



HAL
open science

Propagation d'ondes acoustiques dans une suspension de grains mobiles immergés : couplage de modèles discret et continu par la méthode des domaines fictifs

David Imbert

► **To cite this version:**

David Imbert. Propagation d'ondes acoustiques dans une suspension de grains mobiles immergés : couplage de modèles discret et continu par la méthode des domaines fictifs. Autre [cond-mat.other]. Université de Rennes, 2013. Français. NNT : 2013REN1S109 . tel-00955389

HAL Id: tel-00955389

<https://theses.hal.science/tel-00955389>

Submitted on 4 Mar 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.



THÈSE / UNIVERSITÉ DE RENNES 1
sous le sceau de l'Université Européenne de Bretagne

pour le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE RENNES 1

Mention : Physique

École doctorale Sciences de la Matière

présentée par

David IMBERT

Préparée à l'unité de recherche 6251 IPR
Institut de Physique de Rennes
UFR Structure et Propriétés de la Matière

**Propagation d'ondes
acoustiques dans une
suspension de grains
mobiles immergés :
couplage de modèles
discret et continu par
la méthode des
domaines fictifs**

**Thèse soutenue à Rennes
le 29 novembre 2013**

devant le jury composé de :

Jean-Pierre VILOTTE

Physicien à l'Institut de Physique du Globe de Paris / *rapporteur*

Jean-Yves DELENNE

Directeur de recherche à l'INRA / *rapporteur*

Sébastien MARTIN

Professeur à l'Université Paris Descartes / *examinateur et président du jury*

Loïc LE MARREC

Maître de conférence à l'Université de Rennes 1 / *examinateur*

Sean McNAMARA

Maître de conférence à l'Université de Rennes 1 / *directeur de thèse*

Yves LE GONIDEC

Chargé de recherche au CNRS / *co-directeur de thèse*

À ma famille,

Remerciements

Ce travail de thèse s'inscrit dans une collaboration locale et étroite entre l'Institut de Physique de Rennes et Géosciences Rennes, deux UMR de l'Université de Rennes 1 et du CNRS. Je remercie donc ces deux laboratoires pour m'avoir accueilli mais aussi la Région Bretagne pour avoir financé la majeure partie mon travail ainsi que l'Agence Nationale de la Recherche par l'intermédiaire du projet *StabInGraM*. En outre, il y a plusieurs personnes à qui je voudrais adresser des remerciements.

Je commencerais par remercier Jean-Pierre Vilotte et Jean-Yves Delenne pour avoir accepté la lourde tâche de rapporter ce travail de thèse ainsi que Sébastien Martin et Loïc Le Marrec pour avoir aussi accepté de faire partie de mon jury de thèse. Leurs questions et commentaires très pertinents lors de ma soutenance m'ont beaucoup apporté et m'ont montré l'intérêt qu'ils portaient à ce travail. Je remercie notamment Sébastien Martin pour le compte rendu détaillé qu'il m'a transmis afin de m'aider à effectuer les corrections de mon manuscrit. Enfin, je remercie chaleureusement mes directeurs de thèse, Sean McNamara et Yves Le Gonidec, qui m'ont encadré pendant ces trois années de thèse. Leurs connaissances et savoir-faire très complémentaires m'ont permis d'avancer rapidement sur ce sujet de thèse où plusieurs domaines scientifiques s'entremêlent. Leur sympathie, leur bonne humeur et leur sens de l'humour m'ont permis de réaliser ce travail de recherche dans des conditions que j'affectionne et qui me conviennent parfaitement. Je les remercie aussi pour leur confiance et leur soutien sans faille, spécialement durant les périodes de doute durant la rédaction du manuscrit. Ils m'ont toujours laissé une très grande liberté et une très grande autonomie pour conduire ce projet, notamment en ce qui concerne les grandes orientations du modèle numérique et les choix techniques, mais aussi en matière de communication des résultats.

Plus particulièrement, je souhaite remercier Sean McNamara pour sa disponibilité inégalable quand bien même je surgissais inopinément dans son bureau. Il a su répondre à toutes mes interrogations même si cela requérait un effort pour se pencher sur des détails techniques d'une méthode dont il n'est pourtant pas un spécialiste. De même, je remercie Yves Le Gonidec pour son regard critique, sa rigueur et l'attention qu'il a portée à toujours replacer ce travail dans son contexte, nous évitant ainsi de nous noyer dans l'océan des possibilités qu'offrait ce sujet original. Je tiens aussi à

remercier Loïc Le Marrec pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail et son aide précieuse sur la problématique acoustique au démarrage de la thèse.

Ensuite, je remercie les doctorants des milieux granulaires qui m'ont étroitement accompagné dans la joie et la bonne humeur pendant ces trois années, Mickaël (et Dyane), Antoine, Federico et Lucie qui sont maintenant devenus des amis. J'ai passé d'excellents moments avec vous et nulle doute que ces années de thèse auraient paru bien moins sympathique sans nos pauses cafés et nos soirées passées ensemble. Je pense aussi à tous les autres que j'ai pu côtoyés : les vétérans de *Thésardland* Imen, Merline, Duc, Reine-Marie, Dalila, Thao, mes collègues chercheurs Patrick, Hervé, et les autres mais aussi ceux des autres départements Martin, Rigo, Sébastien, Céline, Richard, Louis, Alexandre, Benjamin et Axelle. Je ne peux pas terminer sans un remerciement spécial à Valérie Ferri, dite *ultrawoman*, dont la bonne humeur inébranlable rayonne proportionnellement à sa gentillesse.

Pour terminer, je voudrais remercier tous mes proches qui ont suivi les péripéties de ma thèse. D'abord, mes parents qui m'ont permis d'accéder à ce niveau d'étude : j'ai conscience du sacrifice financier que cela a représenté pendant cinq ans et j'espère que ma vie futur me permettra de leur renvoyer l'ascenseur. Ensuite à mon frère, je souhaite un avenir radieux dans le côté obscur de la science ainsi que dans sa vie personnelle. Je remercie beaucoup Claire qui a suivi tous les rebondissements de cette thèse et qui m'a été d'un grand secours dans les moments difficiles et le brillant docteur Gaël sans qui je n'aurai peut-être pas fait cette thèse. Enfin, je remercie mes amis Marc, Vincent, Abdelilah, Mélissa, Matthias pour les moments partagés avec eux pendant ces trois années.

Table des matières

Introduction	13
I Modèle	17
1 Méthodes numériques adaptées aux milieux granulaires et aux ondes	19
1.1 Méthodes discrètes	19
1.2 Méthodes continues	21
1.2.1 Principe de la méthode des différences finies	22
1.2.2 Principe de la méthode des éléments finis	24
1.2.3 Principe de la méthode des domaines fictifs	27
1.2.3.1 Multiplicateurs de Lagrange surfaciques	28
1.2.3.2 Multiplicateurs de Lagrange distribués	29
1.2.3.3 Autres méthodes de la classe des domaines fictifs	30
1.2.4 Conclusion	30
2 Méthode des domaines fictifs pour coupler les ondes acoustiques et le mouvement de grains rigides	33
2.1 Description du problème	33
2.2 Équations régissant le fluide	34
2.2.1 Formulation forte	34
2.2.2 Formulation faible	36
2.3 Équation régissant les grains	38
2.4 Combinaison des équations	39
2.4.1 Conditions aux limites	39
2.4.2 Équation combinée du mouvement	40
2.4.3 Formulation par la méthode des domaines fictifs	40
2.4.3.1 Équation complémentaire pour le domaine des grains	41
2.4.3.2 Extension à l'ensemble du système	42
2.4.3.3 Multiplicateurs de Lagrange distribués	42
2.4.4 Équation de continuité	43

2.5	Conservation de l'énergie	44
3	Schéma numérique	47
3.1	Discrétisation spatiale	47
3.1.1	Maillage	48
3.1.2	Éléments finis	50
3.2	Discrétisation temporelle	53
3.2.1	Méthode de décomposition d'opérateurs	53
3.2.2	Résolution des équations physiques	55
3.2.2.1	Schéma d'Euler semi-implicite pour l'équation des ondes	55
3.2.2.2	Algorithme de Verlet pour le PFD	56
3.2.3	Algorithme d'Uzawa pour l'application des contraintes	57
3.2.4	Correction des positions	60
II	Confrontation des résultats numériques aux solutions analytiques et aspects énergétiques	61
4	Grain fixe soumis à une onde plane	65
4.1	Paramètres de l'expérience	65
4.2	Solution analytique des champs acoustiques	67
4.3	Résultats et méthodologie de post-traitement	69
4.4	Comparaison avec des éléments finis mixtes différents	76
4.4.1	Élément fini mixte $RT_0-P_1^+$	78
4.4.2	Élément fini mixte $P_1-P_1^+$	80
4.5	Erreur liée à la position du domaine fictif	80
4.6	Discussion	82
5	Grains mobiles soumis à une force de rappel	87
5.1	Cas d'un grain seul	89
5.1.1	Paramètres de l'expérience	89
5.1.2	Résultats dynamiques et acoustiques	89
5.1.3	Échanges d'énergie entre un grain et le fluide	91
5.2	Cas de deux grains	94
5.2.1	Paramètres de l'expérience	94
5.2.2	Résultats dynamiques et acoustiques	94
5.2.3	Échanges d'énergie entre deux grains	96
5.3	Discussion	98

6	Grain mobile soumis à une onde plane	101
6.1	Solution analytique de la vitesse d'un grain mobile	101
6.2	Résultats et comparaison avec le grain fixe	107
6.3	Erreur relative en fonction de la discrétisation	107
6.4	Vitesse d'un grain en fonction de la longueur d'onde	113
6.4.1	Paramètres de l'expérience	113
6.4.2	Résultats et méthodologie de post-traitement	114
6.4.3	Amplitude et déphasage de la vitesse du grain	115
6.5	Optimisation du rapport de maillages	118
6.6	Discussion	120
7	Suspension de grains mobiles soumis à une impulsion	123
7.1	Paramètres de l'expérience	123
7.1.1	Géométrie du domaine	123
7.1.2	Impulsion gaussienne	125
7.2	Résultats de la propagation de l'onde dans la suspension	126
7.3	Discussion	131
	Conclusions et perspectives	133
A	Conditions aux limites alternatives	135
A.1	Milieu infini	135
A.1.1	Conditions aux limites absorbantes	135
A.1.2	Couches absorbantes parfaitement adaptées	136
A.2	Milieu semi-infini semi-périodique avec source	138
A.2.1	Conditions aux limites semi-périodiques	140
A.2.2	Terme source	140
	Bibliographie	141
	Index	153
	Glossaire	155
	Table des figures	159
	Liste des tableaux	167
	Liste des algorithmes	169

Introduction

Les fonds marins constituent une très vaste étendue de couverture sédimentaire de texture très hétérogène. Il s'agit par exemple de différentes compositions du sédiment en termes de nature des minéraux, de leur granularité ou encore de leur teneur en eau, c'est-à-dire la porosité du milieu. Les fonds marins constituent ainsi des milieux diphasiques où coexistent une phase fluide d'eau de mer et une phase solide de grains complexes. Étant donnée l'étendue de ces interfaces granulaires, leur caractérisation nécessite la mise en œuvre de nouveaux systèmes acoustiques de subsurface (Ker, Le Gonidec, et Gibert, 2012) afin de recueillir des informations sur leur localisation, leur géométrie ou encore leur composition. Parmi les différentes configurations possibles des sondages géophysiques, les mesures en réflexion consistent à émettre une onde acoustique qui se propage dans la tranche d'eau et se réfléchit aux différentes interfaces définies par des contrastes d'impédance acoustique.

Afin de mieux comprendre les processus physiques mis en jeu, des expériences modèles sont élaborées en laboratoire, où l'hétérogénéité des sédiments peut être remplacée par une distribution contrôlée d'inclusions sphériques aux propriétés élastiques connues. De nombreuses expérimentations acoustiques ont été développées pour de tels milieux et ont permis d'étudier certains paramètres particuliers contrôlant le signal mesuré, tel que le comportement multi-échelle des hétérogénéités de volume (Le Gonidec, Gibert, et Proust, 2002; Gautier et Gibert, 2004). En effet, la réponse acoustique d'un milieu granulaire dépend fortement du rapport entre la longueur d'onde incidente et le diamètre des grains, récemment mise en évidence par une approche expérimentale basée sur les propriétés de la transformée en ondelettes et les propriétés effectives du milieu (Le Gonidec et Gibert, 2007). Mais l'état local des contraintes entre les inclusions du milieu impacte également fortement l'onde réfléchi (Tournat et coll., 2004), ce qui rend compte de la sensibilité du comportement d'un milieu granulaire soumis à une onde acoustique. L'information sur l'organisation interne d'un milieu granulaire est par conséquent difficilement accessible et le réseau de contact entre les grains rend le système d'autant plus complexe que des forces extérieures peuvent entrer en jeu.

Par ailleurs, Thirot, Le Gonidec, et Kergosien (2012) ont détecté des émissions acoustiques de forte amplitude provenant d'un milieu granulaire immergé lorsque celui-ci est lentement incliné et ce, avant l'avalanche finale. Pour ne citer que quelques travaux

récents sur le sujet, Staron, Vilotte, et Radjai (2002) ont mis en évidence la mobilisation intermittente et intense des forces de friction d'un milieu granulaire compact aussi soumis à une déstabilisation gravitaire. Les expériences de Nerone, Aguirre, Calvo, Bideau, et Ippolito (2003) ont confirmé la présence des « précurseurs » d'avalanche à la surface d'un milieu granulaire et celles de Zaitsev, Richard, Delannay, Tournat, et Gusev (2008) ont prouvé que les précurseurs de surface étaient accompagnés de réarrangements internes du milieu granulaire, en utilisant des sondages acoustiques. Enfin, Duranteau (2013) a observé récemment l'influence de l'état de surface des grains, et donc des contacts, dans la périodicité des précurseurs d'avalanche.

Mais ces approches expérimentales présentent des limitations difficiles à résoudre, d'ordre technique et méthodologique, et les modèles numériques constituent alors une approche complémentaire indispensable. En ce qui concerne l'exploitation des signaux acoustiques, des modèles numériques de propagation d'onde dans des milieux granulaires immergés existent mais restent cependant incomplets. En effet, une onde acoustique se propageant dans un milieu granulaire est susceptible de provoquer une mobilité des grains qui elle-même peut induire un champ acoustique. Autrement dit, l'énergie acoustique peut être transférée à la fois au travers des pores et des contacts entre grains.

D'une part, les méthodes discrètes négligent la matrice fluide : l'onde ne peut alors se propager qu'au travers du réseau de contacts du milieu granulaire (Mouraille, Mulder, et Luding, 2006). L'inertie du fluide comme l'air est telle que l'énergie transférée à travers les pores peut être négligée et des algorithmes de type « dynamique moléculaire » permettent de modéliser ces milieux. D'autre part, les méthodes continues utilisées en acoustique ne sont sensibles qu'aux contrastes d'impédance et ne prennent pas en compte les vibrations éventuelles du milieu granulaire. Pourtant, dans un liquide, l'énergie échangée entre les grains et le fluide ne peut pas être négligée. Donc, simuler des émissions acoustiques au sein d'un milieu granulaire immergé n'est actuellement pas accessible.

Par conséquent, un modèle numérique permettant de prendre en compte le transfert d'énergie entre les phases fluide et solide est nécessaire pour modéliser plus finement les propriétés acoustiques d'un milieu granulaire immergé. Nous proposons un modèle original afin de coupler le mouvement de grains rigides aux ondes acoustiques. Ce modèle est basé sur la méthode des domaines fictifs de Glowinski, Pan, Hesla, et Joseph (1999) et permet d'associer la méthode discrète de « dynamique moléculaire » gérant la dynamique des grains avec la méthode des éléments finis pour propager l'onde dans le fluide. Sa spécificité lui permet de prendre en compte le transport de quantité de mouvement à la fois par la matrice liquide et au travers des contacts entre grains.

Cette thèse se structure en deux parties : la première porte sur le développement du modèle numérique basé sur la méthode des domaines fictifs, et la seconde présente des expériences numériques associées. Dans la première partie, le premier chapitre

introduit les méthodes numériques adaptées aux milieux granulaires d'une part et aux ondes acoustiques d'autre part. Nous décrivons également les motivations de mise en œuvre de la méthode des domaines fictifs. Le second chapitre décrit la méthode des domaines fictifs utilisée pour assurer le couplage entre les équations de la dynamique et l'équation des ondes. Le troisième chapitre présente la construction du schéma numérique développé pour mettre en œuvre ce nouveau modèle.

Dans la seconde partie, nous présentons plusieurs expériences numériques simples afin de confronter les résultats numériques à des solutions analytiques. Nous commencerons dans le chapitre 4 par soumettre un grain rigide immobile à une onde plane afin d'étudier séparément la partie acoustique du modèle tout en offrant un point de comparaison pour la suite. Dans le chapitre 5, une première application simple du modèle sera envisagée avec des grains soumis à une force de rappel d'un ressort en l'absence d'onde incidente. Cette expérience permettra notamment d'étudier les échanges d'énergie entre grains et fluide. Une solution analytique sera construite au cours du chapitre 6 afin de confronter simultanément les résultats numériques de l'acoustique et de la dynamique dans le cadre de la diffraction d'un grain mobile par une onde plane. Pour terminer, dans le chapitre 7, nous appliquerons le modèle à grande échelle afin d'entrevoir ses possibilités futures.

Première partie

Modèle

Chapitre 1

Méthodes numériques adaptées aux milieux granulaires et aux ondes

Nous commençons par présenter dans ce chapitre les méthodes numériques habituellement utilisées pour modéliser les milieux granulaires ainsi que les ondes acoustiques ou sismiques. Traditionnellement elles sont très distinctes : la modélisation de milieux granulaires est basée sur des méthodes discrètes tandis que la propagation d'ondes est simulée avec des méthodes continues. Nous commencerons donc par décrire les méthodes discrètes comme la « dynamique moléculaire », notamment ses points forts expliquant sa popularité en physique des milieux discrets. Nous montrerons aussi ses limites et la nécessité de lui adjoindre une méthode continue. De nombreuses méthodes continues existent pour modéliser les ondes, nous présenterons les grands principes des méthodes des différences finies, des éléments finis et des domaines fictifs. Nous verrons enfin pourquoi la méthode des domaines fictifs comble le mieux les lacunes des méthodes discrètes tout en préservant ses avantages.

1.1 Méthodes discrètes

Les méthodes discrètes sont couramment utilisées en science dès lors que l'on étudie un grand nombre de particules en interaction entre elles. Ces méthodes permettent de se focaliser sur les lois physiques qui contrôlent les interactions entre les particules, et donc le comportement global de l'ensemble, en faisant abstraction de ce qui se passe à l'intérieur des particules. Ainsi ces méthodes sont réputées pour leur performance car il devient tout à fait possible de modéliser des millions de particules sur un simple PC. Les particules en question peuvent être variées et prouvent l'étendue des applications de ces méthodes : en chimie ce sont des molécules, en biologie des globules ou des bactéries, en physique des grains de sables, de poudre ou même des graines de céréales.

Dans le domaine des milieux granulaires, deux modèles sont principalement utilisés

pour modéliser des grains en interaction : le modèle des sphères molles « dynamique moléculaire » (Cundall et Strack, 1979) et celui des sphères dures « *event-driven* » (Walton et Braun, 1986). D'autres méthodes existent comme la méthode de Monte Carlo (Bird, 1994) ou le modèle de Lattice-Boltzmann (Flekkøy et Herrmann (1993); pour plus de détails sur toutes ces méthodes, voir Allen et Tildesley (1996) et Herrmann et Luding (1998).

L'algorithme de dynamique moléculaire tire son nom de son application initiale qui était d'étudier la dynamique de molécules soumises à des potentiels d'interaction (Alder et Wainwright, 1959). Dans tous les cas le principe général est le même (McNamara, 2010) : le modèle de dynamique moléculaire permet de simuler une collection de N_g corps obéissant au principe fondamental de la dynamique (PFD) décrit par l'équation différentielle :

$$m_k \frac{d\mathbf{X}_k}{dt} = \mathbf{F}_k \quad \forall k = 1, 2, \dots, N_g \quad (1.1)$$

avec m_k la masse du corps k et \mathbf{X}_k sa position. La nature de la force extérieure \mathbf{F}_k agissant sur le corps est choisie en total liberté et dépend du domaine d'application de l'algorithme ce qui donne beaucoup de souplesse à la méthode.

La dynamique moléculaire est construite sur l'hypothèse que les grains sont rigides et incompressibles de sorte que chaque grain sphérique k puisse être entièrement caractérisé avec la position de son centre \mathbf{X}_k et son rayon R_k . Par conséquent, toute la physique et notamment le calcul des forces reposent sur l'interpénétration δ des grains (fig. 1.1). C'est la raison pour laquelle la dynamique moléculaire est appelée « modèle de sphères molles ». Concrètement on définit une force de contact normale parallèle à la direction de la collision $\hat{\mathbf{n}}$ dépendant de l'interpénétration δ pour que deux grains se repoussent lors d'une collision. La relation entre la valeur de la force de contact et l'interpénétration δ peut être linéaire ($\|\mathbf{F}_k\| \propto \delta$) comme pour un ressort, amortie ou non, ou bien non-linéaire comme le suggère le modèle de Hertz (1881) avec une dépendance en $\|\mathbf{F}_k\| \propto \delta^{\frac{3}{2}}$ (Popov, 2010). Aux forces normales peuvent également s'ajouter des forces tangentielles (orientées selon $\hat{\mathbf{t}}$) simulant la friction entre les grains (Cundall et Strack, 1979).

À l'opposé, le modèle de sphères dures *event-driven* représente le cas limite de la dynamique moléculaire quand $\delta \rightarrow 0$ et donc sans interpénétration (McNamara, 2010). Pour être efficace, ce modèle part de l'hypothèse que les grains ont beaucoup d'énergie comme dans un gaz de granulaires (Brilliantov, Spahn, et Hertzsch, 1996). Dans ce cas, des collisions se produisent à des instants réguliers et la probabilité que trois grains interagissent en même temps est nulle. Le modèle utilise les vitesses des grains précédant la collision et un coefficient de restitution basé sur les paramètres physiques des grains (Schwager et Pöschel, 2007) pour calculer les vitesses après la collision.

Finalement, pour étudier des milieux granulaires en quasi-statique, l'algorithme de dynamique moléculaire est souvent privilégié. Il permet de rassembler une multitude d'informations sur les propriétés géométriques et mécaniques de l'assemblage de grains.

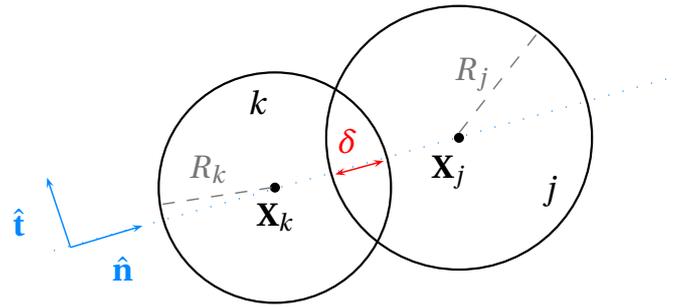


FIGURE 1.1 – Schéma de l'interpénétration de deux particules avec la méthode de dynamique moléculaire (ou modèle de sphères molles). $\hat{\mathbf{n}}$ et $\hat{\mathbf{t}}$ sont les vecteurs unitaires du référentiel de la collision et δ la distance d'interpénétration.

Par l'intermédiaire des modèles de force utilisés et de leurs paramètres, la dynamique moléculaire permet plus particulièrement de se focaliser sur l'effet des contacts sur le comportement global du milieu granulaire. Or, nous avons vu que ces contacts jouaient un rôle essentiel notamment pour la prédiction d'avalanches de milieux granulaires (Duranteau, 2013). Mais ils sont aussi déterminants pour expliquer d'autres phénomènes tels que la formation d'arches, de bandes de cisaillement, etc.

Enfin, les contacts peuvent tout aussi bien servir à propager une onde sonore (Mouraille et coll., 2006; Mouraille et Luding, 2008) comme le ferait un système constitué de masses et de ressorts connectés. Seulement, cela suppose que les ondes ne se propagent que dans le squelette du milieu granulaire puisque le modèle de dynamique moléculaire ne prend absolument pas en compte la matrice entourant les grains. Cette hypothèse est vérifiée quand le milieu granulaire est dans le vide ou dans de l'air car le contraste d'impédance, qui caractérise la résistance d'un milieu au passage de l'onde, est très faible (de l'ordre de 10^{-5} avec du verre). Au contraire, lorsque le milieu granulaire est immergé dans un liquide comme de l'eau, le contraste d'impédance atteint 0.1 ce qui n'est plus négligeable. Par conséquent la matrice fluide doit alors être prise en compte en utilisant une méthode numérique continue.

