et 0.45 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

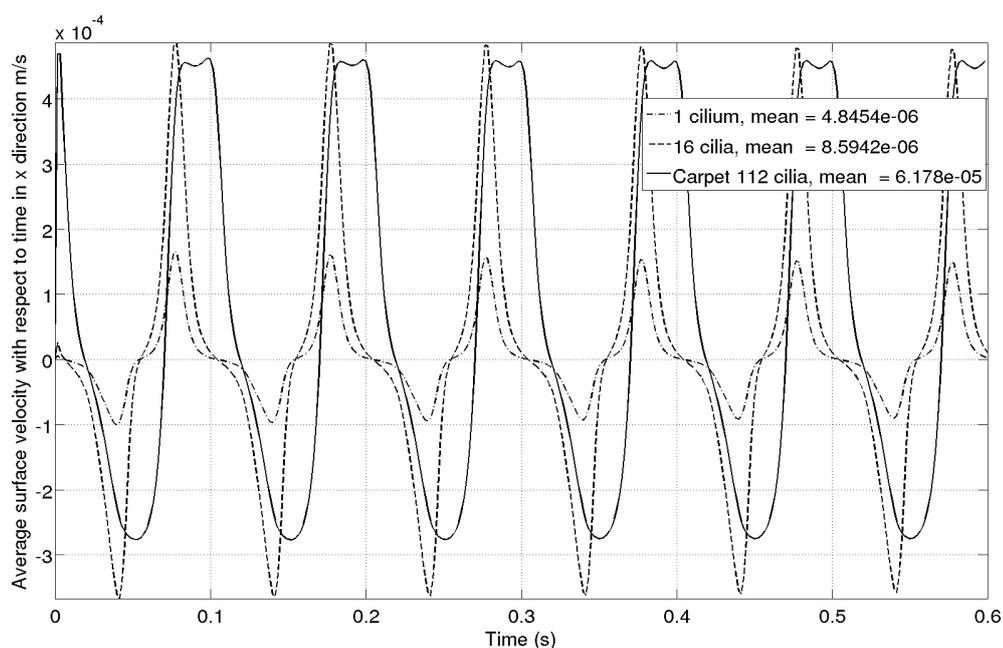


FIGURE 6.16 - Vitesse moyennée sur la surface de la boîte de calcul en fonction du temps, dans les directions x et y . Le résultat de la légende est la moyenne en temps sur la simulation complète.

difficile au premier abord de quantifier l'influence de chacun de ces paramètres et c'est pour cela que l'on introduira dans la suite l'étude paramétrique.

Toujours dans un contexte de synchronisation métachronale une autre simulation est présentée. Il s'agit de la simulation qui a servi à illustrer les performances de l'algorithme SMW-GMRES sur un problème de Stokes réaliste, au chapitre 4. Pour cette simulation quatre cellules sont utilisées, chaque cellule est organisée en quinconce, de la même manière que dans la section 6.2.6, avec 19 cils par cellule ; 76 cils sont donc utilisés pour cette simulation. Tous les cils d'une même cellule ont un battement coordonné, mais un déphasage est introduit entre les cellules. Les dimensions de la boîte de calcul sont $40 \times 40 \times 10 \mu\text{m}^3$. Deux cellules sont centrées en $(10, 10, 0)$ (en μm) et $(30, 30, 0)$ et ont un mouvement en phase, avec les mêmes notations que précédemment $\tau = 0$. Une cellule est centrée en $(30, 10, 0)$ bat avec une avance de phase $\tau = 0.25T_b s$ (avec T_b la période de battement) et la dernière est centrée en $(10, 30, 0)$ et a un retard $\tau = -0.25T_b s$. Le profil de viscosité stratifié est toujours utilisé. Ici la fréquence de battement est $f_b = 4\text{Hz}$.

Sur la figure 6.17, plusieurs images présentent cette simulation avec toujours les mêmes codes de couleur (norme de vitesse et isosurfaces). Cette simulation est plus compliquée que les précédentes, il y a plus de paramètres qui entrent en jeu : distance entre cellules, géométrie de chaque cellule (comme cela a été souligné dans la section 6.2.6), choix des déphasages, ... en plus des paramètres communs aux simulations précédentes : profil de viscosité, taille du domaine (épaisseur du film notamment), fréquence de battement...

Cette simulation est une bonne illustration des degrés de complexité que l'on

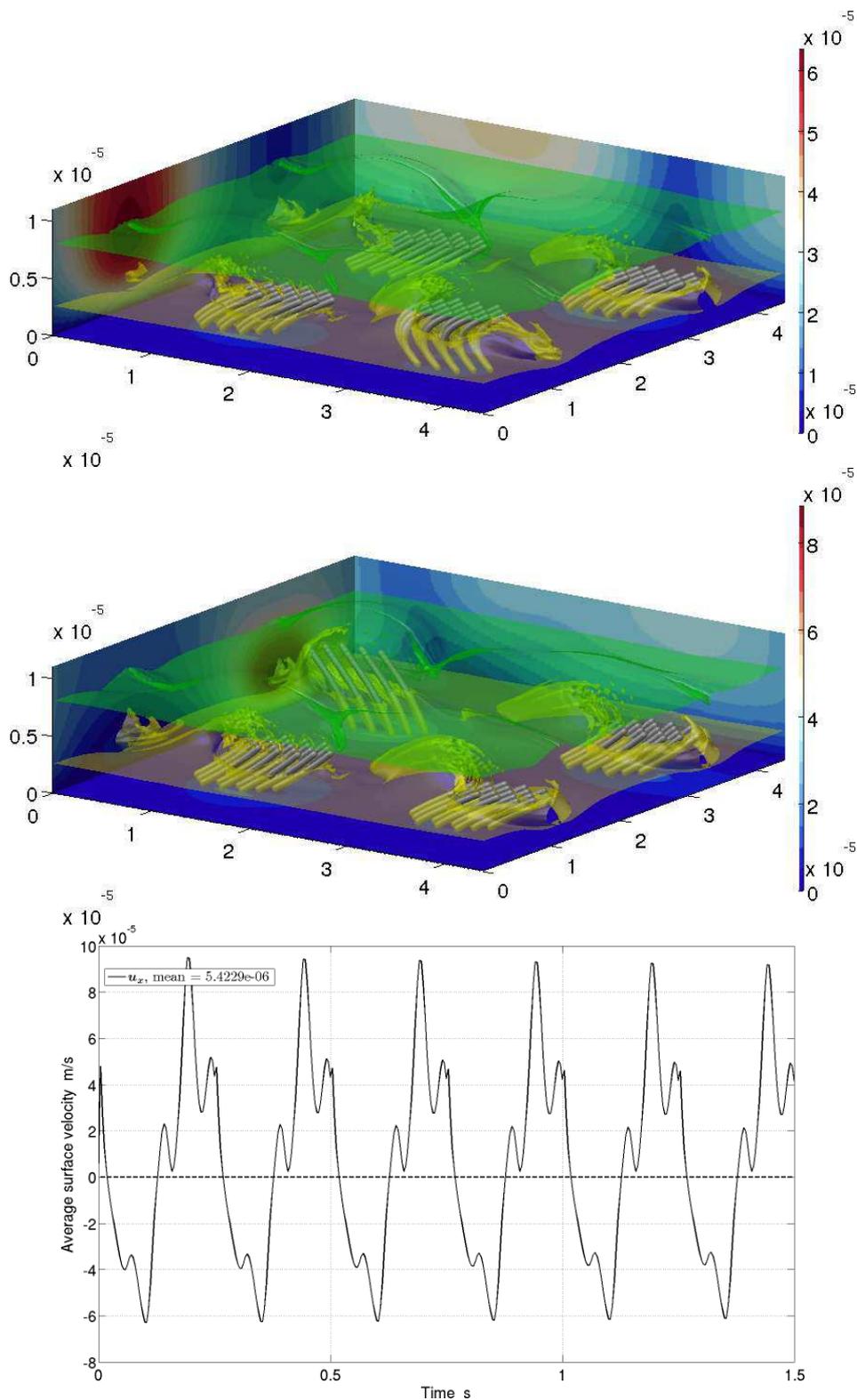


FIGURE 6.17 - (Haut) Vues à différents instants de la simulation de l'écoulement d'un film de mucus initialement stratifié autour des quatre cellules en quinconce, composées de 19 cils chacune. (à $t = 0.792$ et 0.98 s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau $1.25 \times 10^{-3} \text{Pa s}$ et en vert une isosurface de viscosité de niveau $1.75 \times 10^{-3} \text{Pa s}$. (Bas) Vitesse moyenne instantanée à la surface du film et moyennée en temps dans la légende.

peut mettre dans un modèle et que l'on est capable de simuler numériquement. Dans ce cas, le comportement de la vitesse moyenne à la surface du film, et donc le résultat d'efficacité de la clairance mucociliaire (présentés sur la figure 6.17), est difficile à interpréter, notamment l'explication du comportement de la vitesse moyenne à la surface qui présente plusieurs extrema locaux. La réponse à la question : "quel paramètre est responsable d'un tel comportement ?" serait alors hasardeuse.

C'est pourquoi il est important d'augmenter doucement la complexité d'un modèle en essayant d'étudier systématiquement l'influence de chaque paramètre sur l'écoulement. Cela nécessite de nombreuses simulations pour tester suffisamment de valeurs pour chaque paramètre ce qui est possible avec les bonnes performances séquentielles du code de calcul.

6.2.7 Influence des paramètres biologiques

L'écoulement du film de mucus autour de la cellule épithéliale est régi par différents paramètres : loi de viscosité, épaisseur du film, nombre de cils dans une cellule, fréquence de battement... l'enjeu de la partie modélisation et simulation numérique du projet BioFiReaDy est la caractérisation du (des) paramètre(s) qui influence(nt) le plus l'écoulement. Ce problème peut être reformulé d'une autre manière : avec quel jeu de paramètres la clairance mucociliaire est-elle maximale (ou au contraire pathologique) ? Compte tenu des difficultés de mesure et des marges d'erreur correspondantes, il est difficile de répondre à cette question expérimentalement et la simulation numérique est un outil de diagnostic complémentaire.

Comme cela a été présenté dans la section précédente, l'efficacité de la clairance mucociliaire est quantifiée à partir de la vitesse tangentielle à la surface de la boîte de calcul moyennée en temps et en espace. Une étude systématique de chaque paramètre intervenant dans le modèle est possible : pour cela, il "suffit" de faire une simulation pour chaque valeur du paramètre à tester. Cela implique plusieurs dizaines de simulations si on veut tester chaque paramètre avec suffisamment de valeurs. Comme cela a été présenté dans le chapitre 3, les performances séquentielles de l'algorithme sont très bonnes. Il est ainsi possible de lancer n simulations sur n processeurs différents, chaque calcul étant fait avec un jeu de paramètres indépendant.

L'implémentation de cet usage massivement parallèle d'un code séquentiel ne pose pas de problèmes spéciaux en utilisant des bibliothèques de calcul parallèle à mémoire partagée comme MPI. La principale difficulté en utilisant cette librairie est de gérer les communications entre les processeurs, en étant particulièrement attentif pour ne pas les saturer. Dans notre cas, il n'y pas de problèmes de communication : pour chaque simulation, chaque processeur travaille avec sa propre structure de donnée sans s'occuper des autres. La réalisation de n simulations indépendantes sur n processeurs n'est donc pas plus longue qu'une simulation séquentielle isolée. Ces simulations ont été faites sur le cluster de calcul toulousain HYPERION.

Pour la plupart des simulations présentées ici, nous utiliserons les valeurs de paramètres par défaut rassemblées dans la table 6.1 ainsi qu'un profil de viscosité stratifié deux fois plus visqueux en haut de la boîte de calcul, voir équation (6.6). La cellule épithéliale qui nous servira de référence est la cellule à 16 cils organisés de manière régulière (voir paragraphe précédent). Le calcul sera fait sur trois périodes de battement.

Profil de viscosité linéaire à un paramètre

Dans ce paragraphe on reprend le profil linéaire initial de viscosité, mais on fait varier la viscosité maximale à la surface du film. Cette situation modélise un mucus plus déshydraté à la surface comme cela est observable cliniquement pour des pathologies comme la mucoviscidose ou les bronchites chroniques. Le profil de viscosité initial est donné par la formule suivante :

$$\mu_0(x, y, z) = \Phi(\alpha_0(z)) = \mu_{eau}(1 + \alpha_0(z)) = \mu_{eau}\left(1 + \beta \frac{z}{L_z}\right) \quad (6.8)$$

C'est ce paramètre β qui sera testé avec des valeurs comprises entre 0.01 (une viscosité quasiment constante) et 500. Les résultats de ces simulations sont présentés sur la figure 6.18. Lorsque la viscosité augmente à la surface du film, la mobilité est réduite (jusqu'à 35% environ lorsque la surface est 500 fois plus visqueuse). Le résultat le meilleur est trouvé lorsque la viscosité est quasiment constante, plus ce paramètre augmente plus la clairance mucociliaire est dégradée.

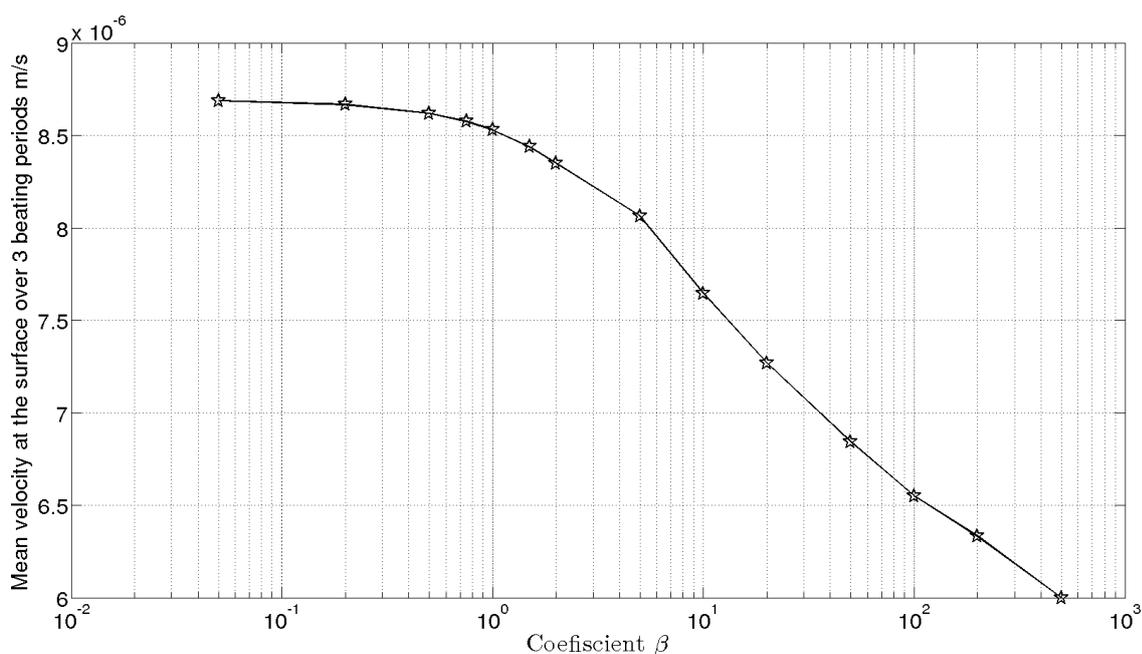


FIGURE 6.18 - Influence de la variation du paramètre β de l'équation (6.8) sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

Ce modèle de distribution initial de la viscosité donne un premier résultat compatible avec les observations médicales : la clairance mucociliaire est moins efficace lorsque la viscosité augmente ; cela a été observé cliniquement pour des pathologies comme la mucoviscidose. Mais ce modèle est trop simple, en particulier on peut se demander si cette diminution est due à l'augmentation de la viscosité maximale à la surface ou à l'augmentation du gradient de viscosité. De plus ce modèle ne permet pas de se rapprocher d'un modèle à deux fluides (fluide périciliaire et mucus). Pour cela un autre profil de viscosité est introduit.

Profil de viscosité logistique à trois paramètres

Le second profil auquel on s'intéresse dans cette partie est un profil appelé "logistique" qui permet de faire une transition continue, plus ou moins raide entre deux valeurs. Ce profil est donné par la formule suivante :

$$\mu_0(x, y, z) = \mu_{eau} \alpha_0(z) = \mu_{eau} \left(1 + \frac{\beta}{1 + \exp(-\gamma(z/L_z - \hat{d}))} \right) \quad (6.9)$$

Trois paramètres vont être étudiés dans ce profil. Le premier paramètre β joue le même rôle que dans le cas linéaire : il contrôle la valeur maximale de viscosité dans la boîte de calcul qui est égale à $\mu_{eau}(\beta + 1)$. Ce profil permet de modéliser, en fonction de la hauteur dans le film, la transition entre cette valeur maximale et la valeur minimale μ_{eau} . Cette transition se fait autour d'une hauteur normalisée \hat{d} et le paramètre γ règle la raideur de la transition. Sur la figure 6.19, ce profil a été tracé avec $\beta = 1$ et $\hat{d} = 0.65$ pour différentes valeurs de γ .

Lorsque γ est suffisamment grand, ce profil modélise bien de manière continue une brusque variation de viscosité entre les parties inférieures et supérieures du film de mucus. Comme cela a été dit en introduction de ce chapitre, le film de mucus peut être considéré comme étant composé de deux fluides : le fluide périciliaire et un mucus plus visqueux au dessus. Ces deux fluides étant essentiellement composés d'eau l'interface entre les deux phases est difficile à déterminer. Ce profil de viscosité est une bonne alternative à l'utilisation de ces modèles : il suppose que l'interface est localisée autour de la hauteur (normalisée) $z = \hat{d}$, γ règle la largeur de cette interface et β la valeur du saut. Un autre avantage de ce modèle est que le champ de viscosité résultant est continu ce qui évite de traiter des termes trop singuliers dans le second membre de l'équation de Stokes.

Un seul paramètre varie dans chaque série de simulations. Les valeurs choisies par défauts sont $\beta = 1$, $\gamma = 10$ et $\hat{d} = 0.65$.

Sur la figure 6.20, on s'intéresse à l'influence du paramètre γ : un champ de viscosité avec une transition de plus en plus raide (entre les valeurs μ_{eau} et $\mu_{eau}(\beta + 1)$) est ainsi testé.

Pour de faibles valeurs de ce paramètre, la longueur de la zone de transition recouvre tout le domaine et le profil initial est assez proche du profil linéaire (avec

néanmoins une légère différence entre les valeurs minimales et maximales). Les résultat d'efficacité de la clairance mucociliaire sont similaires dans ce cas.

Lorsque la transition est plus brutale (ce qui correspond à une augmentation de γ), la clairance mucociliaire devient plus efficace avec des valeurs maximales pour des transitions très raides : à partir de $\gamma = 50$. Si l'on continue à augmenter la valeur de ce paramètre la clairance n'est plus augmentée, la courbe se stabilise sur une sorte de plateau.

Enfin on notera que la différence entre ces valeurs minimales et maximales est de 8%, ce qui est beaucoup moins important que dans le paragraphe précédent. Ce résultat n'est pas négligeable, mais il laisse penser que ce paramètre seul n'est pas l'un des plus influent sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

Sur la figure 6.21 on s'intéresse à l'influence du paramètre \hat{d} : la hauteur de la transition entre le fluide périciliaire et le mucus. Ce paramètre est normalisé par rapport à la hauteur totale du film, ici $10\mu\text{m}$.

Sur cette figure on constate que la clairance mucociliaire est maximale lorsque l'interface est localisée à une hauteur de $7.5\mu\text{m}$. Cette hauteur est légèrement supérieure à la longueur de cil utilisée ($7\mu\text{m}$). Ce résultat suggère donc que la transition doit être localisée juste au dessus de la pointe des cils en position tendue. Ce résultat est en accord avec les travaux de [Fulford et Blake, 1986] qui ont montré que les cils n'avaient pas besoin de pénétrer la couche supérieure de mucus pour maximiser la clairance mucociliaire, dans [Liron et Rozenson, 1983] le contraire

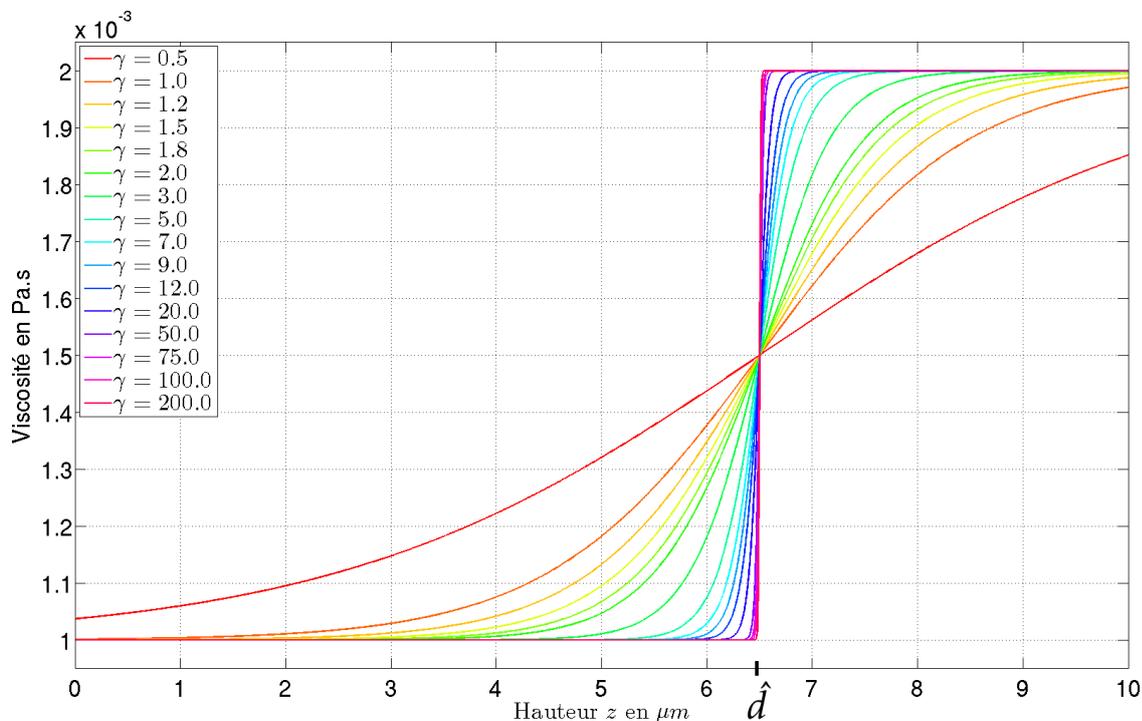


FIGURE 6.19 - Profil logistique de viscosité initial en fonction de la hauteur dans le film z, différentes valeurs du paramètre γ sont présentées. $\beta = 1$ et $\hat{d} = 0.65$ sont fixés.

6.2. Transport du mucus pulmonaire par les cils des cellules épithéliales

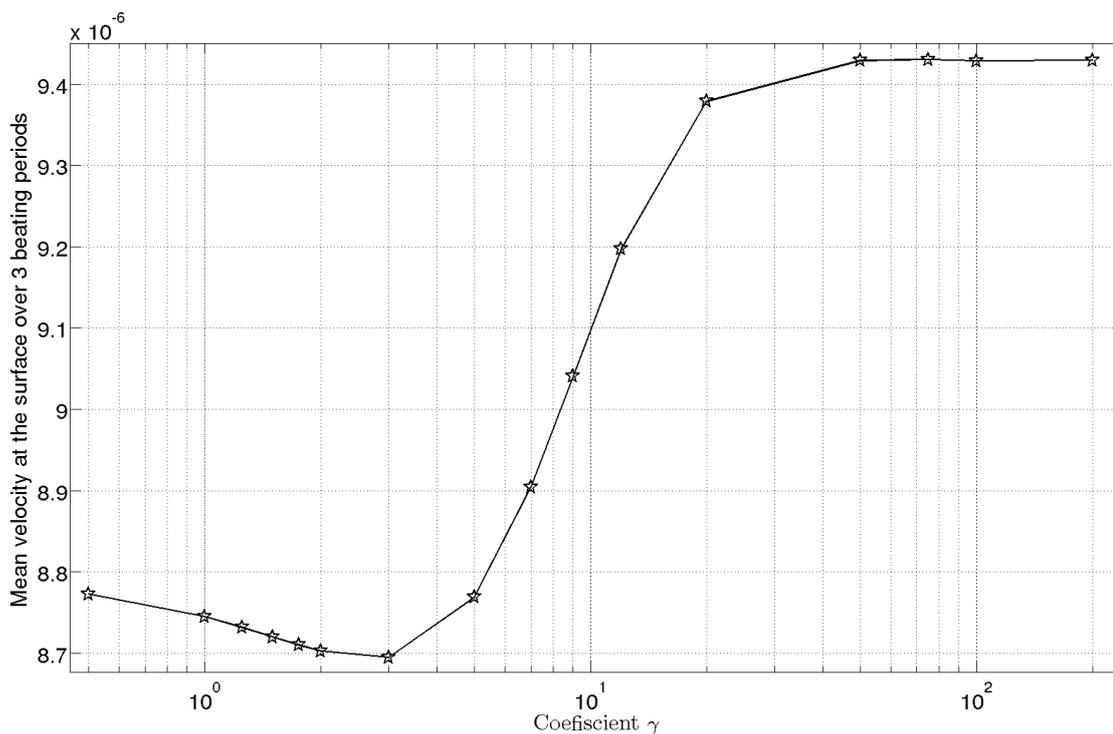


FIGURE 6.20 - Profil initial de viscosité logistique : influence de la variation du paramètre γ sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

avait été montré mais le modèle était très simplifié : la géométrie ciliaire n'était pas considérée. Enfin il faut noter qu'il y a environ 13% d'écart entre les minimums

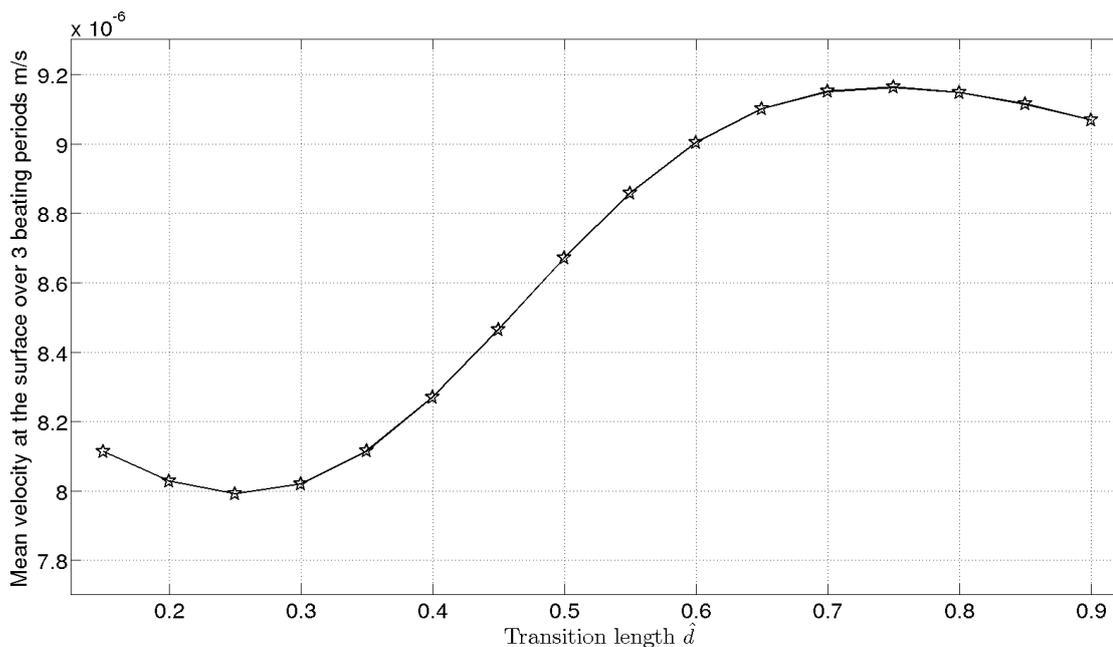


FIGURE 6.21 - Profil initial de viscosité logistique : influence de la variation du paramètre \hat{d} sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

et maximums de cette courbe. Là encore ce résultat n'est pas négligeable. Il reste néanmoins bien inférieur à ce qui a été trouvé dans la section précédente.

Le comportement des deux premiers points peut s'expliquer par le fait que, quand la transition se fait trop bas, les cils ne voient pas vraiment de différence avec un mucus constant.

Enfin sur la figure 6.22 on étudie l'influence du paramètre β , qui, comme dans le cas du profil linéaire, fait varier la viscosité de la phase mucus à la surface du film. La viscosité de la phase inférieure est toujours égale à la viscosité de l'eau.

On constate sur cette figure que le comportement est assez semblable à ce qui a été observé dans le cas linéaire : une diminution de la mobilité du film lorsque la viscosité de la phase mucus augmente. Néanmoins, pour des valeurs faibles (entre 0.05 et 10) il y a une augmentation de l'efficacité de la clairance qui n'avait pas été observée avec le profil linéaire. Cette augmentation semble venir de la raideur de la transition de viscosité entre le fluide périciliaire et le mucus, pour une faible valeur du paramètre γ (un profil proche du linéaire, voir figure 6.19), on retrouve une courbe semblable à la figure 6.18. Le paramètre β reste ici encore le plus influent des paramètres du profil de viscosité sur l'efficacité de la clairance mucociliaire. Mais il semble qu'un équilibre intéressant peut être trouvé avec le paramètre γ .

Des simulations plus intensives étudiant l'influence de ces deux paramètres

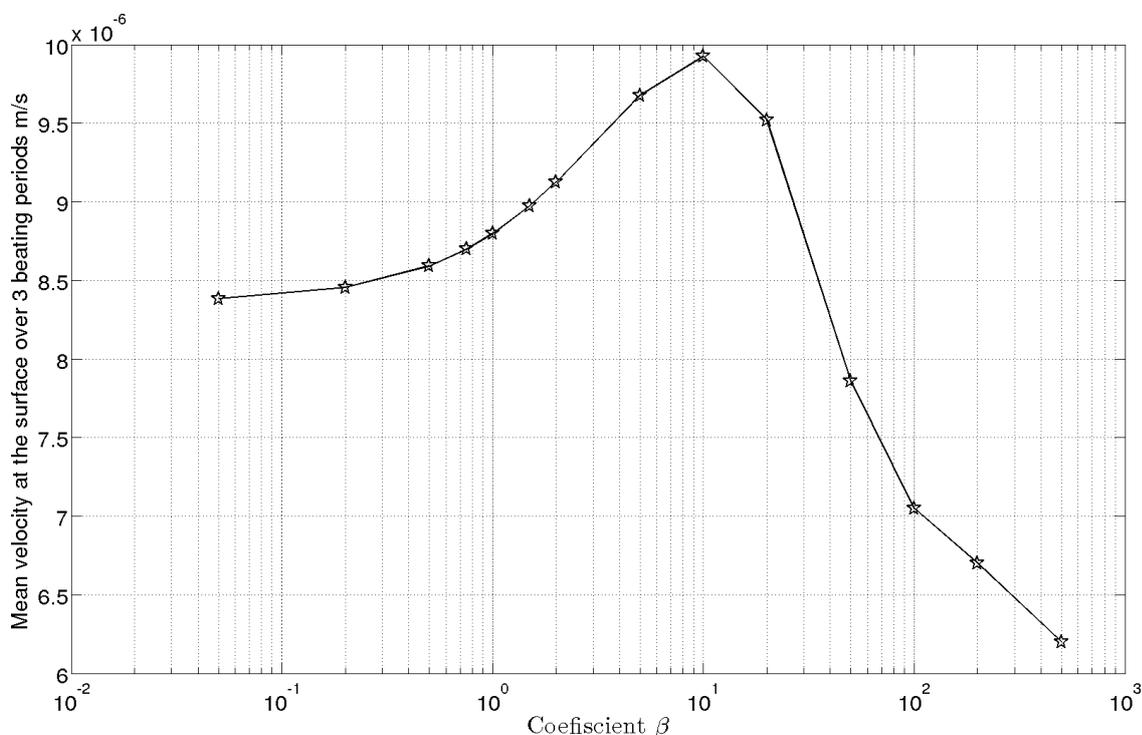


FIGURE 6.22 - Profil initial de viscosité logistique : influence de la variation du paramètre β sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

(β et γ) en même temps mériteraient d'être faites. Cela permettrait de quantifier l'augmentation d'efficacité de la clairance mucociliaire décrite précédemment et qui n'avait pas été identifiée pour le profil linéaire. Il faudrait donc tester par exemple seize valeurs pour chaque paramètre, ce qui induit 256 simulations. Techniquement, le code de calcul est tout à fait capable de le faire, cela nécessite simplement d'avoir 256 processeurs disponibles. Ces études seront faites dans le cadre du développement de la plate-forme intégrative.

Fréquence de battement

Dans ce paragraphe on s'intéresse à la variation de la fréquence de battement des cils. Il a été observé expérimentalement que cette fréquence varie de 4 à 20 Hz [Thiriet, 2012] et cette gamme de fréquences a été étudiée numériquement. Les résultats sont présentés sur la figure 6.23.

Sur cette figure, il apparaît que la vitesse moyennée en temps à la surface du film dépend linéairement de la fréquence de battement. Si la fréquence de battement est multipliée par deux, le temps caractéristique est alors divisé par deux, ce qui finalement multiplie la vitesse caractéristique par le même facteur. Ce résultat est rassurant puisqu'il est compatible avec d'autres études de la littérature [Braiman et Priel, 2008; Jayathilake *et al.*, 2012].