1.2 Méthodes continues

Les méthodes continues permettent de résoudre numériquement les équation aux dérivées partielles (EDP) comme l'équation de Navier-Stokes ou l'équation des ondes. Les inconnues de ces équations sont des champs : en acoustique, ce sont typiquement les champs de pression et de vitesse. Les équations différentielles acceptent généralement tout un ensemble de solutions qu'il faut restreindre en s'aidant par exemple des conditions aux limites.

Nous présentons dans cette section les méthodes candidates à un couplage avec

la méthode de dynamique moléculaire. D'abord, nous nous intéresserons à la méthode des différences finies pour sa simplicité et ses performances. Ensuite, nous nous tournerons vers la méthode des éléments finis connue pour fournir des moyens robustes de contrôle des conditions aux limites. Enfin nous nous pencherons sur la méthode des domaines fictifs qui est plus récente et dérive de celle des éléments finis.

1.2.1 Principe de la méthode des différences finies

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées dans l'équation par des formules de différentiation approchées. Elle est régulièrement utilisée pour discrétiser à la fois l'espace et le temps. La méthode la plus couramment utilisée pour approcher une différentielle est d'effectuer un développement de Taylor au point P_i où on cherche la solution ainsi qu'en d'autres points voisins P_{i-1} , P_{i+1} , etc. L'ordre du développement de Taylor où l'on choisit de s'arrêter donne l'erreur de troncature du schéma numérique.

Le schéma explicite consiste à remplacer l'inconnue de l'équation par le développement de Taylor : on obtient alors une formule « explicite » qui permet de calculer la dérivée en fonction des points déjà connus. Généralement les schémas explicites sont mis en avant car les programmes sont ainsi plus rapides à exécuter et moins coûteux en mémoire vive qu'avec des schémas implicites. En revanche, les schémas explicites sont soumis à une condition de stabilité, aussi appelée « condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) » (1956) qui fixe le pas de discrétisation maximal pour assurer la convergence du schéma. En acoustique, cette condition se traduit par une fréquence maximale à ne pas dépasser. Le schéma implicite est aussi construit sur un développement de Taylor, mais à l'envers. On obtient non pas une formule, mais une nouvelle équation à résoudre. Cet inconvénient est compensé par une très bonne stabilité dès lors que le schéma est appliqué à des équations linéaires.

Les points de calcul sont disposés aux intersections d'un maillage qui est régulier (voir l'exemple figure 1.2) et éventuellement raffiné par endroit. On remarque que dès que l'interface de la structure étudiée n'est pas horizontale ou verticale, on commet une erreur directement liée à la finesse du maillage utilisé. Le problème est moindre en géophysique lorsqu'on étudie les couches de matériaux à l'intérieur du sol puisqu'elles sont généralement parallèles à la surface.

Le succès de la méthode des différences finies vient avant tout du fait qu'elle est basée sur un concept simple à appréhender, qu'elle est facile à implémenter et robuste. Cependant, la méthode des différences finies n'en est pas moins simpliste : depuis les premiers schémas formalisés par Euler (1796) à l'ordre 1, puis par Runge (1895) et Kutta (1901) pour des ordres supérieurs, de nombreux autres schémas numériques ont vu le jour notamment pour accompagner l'essor des ordinateurs dès les années 50. Dans ce cas, la construction de l'algorithme est un peu plus complexe, mais la stabilité et la précision du schéma est meilleure. On peut citer l'exemple de l'algorithme de

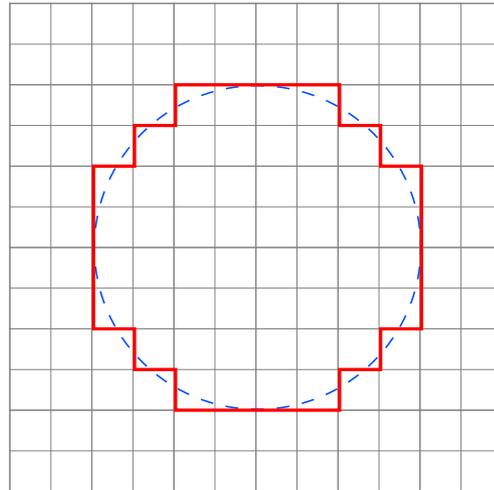


FIGURE 1.2 – Maillage d'un disque par la méthode des différences finies. Le contour rouge en marches d'escalier représente la discrétisation du disque bleu en pointillés. Les points de calcul se situent aux intersections des droites grises.

« prédiction-corrrection » développé par Gear (1967) et l'algorithme de Verlet (1967) souvent utilisés pour discrétiser le temps dans les algorithmes de dynamique moléculaire.

La méthode des différences finies est très utilisée en sismique pour discrétiser à la fois l'espace et le temps (Kosloff et Kessler, 1990). Pour l'équation des ondes scalaire (sous sa formulation en pression), Dablain (1986) a développé des schémas numériques d'ordre élevé afin de limiter le phénomène de dispersion numérique propre aux schémas explicites. Ensuite, Virieux (1986) a construit un schéma aux différences finies pour la formulation mixte de l'équation des ondes exprimée en termes de vitesses et contraintes (ou « équation de l'élastodynamique ») où les degrés de libertés des champs de vitesse et de contrainte sont placés sur des grilles décalées.

Un problème récurrent avec la méthode des différences finies est lié aux interfaces qui ne suivent pas les directions du maillage (comme sur la figure 1.2). Pour parer à cela, des techniques plus poussées comme les méthodes d'interface immergée (LeVeque et Li, 1994) ont été mises au point. Dans ce cas, en plus des schémas classiques de différences finies, des schémas spécifiques sont intégrés pour traiter localement les problèmes aux interfaces. Ils sont essentiellement basés sur les conditions de saut des solutions analytiques de l'équation des ondes. Ainsi le problème est traité quel que soit l'emplacement de l'interface dans le maillage, d'où le terme « immergé ». Par ailleurs, Lombard (2002) et Lombard et Piraux (2004) ont généralisé la méthode d'interface immergée pour l'acoustique (Zhang et LeVeque, 1997) pour la rendre applicable avec n'importe quel schéma aux différences finies et l'ont appelé « *Explicit Simplified Interface Method* (ESIM) ». Néanmoins, la méthode ESIM n'a pas encore été développée

à trois dimensions et n'a pas été conçue pour fonctionner à forte concentration de particules : le problème devient plus compliqué à résoudre quand il y a des contacts 1D, c'est-à-dire deux interfaces côté à côté, et n'est pas encore traité pour des contacts 2D à notre connaissance. Toujours dans l'optique d'améliorer le traitement des interfaces, Lombard, Piraux, Gélis, et Virieux (2008) ont récemment construit une nouvelle méthode permettant d'incorporer des bordures de forme quelconque dans les schémas aux différences.

1.2.2 Principe de la méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis (voir Williamson, 1980, pour des détails historiques) s'appuie sur la formulation variationnelle, ou encore « formulation faible », d'une équation aux dérivées partielles elle-même qualifiée de « formulation forte ». Le terme « faible » vient du fait que le degré de dérivation de la solution est moins grand que celui de l'équation originelle si bien que la formulation faible impose moins de régularité à la solution que la formulation forte. Prenons l'exemple très simple de l'équation de Poisson définie sur un domaine quelconque Υ :

$$-\Delta\phi = f \text{ dans } \Upsilon \quad (1.2)$$

$$\phi = 0 \text{ sur } \partial\Upsilon \quad (1.3)$$

avec ϕ le champ inconnu et f une fonction connue. Pour obtenir la formulation faible, on multiplie les termes de l'équation par des fonctions tests et on intègre chaque terme sur le domaine de définition du problème.

$$-\int_{\Upsilon} \Delta\phi \psi \, d\mathbf{x} = \int_{\Upsilon} f \psi \, d\mathbf{x} \quad (1.4)$$

Ensuite, on utilise les formules de Green pour abaisser le degré de dérivation de la solution au profit de la fonction test.

$$\int_{\Upsilon} \Delta\phi \psi \, d\mathbf{x} = -\int_{\Upsilon} \nabla\phi \cdot \nabla\psi \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Upsilon} \frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{n}} \psi \, d\ell \quad (1.5)$$

avec $\partial\Upsilon$ la bordure du domaine Υ et \mathbf{n} le vecteur unitaire normal à cette bordure. En injectant l'équation 1.5 dans 1.4, on aboutit à la formulation faible telle qu'elle serait utilisée avec la méthode des éléments finis :

$$\int_{\Upsilon} \nabla\phi \cdot \nabla\psi \, d\mathbf{x} = \int_{\Upsilon} f \psi \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Upsilon} \frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{n}} \psi \, d\ell \quad (1.6)$$

Enfin on peut parfois tirer partie des conditions aux bords pour simplifier l'expression obtenue. Ici, la condition de Dirichlet (1.3) impose une valeur de la solution aux

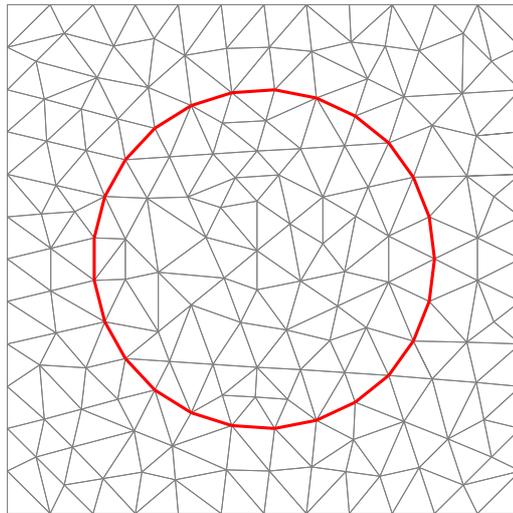


FIGURE 1.3 – Maillage d'un disque par la méthode des éléments finis.

frontières : les fonctions ϕ et ψ doivent donc seulement vérifier cette hypothèse. Si la condition aux bords imposait une valeur de la dérivée $\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{n}}$, on parlerait de condition de Neumann et on pourrait simplifier d'avantage l'expression obtenue.

La formalisation du concept des éléments finis consiste en somme à discrétiser la formulation variationnelle. Avec cette méthode, une solution approchée est calculée en construisant une fonction test continue par morceaux sur un maillage d'éléments finis, c'est-à-dire des subdivisions du domaine de définition du problème (fig. 1.3). Un élément fini constitue une maille du maillage : en 2D il prend généralement la forme d'un triangle ou d'un quadrilatère. La fonction test choisie, souvent un polynôme de Lagrange, dépend de paramètres indéfinis qui représentent généralement la valeur de la fonction ou de ses dérivées en des points caractéristiques de chaque maille (sommets, barycentre, milieux des côtés, etc.). Ensuite, le calcul de l'intégrale sur tous les éléments aboutit à un système linéaire avec autant d'équations qu'il y a de paramètres indéfinis à trouver.

Si le choix des fonctions tests est cohérent, on converge alors vers la solution à mesure qu'on raffine le maillage. L'ordre de convergence de la méthode est intimement lié à l'ordre de l'élément fini choisi pour approximer la fonction test. D'ailleurs, il existe une très grande variété de types d'éléments finis dans la littérature : les plus répandus sont les éléments finis de Lagrange P_k basés sur des polynômes de Lagrange d'ordre k et l'élément fini vectoriel de Raviart et Thomas (1977) RT_k .

La figure 1.3 montre un exemple de maillage d'éléments finis triangulaires utilisé pour discrétiser un disque. On remarque que le maillage est beaucoup plus complexe que celui de la méthode des différences finies. Des algorithmes spécifiques comme la triangulation de Delaunay (1934) sont d'ailleurs nécessaires pour le construire. Néan-

moins, de cette manière, le maillage de la méthode des éléments finis épouse le contour du disque contrairement au maillage de la méthode des différences finies. C'est l'avantage principal de cette méthode : elle permet de discrétiser des géométries plus complexes dès lors que la normale de cette géométrie peut être définie. Toutefois, dans un problème d'évolution où l'interface se déplace au cours du temps, l'avantage se transforme en inconvénient puisque l'intégralité du maillage doit être reconstruit.

La méthode des éléments finis est lourde en mémoire vive car elle nécessite le stockage des matrices représentant le système linéaire à résoudre. De plus, la résolution du système linéaire nécessite l'utilisation d'un *solver* ce qui est plus lent qu'avec un schéma explicite aux différences finies. L'implémentation d'un programme d'éléments finis est aussi plus complexe car des parties du code comme le mailleur réalisant la triangulation du domaine (Geuzaine et Remacle, 2009), l'élément fini (chapitre 3, ou le *solver* (Davis, 2006) font l'objet de sujets de recherche à part entière. Par conséquent, ces programmes sont aussi beaucoup plus lourds que les programmes basés sur la méthode des différences finies. On préfère souvent utiliser des bibliothèques ou des programmes existants, libres (FreeFEM++, Hecht, 2012) ou commerciales (ANSYS®, COMSOL Multiphysics®), car la construction d'un code d'éléments finis est un projet à part entière. Cela permet à l'utilisateur de se focaliser directement sur la modélisation d'un problème précis sans avoir à construire lui-même le mailleur, le *solver*, etc.

Lorsque deux espaces d'éléments finis sont utilisés pour approximer deux variables physiques différentes, on parle alors d'éléments finis mixtes. Les éléments finis mixtes sont utiles en acoustique pour exploiter la formulation mixte de l'équation des ondes exprimée en termes de pressions et vitesses et écrite sous la forme d'un système de deux équations différentielles du premier ordre. Elle permet non seulement d'accéder aux valeurs du champ de pression et du champ de vitesse, mais aussi d'utiliser une condition aux bords absorbante très efficace en acoustique : les couches absorbantes parfaitement adaptées, de l'anglais « *Perfectly Matched Layer* (PML) » (Berenger, 1994) (présentées en annexe A p. 135).

Des outils fondamentaux pour l'analyse des éléments finis mixtes ont été mis au point par Crouzeix et Raviart (1973) puis une analyse générale des méthodes mixtes a été développée par Brezzi (1974). S'en suit l'élément fini de Raviart et Thomas (1977) développé en 2D, puis étendu en 3D par Nédélec (1980). Des études approfondies ont été réalisées par Bécache, Joly, et Tsogka (2000) et Cohen et Fauqueux (2000) sur des éléments finis mixtes applicables à l'équation des ondes acoustiques afin de caractériser précisément l'erreur obtenue et d'optimiser les systèmes linéaires. La théorie des éléments finis mixte est encadrée par des lois mathématiques strictes qui permettent d'assurer une convergence optimale vers la solution. Néanmoins, Li, Arbogast, et Huang (2009) ont récemment montré qu'il était possible de coupler simplement des éléments finis traditionnels comme les éléments finis de Lagrange pour former un élément mixte. Cela permet d'utiliser des éléments finis basiques à portée de tout programme d'élé-

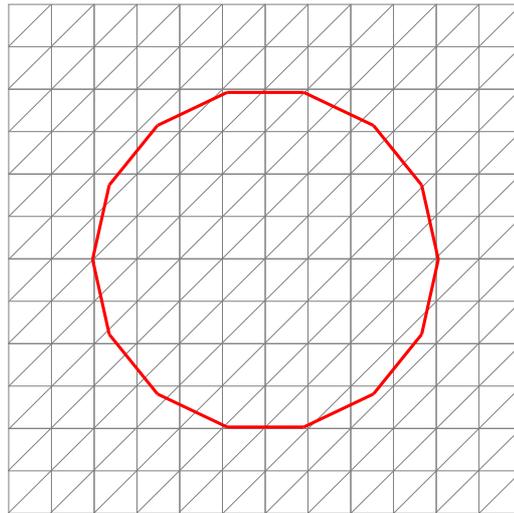


FIGURE 1.4 – Maillage d'un disque par la méthode des domaines fictifs. Le maillage gris est totalement indépendant du maillage rouge.

ment fini. Comme on s'écarte des limites mathématiques, l'erreur n'est plus optimale et des conditions supplémentaires sur la régularité du maillage et la solution sont nécessaires pour converger vers la solution.

1.2.3 Principe de la méthode des domaines fictifs

La méthode des domaines fictifs (Saul'ev, 1963) représente un compromis entre la méthode des différences finies et celle des éléments finis. Elle est basée sur la méthode des éléments finis, mais le maillage et la formulation variationnelle utilisés sont différents. Ainsi, la méthode des domaines fictifs revient à utiliser deux maillages indépendants superposés (voir l'exemple fig. 1.4) : le premier est régulier et indépendant du temps problème et le second est non-structuré et peut dépendre du temps. D'une part l'utilisation d'un maillage régulier se rapproche de la méthode des différences finies et confère la possibilité d'utiliser des *solvers* rapides. D'autre part le second maillage permet de réduire un des inconvénients de la méthode des différences finies à savoir l'approximation de la géométrie. Par conséquent, la structure étudiée peut être déplacée au cours du temps sans pour autant remailler l'intégralité du domaine, contrairement à la méthode des éléments finis.

L'usage de ces deux maillages implique d'avoir au préalable exprimé la formulation variationnelle en termes d'intégrales sur le domaine régulier d'une part et sur le domaine du disque d'autre part. Dès lors, comme il n'existe plus de séparation physique entre le disque et sa matrice dans le domaine régulier, différentes méthodes existent pour prendre en compte les conditions aux limites et les contraintes imposées. Pour

commencer, nous nous intéressons à celles basées sur l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange : d'abord les multiplicateurs de Lagrange surfaciques définis uniquement sur la frontière du disque, puis les multiplicateurs de Lagrange distribués à l'intérieur du disque. Enfin, nous évoquerons d'autres méthodes de la classe des domaines fictifs.

1.2.3.1 Multiplicateurs de Lagrange surfaciques

Babuška (1973) fut le premier à avoir eu l'idée d'utiliser des multiplicateurs de Lagrange avec la méthode des domaines fictifs pour imposer de façon faible les contraintes ou conditions aux limites d'un problème. En effet, les multiplicateurs de Lagrange permettent justement de déterminer les points stationnaires d'une fonction dérivable *sous contrainte*. La méthode des domaines fictifs basée sur des multiplicateurs de Lagrange consiste donc à ajouter dans la formulation variationnelle autant de multiplicateurs de Lagrange qu'il y a de contraintes imposées. La valeur des multiplicateurs de Lagrange étant inconnue, il faut également adjoindre une équation par contrainte à cette formulation variationnelle. Finalement, le système obtenu peut être résolu plus simplement avec des méthodes numériques comme celle du gradient conjugué (Arrow, Hurwicz, et Uzawa, 1958).

Depuis les travaux de Babuška (1973), de nombreuses applications ont vu le jour dans des domaines variés de la physique comme la mécanique des fluides ou l'acoustique. Les premiers développements de la méthode des domaines fictifs ont été réalisés pour les équations elliptiques avec des conditions aux limites de Dirichlet d'une part (Glowinski, Pan, et Periaux, 1994; Girault et Glowinski, 1995) et de Neumann d'autre part (Glowinski, Pan, Wells Jr., et Zhou, 1996; Joly et Rhaouti, 1999). Dans la foulée, Glowinski, Pan, et Periaux (1995) ont appliqué la méthode aux équations de Navier-Stokes pour modéliser une aile d'avion dans un flux d'air.

Par ailleurs, la méthode des domaines fictifs a été adaptée pour l'équation des ondes dans le cadre de problème de diffusion, d'abord en électromagnétisme par Collino, Joly, et Millot (1997), puis en acoustique par Heikkola, Kuznetsov, Neittaanmäki, et Toivanen (1998). Ensuite, Tsogka (1999) et Bécache, Joly, et Tsogka (2001) ont implémenté la méthode pour l'équation de l'élastodynamique afin de modéliser la propagation d'ondes élastiques dans des milieux complexes. Par la même occasion, ils introduisirent l'utilisation d'éléments finis mixtes basés sur ceux de Raviart et Thomas (1977) dans la méthode des domaines fictifs. Glowinski et Lapin (2004) ont développé la méthode pour la formulation mixte de l'équation des ondes acoustiques avec des conditions de Dirichlet en se basant aussi sur les éléments finis de Raviart-Thomas. Toutefois Bécache, Rodríguez, et Tsogka (2009) ont révélé que ces éléments finis mixtes qui convergent pourtant en l'absence d'obstacles ne le font pas forcément en présence du domaine fictif, particulièrement quand celui-ci présente une orientation diagonale.

L'introduction du mouvement dans la méthode des domaines fictifs a d'abord été faite pour l'équation de Navier-Stokes par Glowinski, Pan, et Periaux (1997) qui ont

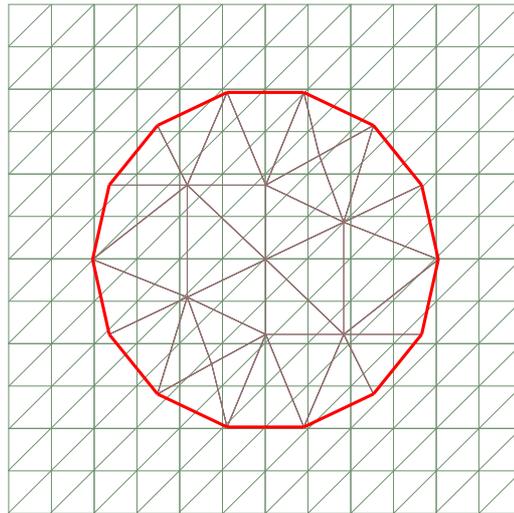


FIGURE 1.5 – Maillage d'un disque par la méthode des domaines fictifs basée sur les multiplicateurs de Lagrange distribués : un maillage régulier (en vert) et l'autre non structuré (en pourpre).

simulé des disques immergés se déplaçant selon une trajectoire donnée. En acoustique, Rhaoui, Chaigne, et Joly (1999) ont ensuite modélisé une membrane de timbale qui, soumise à une force, se déforme et génère des ondes sonores. Pourtant, à ce jour c'est la seule application en acoustique où le domaine fictif est libre de se déplacer ou de se déformer. À l'opposé, cette notion de mouvement a été beaucoup développée en mécanique des fluides grâce à l'introduction de multiplicateurs de Lagrange distribués.

1.2.3.2 Multiplicateurs de Lagrange distribués

Une méthode des domaines fictifs dérivée basée sur des multiplicateurs de Lagrange « distribués » a été développée par Glowinski et Kuznetsov (1998). La différence réside dans le fait que les multiplicateurs de Lagrange ne sont plus uniquement localisés sur la frontière de la structure, mais aussi disséminés à l'intérieur (fig. 1.5). Concrètement cette avancée a permis d'implémenter des contraintes de corps rigide à l'intérieur de particules en mouvement (Glowinski, Pan, et Périaux, 1998). De cette façon, la vitesse de la particule est la même partout à l'intérieur de ses frontières si bien qu'on peut déterminer la dynamique de la particule rien qu'avec la position, la vitesse et l'accélération de son centre. En d'autres termes, cette propriété facilite grandement le couplage de la méthode des domaines fictifs avec la méthode de dynamique moléculaire (section 1.1).

Dès lors, la méthode des domaines fictifs avec multiplicateurs de Lagrange distribués a été exploitée pour simuler la sédimentation de particules mobiles (Glowinski, Pan, Hesla, et Joseph, 1999; Patankar, Singh, Joseph, Glowinski, et Pan, 2000), introdui-

sant ainsi le couplage entre les équations de la dynamique et celles de Navier-Stokes. Glowinski, Pan, Hesla, Joseph, et Périaux (2001) ont également testé cette technique en remplaçant les particules par des ailes d'avion. Plus récemment, des problèmes de sédimentation plus élaborés ont été abordés notamment avec des particules de géométries plus complexes telles que des triangles ou des carrés (Wachs et coll., 2010). De plus, les interactions entre les particules sont de plus en plus gérées par des méthodes d'éléments discrets plus abouties issues de la physique des milieux granulaires. Enfin des applications très concrètes voient le jour comme par exemple la simulation en 3D des valves du cœur (Pati, Ladipo, Paniagua, et Glowinski, 2011).

En revanche, la méthode des domaines fictifs avec multiplicateurs de Lagrange distribués s'est moins répandue dans le domaine de l'acoustique. Elle a tout de même été développée pour l'équation des ondes acoustiques par Bokil (2003) et Bokil et Glowinski (2005) pour traiter des problèmes de diffusion d'obstacles rigides et immobiles.