Épaisseur du film de mucus

Lors de maladies comme les bronchites chroniques, des sécrétions viennent augmenter la hauteur du film pour maximiser la protection des bronches déjà

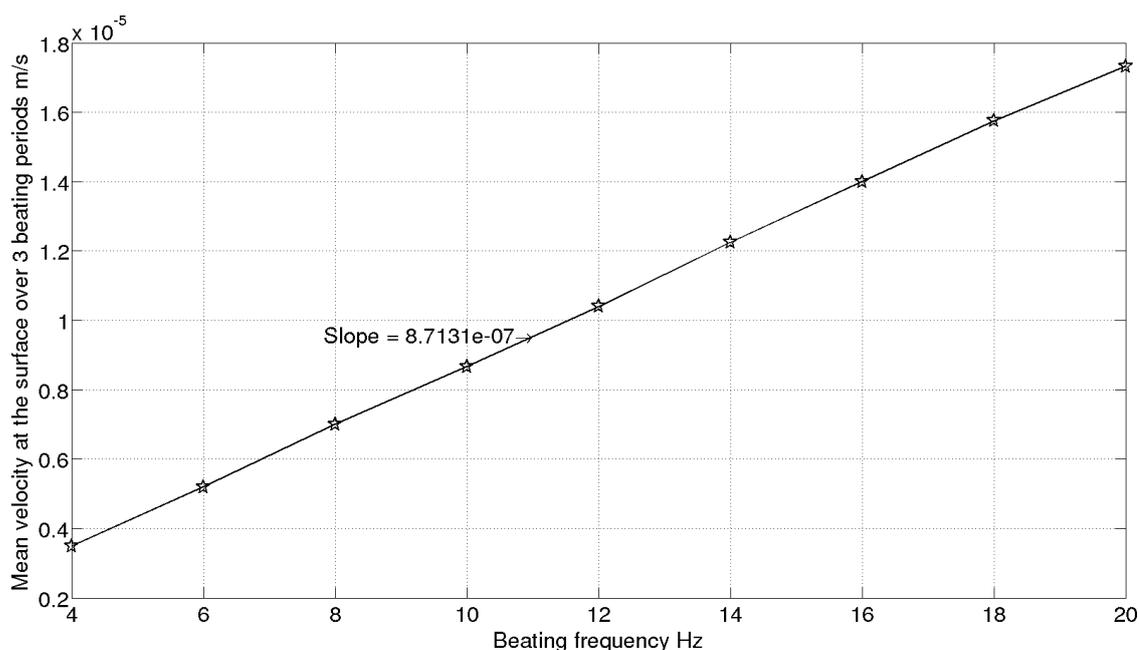


FIGURE 6.23 - Influence de la variation de la fréquence de battement sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

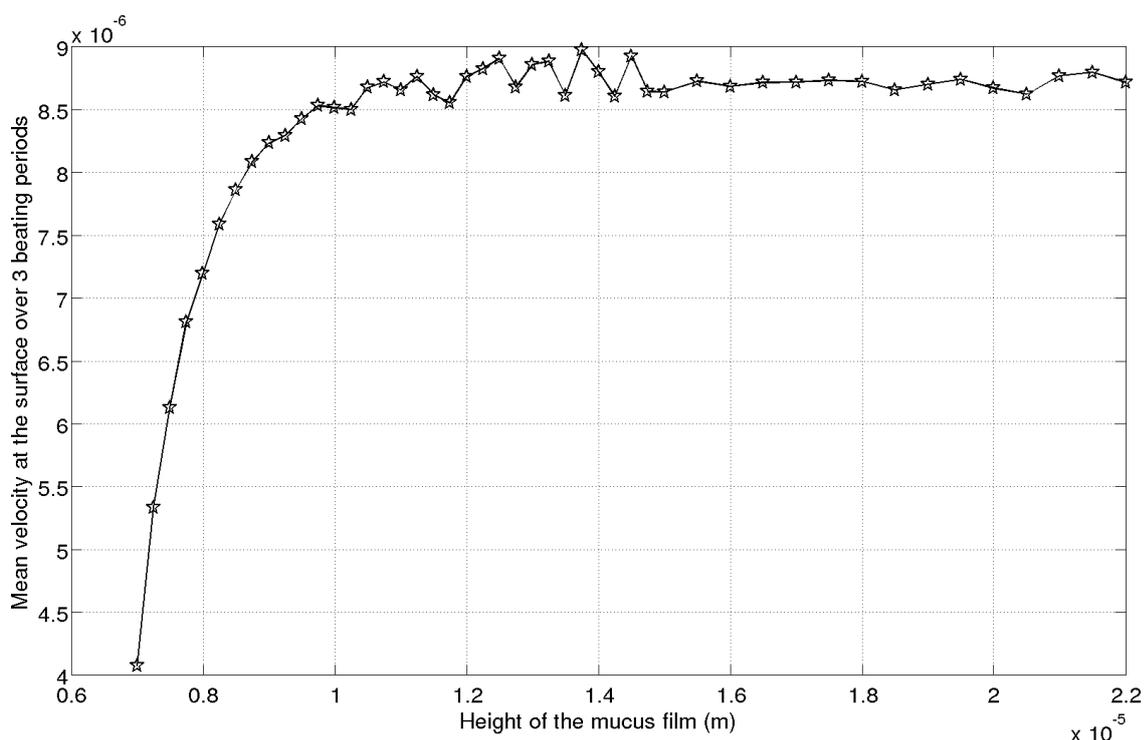


FIGURE 6.24 - Influence de la variation de hauteur du film de mucus sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

fragilisées. Au contraire, des phénomènes d'amincissement du film peuvent se produire et être dangereux car les parois bronchiques sont plus exposées aux pathogènes. La conséquence directe de ces phénomènes est une variation de l'épaisseur du film de mucus et nous allons étudier son influence sur la clairance mucociliaire. Les simulations ont été faites pour différentes hauteurs de la boîte de calcul et le résultat est affiché sur la figure 6.24.

Sur cette figure on constate que, avec une faible hauteur de mucus correspondant à la longueur des cils, la clairance mucociliaire est faible par rapport aux valeurs qui ont été trouvées précédemment. Dès que cette hauteur augmente, la clairance augmente également jusqu'à se stabiliser sur un plateau à environ $8.75 \mu\text{m/s}$. Avec une faible épaisseur de film, la clairance est plus de deux fois (2.25 exactement) moins efficace. Lorsque des phénomènes d'accumulation sont observés la variation d'efficacité de la clairance, par rapport aux valeurs trouvées dans les paragraphes précédents, n'est pas significative. Compte tenu du fait que l'épaisseur du film augmente, il y a une augmentation du débit de mucus. La clairance mucociliaire devient donc plus efficace en terme de volume de mucus évacué, même si la vitesse reste constante.

Il faut noter que dans cet exemple, le profil initial de viscosité est donné par la loi linéaire (6.6) qui dépend de la hauteur. Lorsqu'elle augmente et qu'il y a des phénomènes d'accumulation, on s'attend à ce que la viscosité de la surface augmente également.

Une étude couplée des paramètres β et L_z , plus poussée que ce qui a été

présenté, viendrait compléter cette simulation, c'est-à-dire, comme pour le profil logistique (avec une étude couplée des paramètres β et γ), refaire la simulation pour, par exemple, 16 valeurs de β et 32 valeurs de L_z , soit 512 simulations. Ces simulations seront faites dans le cadre du développement de la plate-forme intégrative qui a déjà été évoquée dans ce manuscrit et dont on reparlera en conclusion.

Diffusion de la fraction massique

Comme cela a été présenté dans le chapitre 2, le terme de diffusion n'est pas dominant dans l'équation de convection-diffusion de la fraction massique. Ce terme a été ajusté de manière empirique, pour obtenir une régularisation suffisante (mais pas trop grande) des solutions de l'équation, les données expérimentales in-vivo de ce paramètre n'étant pas accessibles. Il reste néanmoins intéressant de connaître l'influence de ce paramètre sur les résultats de déplacement du film et une autre étude a été faite dans ce sens. Les résultats sont présentés sur la figure 6.25.

Avec ces valeurs du paramètre η , la condition de stabilité associée à la discrétisation différence finie de l'équation de la chaleur reste inférieure au seuil critique ($\frac{1}{6}$ en 3D) et les calculs explicites sont stables ; il n'est pas nécessaire de mettre en place une méthode de résolution implicite.

Cette courbe montre que la diffusion de la fraction massique n'a qu'une influence très limitée sur la clairance mucociliaire : moins de 1% de différence entre les valeurs minimales et maximales utilisées. Ce paramètre peut donc jouer

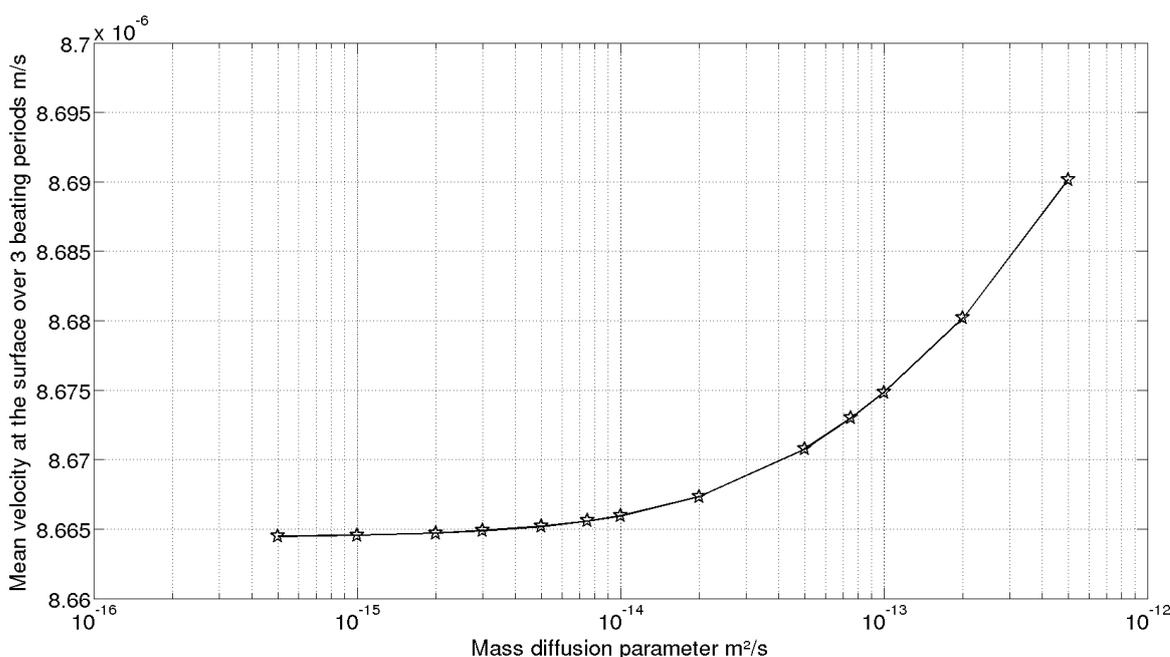


FIGURE 6.25 - Influence de la variation de la diffusion massique sur l'efficacité de la clairance mucociliaire.

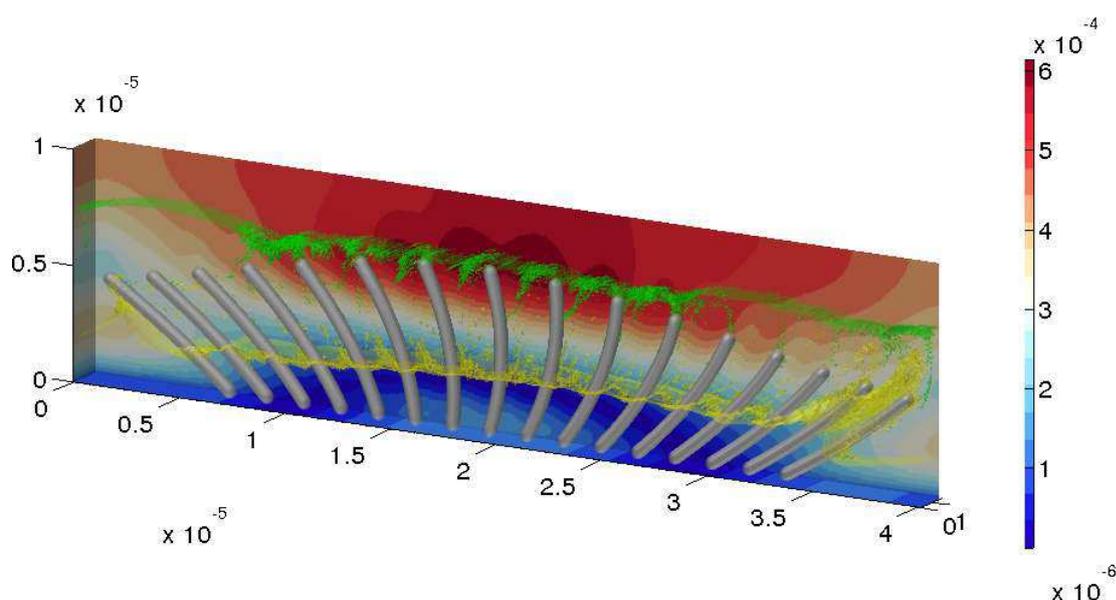


FIGURE 6.26 - Illustration de l'une des simulations faites pour étudier l'influence de la synchronisation métachronale sur la clairance mucociliaire. Ici $\tau = 0.0175s$. Les isosurfaces ont les mêmes valeurs que précédemment.

sereinement son rôle régularisant, sans perturber les résultats.

Synchronisation métachronale

Dans cette section, on étudie l'influence de la synchronisation métachronale, un phénomène qui a déjà été décrit dans la section 6.2.6. Pour cette simulation, une seule rangée de seize cils est utilisée et les dimensions de la boîte de calculs sont $40 \times 1.75 \times 10 \mu\text{m}^3$, les conditions aux limites ne sont pas modifiées, tout comme le reste des paramètres. Ici, on fait varier la synchronisation métachronale, cela signifie qu'au temps t , le premier cil (le plus à gauche, le plus éloigné de la trachée) a le même battement que précédemment. Le second cil (voisin du premier) a un battement déphasé de τT_b , il est dans l'état dans lequel sera le premier cil au temps $t + \tau T_b$. Si τ est positif le cil le plus proche de la trachée est en avance par rapport aux autres. Une illustration de cette simulation pour $\tau = 0.0175T_b$ s est présentée sur la figure 6.26.

Sur la figure 6.27 l'évolution de la clairance mucociliaire en fonction du paramètre de déphasage τ est présentée. Lorsque la synchronisation est quasiment nulle (τ voisin de 0), la clairance mucociliaire est minimale. Plus ce paramètre devient négatif, plus la clairance est améliorée jusqu'à atteindre un plateau avec une efficacité multipliée par 20. Si la synchronisation devient positive, on constate également une augmentation de l'efficacité de la clairance qui continue à croître : on a par exemple un facteur 35 pour $\tau = 0.02s$. Les résultats pour des valeurs de $\tau > 0.02s$ ne sont pas présentés, car avec ces valeurs, des collisions entre les cils sont observées et elles ne sont pas proprement gérées dans l'algorithme de résolution.

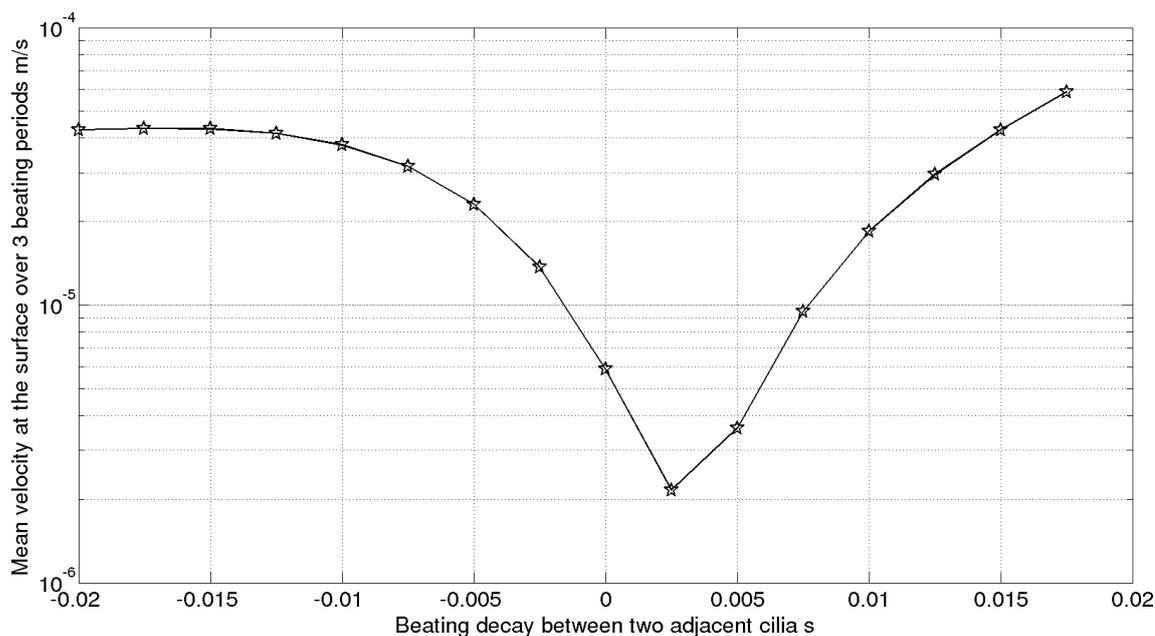


FIGURE 6.27 - Influence de la variation de la synchronisation métachronale sur la clairance mucociliaire. L'axe des abscisses représente le temps de déphasage entre deux cils adjacents.

D'après ces résultats, la synchronisation métachronale semble également être un paramètre très important dans l'efficacité de la clairance mucociliaire.

Conclusion sur l'influence des différents paramètres

Grâce aux bonnes performances séquentielles du code de calcul, basé sur les méthodes numériques décrites dans les premiers chapitres de ce manuscrit, il est possible de faire une étude séparée de l'influence de chaque paramètre du modèle. Pour cela, n simulations sont lancées avec n valeurs différentes d'un paramètre sur un cluster de calcul, ce qui permet de discuter de l'efficacité de la clairance mucociliaire.

Parmi les paramètres testés, la viscosité maximale à la surface du film, semble être un paramètre qui influence beaucoup l'écoulement. Avec les deux profils de viscosité testés, la clairance mucociliaire est rapidement dégradée lorsque ce paramètre augmente. Néanmoins, avec le profil logistique, il a été observé que le paramètre qui contrôle la raideur de la transition peut améliorer les résultats lorsque la viscosité maximale est modérée ; bien que son influence semble moins significative. Des simulations étudiant ces deux paramètres à la fois mériteront d'être effectuées.

Un second paramètre influent a été identifié : l'épaisseur du film de mucus. Les simulations ont montré que lorsque la hauteur est trop faible, la mobilité du film est altérée. L'efficacité de la clairance mucociliaire augmente avec l'épaisseur, jusqu'à se stabiliser sur un plateau à partir d'une douzaine de micromètres. Cela signifie que le débit de mucus augmente avec l'épaisseur, le battement des cils

semble donc capable de surmonter des situations d'accumulation. Cependant, lorsque de telles accumulations sont constatées cliniquement, elles s'accompagnent souvent d'une augmentation de la viscosité et là encore une étude conjointe des deux paramètres méritera d'être réalisée.

Un troisième paramètre joue un rôle très important, d'après les simulations effectuées dans ce chapitre, est la synchronisation métachronale. Si les cils d'une même cellule ne battent pas en phase la clairance mucociliaire est améliorée.

Enfin, il a été montré que la clairance mucociliaire varie linéairement par rapport à la fréquence de battement des cils. Le coefficient de diffusion de la fraction massique ne semble pas jouer un rôle crucial sur la mobilité du film, tout en apportant une régularisation du champ de viscosité.

Cette étude préliminaire de l'influence des paramètres du modèle permet d'orienter les simulations futures de plus grandes envergures. Elles seront effectuées dans le cadre du développement de la plate-forme intégrative dont on reparlera en conclusion. D'un point de vue technique il n'y aura pas de grande différence entre les simulations pour une quinzaine de valeurs d'un paramètre ou des simulations impliquant plusieurs dizaines de valeurs de plusieurs paramètres. La seule difficulté étant de disposer de capacités de calcul suffisantes.