1.2.3.3 Autres méthodes de la classe des domaines fictifs

En premier lieu, la *fat boundary method* (FBM, Maury, 2001) est inspirée de la méthode des domaines fictifs basée sur les multiplicateurs de Lagrange distribués. Toutefois, dans ce cas, le domaine fictif n'est pas étendu à l'intérieur de la structure, mais localisé autour de la frontière de la structure : cette frontière « épaisse » donne son nom à la méthode. On peut également citer la méthode des éléments finis virtuels (Bertrand, Tanguy, et Thibault, 1997) qui présente une alternative pour discrétiser le domaine fictif volumique en se basant sur une méthode de collocation. En deuxième lieu, la méthode appelée *immersed boundary method* (IBM, Peskin, 2002) s'appuie sur un mélange de variables eulériennes définies sur un maillage cartésien et de variables lagrangiennes définies sur un maillage curvilinéaire que l'on peut déformer et déplacer au cours du temps. Le couplage des deux maillages se fait non pas avec des multiplicateurs de Lagrange mais avec des forces appliquées aux frontières. En troisième lieu, Khadra, Angot, Parneix, et Caltagirone (2000) utilisent une méthode de pénalisation pour prendre en compte la géométrie de la structure. Des termes de contrôle sont directement introduits dans les équations du problème. En dernier lieu, des méthodes de domaines fictifs sont développées en s'attachant à remplacer les éléments finis ou les différences finies utilisés pour le maillage régulier par d'autres méthodes spécifiques comme la *finite cell method* (FCM, Parvizian, Düster, et Rank, 2007).

1.2.4 Conclusion

Il existe de nombreuses méthodes pour simuler la propagation d'une onde acoustique dans un milieu. La méthode des différences finies est naturellement plus adaptée aux milieux continus ou aux milieux hétérogènes simples, même si des méthodes existent pour améliorer le traitement des discontinuités. À l'opposé, la méthode des

éléments finis est spécialement conçue pour faire face à toute forme de discontinuité et serait donc plus adéquate pour un milieu hétérogène comme un milieu granulaire.

Néanmoins, la géométrie du milieu hétérogène n'est pas le seul critère à prendre compte. En effet, dans un milieu granulaire compact, chaque grain soumis aux forces d'interaction de ses voisins effectue des micro-déplacements autour de sa position d'équilibre. De plus, des réarrangements de plus grande ampleur peuvent se produire lors lorsque le milieu granulaire est excité (comme par de la déstabilisation gravitaire par exemple). Donc la méthode continue choisie doit être adaptée aux déplacements de particules : c'est le cas de la méthode des domaines fictifs.

Par ailleurs, la méthode des domaines fictifs basée sur les multiplicateurs de Lagrange distribués permet facilement d'implémenter des contraintes aux particules. Cette particularité va permettre de coupler la méthode des domaines fictifs à la méthode de dynamique moléculaire. D'une part le mouvement des particules sera relié à l'onde acoustique et réciproquement, d'autre part l'hypothèse de rigidité des particules sur laquelle est fondé l'algorithme de dynamique moléculaire sera préservée.

Finalement, la méthode des domaines fictifs basée sur les multiplicateurs de Lagrange distribués semble toute trouvée pour coupler le mouvement de grains rigide aux ondes acoustiques. Hélas, elle n'existe pas encore et c'est l'objet de notre prochain chapitre.

Chapitre 2

Méthode des domaines fictifs pour coupler les ondes acoustiques et le mouvement de grains rigides

Dans ce chapitre sont développées les étapes de construction de la méthode des domaines fictifs pour coupler les ondes acoustiques et le mouvement de grains rigides. La première étape consiste à décrire le problème et les équations en vigueur. Puis les équations régissant le fluide seront simplifiées avant d'être transformées sous forme variationnelle. Le PFD régissant la dynamique des grains sera alors présenté. L'étape clé consiste à combiner le PFD avec l'équation des ondes en utilisant la méthode des domaines fictifs. Enfin, on procèdera à une vérification de la conservation de l'énergie des nouvelles équations.

2.1 Description du problème

Soit un domaine Ω englobant l'ensemble des grains G et la matrice fluide $\Omega \setminus G$ (figure 2.1). Le domaine des grains est lui-même décomposé en N_g sous-domaines G_k avec k l'indice du grain : $G = \bigcup G_k$. On appelle Γ la frontière du domaine Ω et ∂G la frontière du domaine G . On définit également le vecteur unitaire normal sortant \mathbf{n}_k de la frontière G_k .

Les grains appartenant au domaine G sont rigides, incompressibles et mobiles pour satisfaire les hypothèses de la dynamique moléculaire. On considère que le fluide est parfait : il est donc non-visqueux, ne conduit pas la chaleur et est isentropique. Ces hypothèses vont permettre par la suite de simplifier le problème initial puisque le rôle du fluide dans ce modèle est uniquement de transporter l'énergie acoustique d'un grain à un autre et pas de simuler des écoulements complexes.

On se place dans le cadre d'un problème à deux dimensions. La taille du domaine

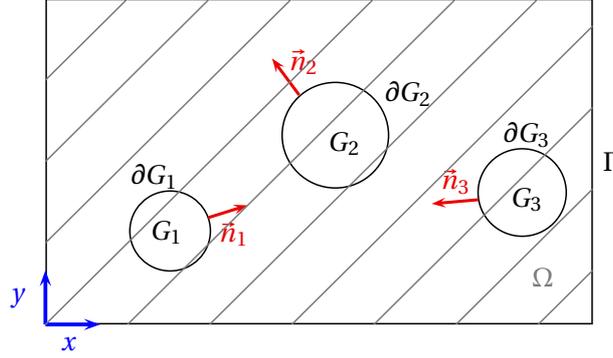


FIGURE 2.1 – Schéma du système avec les différents ensembles

Ω est $L_x \times L_y$. Les domaines G_k sont caractérisés par la position de leur centre \mathbf{X}_k et le rayon R_k (voir aussi la figure 1.1 p. 21). L'origine du repère orthonormal $(O, \mathbf{x}, \mathbf{y})$ est située en bas à gauche du domaine Ω .

On appelle c_0 la vitesse de propagation des ondes acoustique dans le fluide et ρ_0 sa masse volumique. La masse volumique est la même pour tous les grains : ρ_g . L'hypothèse de rigidité des grains imposée par la dynamique moléculaire équivaut à une vitesse de propagation infinie à l'intérieur des grains $c_g = \infty$. Par conséquent elle n'entrera pas en compte dans la formulation de la méthode.

2.2 Équations régissant le fluide

Nous introduisons dans cette partie les équations permettant de modéliser la propagation d'ondes acoustiques dans le fluide. Nous partons d'abord des équations sous leur « formulation forte », c'est-à-dire telle qu'on a l'habitude de les rencontrer en science, pour développer les « formulations faibles », aussi appelées « formulation variationnelle », nécessaires à la méthode des éléments finis.

2.2.1 Formulation forte

Équation de Navier-Stokes Le PFD appliqué à une surface élémentaire¹ de fluide aboutit à l'équation de Navier-Stokes. Dans le cas d'un fluide parfait, elle s'écrit :

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = \rho \mathbf{g} - \nabla P \quad \text{dans } \Omega \setminus G \quad (2.1)$$

avec ρ le champ de masse volumique et P le champ de pression, \mathbf{u} le champ de vitesse associés au fluide et \mathbf{g} l'accélération de la pesanteur.

1. dans le cas du problème 2D mais bien volume élémentaire en 3D

Équation de continuité et équation d'état L'équation (2.1) ne suffit pas à caractériser entièrement le fluide. On lui adjoint l'équation de conservation de la masse dans le fluide :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus G \quad (2.2)$$

Or l'équation d'état d'un fluide lorsqu'un processus est isentropique établie la relation suivante entre les variations des champs de pression P et de masse volumique ρ (Depollier, 2008) :

$$c^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho} \quad \text{dans } \Omega \setminus G \quad (2.3)$$

D'où, en injectant l'équation (2.3) dans l'équation (2.2), on obtient :

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla P + \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.4)$$

Équation des ondes acoustiques L'équation des ondes est obtenue en linéarisant les équations de la mécanique des fluides (2.1) et (2.4) (Depollier, 2008). Pour cela, on suppose que les variations des champs de pression, de masse volumique et de vitesse sont faibles par rapport à leur valeur moyenne, ce qui permet de négliger les termes du second ordre. Cette hypothèse est importante car elle contraint les conditions d'utilisation du modèle par la suite et notamment l'amplitude maximale des ondes modélisées. Néanmoins, elle est justifiée au vu de notre double objectif d'étudier les vibrations du milieu granulaire, aussi de faibles amplitudes, et de faire de la caractérisation non-destructive.

Ensuite on suppose aussi que la longueur sur laquelle le champ de vitesse acoustique varie significativement est très petite par rapport à l'échelle de la gravité. Enfin, on considère que le fluide est uniforme et donc que $c = c_0$ et $\rho = \rho_0$. Finalement on obtient la formulation mixte de l'équation des ondes acoustiques valable dans le domaine du fluide $\Omega \setminus G$ (Depollier, 2008) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla p = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \setminus G \\ \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus G \end{array} \right. \quad (2.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla p = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \setminus G \\ \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus G \end{array} \right. \quad (2.6)$$

avec p la variation du champ de pression par rapport à l'équilibre et \mathbf{u} le champ de vitesse.

Pour compléter cette équation, on ajoute une condition aux limites de Dirichlet sur la frontière extérieure Γ du domaine Ω :

$$p = 0 \quad \text{sur } \Gamma \quad (2.7)$$

Ce choix est fait par soucis de clarté et parce qu'il ne joue pas un rôle majeur dans la formulation de la méthode. Par ailleurs, la condition de Dirichlet servira de base pour développer des conditions aux limites plus utiles, notamment les couches absorbantes parfaitement adaptées (Berenger, 1994), sur lesquelles nous reviendrons.

2.2.2 Formulation faible

Les EDP (2.5) et (2.6) doivent maintenant être exprimées sous forme variationnelle afin d'être utilisées dans la méthode des éléments finis. La formulation faible s'obtient en intégrant chaque terme des équations (2.5) et (2.6) et en les multipliant par une fonction test propre à chacune des variables des équations (voir aussi l'exemple de l'équation de Poisson p. 24). De cette façon, les termes obtenus sont soit des formes bilinéaires comme a soit des formes linéaires comme b :

$$a(u, v) = \int_{\Omega} u v \, d\mathbf{x} \quad \text{ou} \quad b(v) = \int_{\Omega} f v \, d\mathbf{x} \quad (2.8)$$

avec u la fonction solution, v une fonction test et f une fonction connue.

Espaces fonctionnels Dans la méthode des éléments finis, les fonctions u et v sont définies sur des espaces fonctionnels. Nous définissons ici les principaux espaces fonctionnels souvent utilisés, mais le lecteur pourra se référer à Fortin et Garon (1997, chap. 2) pour des détails supplémentaires.

D'abord l'espace L^2 est un espace fonctionnel linéaire représentant l'ensemble des fonctions de carré sommable. Si $v \in L^2(\Omega)$, alors :

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \Omega \longrightarrow \mathbb{R} \left| \int_{\Omega} v^2 \, d\mathbf{x} < \infty \right. \right\} \quad (2.9)$$

L'espace L^2 est aussi un espace de Hilbert parce qu'il est complet et muni du produit scalaire ce qui est capital dans la méthode des éléments finis étant donné que les formulations faibles sont basées sur des produits scalaires.

Ensuite, on définit l'espace de Sobolev H^1 d'ordre 1 utile pour la résolution d'équations différentielles (Fortin et Garon, 1997) :

$$H^1(\Omega) = \left\{ v \in L^2(\Omega) \left| \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\Omega) \forall i = 1, \dots, d \right. \right\} \quad (2.10)$$

avec N la dimension du domaine (dans notre cas $N = 2$). Cet espace impose plus de régularité aux fonctions qui lui appartiennent que l'espace L^2 car il requiert que les dérivées partielles appartiennent aussi à L^2 . En outre, la restriction au bord Γ de la fonction $v \in H^1(\Omega)$ appartient quant à elle à un sous espace de L^2 appelé $H^{1/2}$. Autrement dit, si $v \in H^1(\Omega)$, alors la valeur de v sur la frontière Γ de Ω appartient à $v|_{\Gamma} \in H^{1/2}(\Gamma)$.

Toutefois, il existe un espace de Sobolev $H(\text{div})$ d'ordre 1 muni de fonctions vectorielles qui impose des conditions moins restrictives aux dérivées de \mathbf{v} :

$$H(\text{div}; \Omega) = \{\mathbf{v} \in L^2(\Omega)^N \mid \nabla \cdot \mathbf{v} \in L^2(\Omega)\} \quad (2.11)$$

Nous verrons que cet espace fonctionnel est plus en adéquation avec l'équation des ondes que l'espace H^1 .

Théorème de Lax-Milgram Le théorème fondamental de la méthode des éléments finis a été développé par Lax et Milgram (1954) et montre qu'il existe une unique solution à l'équation écrite sous sa formulation faible. Soit a et b des formes bilinéaires et linéaires et \mathbb{H} un espace de Hilbert (comme par exemple l'un des trois espaces fonctionnels précédents) :

- si a et b sont *continues* sur $\mathbb{H} \times \mathbb{H}$ et \mathbb{H} respectivement, autrement dit si :

$$|a(u, v)| \leq C \|u\|_{\mathbb{H}} \|v\|_{\mathbb{H}} \quad \text{et} \quad |b(v)| \leq C \|v\|_{\mathbb{H}} \quad \forall u, v \in \mathbb{H} \quad (2.12)$$

avec C une constante quelconque,

- et si a est *coercive*, c'est-à-dire :

$$a(v, v) \geq c \|v\|_{\mathbb{H}}^2 \quad \forall v \in \mathbb{H} \quad (2.13)$$

avec c une constante strictement positive,

alors il existe une unique solution u au problème variationnelle $a(u, v) = b(v) \quad \forall u, v \in \mathbb{H}$.

Bien sûr, ce théorème ne permet que de démontrer l'existence et l'unicité de la solution de l'équation $a(u, v) = b(v)$. Les équations en physique sont souvent plus complexes et peuvent contenir plusieurs formes bilinéaires ou linéaires. Cependant le principe reste inchangé et consiste à montrer qu'une ou plusieurs formes bilinéaires vérifient certaines conditions comme la continuité, la symétrie ou la coercivité.

Application à l'équation des ondes La formulation faible de l'équation des ondes (2.5, 2.6) peut s'exprimer ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega \setminus G} \nabla p \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus G \\ \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} q \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega \setminus G} \nabla \cdot \mathbf{u} q \, d\mathbf{x} = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus G \end{array} \right. \quad (2.14)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} q \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega \setminus G} \nabla \cdot \mathbf{u} q \, d\mathbf{x} = 0 \quad \text{dans } \Omega \setminus G \end{array} \right. \quad (2.15)$$

avec \mathbf{v} la fonction test associée au champ de vitesse \mathbf{u} et q celle associée à la variation du champ de pression p .

Néanmoins, cette expression peut être améliorée en utilisant les formules de Green pour intégrer par partie le deuxième terme de l'équation (2.14). Ainsi, on fait apparaître

explicitement les conditions aux frontières du domaine $\Omega \setminus G$ et l'opérateur ∇ est déplacé sur la fonction test \mathbf{v} :

$$\int_{\Omega \setminus G} \nabla p \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega \setminus G} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \int_{\Gamma} p \mathbf{n}_{\Gamma} \cdot \mathbf{v} \, d\ell - \int_{\partial G} p \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, d\ell \quad (2.16)$$

avec \mathbf{n}_{Γ} le vecteur unitaire normal sortant de la frontière extérieure Γ . Ici, \mathbf{n} est le vecteur unitaire sortant du domaine G sur la frontière ∂G (fig. 2.1 p. 34); donc ici $-\mathbf{n}$ est le vecteur sortant du domaine $\Omega \setminus G$ sur ∂G . En injectant ce résultat dans l'équation (2.14) et en utilisant la condition de Dirichlet sur Γ (2.7), les équations (2.14) et (2.15) deviennent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega \setminus G} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial G} p \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, d\ell = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in H(\text{div}; \Omega \setminus G) \\ \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} q \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega \setminus G} \nabla \cdot \mathbf{u} q \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall q \in L^2(\Omega \setminus G) \end{array} \right. \quad (2.17)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega \setminus G} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial G} p \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, d\ell = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in H(\text{div}; \Omega \setminus G) \\ \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} q \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega \setminus G} \nabla \cdot \mathbf{u} q \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall q \in L^2(\Omega \setminus G) \end{array} \right. \quad (2.18)$$

Notons que la fonction test \mathbf{v} est définie sur l'espace $H(\text{div})$ qui est moins restrictif que l'espace H^1 et donc qui paraît plus naturel avec l'équation des ondes. L'existence et l'unicité de la solution ($\mathbf{u} \in H(\text{div}; \Omega \setminus G)$, $p \in L^2(\Omega \setminus G)$) d'un problème tel que (2.17, 2.18) sont démontrées par Brezzi et Fortin (1991, chap. 2).

2.3 Équation régissant les grains

Les hypothèses du modèle de dynamique moléculaire supposent que les grains sont rigides et donc indéformables. Néanmoins le modèle prend en compte les déformations au travers de l'interpénétration des grains (p. 19). L'invariance de cette géométrie permet de se placer dans le cadre de la mécanique du point. En effet, le mouvement d'un disque peut être entièrement caractérisé par la cinématique de son centre. De plus, les rotations n'entrent pas en compte dans le couplage de l'équation des ondes et du mouvement.

Le PFD, ou deuxième loi de Newton, appliqué à un grain k s'énonce comme suit :

$$m_k \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} = \sum_i \mathbf{F}_{\text{ext},i} \quad \forall k = 1, 2, \dots, N_g \quad (2.19)$$

avec m_k la masse du grain k , \mathbf{U}_k la vitesse du grain k et $\mathbf{F}_{\text{ext},i}$ la i^{e} force extérieure appliquée au grain k .

Le membre $\sum \mathbf{F}_{\text{ext}}$ peut inclure des termes de forces variés en fonction de la complexité du modèle. Nous nous limitons aux forces servant à construire le modèle.

$$\sum_i \mathbf{F}_{\text{ext},i} = - \int_{\partial G_k} p \mathbf{n}_k \, d\ell + \mathbf{F}_k \quad \forall k = 1, 2, \dots, N_g \quad (2.20)$$

avec \mathbf{F}_k une force quelconque appliquée au grain k . Le premier terme du second membre de l'équation est l'expression de la force hydrodynamique due au passage de l'onde acoustique et dépend de la variation du champ de pression acoustique p autour de sa valeur moyenne. En l'occurrence, c'est la seule la force essentielle au développement du modèle. Le second terme \mathbf{F}_k englobe toute autre force appliquée au grain k et pouvant être ajoutée au modèle telles que les forces d'interaction avec les voisins du grain. Les modèles utilisés pour définir ces forces sont variés dans la littérature (Cundall et Strack, 1979; Hertz, 1881).

Comme nous l'avons fait pour l'équation des ondes (2.17,2.18), le PFD (2.19) peut aussi s'écrire sous forme variationnelle. Néanmoins dans ce cas précis l'équation conserve son caractère discret puisque la vitesse du grain \mathbf{U}_k appartient à l'ensemble des réels à N dimensions \mathbb{R}^N et non à un espace fonctionnel :

$$\sum_{k=1}^{N_g} \left[m_k \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \cdot \mathbf{V}_k + \int_{\partial G_k} p \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{V}_k d\ell - \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{V}_k \right] = 0 \quad \forall \mathbf{V}_k \in \mathbb{R}^N \quad (2.21)$$

avec \mathbf{V}_k la fonction test associée à la vitesse \mathbf{U}_k .

2.4 Combinaison des équations

2.4.1 Conditions aux limites

La combinaison de l'équation des ondes (2.5) et le PFD (2.19) passe par une condition essentielle pour relier le champ de vitesse acoustique \mathbf{u} et la vitesse \mathbf{U}_k d'un grain k . Il s'agit d'une condition de saut naturelle de l'équation des ondes qui impose la continuité de la normale au champ de vitesse \mathbf{u} au passage de l'interface ∂G :

$$\mathbf{u}^+ \cdot \mathbf{n} = \mathbf{u}^- \cdot \mathbf{n} \quad \text{sur } \partial G \quad (2.22)$$

avec \mathbf{u}^+ le champ de vitesse acoustique du côté extérieur de la frontière ∂G et \mathbf{u}^- celui du côté intérieur.

Toutefois, dans notre cas la vitesse \mathbf{u}^- est assimilée à la vitesse du grain \mathbf{U}_k . La condition de saut (2.22) devient donc :

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_k = \mathbf{U}_k \cdot \mathbf{n}_k \quad \text{sur } \partial G_k \quad \forall k = 1, 2, \dots, N_g \quad (2.23)$$

Cette condition est par ailleurs considérée comme une condition aux limites de Neumann puisqu'elle équivaut à spécifier la valeur de la dérivée sur la frontière du grain, en l'occurrence celle du potentiel de vitesse ϕ relié au champ de vitesse par $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}}$.

Enfin, on introduit la contrainte de mouvement de corps rigide (Glowinski et coll., 1999) pour empêcher la propagation des ondes à l'intérieur des grains. En effet, avec

le modèle de dynamique moléculaire, la vitesse de propagation est considérée comme infinie à l'intérieur du grain. Cette condition impose une divergence du champ de vitesse nulle à l'intérieur du domaine des grains G :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \text{dans } G \quad (2.24)$$

2.4.2 Équation combinée du mouvement

En suivant l'approche de Hu (1996), les formes variationnelles du PFD (2.21) portant sur le domaine G et de l'équation des ondes (2.17) définie sur $\Omega \setminus G$, toutes deux liées au mouvement, peuvent être regroupées au sein d'une même équation appelée par Hu « équation combinée du mouvement », permettant de trouver $\mathbf{u} \in H(\text{div}; \Omega \setminus G)$ et $\mathbf{U}_k \in \mathbb{R}^N$ tels que :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \sum_{k=1}^{N_g} \left[m_k \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \cdot \mathbf{V}_k - \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{V}_k + \int_{\partial G_k} p \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{V}_k \, d\ell \right] - \int_{\partial G} p \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \, d\ell \\ = \int_{\Omega \setminus G} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} \quad \forall \mathbf{v} \in H(\text{div}; \Omega \setminus G), \mathbf{V}_k \in \mathbb{R}^N \end{aligned} \quad (2.25)$$

On remarque que l'intégrale sur la frontière ∂G est susceptible de s'annuler avec la somme des forces hydrodynamiques appliquées à chaque grain. Pour cela, on intègre la condition de saut (2.23) dans un nouvel espace fonctionnel $\tilde{\mathbb{W}}_{\Omega \setminus G}$ appelé « espace combiné des variations » par Glowinski et coll. (1999) qui permettra cette annulation :

$$\tilde{\mathbb{W}}_{\Omega \setminus G} = \{(\mathbf{v}, \mathbf{V}_k) \mid \mathbf{v} \in H(\text{div}; \Omega \setminus G), \mathbf{V}_k \in \mathbb{R}^N; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_k = \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{n}_k \text{ sur } \partial G_k \quad \forall k = 1, 2, \dots, N_g\} \quad (2.26)$$

Par conséquent, l'équation (2.25) se simplifie et consiste maintenant à trouver $(\mathbf{u}, \mathbf{U}_k) \in \tilde{\mathbb{W}}_{\Omega \setminus G}$ tels que :

$$\int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega \setminus G} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + \sum_{k=1}^{N_g} \left[m_k \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \cdot \mathbf{V}_k - \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{V}_k \right] = 0 \quad \forall (\mathbf{v}, \mathbf{V}_k) \in \tilde{\mathbb{W}}_{\Omega \setminus G} \quad (2.27)$$

En d'autres termes dans l'espace fonctionnel $\tilde{\mathbb{W}}_{\Omega \setminus G}$, la force hydrodynamique est prise en compte de façon totalement implicite et n'a pas besoin d'être calculée. C'est compréhensible quand on fait un bilan de forces dans l'ensemble du système : bien que le fluide exerce une pression sur les grains au travers de la force hydrodynamique, les grains exercent une force réciproque sur le fluide.

2.4.3 Formulation par la méthode des domaines fictifs

L'idée de la méthode des domaines fictifs (Babuška, 1973) est d'étendre le problème posé jusqu'à présent dans le domaine $\Omega \setminus G$ à l'ensemble du domaine Ω . De cette

façon les champs acoustiques \mathbf{u} et p sont définis dans l'intégralité du domaine Ω . La géométrie de ce domaine étant très simple, cela permet notamment d'utiliser un maillage régulier du domaine.

Cependant, comme la frontière physique entre les grains et le fluide n'existe plus dans le domaine Ω , des multiplicateurs de Lagrange distribués dans le domaine G doivent être utilisés pour forcer la solution à satisfaire les contraintes imposées sur ∂G et dans G (Glowinski et Kuznetsov, 1998). Finalement, de deux domaines complémentaires $\Omega \setminus G$ et G , on aboutit à deux domaines indépendants Ω et G .

Par soucis de clarté, on considère dans les développements qui suivent qu'il n'y a qu'un seul grain afin de supprimer les indices « k ». Le retour au cas avec plusieurs grains est simple et direct.

2.4.3.1 Équation complémentaire pour le domaine des grains

Pour obtenir une équation combinée du mouvement valable sur tout le domaine Ω , il faut au préalable trouver une expression analogue à l'équation (2.27) mais valable dans le domaine G . Pour cela, nous suivons un raisonnement analogue à Glowinski et coll. (1999, p. 768) mais en partant de l'hypothèse :

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} \quad \text{dans } G \quad (2.28)$$

En effet, contrairement à l'équation de Navier-Stokes modélisée par Glowinski et coll. (1999), l'onde n'est pas sensible aux rotations du grain. L'objectif est maintenant de retrouver les termes en intégrales de l'équation des ondes (2.17).

D'abord, nous commençons par dériver partiellement l'équation (2.28) par rapport au temps :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \quad \text{dans } G \quad (2.29)$$

Comme \mathbf{U} n'est pas un champ vectoriel, $\partial \mathbf{U} / \partial x = \partial \mathbf{U} / \partial y = 0$ et donc :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \frac{d\mathbf{U}}{dt} \quad \text{dans } G \quad (2.30)$$

La forme variationnelle de l'équation (2.30) s'écrit :

$$\int_G \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \int_G \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} \, d\mathbf{x} \quad \forall (\mathbf{v}, \mathbf{V}) \in \tilde{\mathbb{W}}_G \quad (2.31)$$

avec l'espace combiné des variations $\tilde{\mathbb{W}}_G$ défini comme :

$$\tilde{\mathbb{W}}_G = \{(\mathbf{v}, \mathbf{V}) \mid \mathbf{v} \in H(\text{div}; G), \mathbf{V} \in \mathbb{R}^N; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \partial G\} \quad (2.32)$$

Ensuite, on calcule l'intégrale du membre de droite et on multiplie l'équation par ρ_0 :

$$\int_G \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \rho_0 V \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} \, d\mathbf{x} \quad \forall (\mathbf{v}, \mathbf{V}) \in \tilde{\mathbb{W}}_G \quad (2.33)$$

Puis, la contrainte $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ liée à l'équation (2.24) est intégrée à l'espace fonctionnel $\tilde{\mathbb{W}}_G$ dans le nouvel espace \mathbb{W}_G :

$$\mathbb{W}_G = \{(\mathbf{v}, \mathbf{V}) \mid \mathbf{v} \in H(\text{div}; G), \mathbf{V} \in \mathbb{R}^N; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \partial G; \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \text{ dans } G\} \quad (2.34)$$

De cette façon on peut ajouter l'intégrale manquante pour obtenir l'équation complémentaire à l'équation (2.27) consistant à trouver $(\mathbf{u}, \mathbf{U}) \in \mathbb{W}_G$ tels que :

$$\int_G \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_G p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = \rho_0 V \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} \, d\mathbf{x} \quad \forall (\mathbf{v}, \mathbf{V}) \in \mathbb{W}_G \quad (2.35)$$

2.4.3.2 Extension à l'ensemble du système

Les équations (2.27) valable dans le domaine du fluide $\Omega \setminus G$ et (2.35) valable dans le domaine G peuvent maintenant être additionnées pour obtenir l'équation combinée du mouvement pour le domaine Ω :

$$\int_\Omega \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_\Omega p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + (\rho_g - \rho_0) V \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} - \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} = 0 \quad \forall (\mathbf{v}, \mathbf{V}) \in \mathbb{W}_\Omega \quad (2.36)$$

avec V le volume du grain et \mathbb{W} l'espace combiné des variations étendu à Ω où sont aussi définies les fonctions solutions (\mathbf{u}, \mathbf{U}) :

$$\mathbb{W} = \{(\mathbf{v}, \mathbf{V}) \mid \mathbf{v} \in H(\text{div}; \Omega), \mathbf{V} \in \mathbb{R}^N; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \partial G; \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \text{ dans } G\} \quad (2.37)$$

2.4.3.3 Multiplicateurs de Lagrange distribués

L'espace fonctionnel \mathbb{W} (2.34) présente néanmoins l'inconvénient d'être trop compliqué pour être exploité tel quel avec un code d'éléments finis. En effet, le choix d'un type d'éléments finis dépend principalement de l'espace de définition des fonctions tests. Or ce choix est souvent réduit à des espaces fonctionnels conventionnels comme ceux présentés p. 36. Plutôt que d'implémenter de nouveaux éléments finis, on préfère adopter la méthode des multiplicateurs de Lagrange distribués (Glowinski et Kuznetsov, 1998).

Les multiplicateurs de Lagrange permettent d'incorporer de façon faible des contraintes à une équation. Concrètement, cela permet de libérer les contraintes appliquées à ∂G et G de l'espace \mathbb{W} pour les adjoindre à l'équation (2.35) sous la forme de nouvelles inconnues, respectivement $\lambda_\partial \in H^{1/2}(\partial G)$ et $\lambda \in H^1(G)$:

$$\begin{aligned} \int_\Omega \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_\Omega p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + (\rho_g - \rho_0) V \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} - \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} \\ + \int_{\partial G} \lambda_\partial (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \, d\ell + \int_G \lambda \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega), \mathbf{V} \in \mathbb{R}^N \end{aligned} \quad (2.38)$$

Toutefois, le problème posé avec l'équation (2.38) est maintenant indéterminé : à l'inconnue de vitesse, s'ajoutent les deux multiplicateurs de Lagrange λ_∂ et λ . Pour que ce système ait une solution, il est nécessaire de rajouter une équation par contrainte. La résolution du système revient donc à trouver $\forall \mathbf{u} \in H(\text{div}, \Omega)$, $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^N$, $\lambda_\partial \in H^{1/2}(\partial G)$ et $\lambda \in H^1(G)$ tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + (\rho_g - \rho_0) V \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} - \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} \\ \quad + \int_{\partial G} \lambda_\partial (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \, d\ell + \int_G \lambda (\nabla \cdot \mathbf{v}) \, d\mathbf{x} = 0 \quad (2.38) \\ \int_{\partial G} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) \mu_\partial \, d\ell = 0 \quad (2.39) \\ \int_G (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mu \, d\mathbf{x} = 0 \quad (2.40) \\ \forall \mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega), \mathbf{V} \in \mathbb{R}^N, \mu_\partial \in H^{1/2}(\partial G), \mu \in H^1(G) \end{array} \right.$$

avec μ_∂ et μ , respectivement les fonctions tests des multiplicateurs de Lagrange λ_∂ et λ .

Par ailleurs, Girault et Glowinski (1995) ont montré que la précision obtenue avec la méthode des domaines fictifs était liée à une condition *inf-sup* uniforme satisfaite quand la taille des mailles du domaine fictifs G était supérieure à celles du domaine Ω . À contrario, le bon conditionnement du système à résoudre à chaque pas de temps requiert lui que les mailles de Ω soit plus grandes que celle de G . Il en résulte que le rapport κ entre le maillage de G et celui de Ω se situe entre 1 et 2. Nous reviendrons plus en détails sur la valeur de κ optimale dans notre cas au cours du chapitre 6.

2.4.4 Équation de continuité

Précédemment, nous avons obtenu une formulation de l'équation combinée du mouvement 2.36 valable pour l'ensemble du domaine Ω . Toutefois, cette équation doit être accompagnée de la formulation faible de l'équation de continuité (2.18) pour retrouver la formulation mixte de l'équation des ondes. L'idée est toujours d'étendre la formulation (2.18) valable sur $\Omega \setminus G$ à l'ensemble du domaine Ω mais dans ce cas, le problème est plus simple.

En écrivant la formulation variationnelle de la contrainte liée au mouvement de corps rigide (2.24) valable dans le domaine G :

$$\int_G \nabla \cdot \mathbf{u} \, q \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall q \in L^2(G) \quad (2.41)$$

on se rend compte qu'elle est redondante avec l'équation (2.40) car $q \in L^2(G) \in H^1(G)$.

Dès lors, on peut directement étendre l'équation (2.18) au domaine Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} q \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} q \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall q \in L^2(\Omega) \quad (2.42)$$

et l'intégrer au reste du système pour obtenir finalement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(i)} \quad \int_{\Omega} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x} + (\rho_g - \rho_0) V \frac{d\mathbf{U}}{dt} \cdot \mathbf{V} - \mathbf{F} \cdot \mathbf{V} \\ \quad + \int_{\partial G} \lambda_{\partial} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \, d\ell + \int_G \lambda (\nabla \cdot \mathbf{v}) \, d\mathbf{x} = 0 \\ \text{(ii)} \quad \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} q \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} q \, d\mathbf{x} = 0 \\ \text{(iii)} \quad \int_{\partial G} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) \mu_{\partial} \, d\ell = 0 \\ \text{(iv)} \quad \int_G (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mu \, d\mathbf{x} = 0 \end{array} \right. \quad (2.43)$$

$\forall \mathbf{v} \in H(\text{div}, \Omega)$, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^N$, $q \in L^2(\Omega)$, $\mu_{\partial} \in H^{1/2}(\partial G)$, $\mu \in H^1(G)$.

Finalement, on obtient un système de quatre équations avec quatre inconnues :

- les champs acoustiques $\mathbf{u} \in H(\text{div}, \Omega)$ et $p \in L^2(\Omega)$ définis sur tout le domaine Ω que l'on pourra discrétiser avec les méthodes des éléments finis
- la vitesse du grain $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^N$ (et par extensions celles de tous les grains) sous forme discrète qui pourra être calculée par la méthode de dynamique moléculaire
- les multiplicateurs de Lagrange $\lambda_{\partial} \in H^{1/2}(\partial G)$ et $\lambda \in H^1(G)$ qui permettront de modifier le champ de vitesse \mathbf{u} afin qu'il tienne compte des contraintes appliquées aux grains.

2.5 Conservation de l'énergie

L'énergie totale contenue dans le système doit être conservée en l'absence de force extérieure ($\mathbf{F}_k = \mathbf{0}$).

$$\frac{dE}{dt} = 0 \quad (2.44)$$

avec E l'énergie totale, elle-même composée de l'énergie cinétique dans le fluide et les grains et de l'énergie potentiel acoustique :

$$E = \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 \, d\mathbf{x} + m \|\mathbf{U}\|^2 + \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} p^2 \, d\mathbf{x} \right) \quad (2.45)$$

Pour ne pas surcharger l'écriture, on continue de considérer le cas où il n'y a qu'un seul grain. Pour vérifier que le système (2.43) conserve l'énergie (2.44), on remplace ses

fonctions tests par les fonctions solution respectives :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(i)} \quad \frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} + \sum_{k=1}^{N_g} (\rho_g - \rho_0) V_k \|\mathbf{U}_k\|^2 \right\} - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{u} d\mathbf{x} \\ \quad + \int_{\partial G} \lambda_{\partial} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) d\ell + \int_G \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{x} = 0 \\ \text{(ii)} \quad \frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} p^2 d\mathbf{x} \right\} = - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} p d\mathbf{x} \\ \text{(iii)} \quad \int_{\partial G} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) \lambda_{\partial} d\ell = 0 \\ \text{(iv)} \quad \int_G (\nabla \cdot \mathbf{u}) \lambda d\mathbf{x} = 0 \end{array} \right. \quad (2.46)$$

En injectant les équations (ii), (iii) et (iv) dans l'équation (i) du système (2.46), on aboutit à l'équation :

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} + (\rho_g - \rho_0) V \|\mathbf{U}\|^2 + \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} p^2 d\mathbf{x} \right\} = 0 \quad (2.47)$$

Or cette expression s'écrit aussi grâce à l'équation (2.33) p. 41 :

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} + \rho_g V \|\mathbf{U}\|^2 + \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} p^2 d\mathbf{x} \right\} = 0 \quad (2.48)$$

L'intégrale du champ de pression peut aussi être découpée en sous-domaines :

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} + \rho_g V \|\mathbf{U}\|^2 + \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} p^2 d\mathbf{x} \right\} + \int_G \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p}{\partial t} p d\mathbf{x} = 0 \quad (2.49)$$

D'où :

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_{\Omega \setminus G} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} + \rho_g V \|\mathbf{U}\|^2 + \int_{\Omega \setminus G} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} p^2 d\mathbf{x} \right\} = 0 \quad (2.50)$$

Finalement, l'énergie est bien conservée au cours du temps.

Chapitre 3

Schéma numérique

Le système (2.43) obtenu dans le chapitre précédent doit maintenant être discrétisé. Le schéma numérique peut être séparé en deux parties distinctes : la discrétisation spatiale et la discrétisation temporelle. Nous commencerons donc par aborder la discrétisation spatiale en nous appuyant sur la méthode des éléments finis exploitée par le logiciel *FreeFEM++*. Pour cela, les espaces fonctionnels où sont définies les variables du problème seront discrétisés en espaces de dimension finie. Ensuite, concernant la discrétisation temporelle, c'est la méthode des différences finies dont on tirera partie et notamment de la méthode de décomposition d'opérateurs de Marchuk (1990).

3.1 Discrétisation spatiale

La discrétisation spatiale via la méthode des éléments finis passe par triangulation du domaine rectangulaire Ω englobant le fluide et les grains et celle du domaine des grains G , tous deux introduits au chapitre précédent. Cette étape consiste à générer un maillage d'éléments finis bien définis. Le choix des éléments finis à proprement parlé dépend des propriétés des espaces fonctionnels où sont définies les fonctions solution et les fonctions test.

FreeFEM++ Le logiciel d'éléments finis utilisé dans nos simulations est *FreeFEM++* développé par Hecht (2012). Il est gratuit, simple à appréhender et offre de nombreuses possibilités de personnalisation. En effet, il est basé sur un langage informatique de haut niveau hérité du C++ (proche de *Matlab*) qui permet de coder directement des formes variationnelles. Les ressemblances avec le langage C++ permettent aussi d'intégrer facilement un code de dynamique moléculaire écrit en C ou en C++ dans un script *FreeFEM++*. De plus, les géométries sont tracées grâce à leur description analytique. Le maillage est généré automatiquement par un mailleur intégré et l'interpolation entre différents maillages est aussi automatique. Enfin, le logiciel reconnaît plusieurs éléments

finis classiques comme ceux basés sur les polynômes de Lagrange, celui de Raviart-Thomas, de Nédélec, etc. Par contre, il ne supporte que les éléments finis triangulaires et l'implémentation de nouveaux éléments finis est assez complexe.

3.1.1 Maillage

Le maillage, ou triangulation, est la discrétisation spatiale d'un milieu continu avec des éléments finis, de formes triangulaires dans notre cas. Tout l'intérêt de la formulation (éq. 2.43 p. 44) obtenue à l'aide de la méthode des domaines fictifs réside dans le fait que les intégrales sont maintenant définies soit sur tout le domaine Ω , soit dans le domaine des grains G . Dès lors, deux triangulations distinctes sont réalisées : \mathcal{T}_{Ω_h} pour le domaine Ω (fig. 3.1a) et \mathcal{T}_{G_H} pour le domaine des grains G (fig. 3.1b). Les deux maillages ainsi obtenus sont superposés mais complètement indépendants (fig. 3.1c). En revanche les pas de discrétisation de chaque maillage sont reliés entre eux par une condition *inf-sup* reflétant un compromis entre le bon conditionnement du système linéaire à résoudre et la précision de la solution (Girault et Glowinski, 1995).

Le premier maillage \mathcal{T}_{Ω_h} est régulier et indépendant du temps. Il supporte les variables physiques, le champ de vitesse \mathbf{u} et la variation du champ de pression p , et leur fonction test respective, \mathbf{v} et q . On appelle h le pas de discrétisation de ce maillage dont la valeur maximale tolérée dépend de la longueur d'onde minimale présente dans le milieu λ_{\min} et du nombre de points désirés pour discrétiser une seule longueur d'onde N_λ (Kosloff et Kessler, 1990, p. 258) :

$$h = \frac{\lambda_{\min}}{N_\lambda} \quad (3.1)$$

Ce maillage a la forme de l'*Union Jack* plutôt qu'une orientation privilégiée des diagonales dans un sens ou dans l'autre afin de garantir une certaine isotropie, à défaut de pouvoir utiliser des éléments finis rectangulaires dans *FreeFEM++*. En effet contrairement à l'équation de Navier-Stokes, l'équation des ondes est beaucoup plus sensible à l'orientation du maillage. Par conséquent, un maillage comme celui montré en exemple p. 27 (fig. 1.4 en vert-de-gris) offre de moins bons résultats que celui fig. 3.1a.

Au contraire, le second maillage \mathcal{T}_{G_H} où sont définies les multiplicateurs de Lagrange λ et λ_∂ (ainsi que les fonctions test μ et μ_∂ respectivement) a une structure interne régulière mais permettant quand même de suivre la frontière circulaire du grain. Ce maillage utilisé par Glowinski et coll. (1998) permet ensuite de construire l'espace fonctionnel discrétisé indépendamment des degrés de liberté du maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} . De plus le maillage \mathcal{T}_{G_H} , et plus particulièrement chaque grain de \mathcal{T}_{G_H} , peut être librement déplacé au cours du temps sans changer quoi que ce soit au maillage \mathcal{T}_{Ω_h} . Enfin, dans l'optique de modéliser des centaines de grains, on s'attache à limiter au minimum nécessaire le nombre de points utilisés pour discrétiser le grain. Dans cette optique, le

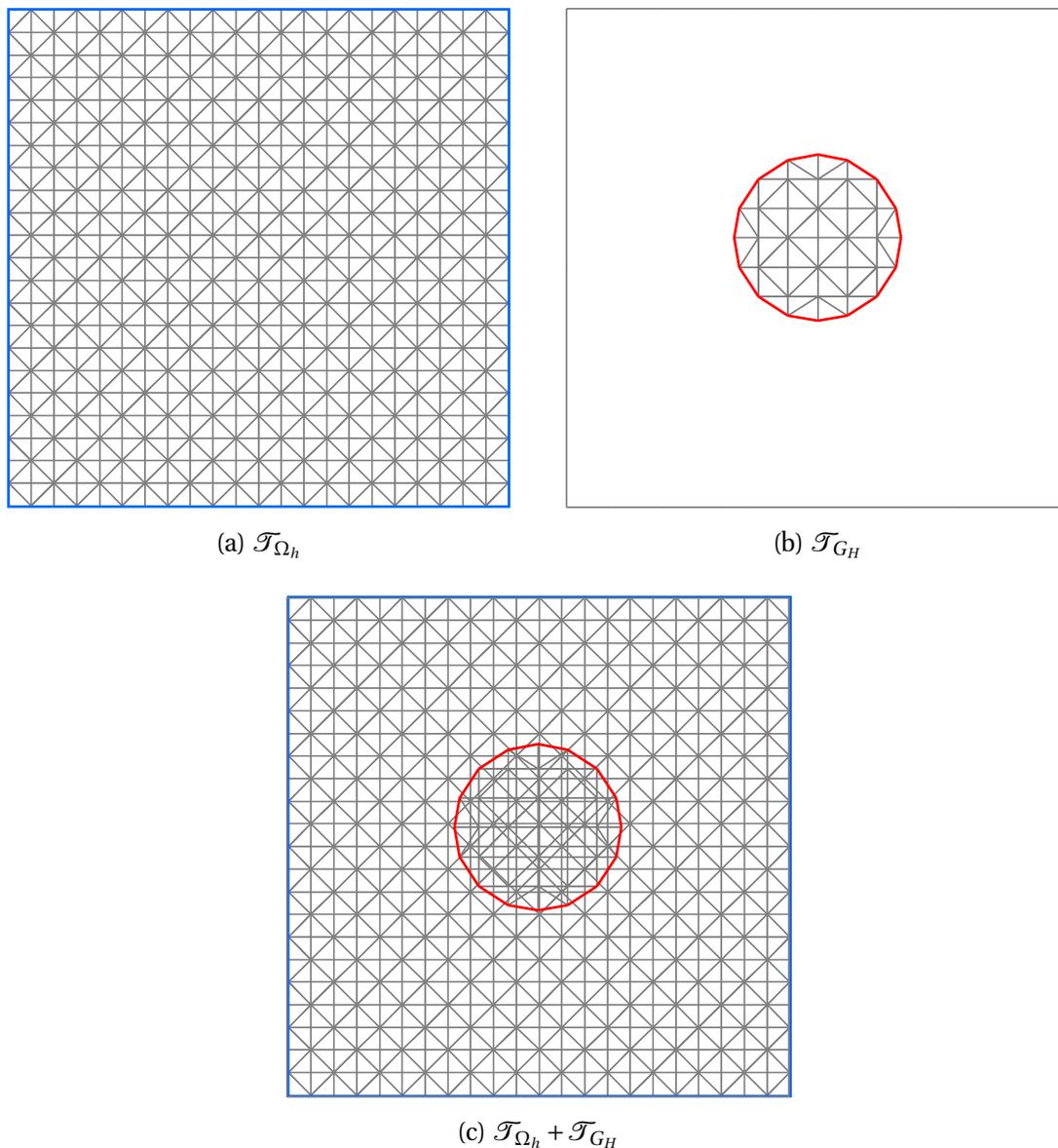


FIGURE 3.1 – Maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} (a) où sont définies les variables physiques et le maillage non structuré \mathcal{T}_{G_H} (b) supportant les multiplicateurs de Lagrange. La figure (c) représente la superposition de ces deux maillages tels qu'ils sont utilisés par la méthode des domaines fictifs.

paramètre $N_{\partial_{\min}}$ représentera le nombre de points minimum à utiliser pour discrétiser la frontière des grains tout en garantissant leur circularité.

Soit H le pas de discrétisation de la frontière du maillage \mathcal{T}_{GH} , les deux maillages sont liés entre eux par la relation :

$$H = \kappa \sqrt{2} h \quad (3.2)$$

Le paramètre κ relie la longueur maximale des côtés des triangles des deux maillages : le facteur $\sqrt{2}$ est nécessaire pour obtenir la diagonale des triangles du maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} . En outre, l'équation (3.2) permet de définir plus précisément les conditions appliquées au pas de discrétisation h dans l'équation (3.1) :

$$h = \min \left(\frac{\lambda_{\min}}{N_\lambda}; \frac{2\pi R_{\min}}{N_{\partial_{\min}} \kappa \sqrt{2}} \right) \quad (3.3)$$

3.1.2 Éléments finis

Même si en apparence il peut paraître anodin, le choix du couple d'éléments finis pour l'équation des ondes est capital pour la convergence et la stabilité du schéma numérique. Ce travail laborieux de sélection ou de développement d'éléments finis mixtes pour des équations spécifiques fait l'objet de nombreuses publications dans la littérature d'analyse numérique comme nous l'avons décrit dans le chapitre 1. Néanmoins, pour notre étude, nous sommes principalement limités aux éléments finis classiques supportés par le logiciel utilisé.

Pour discrétiser l'espace fonctionnel $H(\text{div}, \Omega)$ où est défini le champ de vitesse, le premier choix se porte naturellement sur l'élément fini de Raviart et Thomas (RT_{0h} , 1977) :

$$RT_{0h} = \left\{ \mathbf{v}_h \in L^2(\Omega_h) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Omega_h}, \mathbf{v}_h|_K(\mathbf{x}) \in P_0^2 + P_0 \mathbf{x}, \right. \\ \left. \mathbf{v}_h|_K \cdot \mathbf{n}_{K_i} = \overline{\mathbf{v}_h|_K \cdot \mathbf{n}_{K_i}}^{\partial K} \quad \forall i = 1, 2, 3 \right\} \quad (3.4)$$

en deux dimensions avec K un élément triangulaire, \mathbf{n}_K le vecteur normal unitaire sortant du triangle K et $\overline{\bullet}^{\partial K}$ l'opérateur de moyenne sur la frontière du triangle ∂K . Dans tout ce chapitre, l'indice « h » appliqué à un espace fonctionnel ou une variable fait référence à une forme discrétisée de l'espace ou de la variable sur le maillage \mathcal{T}_{Ω_h} .

Pour l'espace fonctionnel L^2 du champ de pression, c'est l'élément fini de Lagrange constant par morceau P_{0h} qui est utilisé :

$$P_{0h} = \{q_h \in L^2(\Omega_h) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Omega_h}, q_h|_K = \beta_K\} \quad (3.5)$$

avec β_K un nombre réel. On note au passage qu'un polynôme de Lagrange d'ordre 0 est une constante. Ce choix est permis puisque le système (2.43) ne fait intervenir aucune dérivée spatiale du champ de pression.