6.3 EXEMPLE D'UN MICRO-NAGEUR : LE SPERMATOZOÏDE

6.3.1 Contexte et position du problème

Une seconde application numérique aux fluides biologiques est présentée. Il s'agit du calcul d'un écoulement autour d'un micro-nageur. On appelle micro-nageur tout organisme vivant ou appareil manufacturé autopropulsé dont la taille est de l'ordre du micromètre.

A cette échelle, la dynamique d'un fluide comme l'eau n'est plus gouvernée par les équations de Navier-Stokes, mais par les équations de Stokes qui sont réversibles en temps. Un nageur de cette dimension doit donc développer une stratégie non réversible pour avancer. C'est la conséquence du théorème de la coquille Saint-Jacques introduit par Purcell [Purcell, 1977] qui a été énoncé et commenté en introduction.

De nombreux micro-organismes ont été étudiés dans la littérature, de manière expérimentale, théorique et numérique ; les plus étudiés sont probablement la bactérie *Escherichia Coli* qui constitue, à elle seule, 80% de la flore intestinale et le spermatozoïde. La principale ressemblance entre *Escherichia Coli* et le spermatozoïde est leur mode de déplacement : ces deux micro-organismes utilisent des flagelles (plusieurs pour *Escherichia Coli*, un seul pour le spermatozoïde) pour se déplacer. C'est le cas de plusieurs micro-organismes, certains étant même complètement recouverts de cils qui leur permettent de nager. Enfin, d'autres micro-organismes n'utilisent pas de flagelle et déforment directement leur corps pour avancer - voir figure 6.28. Une revue récente, des travaux de différents auteurs de la littérature a été publiée par Lauga et ses collaborateurs [Lauga et

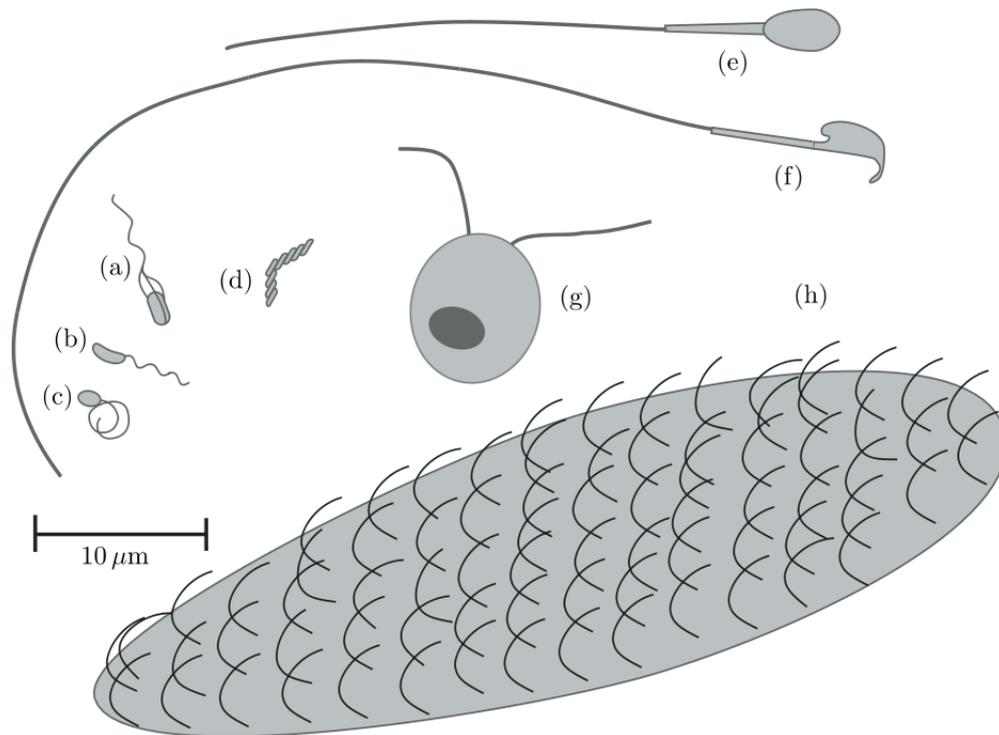


FIGURE 6.28 - Différentes vues schématiques de micro-organismes de différentes échelles (a) *E. coli*. (b) *C. crescentus*. (c) *R. sphaeroides* (d) *Spiroplasma* (e) Spermatozoïde humain (f) Spermatozoïde de souris. (g) *Chlamydomonas*. (h) Un petit *Paramecium*. Image tirée de [Lauga et Powers, 2009].

Powers, 2009].

Depuis la fin du vingtième siècle la dynamique de la nage de spermatozoïdes a été largement étudiée au cours d'études pluridisciplinaires expérimentales et numériques. Deux revues récentes résument les dernières avancées dans ce champ d'application [Fauci et Dillon, 2006; Gaffney *et al.*, 2011]. Ces travaux s'inscrivent dans le cadre de l'étude de la reproduction et notamment de l'infertilité chez les mammifères et en particulier chez l'homme. Plusieurs facteurs peuvent influencer la qualité du sperme et la capacité des spermatozoïdes à fertiliser les ovules. La première cause d'infertilité à laquelle on pense est bien entendu l'absence de spermatozoïde qui rend le sperme stérile. Mais une autre situation est un problème de composition du sperme : si la viscosité de ce fluide n'est pas optimale, les spermatozoïdes qui se sont spécialisés dans la nage à faible Reynolds peuvent avoir des difficultés à se déplacer et donc à fertiliser les gamètes femelles, même si les spermatozoïdes sont en bonne santé. Dans ce cas des traitements médicaux peuvent être envisagés pour optimiser la viscosité du fluide environnant et permettre aux spermatozoïdes d'avancer de manière plus efficace.

6.3.2 Modélisation du mouvement de battement

Pour modéliser le battement du flagelle, le modèle qui a été utilisé pour les cils est adapté. La tête du spermatozoïde est approchée par un ellipsoïde régulier allongé et le flagelle par une courbe paramétrée sur laquelle est posée l'équation de transport (6.1). Le flagelle est attaché à la tête ce qui nous donne une première condition aux limites pour l'équation de transport. La seconde condition aux limites génère le battement hélicoïdal du flagelle :

$$\begin{cases} P(0, t) = 0 \\ L(0, t) = \partial_{\zeta} P(0, t) = h(t) = (\cos \theta_0, \sin \theta_0 \sin t, \cos t) \end{cases} \quad (6.10)$$

Un champ de transport constant suffit à reproduire le battement hélicoïdal observé lors des études expérimentales.

L'étude du déplacement des spermatozoïdes n'est pas le sujet central de ce travail. C'est plutôt un exemple des extensions possibles d'utilisation des algorithmes développés au cours de cette thèse.

6.3.3 Simulations numériques

On présente ici une simulation numérique de l'écoulement qui se développe autour du spermatozoïde pendant le battement. Comme dans le modèle utilisé, l'interaction two-ways n'est pas considérée, les forces exercées par le fluide sur le micro-nageur ne sont pas calculables et il n'est pas possible de le faire avancer "physiquement". En revanche il est possible de faire les calculs dans le repère immobile attaché à la tête du spermatozoïde et de s'intéresser à l'écoulement généré autour pour quantifier l'efficacité de la nage.

Les dimensions ont été choisies pour reproduire un spermatozoïde humain : une flagelle de 40 μm de long et une tête de 4 μm de long (pour le plus grand axe de l'ellipsoïde). Le rayon du flagelle est 0.3 μm .

A l'initialisation, le fluide est stratifié, comme pour les simulations préliminaires de calcul d'écoulement autour des cils de l'épithélium, voir équation (6.6) page 121. Des conditions aux limites périodiques sont fixées dans les directions x et y , et une condition de surface libre plane (voir section 6.2.4) est imposée en haut de la boîte de calcul. Ces conditions aux limites sont complétées par une adhérence sur le bord inférieur avec les mêmes hypothèses de modélisation que dans le cas des cellules épithéliales.

Sur la figure 6.29 plusieurs images de cette simulation sont présentées à différents instants. A l'initialisation, le fluide est stratifié et, lorsque le flagelle du spermatozoïde se met à tourner le champ de viscosité est déformé : il "s'enroule" autour du micro-nageur.

Cet écoulement rotatif est un problème lorsque des méthodes particulières sont utilisées : les courbes caractéristiques sont tangentes à ce champ de vitesse et l'utilisation de grand pas de temps déforme le nuage de particules qui suivent ces tangentes. Il y a une apparition de zones de vide si les pas de temps sont

6.3. Exemple d'un micro-nageur : le spermatozoïde

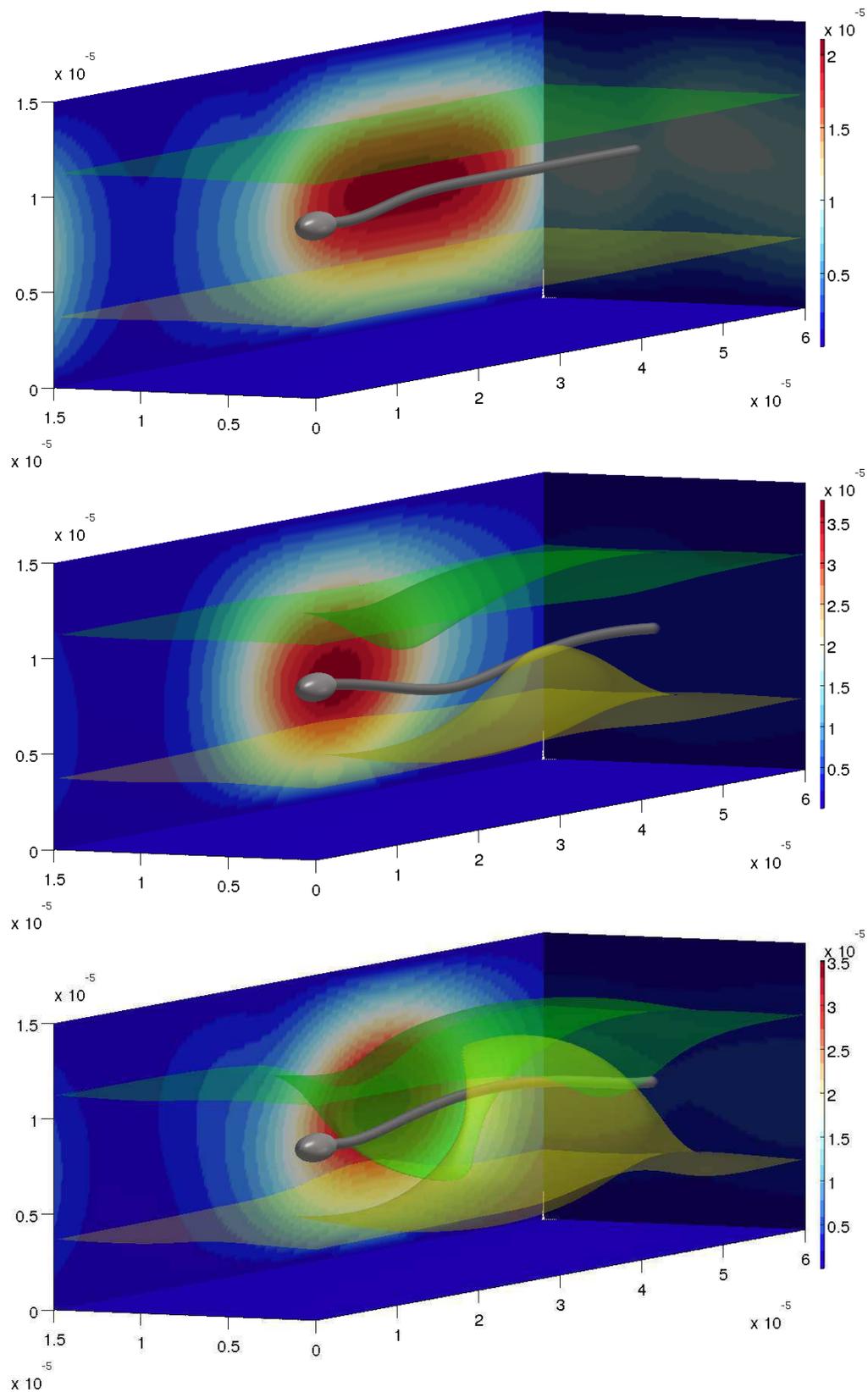


FIGURE 6.29 - Vues à différents instants de la simulation du spermatozoïde dans un fluide stratifié (à $t = 0.003, 0.106, 0.203$ s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

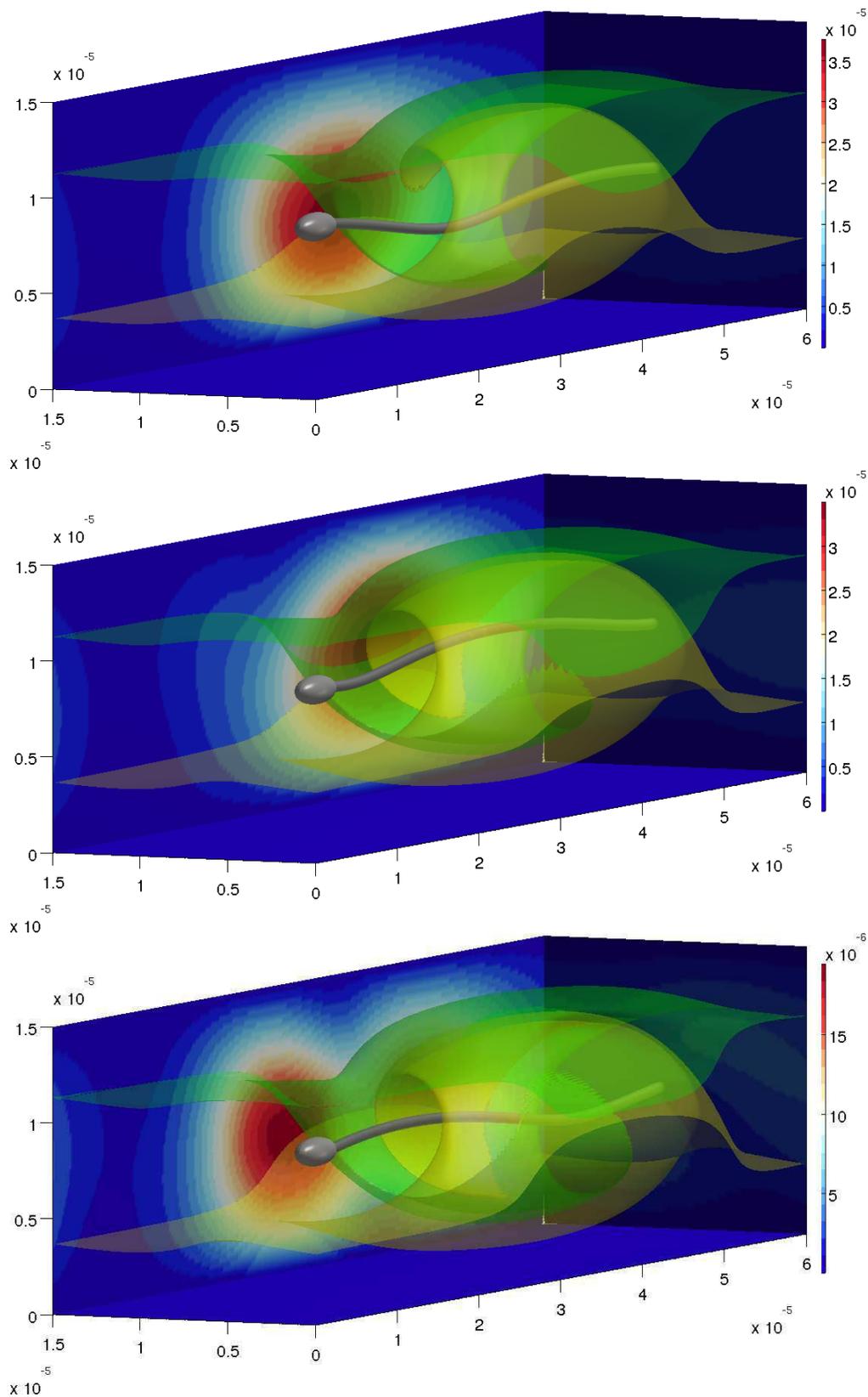


FIGURE 6.30 - Vues à différents instants de la simulation du spermatozoïde dans un fluide stratifié (à $t = 0.306, 0.403, 0.5$ s). L'échelle de couleur présente la norme de vitesse sur les bords du domaine. En jaune est affichée une isosurface de viscosité de niveau 1.25×10^{-3} Pa s et en vert une isosurface de viscosité de niveau 1.75×10^{-3} Pa s.

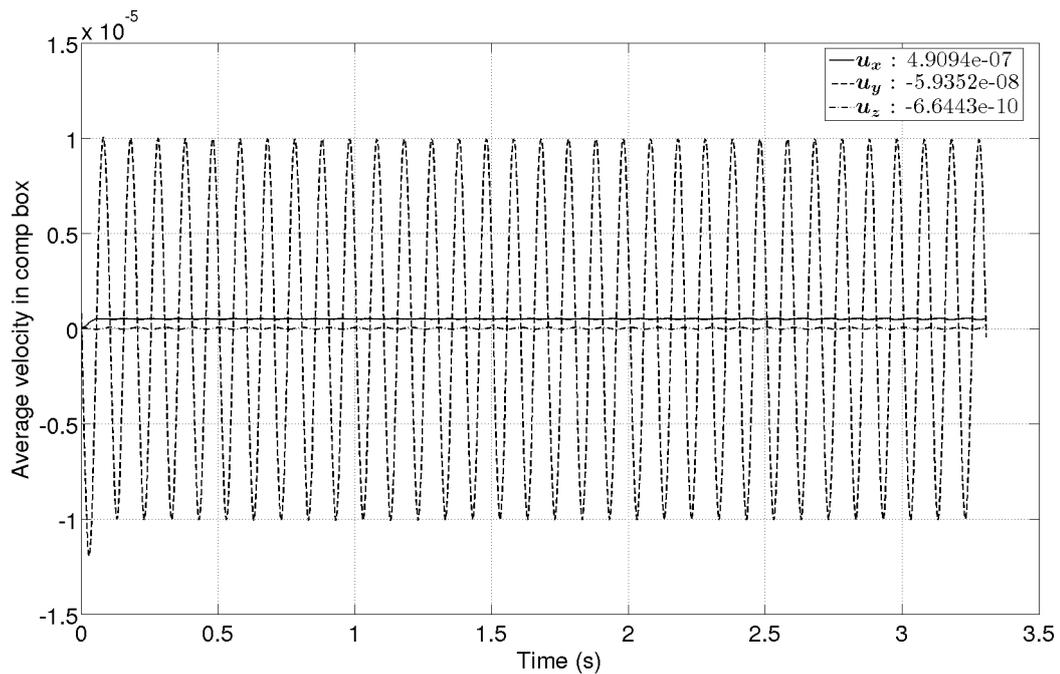


FIGURE 6.31 - Vitesse moyenne dans la boîte de calcul au cours de la simulation. La légende indique également la moyenne en temps.

trop grands, ce qui dégrade les résultats de conservation. Une illustration de ce problème bien connu est donné dans [Eldredge *et al.*, 2002b] par exemple, il est pallié par l'utilisation de méthodes de remaillage.