L'élément fini mixte RT_0 - P_0 est tout à fait recommandé pour traiter le problème de la formulation mixte de l'équation des ondes avec une méthode d'éléments finis classique. Néanmoins, avec la méthode des domaines fictifs, les conditions aux limites ne sont pas prises en compte comme dans la méthode des éléments finis classique. Elles sont appliquées au travers des multiplicateurs de Lagrange. Or, Bécache et coll. (2009) ont révélé des problèmes de convergence de la méthode des domaines fictifs pour la formulation mixte de l'équation des ondes avec des conditions de Neumann. En l'occurrence, la convergence de la méthode des domaines fictifs est altérée selon l'orientation de la frontière du domaine fictif par rapport aux mailles du maillage régulier. Nous confirmerons ces résultats au travers d'expériences numériques avec l'élément fini RT_0 dans le chapitre 4.

Par conséquent, nous remplaçons l'élément fini RT_0 par l'élément fini de Lagrange continu par morceaux P_{1_h} :

$$P_{1_h} = \{v_h \in C^0(\Omega_h) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Omega_h}, v_h|_K \in P_1\} \quad (3.6)$$

avec P_1 le polynôme de Lagrange d'ordre 1. Cependant, cet élément fini étant scalaire, il sera utilisé pour discrétiser chacune des composantes u_x et u_y du champ de vitesse \mathbf{u} . L'élément fini P_{1_h} est l'élément de Lagrange le plus simple supportant la dérivée spatiale présente dans le système (2.43) au travers de l'opérateur ∇ appliqué au champs de vitesse \mathbf{u} ou à sa fonction test \mathbf{v} .

L'élément fini mixte P_1 - P_0 qui découle de ce changement est présenté sur la figure 3.2. Tous les degrés de liberté de cet élément sont placés sur les sommets de l'élément triangulaire K de hauteur h .

Toutefois, en tentant de résoudre le problème de convergence de la méthode des domaines fictifs, on fait face à un nouveau problème : l'élément fini P_1 - P_0 n'entre pas dans la théorie classique des éléments finis mixtes. Autrement dit ces deux éléments finis se marient mal car ils ne permettent pas de garantir que la condition *inf-sup* est toujours respectée (Fortin et Garon, 1997). Nous reviendrons sur les conséquences que cela entraîne sur les résultats numériques au cours des chapitres 4 et 6. Par ailleurs, le choix d'utiliser une méthode mixte basée sur des éléments finis conformes a déjà été fait par Li et coll. (2009). Ils montrent que l'erreur obtenue n'est pas optimale mais qu'elle est tout à fait acceptable, particulièrement quand le maillage est régulier.

Pour appliquer ces choix à notre problème, définissons le sous-espace de dimension finie \mathbb{V}_h qui approxime l'espace fonctionnel où sont définis les champs de vitesse :

$$\mathbb{V}_h = \{\mathbf{v}_h \in (C^0(\Omega_h))^N \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Omega_h}, \mathbf{v}_h|_K = (P_1)^N\} \quad (3.7)$$

Ensuite appelons \mathbb{Q}_h l'espace de dimension finie où sont définis les champs de pression :

$$\mathbb{Q}_h = \{q_h \in L^2(\Omega_h) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Omega_h}, q_h|_K = P_0\} \quad (3.8)$$

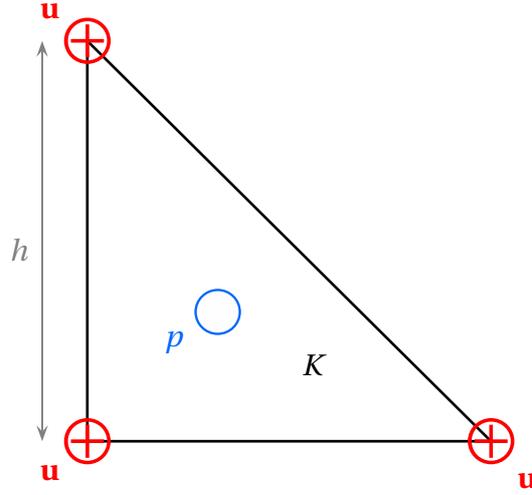


FIGURE 3.2 – Élément fini triangulaire K (isocèle rectangle de hauteur h) avec les degrés de liberté du champ de vitesse \mathbf{u} et de la variation du champ de pression p pour l'élément fini mixte P_1 - P_0

Enfin, soit Λ_H l'espace de dimension finie des multiplicateurs de Lagrange internes définis sur tout le maillage \mathcal{T}_{G_H} :

$$\Lambda_H = \{ \mu_H \in C^0(G_H) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{G_H}, \mu_H|_K = P_1 \} \quad (3.9)$$

et Λ_{∂_H} celui des multiplicateurs de Lagrange surfaciques définis uniquement sur la frontière de \mathcal{T}_{G_H} que nous appelons $\mathcal{T}_{\partial G_H}$:

$$\Lambda_{\partial_H} = \{ \mu_{\partial_H} \in H^{1/2}(\partial G_H) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\partial G_H}, \mu_{\partial_H}|_K = P_1 \} \quad (3.10)$$

Ici, les indices « H » font référence à une forme discrétisée sur le maillage \mathcal{T}_{G_H} de taille de maille H .

Finalement, résoudre le système (2.43) p. 44 équivaut à trouver $(\mathbf{u}_h, \mathbf{U}_k, p_h, \lambda_H, \lambda_{\partial_H}) \in \mathbb{V}_h \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{Q}_h \times \Lambda_H \times \Lambda_{\partial_H}$ tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{(i)} \quad \int_{\Omega} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}_h}{\partial t} \cdot \mathbf{v}_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} - \int_{\Omega} p_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} + \sum_k \left\{ (\rho_g - \rho_0) V_k \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \cdot \mathbf{V}_k - \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{V}_k \right\} \\ \quad + \int_{\partial G} \lambda_{\partial_H} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n} - \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{n}) \, d\ell + \int_G \lambda_H (\nabla \cdot \mathbf{v}_h) \, \mathbf{d}\mathbf{x} = 0 \\ \text{(ii)} \quad \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p_h}{\partial t} q_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u}_h q_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} = 0 \\ \text{(iii)} \quad \int_{\partial G} (\mathbf{u}_h \cdot \mathbf{n} - \mathbf{U}_k \cdot \mathbf{n}) \mu_{\partial_H} \, d\ell = 0 \\ \text{(iv)} \quad \int_G (\nabla \cdot \mathbf{u}_h) \mu_H \, \mathbf{d}\mathbf{x} = 0 \end{array} \right. \quad (3.11)$$

$\forall \mathbf{v}_h \in \mathbb{V}_h, \mathbf{V}_k \in \mathbb{R}^N, q_h \in \mathbb{Q}_h, \mu_{\partial H} \in \Lambda_{\partial H}, \mu_H \in \Lambda_H.$

3.2 Discrétisation temporelle

Nous traitons un problème d'évolution où d'une part les ondes se propagent dans milieu et d'autre part les grains se déplacent au cours du temps. Aussi, pour compléter la discrétisation spatiale, on accompagne la méthode des éléments finis de la méthode des différences finies pour discrétiser les dérivées temporelles du système (3.11). Comme nous l'avons vue au chapitre 1, cette méthode présente de nombreux avantages notamment au travers des schémas explicites. D'abord nous présenterons la méthode de décomposition d'opérateurs utilisée qui permet de simplifier la résolution numérique du problème semi-discrétisé (3.11) en utilisant la méthode des différences finies. Puis nous développerons les étapes clés de l'algorithme de décomposition d'opérateur.

3.2.1 Méthode de décomposition d'opérateurs

Le système (3.11) en l'état est trop compliqué pour être résolu directement. Nous l'avons donc décomposé en problèmes plus petits pouvant être résolus avec des méthodes numériques connues. Pour cela, la méthode de décomposition d'opérateurs de Marchuk (1990, p. 232) basée sur des schémas aux différences finies est utilisée. Soit un problème de la forme :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(\varphi) = f \text{ et } \varphi|_{t=0} = \varphi_0 \quad (3.12)$$

avec φ et $f = \sum_{\alpha=1}^{\beta} f_{\alpha}$ des fonctions quelconques appartenant à des espaces de Hilbert, $A = \sum_{\alpha=1}^{\beta} A_{\alpha}$, $A_{\alpha} \geq 0$, $\beta \geq 2$ et l'opérateur A indépendant du temps. L'algorithme 1 proposé est inconditionnellement stable avec une convergence du premier ordre. Soit Δt le pas de discrétisation temporelle et N_t le nombre de pas de temps. Les sous-

initialiser φ^0 ;

pour $n = 0$ **a** N_t **faire**

pour $\alpha = 1$ **a** β **faire**

 trouver $\varphi^{n+\frac{\alpha}{\beta}}$ tel que :

$$\frac{\varphi^{n+\frac{\alpha}{\beta}} - \varphi^{n+\frac{\alpha-1}{\beta}}}{\Delta t} + A_{\alpha} \left(\varphi^{n+\frac{\alpha}{\beta}} \right) = f_{\alpha}$$

fin

fin

Algorithme 1: Méthode de décomposition d'opérateurs de Marchuk

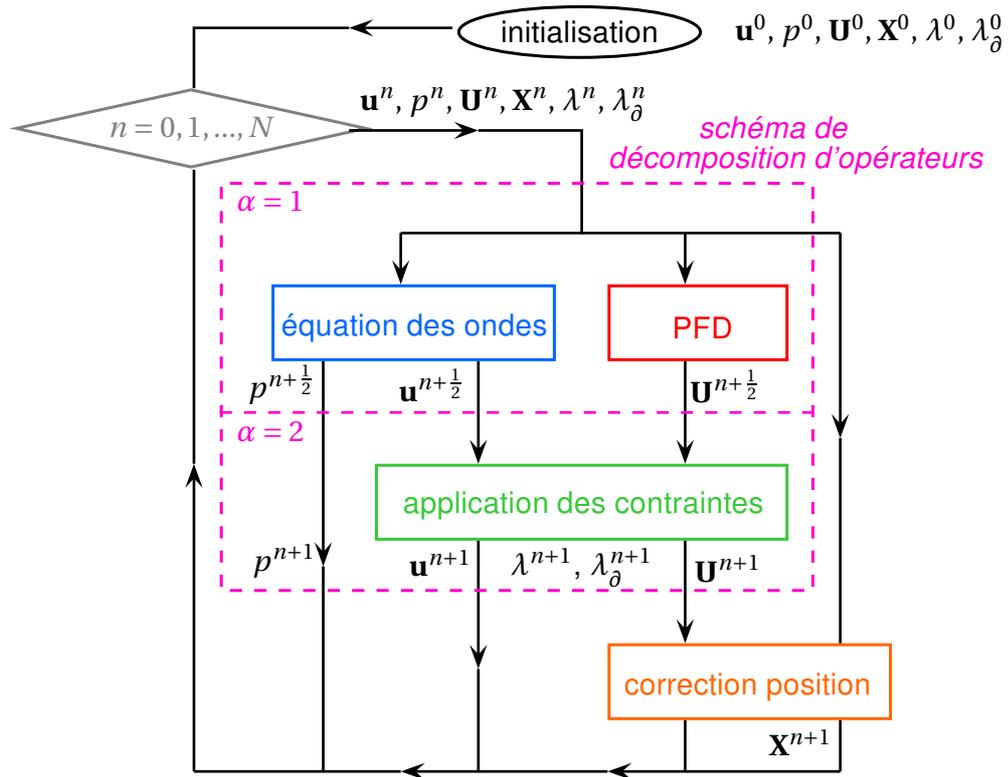


FIGURE 3.3 – Organigramme simplifié de l'algorithme basé sur la méthode de décomposition d'opérateurs

problèmes ainsi créés peuvent être discrétisés indépendamment les uns des autres en utilisant différentes méthodes numériques.

Appliquée au cas présent, la méthode de décomposition d'opérateurs conduit à séparer le système (3.11) en deux sous-problèmes (fig. 3.3) en prenant $\beta = 2$ dans l'algorithme 1.

$\alpha = 1$ Le premier problème regroupe les termes liés aux équations de la physique à savoir l'équation des ondes et le PFD (du 1^{er} au 4^e terme de l'équation (i) ainsi que l'équation (ii) du système (3.11)). Qui plus est, le calcul des variables dynamiques des grains peut être séparé de la résolution de l'équation des ondes puisqu'il n'implique pas d'utiliser des éléments finis.

$\alpha = 2$ Le second problème concerne l'application des contraintes par l'intermédiaire des multiplicateurs de Lagrange (1^{er}, 3^e, 5^e et 6^e termes de l'équation (i) et équations (iii) et (iv) du système (3.11)). Les deux contraintes peuvent être traitées simultanément car la méthode numérique utilisée ne change pas et permet cela (Glowinski et Kuznetsov, 1998).

Afin de suivre facilement l'enchaînement des étapes de la méthode de décomposi-

tion d'opérateurs, le lecteur est vivement encouragé à se reporter à l'organigramme 3.3 au cours des sections suivantes. Par ailleurs, nous rappelons que \mathbf{X}_k est la position du grain k , visible dans l'organigramme. D'une part elle est nécessaire pour le calcul des forces d'interaction entre les grains et d'autre part elle sert à mettre à jour la position du maillage \mathcal{T}_{GH} qui dépend du temps. Toutefois, le calcul de la position n'intervient pas directement dans le schéma de décomposition d'opérateurs et nous y reviendrons dans la section 3.2.4.

3.2.2 Résolution des équations physiques ($\alpha = 1$)

3.2.2.1 Schéma d'Euler semi-implicite pour l'équation des ondes

La discrétisation temporelle de l'équation des ondes (étape en bleu fig. 3.3) est réalisée avec le schéma semi-implicite d'Euler. Ce schéma permet de résoudre numériquement un système de deux équations aux dérivées partielles du premier ordre. La résolution se fait en deux étapes successives présentées dans l'algorithme 2. On rap-

initialisation de p_h^0 et \mathbf{u}_h^0 ;

pour $n = 0$ **a** N_t **faire**

trouver $p_h^{n+\frac{1}{2}} \in \mathbb{Q}_h$ tel que :

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{p_h^{n+\frac{1}{2}} - p_h^n}{\Delta t} q_h \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u}_h^n q_h \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall q_h \in \mathbb{Q}_h \quad (3.13)$$

trouver $\mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} \in \mathbb{V}_h$ tel que :

$$\int_{\Omega} \rho_0 \frac{\mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p_h^{n+\frac{1}{2}} \nabla \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} = 0 \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathbb{V}_h \quad (3.14)$$

fin

Algorithme 2: Schéma semi-implicite d'Euler

pelle que dans les équations (3.13) et (3.14), l'exposant $n + \frac{1}{2}$ fait référence à la première étape $\frac{\alpha}{\beta} = \frac{1}{2}$ du schéma de décomposition d'opérateurs (algorithme 1 p. 53) et non à un demi pas de temps. On a donc bien Δt au dénominateur des fractions. La convergence du schéma semi-implicite d'Euler appliquée à l'équation des ondes est soumise à la condition CFL C suivante :

$$C = c_0 \frac{\sqrt{2}\Delta t}{h} < \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (3.15)$$

Le schéma semi-implicite d'Euler ne converge qu'au premier ordre en temps. Seulement, la précision du schéma numérique globale est limitée par celle de la méthode de décomposition d'opérateur qui converge aussi en $O(\Delta t)$. Cela implique qu'il faille améliorer les deux méthodes pour espérer gagner en précision. Cependant les outils existent, que ce soit pour des schémas de décomposition d'opérateurs ou des méthodes numériques plus précises pour résoudre l'équation des ondes. Par exemple, la technique de symétrisation du schéma (Strang, 1968) permet d'obtenir une convergence en $O(\Delta t^2)$. Néanmoins la faible précision du schéma semi-implicite d'Euler est compensée par ses propriétés géométriques intéressantes (Hairer, Lubich, et Wanner, 2003). Aussi appelé « schéma d'Euler symplectique », ce schéma est stable si (3.15) est satisfaite et conserve parfaitement l'énergie au cours du temps.

Concrètement, les formulations variationnelles discrétisées en temps (3.13) et (3.14) permettent de construire les systèmes matriciels suivants :

$$\mathbf{P} p^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{r} \quad (3.16)$$

$$\mathbf{W} \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{z} \quad (3.17)$$

avec \mathbf{P} et \mathbf{W} des matrices construites à partir des formes bilinéaires

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2 \Delta t} p_h^{n+\frac{1}{2}} q_h \, d\mathbf{x} \quad \text{et} \quad \int_{\Omega} \rho_0 \frac{1}{\Delta t} \mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x}$$

respectivement ; et avec \mathbf{r} et \mathbf{z} des vecteurs créés en utilisant les formes linéaires restantes dans chaque équation. Résoudre ces deux systèmes revient à inverser successivement les matrices \mathbf{P} et \mathbf{W} . Plusieurs *solvers* sont disponibles pour cela dans FreeFem++, parmi eux citons ceux en lien avec notre problème : le gradient conjugué (CG) (Hestenes et Stiefel, 1952) pour les matrices creuses symétriques définies positives, la généralisation de la méthode de minimisation du résidu (GMRES) (Saad et Schultz, 1986) ou encore l'*unsymmetric multifrontal sparse LU factorization package* (UMFPACK) (Davis et Duff, 1997) pour les matrices uniquement creuses.

3.2.2.2 Algorithme de Verlet pour le PFD

L'algorithme de dynamique moléculaire (MD) (McNamara, 2010) consiste à résoudre numériquement le PFD pour chaque grain et à chaque pas de discrétisation temporel n (étape en rouge fig. 3.3). Cette résolution est fortement basée sur le calcul des forces extérieures \mathbf{F} agissant sur les grains. Nous n'entrons pas dans le détail des modèles de force car ce n'est pas essentiel pour développer la méthode des domaines fictifs. L'estimation de l'accélération des grains ainsi obtenue permet ensuite de remonter aux vitesses et positions par intégration.

L'intégrateur choisi pour résoudre le PFD est l'algorithme de Verlet (1967) sous sa formulation en vitesses, très répandu dans le domaine des méthodes d'éléments discrets

pour sa simplicité d'implémentation. On considère ici que la force \mathbf{F} ne dépend que de la position \mathbf{X} encore que des versions de l'algorithme existent pour $\mathbf{F}(\mathbf{X}, \mathbf{U})$ mais elles nécessitent quelques étapes intermédiaires. $\mathbf{F}(\mathbf{X})$ correspond à la modélisation d'un système où l'énergie est conservée, ce qui n'est pas le cas quand la force dépend de la vitesse. Par ailleurs, on introduit \mathbf{X}_k et \mathbf{A}_k , respectivement la position et l'accélération du grain k toutes deux reliées à la vitesse \mathbf{U}_k grâce aux équations :

$$\mathbf{U}_k = \frac{d\mathbf{X}_k}{dt} \quad (3.18)$$

$$\mathbf{A}_k = \frac{d\mathbf{U}_k}{dt} \quad (3.19)$$

L'algorithme de dynamique moléculaire équipé de l'intégrateur de Verlet sous sa formulation en vitesse peut se résumer en trois étapes successives (Swope, Andersen, Berens, et Wilson, 1982) dans l'algorithme 3.

L'erreur commise sur les vitesses avec l'algorithme de Verlet-vitesses est du second ordre $O(\Delta t^2)$. Bien sûr, c'est supérieur à la précision du schéma de décomposition d'opérateur mais tout comme le schéma d'Euler semi-implicite, le schéma de Verlet-vitesses est stable et conserve l'énergie. Verlet-vitesses peut également s'apparenter à l'algorithme dit de « prédiction-correction » de Gear (1967) d'ordre 2 en vitesses avec : l'équation (3.20) correspondant à l'étape de prédiction de la position et (3.22) les étapes de prédiction et correction des vitesses regroupées en une seule. L'algorithme de prédiction-correction est intéressant en dynamique moléculaire car il peut facilement être implémenté à des ordres supérieurs sans pour autant modifier la structure de l'algorithme (Allen et Tildesley, 1996, annexe E).

3.2.3 Algorithme d'Uzawa pour l'application des contraintes ($\alpha = 2$)

La deuxième étape de l'algorithme de décomposition d'opérateurs (algorithme 1) consiste à appliquer les contraintes (iii) et (iv) du système (3.11) aux variables physiques \mathbf{u} et \mathbf{U} (en vert fig. 3.3 p. 54). En d'autres termes, connaissant $\mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}}$ et $\mathbf{U}_k^{n+\frac{1}{2}}$ obtenus à l'étape précédente ($\alpha = 1$), la résolution consiste à trouver $\mathbf{u}_h^{n+1} \in \mathbb{V}_h$, $\mathbf{U}_k^{n+1} \in \mathbb{R}^N$,

```

pour  $k = 1$  a  $N_g$  faire
  | initialisation de  $\mathbf{X}_k^0$ ,  $\mathbf{U}_k^0$  et  $\mathbf{A}_k^0$  ;
fin
pour  $n = 0$  a  $N_t$  faire
  | pour  $k = 1$  a  $N_g$  faire
  | | prédire la position :
  | |
  | | 
$$\mathbf{X}_k^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{X}_k^n + \Delta t \mathbf{U}_k^n + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{A}_k^n \quad (3.20)$$

  | |
  | | pour  $j = k$  a  $N_g$  faire
  | | | calculer les forces d'interaction  $\mathbf{F}(\mathbf{X}_k^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{X}_j^{n+\frac{1}{2}})$  entre les grain  $k$  et  $j$  ;
  | | fin
  | | déduire l'accélération :
  | |
  | | 
$$\mathbf{A}_k^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{X}_k^{n+\frac{1}{2}})}{(\rho_g - \rho_0) V_k} \quad (3.21)$$

  | |
  | | corriger la vitesse :
  | |
  | | 
$$\mathbf{U}_k^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{U}_k^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{A}_k^{n+\frac{1}{2}} + \mathbf{A}_k^n) \quad (3.22)$$

  | fin
fin

```

Algorithme 3: Algorithme de Verlet-vitesses

$\lambda_H^{n+1} \in \Lambda_{\partial H}$ et $\lambda_{\partial H}^{n+1} \in \Lambda_H$ tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \rho_0 \frac{\mathbf{u}_h^{n+1} - \mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} + \sum_k (\rho_g - \rho_0) V_k \frac{\mathbf{U}_k^{n+1} - \mathbf{U}_k^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} \cdot \mathbf{V}_k \\ \quad + \int_{\partial G} \lambda_{\partial H}^{n+1} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n} - \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{n}) \, d\ell + \int_G \lambda_H^{n+1} (\nabla \cdot \mathbf{v}_h) \, d\mathbf{x} = 0 \\ \int_{\partial G} (\mathbf{u}_h^{n+1} \cdot \mathbf{n} - \mathbf{U}_k^{n+1} \cdot \mathbf{n}) \mu_{\partial H} \, d\ell = 0 \\ \int_G (\nabla \cdot \mathbf{u}_h^{n+1}) \mu_H \, d\mathbf{x} = 0 \end{array} \right. \quad (3.23)$$

$\forall \mathbf{v}_h \in \mathbb{V}_h$, $\mathbf{V}_k \in \mathbb{R}^N$, $q_h \in \mathbb{Q}_h$, $\mu_{\partial H} \in \Lambda_{\partial H}$, $\mu_H \in \Lambda_H$. Sous cette forme, le système (3.23) peut sembler aussi difficile à résoudre que le système original (3.11), pourtant il n'en est rien. En effet, nous pouvons réécrire le système sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{C}_1^T & \mathbf{C}_3^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 & \mathbf{C}_2^T & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_1 & \mathbf{C}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_3 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \mathbf{U}^{n+1} \\ \lambda_{\partial H}^{n+1} \\ \lambda^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{U}^{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

ou encore plus simplement sous forme d'une matrice par blocs :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{C}^T \\ \mathbf{C} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{d} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

avec les blocs \mathbf{A} , \mathbf{C} et les vecteurs \mathbf{b} , \mathbf{c} et \mathbf{d} définis comme :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{C}_1 & \mathbf{C}_2 \\ \mathbf{C}_3 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \mathbf{U}^{n+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} \lambda_{\partial H}^{n+1} \\ \lambda^{n+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{d} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{U}^{n+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

On remarque que la matrice de (3.24) est symétrique de part l'emplacement des blocs \mathbf{C} et \mathbf{C}^T et de part la symétrie des formes bilinéaires a_1 et a_2 associées aux blocs \mathbf{A}_1 et \mathbf{A}_2 respectivement :

$$a_1(\mathbf{u}_h^{n+1}, \mathbf{v}_h) = a_1(\mathbf{v}_h, \mathbf{u}_h^{n+1}) = \int_{\Omega} \rho_0 \frac{\mathbf{u}_h^{n+1}}{\Delta t} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} \quad (3.26)$$

$$a_2(\mathbf{U}_k^{n+1}, \mathbf{V}_k) = a_2(\mathbf{V}_k, \mathbf{U}_k^{n+1}) = \sum_k (\rho_g - \rho_0) V_k \frac{\mathbf{U}_k^{n+1}}{\Delta t} \cdot \mathbf{V}_k \quad (3.27)$$

Qui plus est, les blocs \mathbf{A}_1 et \mathbf{A}_2 sont des matrices définies positives car les formes bilinéaires a_1 et a_2 sont coercives sur \mathbb{V}_h et \mathbb{R}^N respectivement.

```

pour  $n = 0$  a  $N_t$  faire
  mise à jour du vecteur  $\mathbf{d}$  ;
  initialisation de  $\mathbf{c}_0$  ;
   $i = 0$  ;
  tant que la précision désirée n'est pas atteinte faire
    trouver  $\mathbf{b}_{i+1}$  tel que :
      
$$\mathbf{A}\mathbf{b}_{i+1} = \mathbf{d} - \mathbf{C}^T \mathbf{c}_i \tag{3.28}$$

    calculer  $\mathbf{c}_{i+1}$  :
      
$$\mathbf{c}_{i+1} = \mathbf{c}_i + \beta \mathbf{C}\mathbf{b}_{i+1} \tag{3.29}$$

     $i = i + 1$  ;
  fin
fin

```

Algorithme 4: Algorithme d'Uzawa de gradient conjugué

Dans ces conditions, la matrice \mathbf{A} est inversible et donc le système (3.25) peut être résolu avec la méthode d'Uzawa de gradient conjugué (Arrow et coll., 1958) (algorithme 4). À chaque pas de temps n , l'algorithme démarre avec une estimation initiale \mathbf{c}_0 . Concrètement, on peut choisir les multiplicateurs de Lagrange du pas de temps précédent $(\lambda_\partial^n, \lambda^n)$ comme valeur de \mathbf{c}_0 .

Elman et Golub (1994) rappellent que le taux de convergence optimal de l'algorithme d'Uzawa est obtenu pour :

$$\beta = \frac{2}{\mu_1 + \mu_2} \tag{3.30}$$

avec μ_1 et μ_2 respectivement la plus petite et la plus grande valeur propre du complément de Schur du système (3.25), c'est-à-dire le produit $\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}^T$. La méthode des puissances itérées permet d'obtenir les valeurs propres extrêmes d'une matrice (Saad, 2011, p. 85).

3.2.4 Correction des positions

En marge du schéma de décomposition d'opérateur, il faut déduire la nouvelle position des grains \mathbf{X}^{n+1} en fonction de la vitesse trouvée à la fin de la deuxième étape \mathbf{U}^{n+1} (étape en orange fig. 3.3 p. 54). En effet, la position $\mathbf{X}^{n+\frac{1}{2}}$ calculée à l'étape $\alpha = 1$ ne tient pas encore compte de la force hydrodynamique liée au passage de l'onde acoustique. Cette dernière est contenue implicitement dans la formulation de la méthode des domaines fictifs comme nous l'avons vu au chapitre 2.

Pour la discrétisation de l'équation (3.18) (p. 57), on procède conformément au schéma de Verlet :

$$\mathbf{X}_k^{n+1} = \mathbf{X}_k^n + \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{U}_k^{n+1} + \mathbf{U}_k^n) \tag{3.31}$$

Deuxième partie

Confrontation des résultats numériques aux solutions analytiques et aspects énergétiques

Dans cette seconde partie, nous appliquons le modèle décrit dans la première partie à une série d'expériences numériques. Ces expériences vont permettre de vérifier le bon comportement du modèle pour différents cas tests et de tester l'influence de certains paramètres sur les résultats numériques. Les solutions numériques obtenues avec le modèle peuvent être séparées en deux groupes : les solutions de l'acoustique comme le champ de pression p et le champ de vitesse \mathbf{u} et les solutions de la dynamique des grains, en l'occurrence leur position \mathbf{X} et leur vitesse \mathbf{U} . Ces deux facettes doivent être confrontées à des solutions analytiques pour valider le modèle. Par chance, les conditions auxquelles sont sujettes les grains nous permettent d'utiliser des solutions analytiques dans le cas de la diffraction d'une onde plane par un seul grain rigide.

Au cours des trois chapitres qui suivent, trois cas tests seront donc présentés. D'abord, un grain fixe sera soumis à une onde plane pour confronter les solutions numériques aux solutions analytiques classiques de l'acoustique et à des résultats similaires de la littérature. Ensuite, un ou deux grains seront soumis à une force de rappel d'un ressort en l'absence d'onde incidente pour étudier les échanges d'énergie entre grains et fluide. Enfin, un grain mobile sera à son tour soumis à une onde plane et une nouvelle solution analytique sera construite afin d'étudier simultanément les solutions numériques de l'acoustique et de la dynamique. Enfin dans le dernier chapitre, nous verrons une application pratique et à grande échelle afin d'entrevoir les possibilités du modèle.

Chapitre 4

Grain fixe soumis à une onde plane

Le cas de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide fixe est classique en acoustique (Potel et Bruneau, 2006). On dispose donc d'une première solution analytique servant de référence pour les résultats obtenus avec notre modèle. Cette comparaison directe est rendue possible par la contrainte de rigidité appliquée au grain et en considérant le cas où la partie dynamique du modèle est désactivée. Ce choix d'isoler la partie acoustique du modèle est délibéré car il permet de préalablement confirmer le choix des éléments finis mixtes et de calibrer certains paramètres numériques intrinsèques à la méthode des domaines fictifs. De plus, le cas de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide fixe a aussi servi à illustrer la méthode des domaines fictifs de Bokil et Glowinski (2005) et cela donne donc un point de comparaison supplémentaire.

4.1 Paramètres de l'expérience

Un grain de rayon $R = 1$ mm est positionné au milieu d'un domaine rectangulaire de taille $L_x \times L_y$ et soumis à une onde plane incidente (4.1). On se place dans la configuration d'un milieu semi-infini semi-périodique afin d'être en mesure de générer une onde plane. L'annexe regroupe des conditions aux limites alternatives que nous utiliserons tout au long de cette partie (voir la section A.2 p. 138 pour le milieu semi-infini). La configuration d'un milieu semi-périodique semi-infini implique d'utiliser des couches absorbantes parfaitement adaptées (ou *perfectly matched layers (PML)*), aussi décrites en détails dans l'annexe A. La largeur des *PML* est de $L_{PML} = 10 h$. La source d'ondes planes est placée à une hauteur $y_S = L_y - 20 h$ et le signal de la source est régi par la fonction s_c :

$$s_c(t) = S_{\max} \sin(2\pi f_s t) \quad (4.1)$$

avec $S_{\max} = 1$ Pa l'amplitude maximale de la source et f_s la fréquence de la source.

La matrice fluide est faite d'eau de masse volumique $\rho_0 = 1\,000$ kg/m³ avec une vitesse des ondes de $c_0 = 1\,500$ m/s. Le grain étant rigide, il n'y a donc pas de pro-

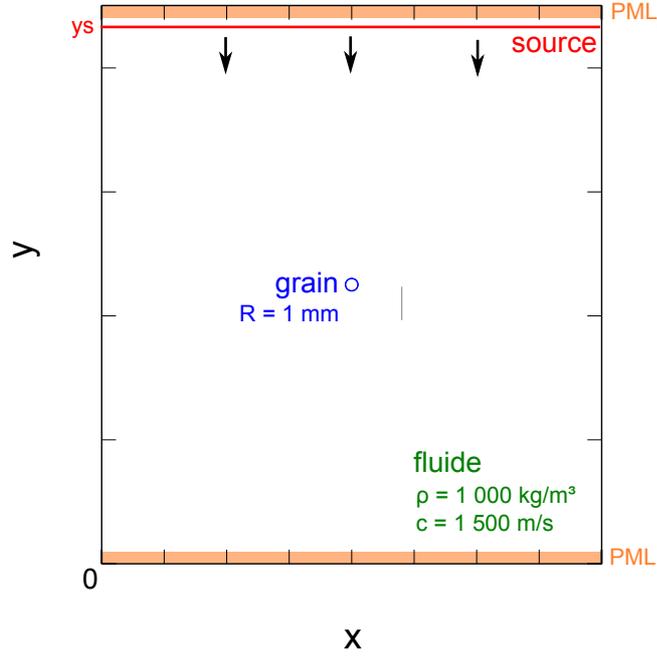


FIGURE 4.1 – Schéma de l'expérience numérique d'un grain soumis à une onde plane

propagation des ondes à l'intérieur. De plus, dans cette section, le grain est fixe et donc considéré comme infiniment dense. Ce cas particulier d'un grain de masse infinie nécessite de ne pas prendre en compte la partie dynamique de l'algorithme (la résolution du PFD dans l'organigramme 3.3 p. 54). Par conséquent, la condition de saut de l'équation des ondes (2.23) (p. 39) se simplifie en :

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial G \quad (4.2)$$

De plus, le système (3.24) (p. 59) que l'on résout lors de l'application des contraintes est lui aussi simplifié pour devenir :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{C}_1^T & \mathbf{C}_3^T \\ \mathbf{C}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{C}_3 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \lambda_{\partial}^{n+1} \\ \lambda^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

De cette façon, la vitesse du grain \mathbf{U} ne fait plus partie des inconnues à résoudre.

Les paramètres de discrétisation du modèle h , H et Δt sont calculés automatiquement avec les équations (3.1) et (3.2) p. 48 et (3.15) p. 55. Le pas de discrétisation h du maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} dépend la longueur d'onde minimale existante dans le milieu λ_{\min} , et donc de la fréquence de la source f_s pour chaque simulation. Les autres

paramètres dont dépendent ces équations sont : le nombre de points utilisés pour discrétiser une longueur d'onde $N_\lambda = 12$, le nombre de points minimum pour discrétiser la frontière d'un grain $N_{\theta_{\min}} = 14$, le rapport de maillages $\kappa = 1,3$ et la condition CFL $C = 0,5$. Nous reviendrons plus en détails sur la façon de choisir certains de ces paramètres dans les développements de cette partie.

4.2 Solution analytique des champs acoustiques

L'avantage de la fonction source s_c est qu'elle peut être aisément associée à une fonction complexe de la forme :

$$\tilde{p}_i(r, \theta, t) = S_{\max} e^{i(k_s r \cos(\theta - \theta_i) - \omega_s t)} \quad (4.4)$$

$$\tilde{p}_i(r, \theta, t) = S_{\max} [\cos(k_s r \cos(\theta - \theta_i)) + i \sin(k_s r \cos(\theta - \theta_i))] e^{-i\omega_s t} \quad (4.5)$$

avec r et θ les coordonnées polaires du repère orthonormé ayant pour origine le centre du grain \mathbf{X}_1 , $\theta_i = -\frac{\pi}{2}$ l'angle d'incidence de l'onde, k_s et ω_s respectivement le nombre d'onde et la pulsation de la source. Le symbole « tilde » au dessus d'une variable signifie qu'elle est complexe. De plus, l'équation (4.5) peut être manipulée plus simplement lorsqu'elle est exprimée sous forme d'une somme de fonctions de Bessel J_n (voir Abramowitz et Stegun, 1964, ch. 9 pour des expressions de J_n). En utilisant les équations 9.1.44 et 9.1.45 (Abramowitz et Stegun, 1964, p. 361), on peut ainsi exprimer le champ de pression complexe incident sous la forme :

$$\tilde{p}_i(r, \theta, t) = S_{\max} \left[J_0(k_s r) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} i^n J_n(k_s r) \cos(n(\theta - \theta_i)) \right] e^{-i\omega_s t} \quad (4.6)$$

Concrètement, la somme n'est pas réalisée sur une infinité de termes, la convergence étant obtenue au bout de (Barber et Hill, 1990, p. 30) :

$$N_B = k_s R + 4,05 (k_s R)^{\frac{1}{3}} + 17 \quad (4.7)$$

La solution analytique du champ de pression complexe réfléchi lors de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide fixe est donnée en coordonnées cylindriques par (Potel et Bruneau, 2006) :

$$\tilde{p}_r(r, \theta, t) = \left[\sum_{n=0}^{\infty} B_n H_n^{(1)}(k_s r) \cos(n(\theta - \theta_i)) \right] e^{-i\omega_s t} \quad (4.8)$$

avec $H_n^{(1)}$ est la fonction de Hankel du premier type (Abramowitz et Stegun, 1964, ch. 9) et B_n une constante déterminée avec les conditions aux limites (Potel et Bruneau,

2006) :

$$B_n = \begin{cases} -S_{\max} \frac{J'_0(k_s R)}{H_0^{(1)'}(k_s R)} & \text{si } n = 0 \\ -2 S_{\max} i^n \frac{J'_n(k_s R)}{H_n^{(1)'}(k_s R)} & \text{si } n \geq 1 \end{cases} \quad (4.9)$$

Naturellement, le champ de pression total complexe est la somme des champs incident et réfléchi :

$$\tilde{p}(r, \theta, t) = \tilde{p}_i(r, \theta, t) + \tilde{p}_r(r, \theta, t) \quad (4.10)$$

Enfin, le champ de vitesse complexe peut être déduit du champ de pression complexe :

$$\tilde{\mathbf{u}}(r, \theta, t) = \frac{-i}{k_s \rho_0 c_0} \nabla \tilde{p}(r, \theta, t) \quad (4.11)$$

À ce stade, il est important de noter que ces solutions dépendent fortement du nombre d'onde k_s et plus particulièrement du produit $k_s R$ que nous appellerons par la suite « nombre d'onde adimensionné ». En effet, lors de la diffraction d'une onde plane par un obstacle, ce n'est pas tant la fréquence de l'onde incidente seule qui est importante mais plutôt le rapport d'échelle entre la longueur d'onde de l'onde incidente et la longueur de l'obstacle. Aussi, on introduit une autre grandeur semblable à $k_s R$: la longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d}$ à laquelle nous nous référerons et reliée à $k_s R$ par la relation :

$$\frac{\lambda}{d} = \frac{\pi}{k_s R} \quad (4.12)$$

On s'efforcera d'exprimer $\frac{\lambda}{d}$ sous forme de fractions de π pour faciliter la conversion en $k_s R$. La longueur d'onde adimensionnée est plus intuitive puisqu'elle fournit directement un rapport entre deux longueurs : celle de l'onde et celle de l'obstacle. Ce paramètre $\frac{\lambda}{d}$ est très important dans la théorie de Mie qui décrit la diffusion d'une onde par une particule car il gouverne les directions dans lesquelles la diffusion sera la plus intense.

Pour mieux comprendre la dépendance de la solution par rapport à l'angle d'observation, introduisons la fonction de forme en champ lointain f_∞ définie comme le rapport entre l'amplitude du champ réfléchi et l'amplitude de l'onde incidente quand la distance à l'obstacle approche l'infini (Crocker, 1998, p. 374) :

$$f_\infty(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k_s R}} \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \frac{B_n}{S_{\max}} \cos(n(\theta - \theta_i)) \quad (4.13)$$

Cette fonction a l'avantage de fournir un champ adimensionné ne dépendant que de l'angle d'observation θ . À partir de la fonction de forme, on peut obtenir la section

efficace de diffusion σ_d qui représente la distribution de l'intensité diffusée dans une direction donnée :

$$\sigma_d(\theta) = |f_\infty(\theta)|^2 \quad (4.14)$$

Finalement, le rapport entre les sections efficaces de diffusion du champ rétrodiffusé et du champ diffusé vers l'avant $\frac{\sigma_d(\pi/2)}{\sigma_d(-\pi/2)}$ et celui entre les sections efficaces de diffusion des champs transverse et longitudinal $\frac{\sigma_d(0)}{\max(\sigma_d(\pi/2), \sigma_d(-\pi/2))}$ sont tracés sur la figure 4.2 en fonction de la longueur d'onde adimensionnée. On peut aisément différencier deux tendances : l'une lorsque la longueur d'onde adimensionnée est grande et l'autre lorsqu'elle est plus faible avec une transition autour de $\frac{\lambda}{d} \approx 2,5$. À grande longueur d'onde adimensionnée, l'onde incidente est principalement rétrodiffusée par le grain et les diffusions transverses sont très faibles. On peut aussi remarquer l'évolution du module de la fonction de forme (en rouge sur la figure 4.2) à mesure que la longueur d'onde adimensionnée diminue. Autour de $\frac{\lambda}{d} \approx 2,5$, l'intensité de la diffusion est identique vers l'avant et l'arrière tandis que l'intensité de la diffusion transverse dépasse celle de la diffusion longitudinale. Enfin, quand la longueur d'onde adimensionnée diminue, on observe l'apparition de lobes secondaires de faible amplitude ; la diffusion est aussi très focalisée vers l'avant du grain.

Ces données nous montrent que les variables qui affectent le plus la solution analytique sont la longueur d'onde adimensionnée et l'angle d'observation. L'idée dans cette section est donc de comparer des diagrammes de directivité numérique et analytique pour plusieurs longueurs d'onde adimensionnées différentes.

4.3 Résultats et méthodologie de post-traitement

Une première simulation est réalisée avec les paramètres décrits précédemment et une longueur d'onde adimensionnée de $\frac{\lambda}{d} = \pi$ équivalente à une fréquence d'onde incidente de $f_s \approx 240$ kHz pour un diamètre $d = 2$ mm. Les dimensions du domaine sont $L_x \times L_y = 84 \times 94$ mm, la longueur L_y étant plus grande que L_x afin de prendre en compte les PML et la source. La durée de la simulation est $t_f = 54$ μ s, le temps pour l'onde incidente d'atteindre le grain au centre du domaine et le temps pour l'onde réfléchie de se propager jusqu'au bord du domaine. Les paramètres de discrétisation qui découlent de la fréquence de la source sont $h = 0,25$ mm et $\Delta t = 59$ ns.

La figure 4.3a montre une image du champ de pression total p calculé avec la méthode des domaines fictifs à l'instant final où le front d'onde a quasiment atteint le bas du domaine. On distingue le grain au centre du domaine ainsi que des interférences générées par l'onde réfléchie par le grain. On devine la ligne source à la hauteur $y_s \approx 90$ mm puisqu'elle génère une discontinuité dans les oscillations.

Toutefois, le champ total n'est pas le plus intéressant en soit. L'attention doit se porter sur la part du champ total qui a interagi avec le domaine fictif, en l'occurrence

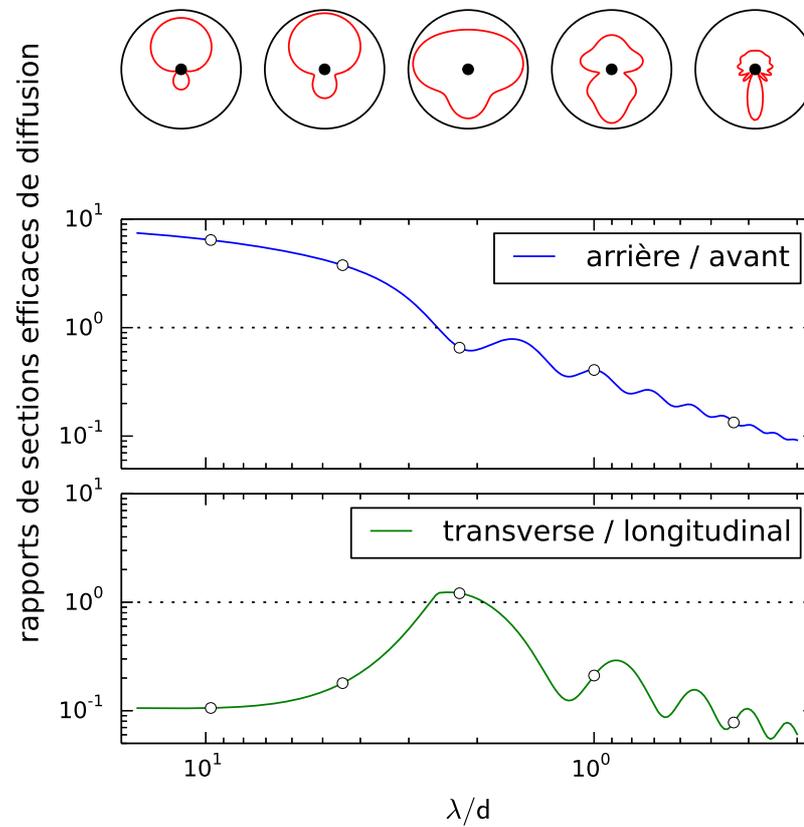


FIGURE 4.2 – Solution analytique des rapports de sections efficaces de diffusion lors de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide fixe. La courbe bleue du milieu représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ rétrodiffusé et celui diffusé vers l'avant du grain en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente. La courbe verte du bas représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ transverse et le champ longitudinal. En haut figurent cinq diagrammes de directivité du module de la fonction de forme pris pour cinq longueurs d'onde adimensionnées spécifiques (ronds blancs sur les courbes). Un diagramme de directivité est une représentation graphique en coordonnées polaires de l'amplitude de la solution en fonction de l'angle d'observation.

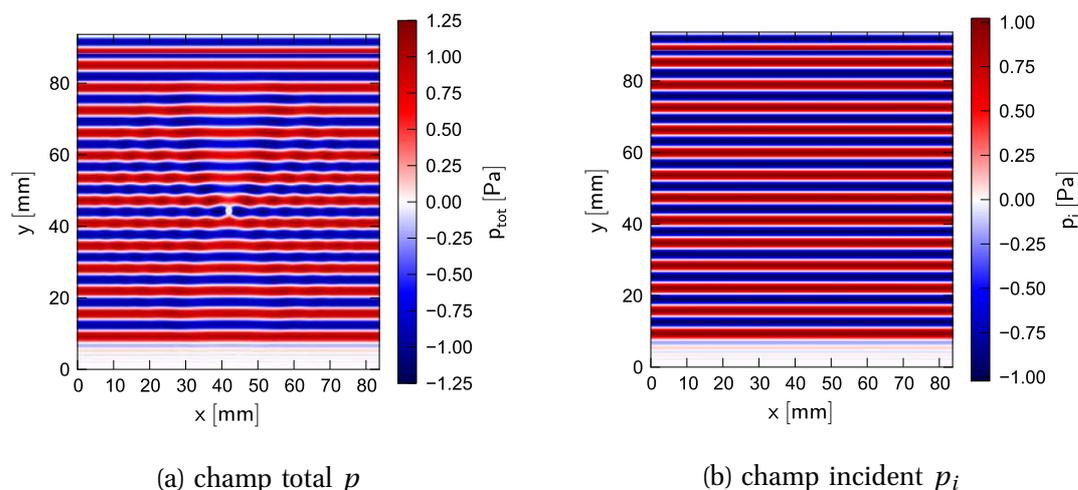


FIGURE 4.3 – Solution numérique des champs de pression total (a) et incident (b) à l’instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d’une onde plane par un grain fixe. L’onde incidente est orientée du haut vers le bas (selon l’axe $-y$) et le signal qui la génère est défini par la fonction $s_c(t)$ d’amplitude maximale $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$ et de longueur d’onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = \pi$

le champ réfléchi. En partant de l’équation (4.10) appliquée à la solution numérique du champ de pression, on peut déduire le champ réfléchi à partir du champ incident. La figure 4.3b montre la solution numérique du champ incident p_i qui s’obtient en réalisant une simulation identique à celle de la fig. 4.3a mais sans le grain. Dès lors, on obtient le champ de pression réfléchi en réalisant la soustraction des deux champs $p_r = p_{\text{tot}} - p_i$ en dehors du grain.

Le champ de pression réfléchi est représenté en trois dimensions sur la figure 4.4¹. On remarque que l’onde réfléchie se propage dans toutes les directions autour du grain, son amplitude diminuant avec la distance r par rapport au centre du grain. De plus, l’amplitude de l’onde réfléchie varie en fonction de l’angle d’observation θ : la rétro-diffusion est plus forte que la diffusion vers l’avant pour cette fréquence d’onde incidente.