Pour cette simulation le volume de la géométrie pénalisée est très faible par rapport à la taille du domaine fluide et l'utilisation de l'algorithme de SMW-GMRES est très intéressante, comme cela a été décrit dans la section 4.1 page 68.

Pour quantifier l'efficacité de la nage de ce spermatozoïde, la vitesse moyenne intégrée sur tout le domaine fluide est un bon indicateur. Le résultat est présenté pour les trois composantes de la vitesse sur la figure 6.31. Comme le spermatozoïde "regarde" vers les x négatifs ce résultat strictement positif indique que le fluide se déplace dans l'autre sens : dans le repère du fluide, le spermatozoïde avance. Quantitativement cette vitesse est en accord avec la littérature [Gaffney *et al.*, 2011; Fauci et Dillon, 2006]. Ce résultat se voit également sur la figure 6.30 où, l'isosurface "enroulée" ressort par la face vers laquelle le spermatozoïde regarde en raison de la périodicité du domaine.

Dans les autres directions, la vitesse moyenne de l'écoulement est bien inférieure (un à trois ordres de grandeur en dessous de la direction de déplacement), ce qui montre bien que le spermatozoïde a une direction privilégiée de déplacement dans le sens où il regarde.

6.4 CALCULS D'ÉCOULEMENTS DANS LES MILIEUX POREUX

6.4.1 Position du problème

Une autre application possible des algorithmes développés pour le problème de Stokes en géométrie complexe est la simulation d'écoulements dans les milieux poreux. Traditionnellement, on parle plutôt du problème de Stokes-Brinkman. Ce problème permet de modéliser l'écoulement d'un fluide à travers un réseau de pores et de fissures les connectant. Ce modèle suppose que le nombre de Reynolds de l'écoulement est faible, ce qui signifie que, soit les pores sont très petits, soit le fluide est extrêmement visqueux, soit un compromis entre ces deux hypothèses pour rester dans le régime de Stokes.

Ce type d'écoulement intervient dans de très nombreuses applications médicales ou industrielles. Parmi ces applications, on peut citer de manière non exhaustive en médecine la sécrétion de protéines à travers des membranes (par exemple la sécrétion des mucines et de fluide périciliaire à travers la paroi bronchique dans les poumons), la cicatrisation avec les plaquettes, l'infiltration à travers les pores de la peau (d'un médicament ou d'un agent pathogène); dans l'industrie on peut également citer plusieurs exemples d'infiltrations : dans les sols (de polluants par exemple), dans les résines, les bétons ou les réacteurs en génie des procédés...

Dans les milieux poreux l'écoulement est généré par une force extérieure qui met le fluide en mouvement à travers le milieu poreux. C'est une géométrie souvent très complexe (voir figure 6.32 qui montre les géométries utilisées dans les simulations) constituée de micro cavités reliées entre elles par des systèmes de

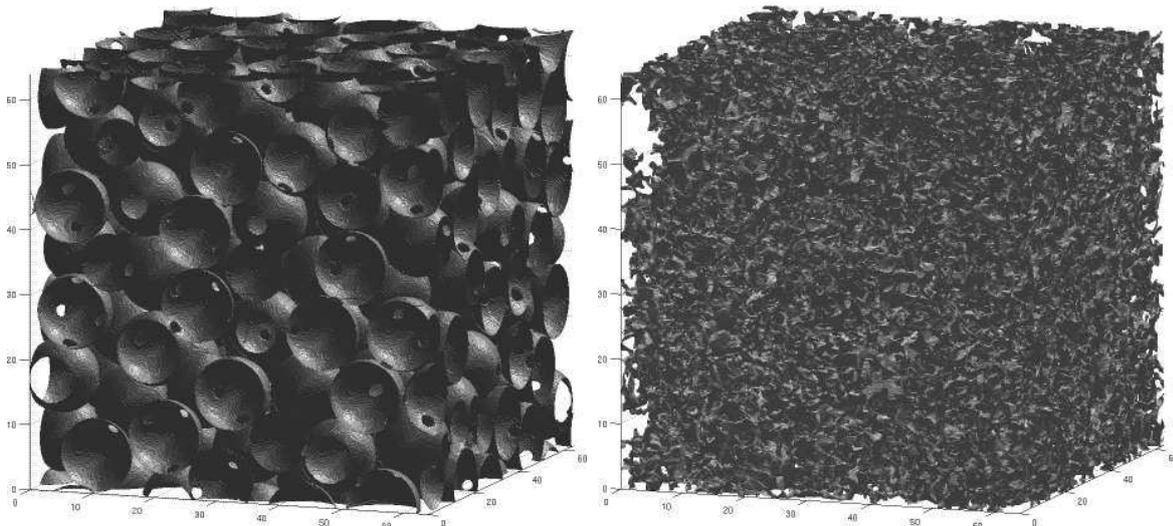


FIGURE 6.32 - Isosurface de niveau 0.5 de géométries des réseaux de pore utilisés pour les simulations d'écoulement dans les milieux poreux. A gauche un réseau de sphères de silice empilées, à droite un échantillon de grès de Castlegate en Utah. Données libres de The Network Generation Comparison Forum.

fissures. Dans ces applications, si la viscosité μ est supposée constante, la loi de Darcy permet de calculer la vitesse u de manière directe :

$$u = \frac{K}{\mu} f \quad (6.11)$$

Dans cette équation u est la vitesse du fluide, μ est la viscosité, K est le tenseur de perméabilité du milieu (appelé aussi tenseur de perméabilité de Darcy) et f la force externe qui entraîne l'écoulement.

La perméabilité K est un tenseur qui donne en tout point la réponse de la géométrie du milieu en fonction de la force qui s'exerce sur le fluide. Cette donnée n'est en général pas calculable de manière expérimentale et la difficulté dans l'utilisation de ces modèles est d'estimer ce paramètre.

Une manière de calculer ce tenseur K est d'utiliser la géométrie du milieu qui, elle, est reconstituée expérimentalement avec des méthodes de PIV et de résonance magnétique nucléaire [Seto *et al.*, 2001]. Cela permet de résoudre les équations de la mécanique des fluides à travers cette géométrie. Compte tenu des échelles spatiales, l'écoulement est régi par le problème de Stokes à viscosité constante qui peut être résolu avec une méthode de pénalisation. Ce problème est linéaire et on peut faire une analogie entre l'équation (6.11) et le problème déjà présenté :

$$\begin{cases} -\mu\Delta u + \frac{\chi}{\varepsilon}u = f - \nabla p \\ \operatorname{div}u = 0 \end{cases} \quad (6.12)$$

Si on résout trois fois (6.12) avec f égal successivement aux trois vecteurs de la base canonique et en notant respectivement v^1 , v^2 et v^3 ces solutions, on a (avec $\mu = 1$) en considérant (6.11) :

$$K = \begin{pmatrix} v_x^1 & v_x^2 & v_x^3 \\ v_y^1 & v_y^2 & v_y^3 \\ v_z^1 & v_z^2 & v_z^3 \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

Pour ces calculs, l'algorithme présenté dans les chapitres précédents est réutilisé, ce qui donne de bonnes performances. Ce type d'application est un bon exemple pour tester la robustesse du traitement du terme de pénalisation en raison de la complexité des fonctions caractéristiques.

Ce résultat, présenté à viscosité constante reste valable tant que les équations décrivant l'écoulement sont linéaires. La méthodologie reste valable pour un champ de viscosité non homogène indépendant de la vitesse. Par contre, si on s'intéresse au couplage entre le problème de Stokes et une équation de convection-diffusion le résultat n'est plus valable et il faut résoudre directement (6.12) à chaque pas de temps.

6.4.2 Transport dans les milieux poreux

Le calcul du champ de vitesse à l'intérieur du réseau de pores du milieu poreux est utilisé pour étudier la connectivité entre les cavités du milieu. Cette étude dépend des applications médicales/industrielles visées. Par exemple, si on cherche à modéliser le passage d'un médicament à travers l'épiderme ou une membrane, une bonne connectivité est recherchée pour maximiser les effets du traitement. Au contraire, si on cherche à modéliser l'infiltration d'un polluant à travers le sol, on veut minimiser la pénétration jusqu'aux nappes phréatiques.

Pour l'étude de ces phénomènes un traceur passif est utilisé dans l'écoulement : c'est la fraction massique α qui jouera ce rôle, et on continue de supposer une viscosité constante. Dans ce cas, le champ de vitesse u ne dépend pas du temps : il est calculé une fois au début de la simulation et il y a seulement besoin de résoudre l'équation sur α , qui peut être une équation de convection pure ou une équation de convection-diffusion si on veut considérer la diffusion massique (et profiter des effets régularisants). L'utilisation des méthodes Lagrangiennes pour la résolution de ces problèmes est très bénéfique. Le champ de vitesse étant calculé un fois, cela peut même être fait de manière "offline" (un seul calcul qui est sauvegardé et ensuite rechargé à chaque nouvelle simulation), de telle sorte que le coût est linéaire par rapport au nombre de point de grille puisqu'on ne résout que le transport. Le point le plus coûteux de la méthode est alors les interpolations qui peuvent être facilement parallélisées comme cela a été présenté dans la section 2.1.4.

Finalement, les calculs sont peu coûteux : un pas de temps est résolu en quelques minutes sur une dizaine de processeurs en utilisant 1024 points de grille dans chaque direction (soit plus d'un milliards de particules) ce qui permet de faire beaucoup de pas de temps (3000 dans les simulations suivantes). La limitation de l'algorithme vient plutôt de la taille de ces tableaux qui nécessite suffisamment de mémoire virtuelle (un champ scalaire en double précision discrétisé sur un milliard de points "pèse" 8 Go). Cette grande taille de tableaux rend également le post-processing coûteux.

Sur les figures 6.34 et 6.33 sont présentées différentes vues, à différents instants de l'écoulement du traceur passif à travers les deux géométries qui ont été présentées sur la figure 6.32. Un raffinement avec 1024 points de grille dans chaque direction est utilisé pour ces simulations. La force externe f est dirigée vers le bas.

A l'initialisation le traceur est disposé en haut de la boîte de calcul, dans quatre zones circulaires, épaisses de cinq pas d'espace, pour la simulation des sphères de silice. Pour la simulation de l'échantillon de grès, on initialise uniformément au sommet de la boîte de calcul sur la même épaisseur. Le principal argument qui justifie ce choix est que la connectivité du milieu pour le premier exemple est bien meilleure : avec une initialisation sur toute la surface, la quasi totalité des pores seraient remplies par le traceur et la lisibilité ne serait pas très bonne.

Au cours des simulations le traceur progresse à travers le réseau de pores, cela met bien en évidence la connectivité du réseau. La progression est plus lente dans le grès que dans les sphères de silice où de très fines structures se forment, ce

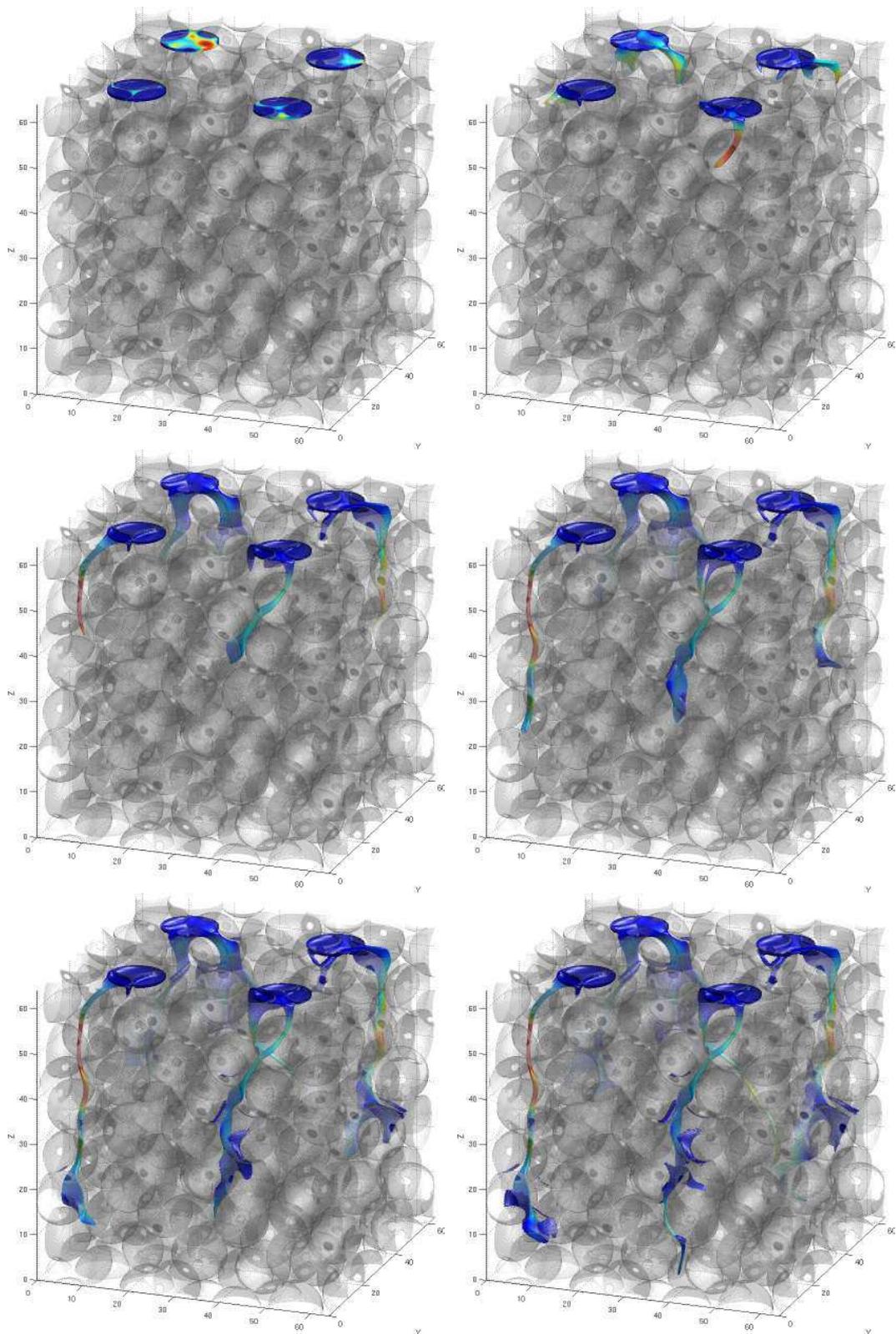


FIGURE 6.33 - Vues à différents instants de l'écoulement du traceur passif à travers le milieu poreux constitué des sphères de silice. L'isosurface grise représente la géométrie du milieu poreux, la carte de couleur représente l'intensité du champ de vitesse sur l'isosurface de fraction massique.

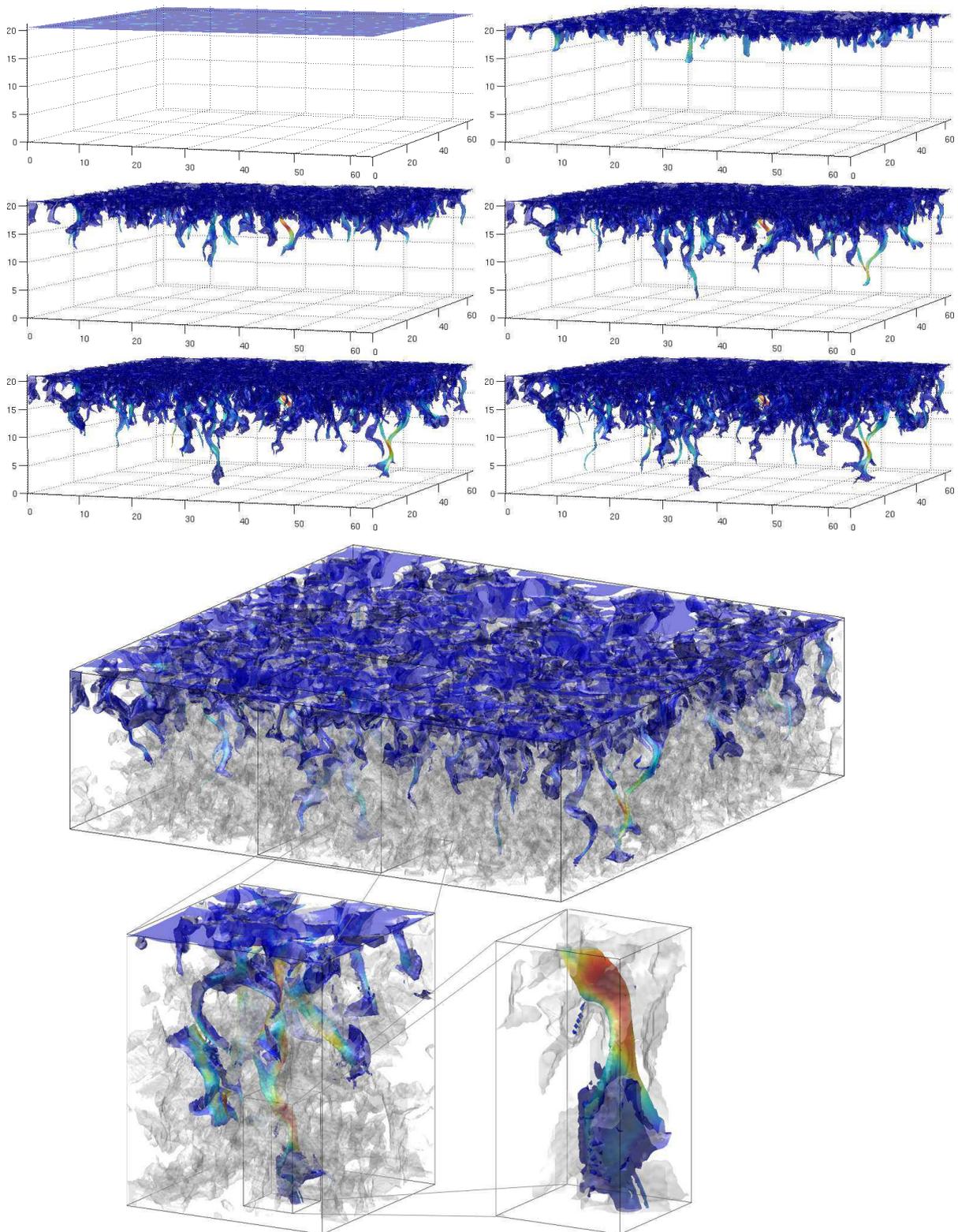


FIGURE 6.34 - Vues à différents instants de l'écoulement du traceur passif à travers le milieu poreux constitué du grès de Castlegate. Sur les six premières images, l'isosurface représentant la géométrie du milieu poreux n'est pas affichée pour faciliter la lisibilité, la carte de couleur représente l'intensité du champ de vitesse sur l'isosurface de fraction massique. En bas, traceur passif et géométrie : composition multiéchelles avec trois niveaux de zoom.

qui justifie la finesse du raffinement utilisé. Un zoom au niveau de ces structures met en évidence des phénomènes d'aliasing qui justifieraient des calculs avec une résolution encore plus haute.