Le modèle nous donne aussi accès aux composantes du champ de vitesse \mathbf{u} (fig. 4.5. La solution donnée par le champ de vitesse est proche de celle donnée par le champ de pression à ceci près que c’est un champ vectoriel ce qui permet d’observer séparément sa composante selon \mathbf{x} et celle selon \mathbf{y} . Cela permet par exemple de relever plus facilement la symétrie par rapport à la direction de propagation de l’onde incidente (fig. 4.5a) et la différence d’amplitude entre le champ rétrodiffusé et le champ diffusé

1. Tous les graphiques de la partie 2 sont tracés en utilisant le module python *Matplotlib* (Hunter, 2007).

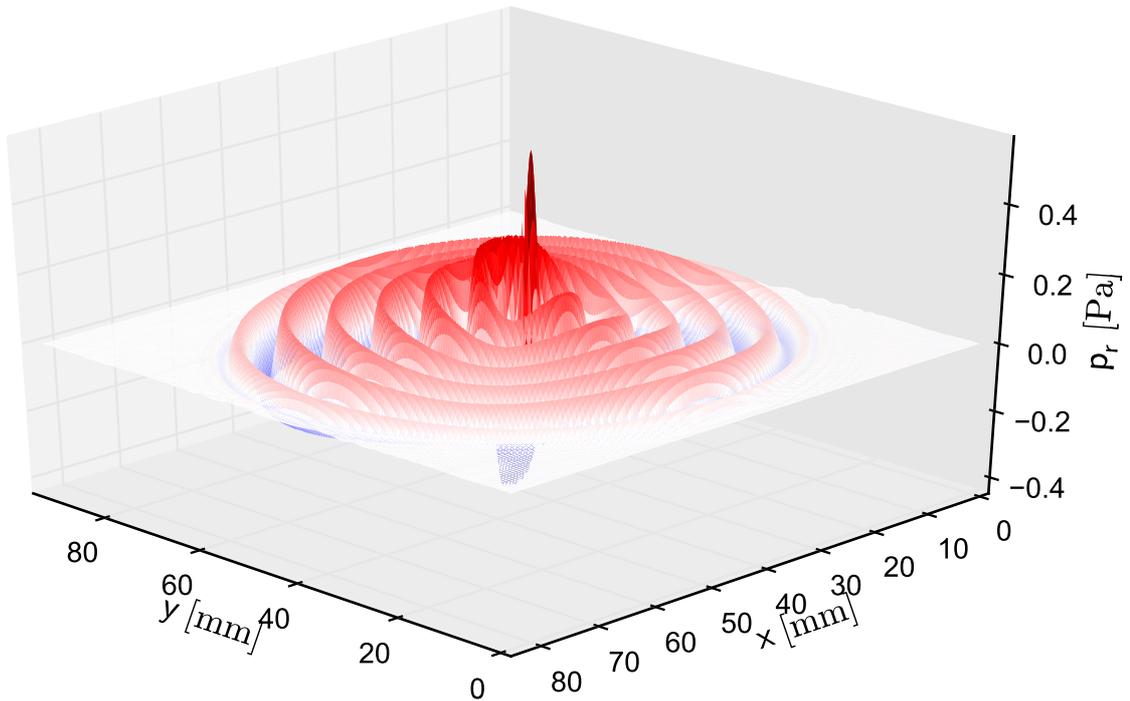


FIGURE 4.4 - Solution numérique du champ de pression réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain fixe. Les surfaces rouges correspondent à une valeur de champ de pression positive, blanches à une valeur nulle et bleues à une valeur négative ; la luminosité est inversement proportionnelle à la valeur du champ de pression.

vers l'avant (fig. 4.5b).

Par ailleurs, sur les figures 4.4 et 4.5 on constate des pics de forte amplitude localisé à l'intérieur du grain. Les valeurs des champs à l'intérieur du grain ne sont pas physiques et ne sont que le reflet des multiplicateurs de Lagrange qui appliquent les contraintes imposées au grain.

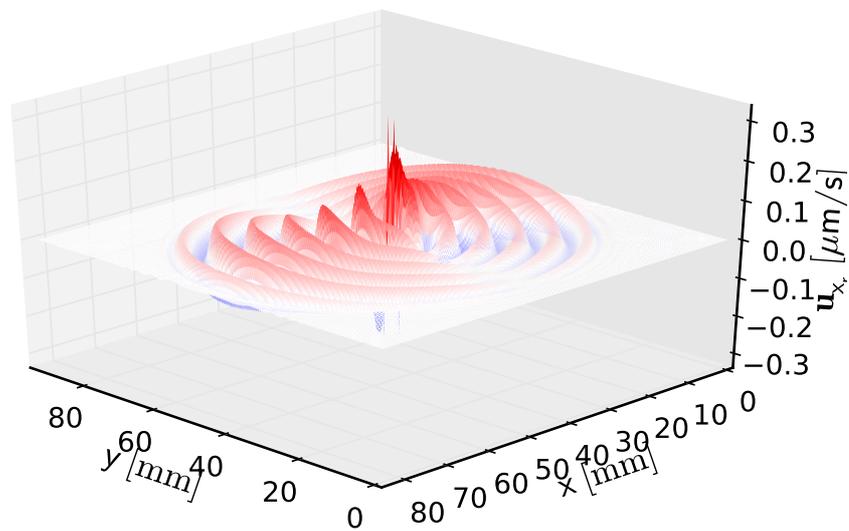
Afin de comparer les solutions numérique et analytique, nous devons commencer par calculer le module du champ de pression. Contrairement à la solution analytique qui est complexe, le champ de pression numérique lui est réel. Néanmoins, comme l'onde incidente est sinusoïdale et monochromatique, il est possible de retrouver artificiellement une estimation du module du champ de pression indépendant du temps en additionnant les solutions numériques à deux instants séparés par une demi-période $\frac{T_s}{2}$:

$$|p_r(r, \theta)| = p_r(r, \theta, t) - p_r\left(r, \theta, t - \frac{T_s}{2}\right) \quad (4.15)$$

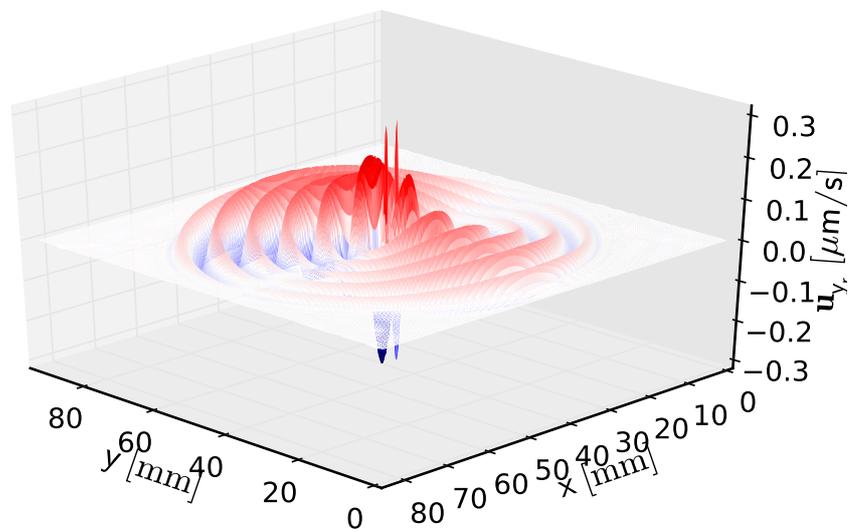
Le résultat obtenu est présenté sur la figure 4.6a avec dessiné au pointillé le cercle où sont récupérées les valeurs de champs de pression pour le tracé du diagramme de directivité (fig. 4.6b). On procède de la même façon pour obtenir les diagrammes de directivité des deux composantes du champ de vitesse (fig. 4.6c et 4.6d).

Les résultats numériques sont proches de la solution analytique compte tenu du nombre de points utilisés pour discrétiser le grain ($N_\partial = 14$). La valeur des champs longitudinaux est légèrement sous-estimée tandis que celle des champs transverses est tout autant surestimée. L'allure des deux courbes est la même ce qui prouve que le modèle parvient à capter le phénomène physique et que les contraintes imposées avec les multiplicateurs de Lagrange dans le domaine fictif G ont bien été appliquées dans le domaine régulier Ω .

On observe néanmoins des micro-oscillations du champ de pression et de la composante selon \mathbf{x} du champ de vitesse pour des angles compris entre -20° et 20° , et -160° et 160° . Ces parasites numériques ne sont pas surprenants car ils sont caractéristiques de l'élément fini mixte P_1 - P_0 utilisé pour discrétiser le modèle (Fortin et Garon, 1997, p. 259). D'autre part, le motif du maillage en *Union Jack* initialement choisi pour garantir une certaine isotropie du maillage est soupçonné de provoquer lui aussi des micro-oscillations à cause de l'alternance de l'orientation des triangles (fig. 3.1a p. 49). L'usage d'éléments finis triangulaires est très rare en acoustique car les éléments finis rectangulaires assurent bien mieux l'isotropie du maillage. Cependant, le logiciel *FreeFEM++* (Hecht, 2012) ne supporte pour l'heure que des éléments finis triangulaires.



(a) composante selon x



(b) composante selon y

FIGURE 4.5 – Solution numérique du champ de vitesse réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain fixe. Les surfaces rouges correspondent à une valeur de champ de pression positive, blanches à une valeur nulle et bleues à une valeur négative ; la luminosité est inversement proportionnelle à la valeur du champ de vitesse.

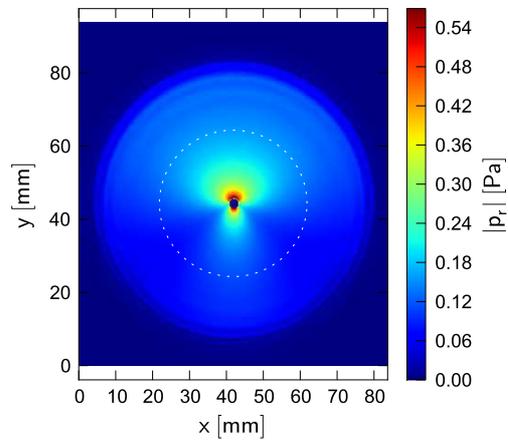
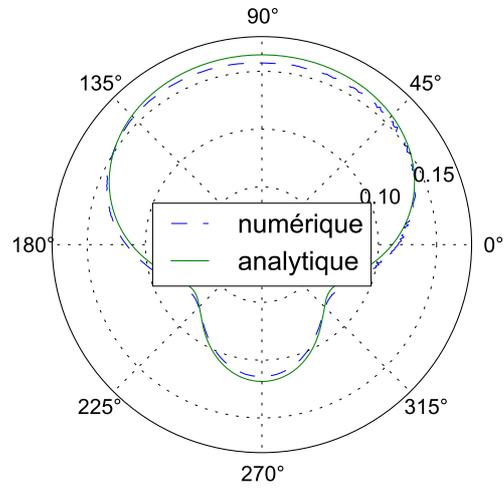
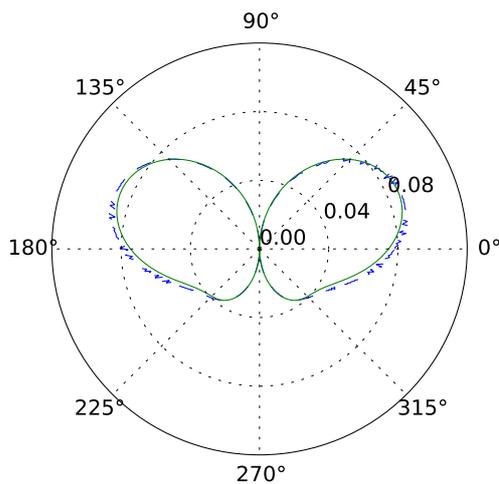
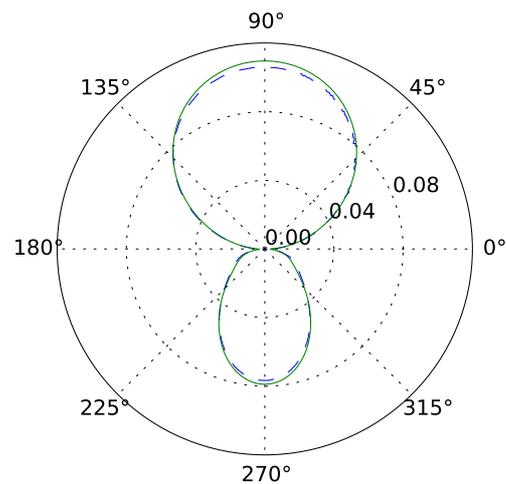
(a) module du champ de pression réfléchi $|p_r|$ (b) diagramme de directivité de $|p_r|$ (c) diagramme de directivité de $|\mathbf{u}_{x_r}|$ (d) diagramme de directivité de $|\mathbf{u}_{y_r}|$

FIGURE 4.6 – Module du champ de pression réfléchi (a) avec un cercle blanc au pointillé de rayon $r = 20R$ localisant les données sélectionnées pour tracer le diagramme de directivité du module du champ de pression réfléchi (b). Les diagrammes (c) et (d) sont construits de la même manière pour représenter les modules des composantes du champ de vitesse.

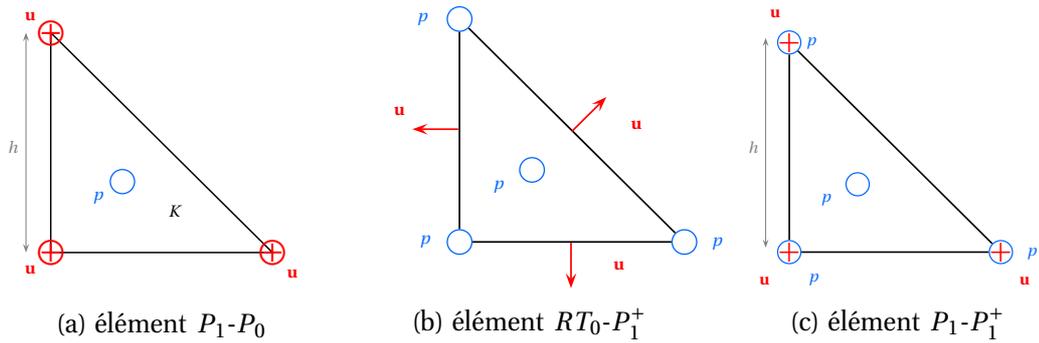


FIGURE 4.7 – Degrés de liberté du champ de vitesse \mathbf{u} et du champ de pression p pour les éléments finis mixtes P_1-P_0 , $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$

4.4 Comparaison avec des éléments finis mixtes différents pour plusieurs longueurs d'onde adimensionnées

Afin de mieux comprendre le choix de l'élément fini P_1-P_0 , nous présentons maintenant des résultats avec d'autres éléments finis mixtes disponibles avec *FreeFEM++* : les éléments finis mixtes $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$. Les degrés de liberté de ces éléments finis sont représentés sur la figure 4.7.

La comparaison est opérée sur les diagrammes de directivité des champs de pression plutôt que les champs de vitesse pour ne pas surcharger les résultats. Du reste, nous avons pu constater que les solutions numériques des champs de pression et des champs de vitesse étaient très corrélées (fig. 4.6) et que le champ de pression cumulait les informations portées par les deux composantes du champ de vitesse. De plus, au vu des solutions analytiques présentées figure 4.2 (p. 70), nous réalisons cette comparaison pour quatre longueurs d'onde adimensionnées données : $\frac{\lambda}{d} = 4\pi \approx 13$ (très basse fréquence), $\frac{\lambda}{d} = \frac{20\pi}{13} \approx 5$ (basse fréquence), $\frac{\lambda}{d} = \frac{5\pi}{8} \approx 2$ (fréquence de transition), $\frac{\lambda}{d} = \frac{\pi}{4} \approx 0,8$ (haute fréquence).

Dans tous les cas, le module du champ de pression issu de la solution analytique (4.8) sert de référence. La figure 4.8 commence par présenter les diagrammes de directivité obtenus avec l'élément fini mixte P_1-P_0 pour quatre longueurs d'onde adimensionnées en complément de celui obtenu pour $\frac{\lambda}{d} = \pi$ (fig. 4.6). Cette figure permet de confirmer les remarques formulées précédemment sur l'allure similaire des courbes des résultats numérique et analytique pour chacune des longueurs d'onde adimensionnées.

De même, on note encore la présence de parasite : ils sont d'ailleurs plus facilement discernables sur les figures 4.8c et 4.8d. Pour le comprendre, il ne faut pas perdre à l'esprit à l'équation (3.1) (p. 48) qui fixe le pas de discrétisation spatiale. Quand la

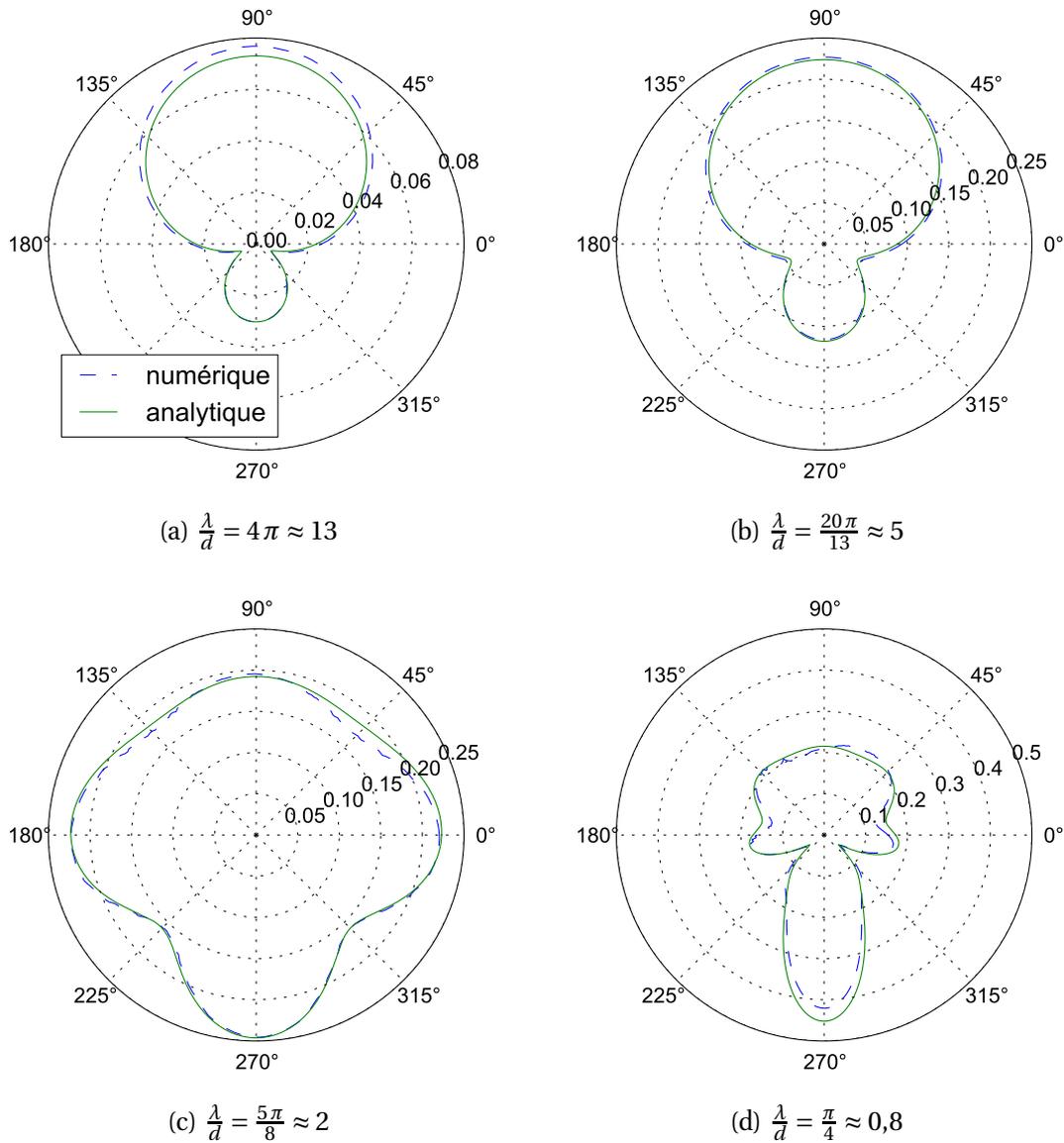


FIGURE 4.8 - Diagramme de directivité du module des champs de pression réfléchis, numérique et analytique, pour quatre longueurs d'onde adimensionnées $\frac{\lambda}{d}$ différentes et avec l'élément fini mixte P_1 - P_0 , lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} .

longueur d'onde minimale présente dans le milieu λ_{\min} devient grande, alors c'est le deuxième argument de la fonction min qui détermine le pas de discrétisation. Cela revient à augmenter artificiellement le nombre de points à utiliser pour discrétiser une longueur d'onde N_λ .

Par ailleurs, la sous-estimation du champ longitudinal et la surestimation du champ transverse révélés sur la figure 4.6 n'est pas reproductible à toutes les fréquences. Nous essaierons de mieux comprendre les raisons de cet écart dans la section 4.5, une fois les résultats analysés pour les éléments finis mixtes $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$.

4.4.1 Élément fini mixte $RT_0-P_1^+$

Une première version du modèle a d'abord été développée avec l'élément fini mixte $RT_0-P_1^+$ (Imbert et McNamara, 2012) dont les degrés de liberté sont présentés fig. 4.7b (p. 76). Comme nous l'avons vu au chapitre 3, l'élément fini mixte de Raviart et Thomas (1977) RT_{0h} est le choix naturel pour un problème d'onde résolu avec la méthode des éléments finis. En revanche, il présente des défauts de convergence avec la méthode des domaines fictifs. En dépit du fait qu'il est traditionnellement associé à l'élément fini de Lagrange constant par morceaux P_0 , nous avons préféré l'associer à l'élément fini de Lagrange continu par morceaux enrichi d'une fonction bulle P_{1h}^+ (Brezzi, Bristeau, Franca, Mallet, et Rogé, 1992) :

$$P_{1h}^+ = \{q_h \in C^0(\Omega_h) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Omega_h}, q_h|_K = P_1 + \text{span}\{\alpha_{1_K} \alpha_{2_K} \alpha_{3_K}\}\} \quad (4.16)$$

avec P_1 un polynôme de Lagrange d'ordre 1 et $\text{span}\{\alpha_{1_K} \alpha_{2_K} \alpha_{3_K}\}$ le sous-espace vectoriel engendré par les coordonnées barycentriques α_{1_K} , α_{2_K} et α_{3_K} du triangle K . Ces éléments ont en commun un degré de liberté au centre du triangle K mais l'élément P_1^+ possède en plus de cela des degrés de liberté sur les sommets. L'élément P_1^+ peut être exploité pour stabiliser une méthode des éléments finis ; qui plus est, Mourad, Dolbow, et Harari (2006) l'ont utilisé pour stabiliser une méthode de domaines fictifs où une condition de Dirichlet était imposée avec des multiplicateurs de Lagrange surfaciques.

Dans l'article de Imbert et McNamara (2012), seule la partie dynamique avait été étudiée et comparée à une solution analytique. Par ailleurs, des problèmes liés à la dynamique survenaient autour de la longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} \approx 1$. Les champs de pression et de vitesse n'avaient alors fait l'objet que d'observations globales. Les résultats des diagrammes de directivité pour cet élément sont présentés sur la figure 4.9.