La simulation d'écoulements en milieux poreux est un bon exemple d'application possible du code de calcul développé au cours de cette thèse. De par la complexité des géométries, c'est un test qui vient valider la robustesse de la méthode de pénalisation implémentée. Ce type d'écoulement intervient dans de très nombreux domaines d'application, une des extensions possibles sera brièvement décrite dans les perspectives de ce manuscrit.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Sommaire

7.1 CONCLUSIONS	162
7.1.1 Modélisation	162
7.1.2 Développement d'algorithmes rapides de résolution . . .	163
7.1.3 Modélisation de l'écoulement du mucus pulmonaire . . .	164
7.1.4 Autres applications	164
7.2 PERSPECTIVES	165
7.2.1 Enrichissement du modèle	165
7.2.2 Plate-forme intégrative	168
7.2.3 Analyse mathématique	168
7.2.4 Extension à d'autres écoulements	168

7.1 CONCLUSIONS

Au cours de cette thèse, des méthodes numériques ont été développées dans le but de modéliser et simuler des écoulements de fluides biologiques. Ce travail s'inscrit dans le cadre du projet ANR pluridisciplinaire BioFiReaDy qui a pour objectif d'étudier le mucus pulmonaire, et les maladies associées comme la mucoviscidose.

Les études expérimentales in-vivo pour étudier un fluide comme le mucus pulmonaire sont limitées par la géométrie complexe des poumons et les tailles caractéristiques des phénomènes qui rendent les mesures invasives. La simulation numérique apporte alors un bon complément d'informations qualitatives et quantitatives. Ces écoulements de films biologiques sont complexes et plusieurs difficultés se posent quand on cherche à les modéliser : ces fluides ne sont pas homogènes, dans le sens où leur composition présente de fortes variations spatiales, et il faut tenir compte de la complexité de la géométrie.

Sur les parois des bronches, des cils de quelques micromètres de long battent dans le film de mucus pour le propulser. Le but de ce travail a été de modéliser et simuler cet écoulement pour être capable d'étudier séparément le rôle joué par les différents paramètres. Plus le modèle d'écoulement sera complexe, plus il y aura de paramètres à étudier, il y a donc un compromis à faire entre ces deux éléments. Pour étudier séparément l'influence des paramètres, il faut être capable de faire de nombreuses simulations avec de nombreux jeux de paramètres, cela demande de développer des algorithmes performants, stables et précis.

7.1.1 Modélisation

Compte tenu des petites échelles spatiales en jeu le nombre de Reynolds associé à l'écoulement est très faible et le fluide est soumis aux équations de Stokes. De très nombreuses méthodes existent dans la littérature pour modéliser l'interaction entre le fluide et une géométrie complexe en mouvement. La méthode de pénalisation a été choisie pour sa facilité d'implémentation sur des grilles régulières cartésiennes. Ce choix a permis d'utiliser des solveurs rapides compatibles avec cette discrétisation, qui ne nécessitent pas d'assemblage de matrice.

Les fluides biologiques sont essentiellement composés d'eau et leur rhéologie est étroitement liée à la proportion d'un ou plusieurs agents dont miscibles dont la concentration évolue (par exemple des protéines, des cellules, des déchets...). Pour modéliser ce comportement, la viscosité du fluide est une fonction de la fraction massique de ce(s) constituant(s), elle même dépendante de la vitesse du fluide à travers une équation de convection-diffusion. Ce couplage génère une dynamique d'écoulement non linéaire.

La solution de ce système d'équations pénalisées, posé sur tout le domaine de calcul, couplé à la convection-diffusion de la fraction massique a également été analysée d'un point de vue théorique. L'existence et l'unicité de la solution a été montrée ainsi que sa convergence vers la solution du problème non pénalisé, posé

en géométrie complexe, lorsque le paramètre de pénalisation tend vers zéro.

Outre ces aspects de modélisation, un autre problème se pose : la calibration des paramètres qui interviennent dans les modèles. Les expériences dans le cadre de la clairance mucociliaire sont compliquées par les petites échelles, ce qui rend les mesures in-vivo invasives. De plus, la structure du poumon empêche l'obtention d'informations, par endoscopie ou IRM, au delà de quelques générations de bronches (cinq ou six). Les mesures in-vitro restent possibles, mais les expérimentations sur du matériel vivant sont biaisées à l'extérieur du corps humain.

7.1.2 Développement d'algorithmes rapides de résolution

Méthodes utilisées

Pour résoudre ce système couplé entre le problème de Stokes et la convection-diffusion de la fraction massique, un algorithme hybride a été développé : les opérateurs de diffusion sont discrétisés sur des grilles cartésiennes régulières et les opérateurs de transport sur des particules. Cela permet de profiter des bonnes performances de calculs de chaque méthode : des solveurs rapides pour les problèmes elliptiques et des méthodes lagrangiennes robustes pour le transport.

Les méthodes particulières ne sont pas contraintes par des conditions de stabilité ce qui permet de faire de grands pas de temps et d'économiser le nombre de résolutions du champ de vitesse. Pour calculer ce champ une nouvelle méthode de projection adaptée au cas quasi-statique a été introduite. Elle est basée sur une méthode de point fixe pour traiter efficacement la contrainte d'incompressibilité et les problèmes de vitesse tangentielle résiduelle inhérents à ces méthodes. Ce point fixe permet également de traiter les termes qui viennent de la viscosité non homogène ce qui découple le calcul des trois composantes du champ de vitesse.

L'un des points clé de l'algorithme est le transfert des champs entre la grille et le nuage de particules. L'utilisation de noyaux d'interpolation d'ordre élevé et à support compact garantit de bons résultats de conservation.

Performances

Les performances de calcul des méthodes Lagrangiennes présentées sont très bonnes, c'est pour cela qu'elles sont largement utilisées pour les problèmes de grandes dimension en mécanique des fluides. Le coût de calcul de ces méthodes (ainsi que celui des interpolations entre la grille et particules) est linéaire par rapport au nombre de points de discrétisation ce qui permet de résoudre des problèmes 3D de grande dimension en un temps raisonnable, même de manière séquentielle.

Les solveurs rapides utilisés dans la méthode de point fixe sont basés sur des méthodes FFT et multigrilles qui ont un coût de calcul en $\mathcal{O}(N \log N)$ ce qui est également rapide en grande dimension. Une méthode de résolution basée sur la formule de Sherman-Morrison-Woodbury et l'algorithme GMRES permet de

traiter les termes de pénalisation à moindre coût, que ce soit en terme de temps CPU ou d'occupation mémoire.

Ces résultats permettent de faire des simulations avec un grand nombre de degrés de liberté sans avoir besoin de recourir au calcul parallèle. Une utilisation parallèle de ces algorithmes est appréciable lorsqu'un raffinement très fin est recherché.

Les ordres de convergence et la conservation de la méthode numérique ont été validés avec plusieurs cas test.

7.1.3 Modélisation de l'écoulement du mucus pulmonaire

Avec ces algorithmes rapides, plusieurs simulations d'écoulements de films biologiques ont été présentées dans la dernière partie de cette thèse. La principale application a été l'étude de l'écoulement du mucus pulmonaire autour des cellules épithéliales ciliées du poumon. Un modèle de battement très peu coûteux a été implémenté pour modéliser ces cils, il s'agit d'une équation de transport posée sur une courbe paramétrée monodimensionnelle. Le battement généré est comparable aux résultats expérimentaux et numériques de la littérature.

Plusieurs simulations ont montré que les méthodes numériques implémentées sont bien adaptées à la résolution de ce problème. Ces simulations de complexités diverses ont donné des résultats de mobilité du film de mucus compatibles avec les études expérimentales et numériques.

Les bonnes performances séquentielles de calcul ont permis d'étudier, de manière systématique, l'influence de plusieurs paramètres du modèle. En utilisant un certain nombre de processeurs sur un cluster de calcul, il est possible de lancer autant de simulations indépendantes, utilisant chacune un jeu de paramètres différent. Dans ce cas le temps d'attente pour l'utilisateur est le même que pour une seule simulation. Cela a permis d'identifier les paramètres qui influencent le plus la mobilité du mucus (variations de viscosité, épaisseur du film et synchronisation métachronale).

7.1.4 Autres applications

L'algorithme développé pour la modélisation de l'écoulement du mucus pulmonaire a été utilisé pour simuler d'autres écoulements non homogènes à faible nombre de Reynolds et en géométrie complexe. Toujours dans un contexte biologique une simulation de la nage d'un spermatozoïde a été présentée. La géométrie de ce micro-nageur est très proche de celle des cils et le modèle de battement a facilement été adapté. Les résultats sont prometteurs puisque les vitesses d'écoulement sont compatibles avec les travaux expérimentaux et numériques de la littérature.

Enfin le dernier exemple de simulation à faible nombre de Reynolds concerne les milieux poreux : l'écoulement d'un fluide à travers un réseau de micro pores. Ce type d'écoulement intervient dans de nombreux domaines d'application : biologie,

géophysique, industrie... Le fluide est également soumis aux équations de Stokes et la géométrie est calculable expérimentalement. Ce type de simulation permet de tracer la progression du fluide dans le milieu et de calculer les matrices de perméabilité équivalente. Ces matrices peuvent être utilisées dans l'équation de Darcy, beaucoup plus simple à résoudre.

7.2 PERSPECTIVES

Le travail développé dans cette thèse, dont les résultats viennent d'être résumés conduit à se poser d'autres questions pour orienter les travaux de recherche futurs dans ce contexte d'écoulements très visqueux, non homogènes et en géométrie complexe. Parmi les points suivants, plusieurs idées sont avancées en vue d'améliorer la modélisation physique des écoulements. Les méthodes numériques nécessaires à leur implémentation sont aussi décrites. Une discussion sur l'élaboration de la plate-forme intégrative est également présentée. Enfin les hypothèses de modélisation et les méthodes numériques présentées sont suffisamment générales pour s'appliquer à d'autres types d'écoulements dont on parlera également.

7.2.1 Enrichissement du modèle

Modèle two-ways pour l'interaction fluide-structure

Une amélioration possible, pour mieux tenir compte de la physique de l'écoulement en interaction avec la géométrie, consisterait à mettre en place un couplage dit two-ways entre le solide et le fluide. Dans ce travail, avec la méthode de pénalisation, nous n'avons considéré que l'effet exercé par la géométrie sur le fluide. Plusieurs travaux de la littérature ont déjà traité ce type d'interaction dans le cas de solide rigides [Coquerelle et Cottet, 2008] ou pour modéliser la nage de poissons [Gazzola *et al.*, 2011; Bergmann et Iollo, 2011; Conti *et al.*, 2012; Sparenberg, 2002] par exemple. Dans le cas des poissons, comme dans le cas des cils ou d'un spermatozoïde, il faut se donner une loi de l'effort fournie par le "nageur" qui devra être choisit judicieusement pour ne pas ajouter trop de paramètres au modèle. Tous ces travaux se situent dans le cadre des équations de Navier-Stokes, dont les résultats semblent transposables au problème de Stokes. Des travaux complémentaires pourront aiguiller ce choix : [Eldredge, 2006] où les forces fluides sont calculées de manière surfacique à partir de la vorticité (avec une discrétisation particulière) pour des nageurs de type méduse, [Noca *et al.*, 1999] où des techniques de calcul utilisent seulement le champ de vitesse et ses dérivées dans le calcul des forces hydrodynamiques. Enfin, dans [Curet *et al.*, 2010] une méthode implicite de traitement de l'autopropulsion, où la déformation du nageur est prescrite et l'interaction corrige la vitesse solide méritera d'être considérée.

Comme on considère ici le problème de Stokes quasi-statique, le traitement explicite n'est pas possible. Néanmoins une intégration itérative dans le point fixe est peut être envisageable. En cas de réussite, le calcul two-ways pourrait

ne pas être plus coûteux que le calcul one-way, cela demandera notamment une implémentation méticuleuse des calculs de force et/ou de la modification du champ de vitesse \bar{u} .

Prise en compte de l'interface air-liquide

Comme cela a été souligné dans les chapitres 5 et 6, l'hypothèse de surface libre plane, faite sur la condition aux limites de la face supérieure est très forte. Il serait intéressant de quantifier l'influence d'une véritable surface libre ce qui rajouterai une équation à résoudre et des termes supplémentaires dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Un paramètre supplémentaire serait alors introduit dont l'influence n'est probablement pas nulle : la tension de surface. Un des papiers fondateurs pour le traitement numérique des surfaces libres date du début des années 90 : [Brackbill *et al.*, 1992].

Une possibilité pour résoudre ce problème est d'utiliser une méthode de level set pour repérer la surface libre. De très nombreux travaux ont traité ces problèmes en soulignant les difficultés associées. Un choix entre un traitement lagrangien ou eulérien de l'équation de transport de la surface libre sera également à discuter.

L'intégration aux algorithmes sera probablement facilitée avec un traitement hybride grille-particules [Enright *et al.*, 2002, 2005; Hieber et Koumoutsakos, 2005], les méthodes d'interpolation et de transport étant déjà implémentées dans ce cadre. Ce choix permettra en outre de conserver de grands pas de temps.

L'implémentation de ces conditions d'interface permettrait de comparer le modèle à viscosité variable avec un modèle bifluide. Un premier travail dans le cadre du mucus servira de base à cette perspective [Craster et Matar, 2000; Matar *et al.*, 2002] où les auteurs traitent le cas de deux couches de fluide. Dans ces travaux, un modèle réduit basé sur les équations de lubrification est dérivé pour calculer la vitesse du fluide. Ce travail est étroitement lié à l'étude des surfactants : des sécrétions pulmonaires qui tendent à abaisser la tension de surface du mucus, et des effets Marangoni : transport surfacique induit par des gradients de tension de surface. Ces effets pourraient être étudiés en 3D avec l'implémentation de la surface libre.

A priori, la valeur de la tension de surface entre l'air et le mucus est forte ce qui tend à aplanir la surface libre. Des phénomènes de déferlement ne seront pas observés dans les écoulements pulmonaires. En revanche de faible déformation pourront avoir un effet sur l'écoulement de l'air au voisinage de la surface.

Modélisation des effets non newtoniens

Un élément qui peut également être intégré dans le modèle est la prise en compte des effets non newtoniens. Cette partie sera effectuée dans le cadre du projet ANR BioFiReaDy au cours duquel des mesures rhéométriques expérimentales sont programmées, les prélèvements sont faits sur des patients atteints de

mucoviscidose. Les résultats orienteront les études de modélisation dans le choix des modèles à utiliser.

Dans les résultats de la littérature deux types de comportement peuvent être trouvés. Soit un modèle viscoplastique, soit un modèle viscoélastique à mémoire de forme.

Pour modéliser la viscoplasticité il faut se donner une loi de comportement non linéaire sur le comportement de la viscosité en fonction des contraintes : $\mu = F(\|D(u)\|)$. Les études expérimentales permettront de modéliser F . D'un point de vue de l'implémentation, les méthodes de point fixe conviennent bien et des méthodes plus adaptées comme les méthodes de gradient conjugué ou de Newton permettent d'accélérer la convergence [Martin et Monnier, 2013]. Pour implémenter ces dernières on dispose de l'expression explicite de F ce qui permet de calculer les gradients et hessiennes utilisés par ces méthodes.

Des lois de comportement existent également pour les fluides à mémoire de forme. Un modèle assez général est le modèle de Oldroyd-B qui définit le tenseur des contraintes de Cauchy comme $\sigma(u) = -\text{div}(\tau - pI)$ où, contrairement au cas newtonien, la partie visqueuse de ce tenseur est telle que $\tau \neq 2\mu D(u)$ mais est la solution d'une équation aux dérivées partielles :

$$\tau + \lambda_1 \overset{\nabla}{\tau} = 2\mu(D + \lambda_2 \overset{\nabla}{D}) \quad (7.1)$$

où la dérivée surconvectée se développe : $\overset{\nabla}{\tau} = \frac{\partial}{\partial t} \tau + v \cdot \nabla \tau - ((\nabla v)^T \cdot \tau + \tau \cdot (\nabla v))$.

Avec ce modèle, le fluide se "souvient" de ces contraintes passées et cherche à relaxer vers ces états avec un temps caractéristique λ_1 et un temps de retard λ_2 . Pour résoudre numériquement ce problème, il est possible de scinder en deux le tenseur τ : une partie newtonienne classique et une partie viscoélastique solution d'une équation semblable à (7.1) [Phillips et Williams, 1999]. Ensuite il faudra résoudre d'une part cette équation rétrograde en temps, ce qui demandera potentiellement beaucoup de mémoire puisqu'il faudra stocker l'historique des contraintes ; d'autre part le problème de Stokes avec une contribution viscoélastique au second membre.

Enfin, ce modèle pourrait être dépendant de la fraction de mucine : ce sont ces protéines qui sont responsables des comportements non newtoniens du fluide et une dépendance des temps caractéristiques λ_1 et λ_2 par rapport à α permettrait de mieux modéliser ces phénomènes. De la même manière pour le modèle viscoplastique on peut imaginer $\mu = F(\|D(u)\|, \alpha)$.

Modélisation des sécrétions de mucines

Une autre amélioration possible du point de vue de la modélisation des écoulements de mucus pulmonaire serait de prendre en compte les sécrétions de mucines par les cellules gobelets, ainsi que les sécrétions aqueuses à travers la membrane pulmonaire (trancytose). Pour cela, après un travail de modélisation, il faudrait modifier les équations d'évolution de la fraction massique, en rajoutant des termes

sources et éventuellement des termes de réactifs. Cet enrichissement du modèle viendrait ajouter des paramètres très difficiles à estimer dans le modèle.

Une seconde piste de recherche complémentaire pour la modélisation des mucines consisterait à tenir compte de ces protéines à travers leur dynamique moléculaire et d'utiliser des méthodes d'homogénéisation pour passer à un modèle macroscopique. Un couplage avec le travail présenté dans ce manuscrit serait ensuite possible et permettrait notamment d'estimer le paramètre de diffusion de la fraction massique. Une des difficultés de ce travail serait la description moléculaire

7.2.2 Plate-forme intégrative

Un autre objectif du projet ANR BioFiReaDy est de développer une plate-forme intégrative capable de donner en temps réel l'influence sur la clairance mucociliaire de la modification des paramètres biologiques et physiologiques. Pour cela un réseau de neurones sera entraîné avec une base de données de simulations effectuées en utilisant le code de calcul développé au cours de cette thèse. Ce calcul intensif sera aiguillé par les simulations présentées lors de l'étude paramétrique du chapitre 6.

Ce travail est le sujet du post-doc de Fanny Dardalhon.

7.2.3 Analyse mathématique

Plusieurs directions peuvent être également suivies du point de vue de l'analyse des problèmes et des méthodes numériques. Une extension des calculs théoriques présentés au chapitre 5 est envisageable. Dans le même esprit que [Carbou et Fabrie, 2003], une étude précise de la couche limite qui se développe dans le cas du couplage entre le problème de Stokes pénalisé et la convection-diffusion de la fraction massique serait intéressant. De même l'analyse des modèles tenant compte du couplage two-ways, de la surface libre et/ou des effets non newtoniens restent des problèmes ouverts.

D'un autre côté, l'analyse numérique rigoureuse de la méthode itérative de projection basée sur le point fixe n'a pas été faite. Cela viendrait renforcer la validité des ordres de convergence numériques présentés.

7.2.4 Extension à d'autres écoulements

D'autres écoulements de mucus pourront être étudiés à partir de ce qui a été développé dans cette thèse. Une amélioration des simulations de spermatozoïde permettra d'étudier plus en détails les pathologies liées à la fertilité. On pourra notamment regarder les interactions hydrodynamiques entre deux individus, étudier l'efficacité de la nage en fonction de la distance à la surface libre, de la non homogénéité du milieu... grâce aux possibilités d'étude paramétrique. Des études similaires pourraient être envisagées pour les calculs d'écoulements en milieux

poreux. L'extension à d'autres mucus, comme le mucus intestinal, est également envisageable, de même que d'autres écoulements de Stokes.

Les simulations préliminaires d'écoulements en milieux poreux pourraient également être étendues à la modélisation de la coagulation du sang avec les plaquettes. Dans ce cas le milieu poreux est défini par un réseau de fibrines modélisant les tissus biologiques. Une série de travaux serviront de base à ces développements [Leiderman *et al.*, 2008; Leiderman et Fogelson, 2011].

Bibliographie

- J. C. ADAMS : mudpack : Multigrid portable fortran software for the efficient solution of linear elliptic partial differential equations. *Applied Mathematics and Computation*, 34 (2, Part 2):113–146, nov. 1989.
- R. A. ADAMS et J. J. F. FOURNIER : *Sobolev Spaces*. Academic Press, juin 2003.
- C. ANDERSON et C. GREENGARD : On vortex methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 22(3):413–440, juin 1985.
- P. ANGOT : Analysis of singular perturbations on the brinkman problem for fictitious domain models of viscous flows. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 22(16):1395–1412, 1999.
- P. ANGOT, C.-H. BRUNEAU et P. FABRIE : A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81(4):497–520, 1999.
- P. ANGOT, J.-P. CALTAGIRONE et P. FABRIE : A spectacular vector penalty-projection method for darcy and navier-stokes problems. In *Finite Volumes for Complex Applications VI Problems & Perspectives*, num. 4 de Springer Proceedings in Mathematics, p. 39–47. Springer Berlin Heidelberg, jan. 2011.
- P. ANGOT, M. JOBELIN et J.-C. LATCHÉ : Error analysis of the penalty-projection method for the time dependent stokes equations. *International Journal on Finite Volumes*, 6 (1):1–26, 2009.
- J. T. BEALE et A. MAJDA : Rates of convergence for viscous splitting of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 37(156):243–259, oct. 1981.
- J. T. BEALE et A. MAJDA : Vortex methods. II : higher order accuracy in two and three dimensions. *Mathematics of Computation*, 39(159):29–52, juil. 1982.
- M. BERGDORF, G.-H. COTTET et P. KOUMOUTSAKOS : Multilevel adaptive particle methods for convection-diffusion equations. *Multiscale Modeling & Simulation*, 4(1):328–357, jan. 2005.
- M. BERGDORF et P. KOUMOUTSAKOS : A lagrangian Particle-Wavelet method. *Multiscale Modeling & Simulation*, 5(3):980–995, jan. 2006.
- M. BERGMANN et A. IOLLO : Modeling and simulation of fish-like swimming. *Journal of Computational Physics*, 230(2):329–348, jan. 2011.
- S. BERTOLUZZA, M. ISMAIL et B. MAURY : The fat boundary method : Semi-discrete scheme and some numerical experiments. In T. J. BARTH, M. GRIEBEL, D. E. KEYES, R. M. NIEMINEN, D. ROOSE, T. SCHLICK, R. KORNUBER, R. HOPPE, J. PÉRIEUX, O. PIRONNEAU, O. WIDLUND et J. XU, édés : *Domain Decomposition Methods in Science and Engineering*, num. 40 de Lecture Notes in Computational Science and Engineering, p. 513–520. Springer Berlin Heidelberg, jan. 2005.

- S. BERTOLUZZA, M. ISMAIL et B. MAURY : Analysis of the fully discrete fat boundary method. *Numerische Mathematik*, 118 (1):49–77, mai 2011.
- J. R. BLAKE et H. WINET : On the mechanics of muco-ciliary transport. *Biorheology*, 17 (1-2):125–134, 1980.
- J. BLAKE : A model for the micro-structure in ciliated organisms. *Journal of Fluid Mechanics*, 55(01):1–23, 1972.
- D. BOFFI et L. GASTALDI : A finite element approach for the immersed boundary method. *Computers & Structures*, 81:491–501, mai 2003.
- F. BOYER et P. FABRIE : *Eléments d'analyse pour l'étude de quelques modèles d'écoulements de fluides visqueux incompressibles*. Springer, déc. 2005.
- F. BOYER et P. FABRIE : *Mathematical Tools for the Study of the Incompressible Navier-Stokes Equations and Related Models*. Springer, 2013.
- J. BRACKBILL, D. KOTHE et C. ZEMACH : A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, juin 1992.
- A. BRAIMAN et Z. PRIEL : Efficient mucociliary transport relies on efficient regulation of ciliary beating. *Respiratory Physiology & Neurobiology*, 163(1-3):202–207, nov. 2008.
- C. J. BROKAW : Computer simulation of flagellar movement IX. oscillation and symmetry breaking in a model for short flagella and nodal cilia. *Cell Motility and the Cytoskeleton*, 60(1):35–47, jan. 2005.
- D. L. BROWN, R. CORTEZ et M. L. MINION : Accurate projection methods for the incompressible Navier–Stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 168(2):464–499, avr. 2001.
- J. C. BUTCHER : *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons, avr. 2008.
- F. BUYUKKECECI, O. AWILE et I. F. SBALZARINI : A portable OpenCL implementation of generic particle-mesh and mesh-particle interpolation in 2D and 3D. *Parallel Computing*, 39(2):94–111, fév. 2013.
- G. CARBOU et P. FABRIE : Boundary layer for a penalization method for viscous incompressible flow. *Differential Equations*, 8 (12):1453–1480, 2003.
- R. CAUSEY : Mucus and the mare : How little we know. *Theriogenology*, 68(3):386–394, août 2007.
- F. CHANTALAT, C.-H. BRUNEAU, C. GALUSINSKI et A. IOLLO : Level-set, penalization and cartesian meshes : A paradigm for inverse problems and optimal design. *Journal of Computational Physics*, 228(17):6291–6315, sept. 2009.
- P. CHATELAIN, G.-H. COTTET et P. KOUMOUTSAKOS : Particle mesh hydrodynamics for astrophysics simulations. *International Journal of Modern Physics C*, 18(04):610–618, 2007.
- P. CHATELAIN, A. CURIONI, M. BERGDORF, D. ROSSINELLI, W. ANDREONI et P. KOUMOUTSAKOS : Billion vortex particle direct numerical simulations of aircraft wakes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(13-16):1296–1304, fév. 2008.
- P. CHATELAIN et P. KOUMOUTSAKOS : A fourier-based elliptic solver for vortical flows with periodic and unbounded directions. *Journal of Computational Physics*, 229 (7):2425–2431, avr. 2010.
- R. CHATELIN et P. PONCET : A hybrid grid-particle method for moving bodies in 3D stokes flow with variable viscosity. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(4):B925–B949, août 2013a.
- R. CHATELIN et P. PONCET : Particle methods and Penalization : a Sherman-Morrison-Woodbury approach to compute 3D viscous flows using FFT. *Submitted*, 2013b.
- R. CHATELIN, P. PONCET, A. DIDIER, M. MURRIS-ESPIN, D. ANNE-ARCHARD et

- M. THIRIET : Mucus and ciliated cells of human lung : Splitting strategies for particle methods and 3d stokes flows. *In IUTAM Symposium on Particle Methods in Fluid Mechanics*, 2012.
- R. CHATELIN, P. PONCET et M. TOKMAN : Computational aspects of mucus propulsion by ciliated epithelium. *In European Microfluidics Conference*, Toulouse, 2010.
- R. CHATELIN, D. SANCHEZ et P. PONCET : Analysis of penalized variable viscosity 3d stokes equations coupled with diffusion and transport. *Submitted*, 2013.
- M. A. CHILVERS et C. O'CALLAGHAN : Analysis of ciliary beat pattern and beat frequency using digital high speed imaging : comparison with the photomultiplier and photodiode methods. *Thorax*, 55(4):314–317, 2000.
- A. J. CHORIN : A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2(1):12–26, août 1967.
- A. J. CHORIN : Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of Computation*, 22(104):745–762, oct. 1968.
- A. J. CHORIN : Numerical study of slightly viscous flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 57(04):785–796, 1973.
- C. CONTI, D. ROSSINELLI et P. KOUMOUTSAKOS : GPU and APU computations of finite time lyapunov exponent fields. *Journal of Computational Physics*, 231(5):2229–2244, mars 2012.
- M. COQUERELLE et G.-H. COTTET : A vortex level set method for the two-way coupling of an incompressible fluid with colliding rigid bodies. *Journal of Computational Physics*, 227(21):9121–9137, nov. 2008.
- R. CORTEZ : The method of regularized stokeslets. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 23(4):1204–1225, jan. 2001.
- R. CORTEZ, L. FAUCI et A. MEDOVIKOV : The method of regularized stokeslets in three dimensions : Analysis, validation, and application to helical swimming. *Physics of Fluids*, 17(3):031504, 2005.
- G.-H. COTTET, G. BALARAC et M. COQUERELLE : Subgrid particle resolution for the turbulent transport of a passive scalar. *In Advances in Turbulence XII*, p. 779–782. Springer, 2009.
- G. H. COTTET et S. MAS-GALLIC : A particle method to solve the navier-stokes system. *Numerische Mathematik*, 57(1):805–827, déc. 1990.
- G.-H. COTTET : A particle-grid superposition method for the navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 89(2):301–318, août 1990.
- G.-H. COTTET et P. D. KOUMOUTSAKOS : *Vortex Methods : Theory and Practice*. Cambridge University Press, mars 2000.
- G.-H. COTTET et A. MAGNI : TVD remeshing formulas for particle methods. *Comptes Rendus Mathématique*, 347:1367–1372, déc. 2009.
- B. COUET, O. BUNEMAN et A. LEONARD : Simulation of three-dimensional incompressible flows with a vortex-in-cell method. *Journal of Computational Physics*, 39(2):305–328, fév. 1981.
- R. V. CRASTER et O. K. MATAR : Surfactant transport on mucus films. *Journal of Fluid Mechanics*, 425:235–258, 2000.
- O. M. CURET, I. K. ALALI, M. A. MACIVER et N. A. PATANKAR : A versatile implicit iterative approach for fully resolved simulation of self-propulsion. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(37–40):2417–2424, août 2010.
- R. DAUTRAY et J. L. LIONS : *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology : Volume 1 Physical Origins and Classical Methods*. Springer, 2000.
- P. DEGOND et S. MAS-GALLIC : The weighted particle method for convection-diffusion equations. part 1 : The case of an isotropic

- viscosity. *Mathematics of Computation*, 53 (188):485, oct. 1989a.
- P. DEGOND et S. MAS-GALLIC : The weighted particle method for convection-diffusion equations. part 2 : The anisotropic case. *Mathematics of Computation*, 53(188):509, oct. 1989b.
- G. DUVAUT et J. L. LIONS : Les inéquations en mécanique et en physique, 1972.
- P. A. EDWARDS et D. B. YEATES : Magnetic rheometry of bronchial mucus. In *Viscoelasticity of Biomaterials*, vol. 489 de ACS Symposium Series, p. 249–267. American Chemical Society, mai 1992.
- M. EL OSSMANI et P. PONCET : Efficiency of multiscale hybrid grid-particle vortex methods. *Multiscale Modeling & Simulation*, 8 (5):1671–1690, jan. 2010.
- J. D. ELDREDGE : Numerical simulations of undulatory swimming at moderate reynolds number. *Bioinspiration & Biomimetics*, 1(4):S19–S24, déc. 2006.
- J. D. ELDREDGE, T. COLONIUS et A. LEONARD : A vortex particle method for two-dimensional compressible flow. *Journal of Computational Physics*, 179(2):371–399, juil. 2002a.
- J. D. ELDREDGE, A. LEONARD et T. COLONIUS : A general deterministic treatment of derivatives in particle methods. *Journal of Computational Physics*, 180(2):686–709, août 2002b.
- S. ENAULT, D. LOMBARDI, P. PONCET et M. THIRIET : Mucus dynamics subject to air and wall motion. *ESAIM Proceedings*, 30:124–141, déc. 2010.
- D. ENRIGHT, R. FEDKIW, J. FERZIGER et I. MITCHELL : A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *Journal of Computational Physics*, 183(1):83–116, nov. 2002.
- D. ENRIGHT, F. LOSASSO et R. FEDKIW : A fast and accurate semi-lagrangian particle level set method. *Computers & Structures*, 83(6–7):479–490, fév. 2005.
- B. FABRÈGES et B. MAURY : Approximation of single layer distributions by dirac masses in finite element computations. *Journal of Scientific Computing*, p. 1–16, 2012.
- L. J. FAUCI et R. DILLON : Biofluidmechanics of reproduction. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 38(1):371–394, 2006.
- C. FOIAS et R. TEMAM : Remarques sur les équations de navier-stokes stationnaires et les phénomènes successifs de bifurcation. *Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa - Classe di Scienze*, 5(1):29–63, 1978.
- M. FORTIN et R. GLOWINSKI : *Augmented Lagrangian Methods : Applications to the Numerical Solution of Boundary-Value Problems*. Elsevier, avr. 1983.
- M. FRIGO et S. JOHNSON : The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 93(2):216–231, 2005.
- G. FULFORD et J. BLAKE : Muco-ciliary transport in the lung. *Journal of Theoretical Biology*, 121(4):381–402, août 1986.
- E. GAFFNEY, H. GADÊLHA, D. SMITH, J. BLAKE et J. KIRKMAN-BROWN : Mammalian sperm motility : Observation and theory. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 43(1):501–528, 2011.
- M. GAZZOLA, P. CHATELAIN, W. M. van REES et P. KOUMOUTSAKOS : Simulations of single and multiple swimmers with non-divergence free deforming geometries. *Journal of Computational Physics*, 230(19):7093–7114, août 2011.
- L. GHEBER et Z. PRIEL : Extraction of cilium beat parameters by the combined application of photoelectric measurements and computer simulation. *Biophysical Journal*, 72(1):449–462, jan. 1997.
- R. GLOWINSKI, T. PAN, T. HESLA, D. JOSEPH et J. PÉRIAUX : A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies : Application to particulate flow. *Journal of Computational Physics*, 169(2):363–426, mai 2001.

- R. GLOWINSKI, T.-W. PAN et J. PERIAUX : A fictitious domain method for dirichlet problem and applications. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 111:283–303, 1994.
- L. GREENGARD et V. ROKHLIN : A fast algorithm for particle simulations. *Journal of Computational Physics*, 73(2):325–348, déc. 1987.
- J. GUERMOND, P. MINEV et J. SHEN : An overview of projection methods for incompressible flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195:6011–6045, sept. 2006.
- W. W. HAGER : Updating the inverse of a matrix. *SIAM Rev.*, 31(2):221–239, juin 1989.
- D. HALPERN, J. L. BULL et J. B. GROTBORG : The effect of airway wall motion on surfactant delivery. *Journal of Biomechanical Engineering*, 126(4):410, 2004.
- F. H. HARLOW : The particle-in-cell method for numerical solution of problems in fluid dynamics. Rap. tech. LADC-5288, Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., jan. 1962.
- J. L. HESS : Panel methods in computational fluid dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 22(1):255–274, 1990.
- S. E. HIEBER et P. KOUMOUTSAKOS : A lagrangian particle level set method. *Journal of Computational Physics*, 210(1):342–367, nov. 2005.
- C. HIRT, A. AMSDEN et J. COOK : An arbitrary lagrangian-eulerian computing method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, 14(3):227–253, mars 1974.
- G. HOU, J. WANG et A. LAYTON : Numerical methods for fluid-structure interaction – a review. *Commun. Comput. Phys*, 12(2):337–377, 2012.
- H. H. HU, N. PATANKAR et M. ZHU : Direct numerical simulations of Fluid-Solid systems using the arbitrary Lagrangian-Eulerian technique. *Journal of Computational Physics*, 169(2):427–462, mai 2001.
- J. HUSSONG, N. SCHORR, J. BELARDI, O. PRUCKER, J. RÜHE et J. WESTERWEEL : Experimental investigation of the flow induced by artificial cilia. *Lab on a Chip*, 11(12):2017–2022, juin 2011a.
- J. HUSSONG, W.-P. BREUGEM et J. WESTERWEEL : A continuum model for flow induced by metachronal coordination between beating cilia. *Journal of Fluid Mechanics*, 684:137–162, 2011b.
- J. JANELA, A. LEFEBVRE et B. MAURY : A penalty method for the simulation of fluid-rigid body interaction. In *ESAIM : Proceedings*, vol. 14, p. 115–123, 2005.
- P. JAYATHILAKE, Z. TAN, D. LE, H. LEE et B. KHOO : Three-dimensional numerical simulations of human pulmonary cilia in the periciliary liquid layer by the immersed boundary method. *Computers & Fluids*, 67(0):130–137, août 2012.
- G.-S. JIANG et C.-W. SHU : Efficient implementation of weighted eno schemes. *Journal of Computational Physics*, 126(1), jan. 1996.
- M. JOBELIN, C. LAPUERTA, J.-C. LATCHÉ, P. ANGOT et B. PIAR : A finite element penalty-projection method for incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 217(2):502–518, sept. 2006.
- S. R. KELLER et T. Y. WU : A porous prolate-spheroidal model for ciliated micro-organisms. *J. Fluid Mech*, 80(2):259–278, 1977.
- K. KHADRA, P. ANGOT, S. PARNEIX et J.-P. CALTAGIRONE : Fictitious domain approach for numerical modelling of Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 34(8):651–684, 2000.
- P. KOUMOUTSAKOS, G.-H. COTTET et D. ROSINELLI : Flow simulations using particles. In *invited conference. Mai*, 2009.
- S. K. LAI, Y.-Y. WANG, D. WIRTZ et J. HANES : Micro- and macrorheology of mucus. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 61(2):86–100, fév. 2009.

- E. LAUGA et T. R. POWERS : The hydrodynamics of swimming microorganisms. *Reports on Progress in Physics*, 72(9):096601.1–096601.36, sept. 2009.
- W. LEE, P. JAYATHILAKE, Z. TAN, D. LE, H. LEE et B. KHOO : Mucociliary transport : Effect of mucus viscosity, cilia beat frequency and cilia density. *Computers & Fluids*, 49(1):214–221, oct. 2011.
- A. LEFEBVRE : Fluid-particle simulations with FreeFem++. In *ESAIM : Proceedings*, vol. 18, p. 120–132, 2007.
- K. LEIDERMAN, E. L. BOUZARTH, R. CORTEZ et A. T. LAYTON : A regularization method for the numerical solution of periodic stokes flow. *Journal of Computational Physics*, 236:187–202, mars 2013.
- K. LEIDERMAN et A. L. FOGELSON : Grow with the flow : a spatial and temporal model of platelet deposition and blood coagulation under flow. *Mathematical Medicine and Biology*, 28(1):47–84, jan. 2011.
- K. M. LEIDERMAN, L. A. MILLER et A. L. FOGELSON : The effects of spatial inhomogeneities on flow through the endothelial surface layer. *Journal of Theoretical Biology*, 252(2):313–325, mai 2008.
- J. LERAY : Sur le mouvement d’un liquide visqueux emplissant l’espace. *Acta Mathematica*, 63(1):193–248, déc. 1934.
- R. J. LEVEQUE et Z. LI : The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(4):1019–1044, août 1994.
- P. LI, H. JOHNSTON et R. KRASNY : A cartesian treecode for screened coulomb interactions. *Journal of Computational Physics*, 228(10):3858–3868, juin 2009.
- J. L. LIONS et E. MAGENES : *Non-homogeneous boundary value problems and applications*. Springer-Verlag, 1972.
- N. LIRON et M. ROZENSON : Mucociliary transport. *J. submicrosc. Cytol*, 15(1):317–321, 1983.
- A. MAGNI : *Méthodes particulières avec remaillage : analyse numérique nouveaux schémas et applications pour la simulation d’équations de transport*. Thèse de doctorat, Université de Grenoble, juil. 2011.
- A. MAGNI et G.-H. COTTET : Accurate, non-oscillatory, remeshing schemes for particle methods. *Journal of Computational Physics*, 231(1):152–172, jan. 2012.
- N. MARTIN et J. MONNIER : Four-field finite element solver for viscoplastic free-surface flows and variational sensitivity analysis. *SIAM, Journal on Scientific Computing*, 2013.
- O. K. MATAR, R. V. CRASTER et M. R. E. WARNER : Surfactant transport on highly viscous surface films. *Journal of Fluid Mechanics*, 466:85–111, 2002.
- O. K. MATAR et P. D. M. SPELT : Dynamics of thin free films with reaction-driven density and viscosity variations. *Physics of Fluids*, 17(12):122102–122102–15, déc. 2005.
- H. MATSUI, S. H. RANDELL, S. W. PERETTI, C. W. DAVIS et R. C. BOUCHER : Coordinated clearance of periciliary liquid and mucus from airway surfaces. *Journal of Clinical Investigation*, 102(6):1125–1131, sept. 1998.
- B. MAUROY, C. FAUSSER, D. PELCA, J. MERCKX et P. FLAUD : Toward the modeling of mucus draining from the human lung : role of the geometry of the airway tree. *Physical Biology*, 8(5):056006, oct. 2011.
- B. MAURY : Direct simulations of 2D fluid-particle flows in bi-periodic domains. *Journal of Computational Physics*, 156(2):325–351, déc. 1999.
- B. MAURY : A fat boundary method for the poisson problem in a domain with holes. *Journal of Scientific Computing*, 16(3):319–339, sept. 2001.
- B. MAURY : Numerical analysis of a finite element/volume penalty method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 47(2):1126–1148, 2009.

- S. M. MITRAN : Metachronal wave formation in a model of pulmonary cilia. *Computers & Structures*, 85:763–774, juin 2007.
- R. MITTAL et G. IACCARINO : Immersed boundary methods. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 37(1):239–261, 2005.
- J. MONAGHAN : Extrapolating b splines for interpolation. *Journal of Computational Physics*, 60(2):253–262, sept. 1985.
- G. MORRA, P. CHATELAIN, P. TACKLEY et P. KOUMOUTSAKOS : Earth curvature effects on subduction morphology : Modeling subduction in a spherical setting. *Acta Geotechnica*, 4(2):95–105, mai 2008.
- F. NOCA, D. SHIELS et D. JEON : A comparison of methods for evaluating time-dependent fluid dynamic forces on bodies, using only velocity fields and their derivatives. *Journal of fluids and structures*, 13(5):551–578, juil. 1999.
- S. NONAKA, S. YOSHIBA, D. WATANABE, S. IKEUCHI, T. GOTO, W. F. MARSHALL et H. HAMADA : De novo formation of Left-Right asymmetry by posterior tilt of nodal cilia. *PLoS Biology*, 3(8):1467–1472, 2005.
- S. OSHER et R. FEDKIW : *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2003.
- N. PATANKAR, P. SINGH, D. JOSEPH, R. GLOWINSKI et T.-W. PAN : A new formulation of the distributed lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(9):1509–1524, sept. 2000.
- N. PATANKAR : A formulation for fast computations of rigid particulate flows. *Annual Research Briefs (Center for turbulence research)*, 2001.
- C. S. PESKIN : Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 25(3):220–252, nov. 1977.
- C. S. PESKIN : The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11, juil. 2003.
- R. PEYRET, T. D. TAYLOR et S. A. BERGER : Computational methods for fluid flow. *Physics Today*, 39(7):70–71, 1986.
- T. PHILLIPS et A. WILLIAMS : Viscoelastic flow through a planar contraction using a semi-lagrangian finite volume method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 87(2-3):215–246, nov. 1999.
- P. PLOUMHANS et G. WINCKELMANS : Vortex methods for high-resolution simulations of viscous flow past bluff bodies of general geometry. *Journal of Computational Physics*, 165(2):354–406, déc. 2000.
- P. PONCET : Topological aspects of three-dimensional wakes behind rotary oscillating cylinders. *Journal of Fluid Mechanics*, 517:27–53, 2004.
- P. PONCET : Finite difference stencils based on particle strength exchange schemes for improvement of vortex methods. *Journal of Turbulence*, 7:N23, jan. 2006.
- P. PONCET : Analysis of direct three-dimensional parabolic panel methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45(6):2259–2297, jan. 2007.
- P. PONCET : Analysis of an immersed boundary method for three-dimensional flows in vorticity formulation. *Journal of Computational Physics*, 228(19):7268–7288, oct. 2009.
- E. PUCHELLE, J. M. ZAHM et D. QUEMADA : Rheological properties controlling mucociliary frequency and respiratory mucus transport. *Biorheology*, 24(6):557–563, 1987.
- E. PURCELL : Life at low reynolds number. *American Journal of Physics*, 45(1):3–11, 1977.
- I. RAMIÈRE, P. ANGOT et M. BELLARD : A fictitious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196(4-6):766–781, jan. 2007.

- L. ROSENHEAD : The formation of vortices from a surface of discontinuity. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 134(823):170–192, nov. 1931.
- D. ROSSINELLI, M. BERGDORF, G.-H. COTTET et P. KOUMOUTSAKOS : GPU accelerated simulations of bluff body flows using vortex particle methods. *Journal of Computational Physics*, 229(9):3316–3333, mai 2010.
- D. ROSSINELLI et P. KOUMOUTSAKOS : Vortex methods for incompressible flow simulations on the GPU. *The Visual Computer*, 24(7-9):699–708, juil. 2008.
- Y. SAAD et M. SCHULTZ : GMRES : a generalized minimal residual method for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on scientific and statistical computing*, 7(3):856–869, 1986.
- J. K. SALMON et M. S. WARREN : Skeletons from the treecode closet. *Rap. tech., CiteSeerX*, 1994.
- M. J. SANDERSON et M. A. SLEIGH : Ciliary activity of cultured rabbit tracheal epithelium : beat pattern and metachrony. *Journal of Cell Science*, 47(1):331–347, jan. 1981.
- A. SARTHOU, S. VINCENT, J. P. CALTAGIRONE et P. ANGOT : Eulerian-Lagrangian grid coupling and penalty methods for the simulation of multiphase flows interacting with complex objects. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(8):1093–1099, 2008.
- R. SCARDOVELLI et S. ZALESKI : Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31(1):567–603, 1999.
- J. A. SETHIAN : *Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*. Cambridge University Press, juin 1999.
- J. A. SETHIAN et P. SMERKA : Level set methods for fluid interfaces. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 35(1):341–372, 2003.
- K. SETO, J. T. HOLLENSHEAD, A. T. WATSON, C. T. P. CHANG et J. C. SLATTERY : Determination of permeability distributions using NMR velocity imaging. *Transport in Porous Media*, 42(3):351–387, mars 2001.
- N. SHARMA et N. A. PATANKAR : A fast computation technique for the direct numerical simulation of rigid particulate flows. *Journal of Computational Physics*, 205(2):439–457, mai 2005.
- J. SHEN : On error estimates of the penalty method for unsteady Navier-Stokes equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 32(2):386–403, avr. 1995.
- J. SHERMAN et W. J. MORRISON : Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix. *The Annals of Mathematical Statistics*, 21(1):124–127, mars 1950.
- D. SMITH, E. GAFFNEY et J. BLAKE : Discrete cilia modelling with singularity distributions : Application to the embryonic node and the airway surface liquid. *Bulletin of Mathematical Biology*, 69(5):1477–1510, 2007a.
- D. SMITH, E. GAFFNEY et J. BLAKE : A viscoelastic traction layer model of muco-ciliary transport. *Bulletin of Mathematical Biology*, 69(1):289–327, 2007b.
- D. SMITH, E. GAFFNEY et J. BLAKE : Modelling mucociliary clearance. *Respiratory Physiology & Neurobiology*, 163:178–188, nov. 2008.
- J. A. SPARENBERG : Survey of the mathematical theory of fish locomotion. *Journal of engineering mathematics*, 44(4):395–448, 2002.
- G. STRANG : On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3):506–517, sept. 1968.
- P. SWARZTRAUBER et R. SWEET : Efficient FORTRAN subprograms for the solution of elliptic partial differential equations (abstract). *SIGNUM Newsl.*, 10(4), déc. 1975.

- R. A. SWEET : A parallel and vector variant of the cyclic reduction algorithm. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 9(4):761–765, juil. 1988.
- R. TEMAM : Sur l'approximation de la solution des équations de navier-stokes par la méthode des pas fractionnaires (i). *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 32(2):135–153, jan. 1969.
- M. THIRIET : *Tissue Functioning and Remodeling in the Circulatory and Ventilatory Systems*. Num. v.5 de Biomathematical and Biomechanical Modeling of the Circulatory and Ventilatory Systems. Springer, Dordrecht, 2012.
- J. WELCH, F. HARLOW, J. SHANNON et B. DALY : The MAC method. a computing technique for solving viscous, incompressible, transient fluid-flow problems involving free surfaces. *In Los Alamos Scientific Laboratory Report*. Los Alamos Laboratory, 1966.
- M. WOODBURY : Inverting modified matrices. *Memorandum report*, 42:106, 1950.
- T. S. YU, E. LAUGA et A. E. HOSOI : Experimental investigations of elastic tail propulsion at low reynolds number. *Physics of Fluids*, 18:091701, juin 2006.

Méthodes numériques pour l'écoulement de Stokes 3D: fluides à viscosité variable en géométrie complexe mobile ; application aux fluides biologiques

RÉSUMÉ

Ce travail propose des méthodes numériques pour la résolution du problème de Stokes en géométrie complexe pour des fluides non homogènes. Ce modèle décrit l'écoulement d'un fluide très visqueux, incompressible, dont la viscosité n'est pas uniforme mais dépend de la concentration d'un certain agent. D'un point de vue mathématique, il s'agit de résoudre un problème elliptique couplé à une équation de convection-diffusion, qui génèrent une dynamique non linéaire.

L'algorithme de résolution est basé sur une discrétisation hybride utilisant une grille et des particules. Des algorithmes à pas fractionnaires permettent de séparer la résolution des différents phénomènes pour profiter des avantages spécifiques à ces discrétisations: méthodes lagrangiennes adaptées à la convection et méthodes eulériennes pour la diffusion. Une méthode de pénalisation permet de gérer efficacement l'interaction entre le fluide et la géométrie mobile du domaine. Une méthode de projection itérative est développée pour ce problème quasi-statique, cela permet d'utiliser des solveurs rapides propices aux calculs en grande dimension. Plusieurs cas tests viennent valider la convergence, la conservation et les performances de l'algorithme en 3D.

Ce travail s'inscrit dans le contexte de l'étude de l'écoulement du mucus pulmonaire autour des cellules épithéliales ciliées tapissant les bronches. L'efficacité du transport du mucus, assurant la capture et l'expectoration des agents pathogènes, est étudiée en fonction des paramètres biologiques. D'autres simulations d'un micro-nageur et d'écoulements en milieux poreux complètent cette étude.

Mots clés: *Méthodes numériques pour les EDP, Mécanique des fluides 3D, Écoulements de Stokes, Méthodes particulières lagrangiennes, Interactions fluide-structure, Fluides non homogènes, Fluides biologiques*

Numerical methods for 3D Stokes flow: variable viscosity fluids in a complex moving geometry; application to biological fluids.

ABSTRACT

This work intends to provide numerical methods to solve the Stokes problem in a complex geometry for nonhomogeneous fluids. This model describes highly viscous flows, incompressible, whose viscosity is not uniform, depending on a certain agent concentration. From a mathematical point of view, it is an elliptic problem coupled to a convection-diffusion equation, generating a non linear dynamics.

The computational algorithm is based on an hybrid grid-particles discretization. A fractional-steps algorithm enable to separate the computation of the different phenomena involved, to take advantage of both these discretizations: Lagrangian methods are adapted to solve convection operators and Eulerian methods are used for diffusion. A penalization method enables an efficient treatment of the interaction between the fluid and the domain's complex moving geometry. An iterative projection method is developed for this quasi-static problem, it permits the use of fast solvers compatible with large dimension problems. Several test are presented to validate the convergence, the conservation and the performances of the algorithm in 3D.

The context of this work is the mucus flow in the lung, around the epithelium ciliated cells covering bronchus. The study focuses on the efficiency of mucus transport, which captures and expectorate pathogen agents, with respect to biological parameters. Other simulations of a micro-swimmer and a porous media flow supplement this study.

Key words: *Numerical methods for PDE, 3D Computational fluid dynamics, Stokes flow, Particle Lagrangian methods, Fluid-structure interactions, Non homogeneous fluids, Biological fluids*