La solution numérique obtenue avec l'élément fini mixte $RT_0-P_1^+$ est manifestement éloignée de la solution analytique. C'est particulièrement flagrant pour $\frac{\lambda}{d} = \frac{20\pi}{13}$ (fig. 4.9b) et $\frac{\lambda}{d} = \frac{5\pi}{8}$ 4.9c. D'une part la symétrie de la solution n'est pas respectée, d'autre part l'allure de la solution numérique est très approximative. Le seul avantage de cet élément fini mixte est d'obtenir une solution numérique dénuée de parasites

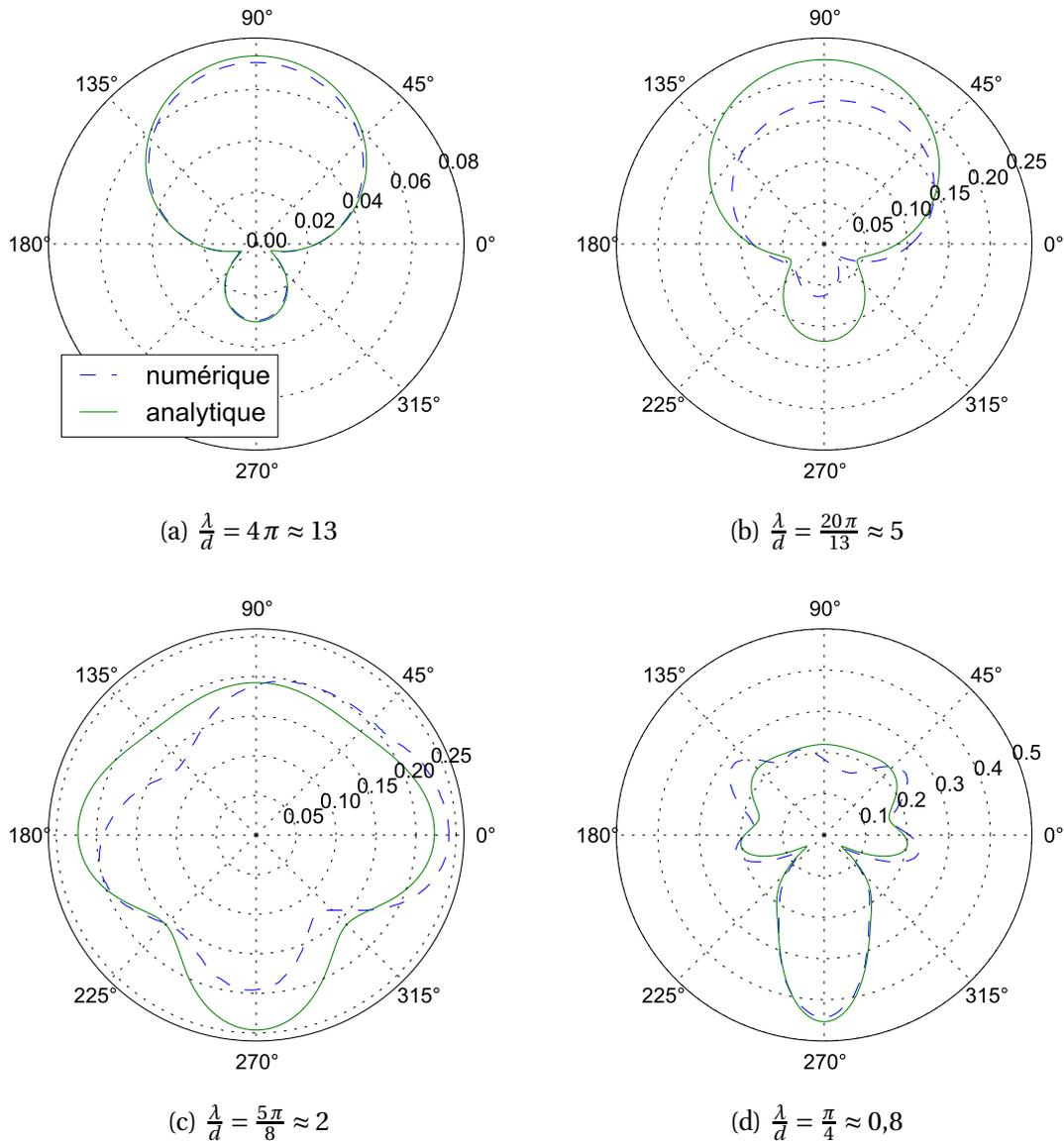


FIGURE 4.9 - Diagramme de directivité du module des champs de pression réfléchis, numérique et analytique, pour quatre longueurs d'ondes adimensionnées $\frac{\lambda}{d}$ différentes et l'élément fini mixte $RT_0-P_1^+$, lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} .

numériques. Finalement, ce résultat est révélateur d'un problème de convergence du domaine fictif pour l'élément fini mixte $RT_0-P_1^+$.

4.4.2 Élément fini mixte $P_1-P_1^+$

Pour remédier aux problème de convergence de l'élément RT_0 , nous le remplaçons par un élément fini conforme : l'élément fini de Lagrange continu par morceaux (fig. 4.7c et éq. (3.6) p. 51). Les éléments finis de Lagrange sont utilisés la plupart du temps avec la méthode des domaines fictifs en dehors du cadre de la théorie des éléments finis mixtes.

On constate que les résultats obtenus avec l'élément fini mixte $P_1-P_1^+$ (fig. 4.10) sont similaires à ceux obtenus avec l'élément $P_1-P_1^+$ (fig. 4.8 p. 77). Bien que les deux résultats ne soient pas strictement identiques, on obtient à peu près le même écart de la solution analytique. En l'occurrence le fait d'augmenter les degrés de liberté de l'élément de pression n'apporte rien si ce n'est du temps de calcul supplémentaire.

4.5 Erreur liée à la position du domaine fictif par rapport au maillage régulier

L'écart entre les solutions numérique et analytique pour les éléments finis mixtes $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$ doit être caractérisé afin de mieux comprendre les limites de notre modèle. Après avoir envisagé d'autres possibilités d'éléments finis, notre attention se porte sur la conséquence de la superposition du maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} et du maillage non-structuré des domaines fictifs \mathcal{T}_{G_H} . En effet, la convergence de la méthode des domaines fictifs est démontrée dès lors qu'une condition *inf-sup* est satisfaite (Girault et Glowinski, 1995). Cette condition, qui impose que $H > h$, montre que la frontière du domaine fictif ne doit pas couper le maillage n'importe où.

Pour obtenir l'erreur liée à la position du domaine fictif par rapport au maillage régulier, l'expérience réalisée dans la section 4.3 (p. 69) est recommencée avec les mêmes paramètres mis à part la position du grain \mathbf{X}_1 . Le centre du grain est déplacé d'une distance $h/2$ entre chaque simulation de façon à couvrir entièrement le motif en *Union Jack* (fig. 4.11) : cela représente donc $4 \times 4 = 16$ résultats. Dès lors, on parvient à 16 courbes, la première étant le résultat de la figure 4.6b (p. 75) pour la position originelle du grain. Par souci de clarté, de ces 16 courbes, seules sont conservées les valeurs extrêmes pour chacun des angles d'observation constituant ainsi la marge d'erreur du module du champ de pression.

Les résultats numériques de l'erreur liée à la position du domaine fictif par rapport au maillage régulier sont représentés sur la figure 4.12 pour les éléments finis $P_1-P_1^+$ et $RT_0-P_1^+$. Ce résultat permet d'abord de comprendre que l'asymétrie des résultats obtenus précédemment avec l'élément de Raviart-Thomas est très liée à l'emplacement

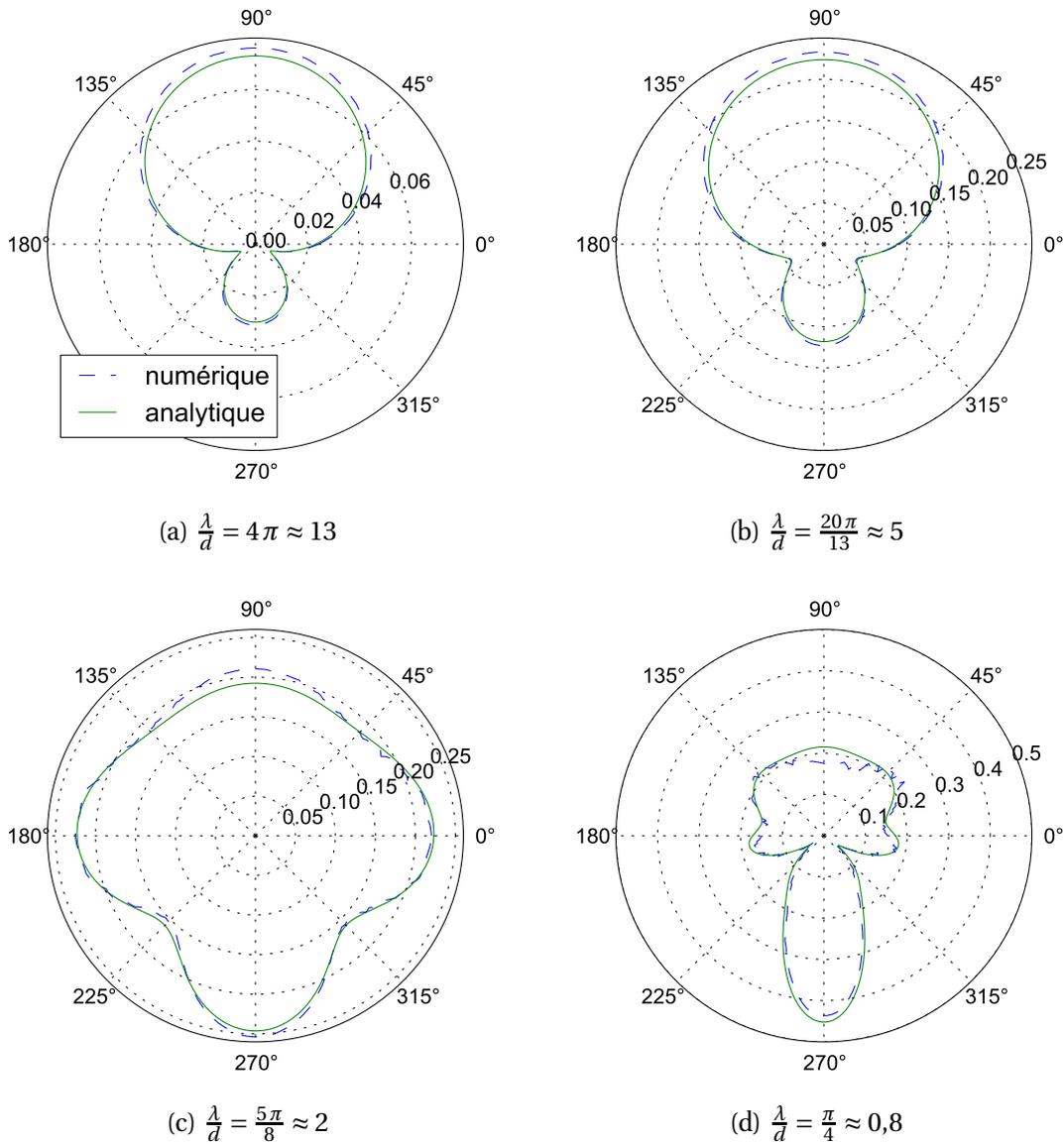


FIGURE 4.10 - Diagramme de directivité du module des champs de pression réfléchis, numérique et analytique, pour quatre longueurs d'ondes adimensionnées $\frac{\lambda}{d}$ différentes et l'élément fini mixte $P_1-P_1^+$, lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} .

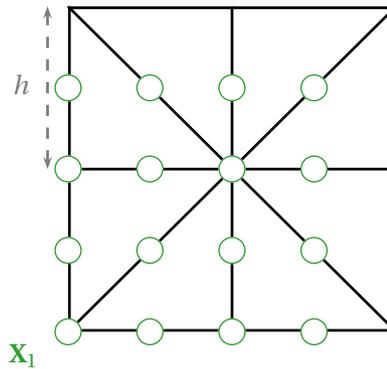


FIGURE 4.11 – Schéma des positions successives adoptées par le centre du grain \mathbf{X}_1 par rapport au maillage en vue de calculer l'erreur liée à la position

ou le domaine fictif coupe le domaine régulier (fig. 4.12a). Le deuxième constat pour cet élément concerne l'erreur elle-même : elle atteint près de 50% pour le champ diffusé vers l'avant et le champ rétrodiffusé est sous-estimé quelque soit la position du grain.

Pour ce qui est de l'élément fini mixte $P_1-P_1^+$ (fig. 4.12b) semblable à l'élément P_1-P_0 , l'erreur dépend peu de l'angle d'observation. De toute manière, la méthode des domaines fictifs n'a pas vocation à épouser parfaitement la forme de l'obstacle comme le fait la méthode des éléments finis : elle est seulement moins soumise à l'effet de marches d'escalier de la méthode des différences finies (fig. 1.2 p. 23). On remarque toujours la présence des micro-oscillations dont on peut maintenant préciser les angles auxquelles elles semblent se produire, à savoir autour de $\theta = \{45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ\}$. Ces angles sont les mêmes que ceux des diagonales du maillage régulier.

Afin de savoir si cette erreur se résorbe quand on augmente la discrétisation des deux maillages, on trace sur la figure 4.13 l'erreur obtenue pour deux nombres de points pour discrétiser le grain $N_{\partial_{\min}}$. On relève une diminution de l'erreur se produisant essentiellement sur le champ longitudinal. Néanmoins la solution numérique pour $N_{\partial_{\min}} = 28$ s'écarte de la solution analytique en ce qui concerne le champ diffusé vers l'avant. Une raison probable est la valeur du rapport de maillages qui est trop faible : elle est fixée $\kappa = 1,15$ dans l'expérience du calcul de l'erreur. Nous trouverons un moyen de donner à κ une valeur adaptée à notre problème dans la section 6.5.

4.6 Discussion

Cette section préliminaire à « l'activation » de la partie dynamique du modèle nous a permis d'appréhender les résultats attendus dans ce type de problèmes d'acoustique. Dans cette configuration sans partie dynamique, un parallèle peut être fait avec les méthodes des domaines fictifs de Glowinski et Lapin (2004) et Bokil et Glowinski (2005),

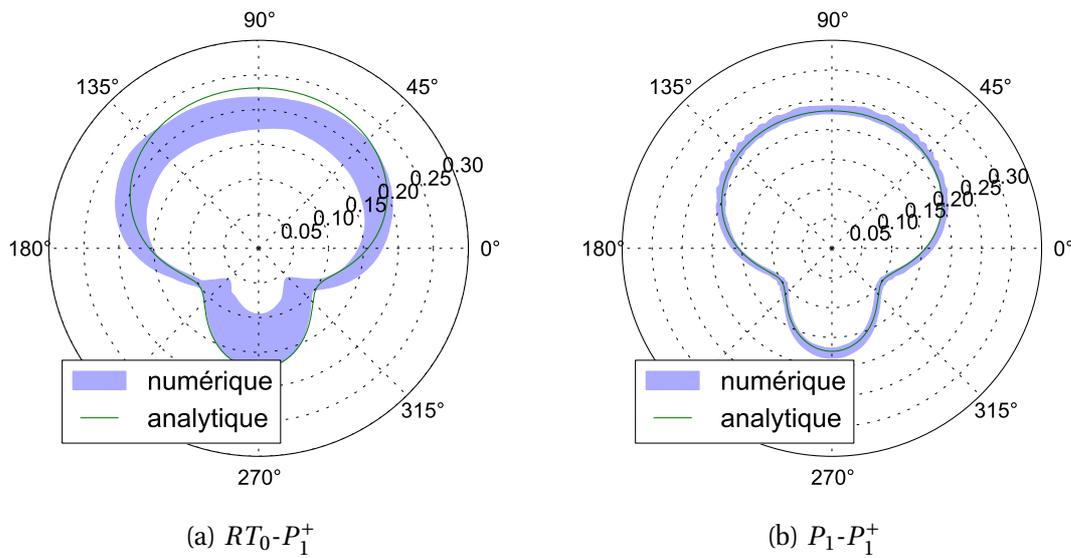


FIGURE 4.12 - Diagramme de directivité de l'erreur du module du champ de pression réfléchi numérique selon la position du maillage \mathcal{T}_{G_H} par rapport au maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} , pour les éléments finis mixtes $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . La longueur d'onde adimensionnée vaut $\frac{\lambda}{d} = \pi$ et le rapport de maillages est fixé à $\kappa = 1,15$ pour cette expérience.

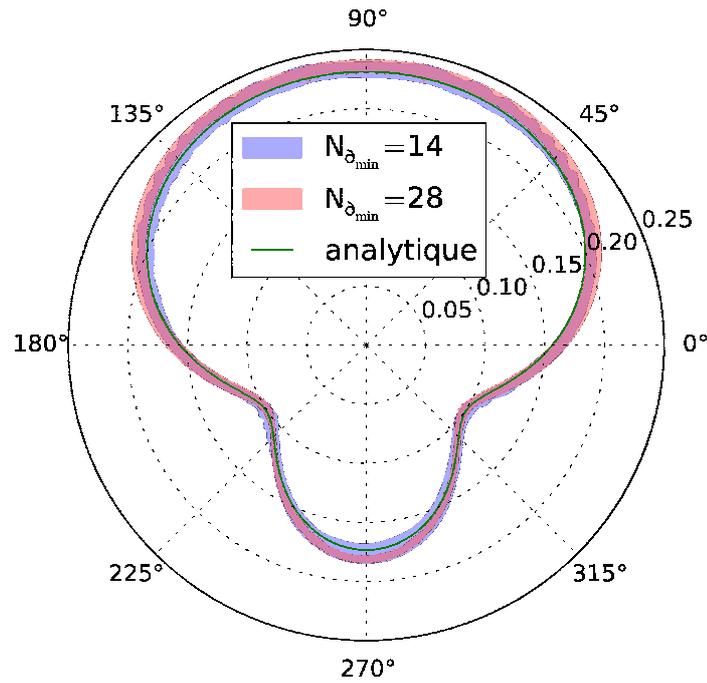


FIGURE 4.13 – Diagramme de directivité de l'erreur du module du champ de pression réfléchi numérique selon la position du maillage \mathcal{T}_{G_H} par rapport au maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} en fonction du nombre de points utilisés pour discrétiser la frontière du grain. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . La longueur d'onde adimensionnée vaut $\frac{\lambda}{d} = \pi$ et le rapport de maillages est fixé à $\kappa = 1,15$ pour cette expérience. L'élément fini est l'élément P^1 - P_1^+ .

elle aussi basée sur des multiplicateurs de Lagrange, pour simuler la diffraction d'une onde plane par un obstacle fixe. En revanche ils utilisent une condition de Dirichlet (imposée au champ de pression) au lieu d'une condition de Neumann et des éléments finis différents. Nous pouvons néanmoins constater que les résultats numériques de la figure 4.4 (p. 72) sont semblables à ceux de la figure 5 (de l'article de Bokil et Glowinski, 2005, p. 259), en prenant note qu'ils utilisent une longueur d'onde adimensionnée de $\frac{\lambda}{d} = 1$ au lieu de π .

D'autre part nous avons montré que l'élément fini de (Raviart et Thomas, 1977), pourtant adapté aux problèmes d'ondes résolus avec la méthode des éléments finis, souffre de problèmes de convergences avec notre méthode des domaines fictifs. Ce résultat peut être confronté à ceux de Bécache et coll. (2009) qui ont récemment dévoilé des problèmes de convergence de l'élément mixte RT_0-Q_0 (Q_0 est l'équivalent rectangulaire de l'élément P_0) avec la méthode des domaines fictifs pour l'équation des ondes avec une condition de Neumann (4.2) mais uniquement des multiplicateurs de Lagrange surfaciques (le domaine fictif étant ouvert). Ainsi, ils ont réalisé des expériences numériques avec des obstacles plans qu'ils ont orientés à plusieurs angles différents. Il s'avère que selon l'orientation de la discontinuité, la convergence n'est plus assurée et ce même en raffinant le maillage. Dans notre cas, un cercle présente toutes les orientations possibles par rapport au maillage régulier, on peut donc en déduire une origine commune au problème de convergence.

Enfin, cette section nous a permis de mieux comprendre les limites de notre modèle et de la méthode des domaines fictifs en général. L'utilisation de l'élément fini P_1-P_0 par la suite représente le meilleur choix uniquement au vu des contraintes de *FreeFEM++*. Les micro-oscillations générées nécessiteraient sûrement de le remplacer par un autre élément fini mixte. Des solutions sont d'ailleurs proposées par Bécache et coll. (2009) pour l'élément RT_0 mais elles sont trop complexes à implémenter dans *FreeFEM++*. Nous avons aussi remarqué que l'erreur liée à la position du maillage du domaine fictif par rapport au maillage régulier diminuait avec la discrétisation mais qu'il fallait encore déterminer la valeur du paramètre κ .

Chapitre 5

Grains mobiles soumis à une force de rappel

Nous revenons maintenant au modèle à proprement parler : celui décrit dans la partie 1 avec le couplage entre les ondes acoustiques et la dynamique des grains. L'originalité de notre modèle réside dans sa capacité à fonctionner sans aucune source incidente. Pour le comprendre, nous réalisons des tests dans lesquels un ou deux grains sont soumis à des forces de rappel de ressorts. Dans ce cas, les grains rayonnent dans le fluide tout en oscillant librement autour de leur position d'équilibre. L'expression de l'énergie potentielle étant connue pour les forces de ressort, cela permettra d'observer les échanges d'énergie entre un grain et un fluide d'une part (fig. 5.1a) et deux grains séparés par un fluide d'autre part (fig. 5.1b).

La force de rappel du ressort agissant sur un grain est donnée par :

$$\mathbf{F}_k = -k_g \Delta Y_k \mathbf{y} \quad (5.1)$$

avec ΔY_k la composante selon \mathbf{y} de l'écart du grain par rapport à sa position d'équilibre et k_g la raideur du ressort.

Définitions de l'énergie Les estimateurs à notre disposition pour l'énergie sont ceux décrits dans l'équation (2.47) (p. 45). En effet, la spécificité de la méthode des domaines fictifs fait qu'on peut difficilement séparer l'énergie dans le grain et celle dans le fluide. Le domaine $\Omega \setminus G$ n'est plus accessible car englobé dans le domaine Ω . Par contre, il est pertinent d'observer l'énergie acoustique portée par l'onde acoustique dans le domaine Ω et l'énergie mécanique portée par les grains puisque démonstration a été faite qu'on parvient au même résultat de la conservation de l'énergie (2.5 p. 44).

Cette précision étant faite, on définit l'énergie totale E comme la somme de l'énergie acoustique et de l'énergie mécanique :

$$E = E_a + E_m \quad (5.2)$$

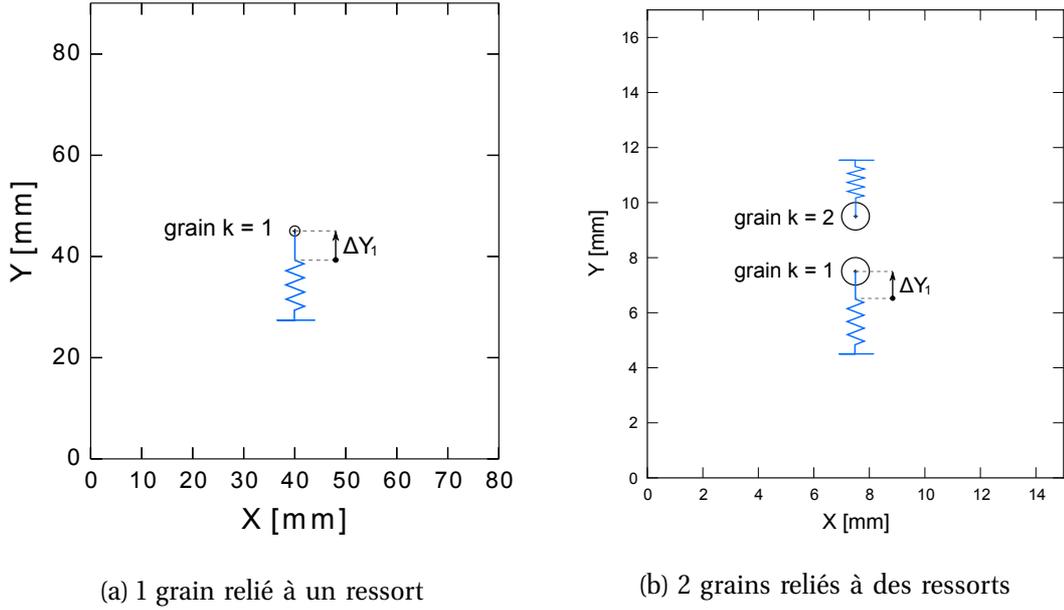


FIGURE 5.1 – Schéma des deux configurations utilisées dans le chapitre 5. Les deux grains sont reliés à leur propre ressort de raideur k_g . Le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché

L'énergie acoustique E_a se compose d'énergie cinétique $E_{a,c}$ liée aux champs de vitesse et d'énergie potentielle $E_{a,p}$ liée au champ de pression :

$$E_a = E_{a,c} + E_{a,p} \quad (5.3)$$

avec

$$E_{a,c} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} \rho_0 \|\mathbf{u}\|^2 d\mathbf{x} \quad (5.4)$$

$$E_{a,p} = \int_{\Omega} \frac{1}{2 \rho_0 c_0^2} p^2 d\mathbf{x} \quad (5.5)$$

De même l'énergie mécanique E_m est partagée en énergie cinétique $E_{m,c}$ liée à la vitesse du grain et en énergie potentielle du ressort $E_{m,p}$ liée à l'écart par rapport à la position d'équilibre :

$$E_m = E_{m,c} + E_{m,p} \quad (5.6)$$

avec

$$E_{m,c} = \sum_{k=1}^{N_g} \frac{1}{2} k_g \Delta Y_k^2 \quad (5.7)$$

$$E_{m,p} = \sum_{k=1}^{N_g} \frac{1}{2} (\rho_g - \rho_0) V_k \|\mathbf{U}_k\|^2 \quad (5.8)$$

On note également que l'énergie mécanique cinétique $E_{m,p}$ (5.8) ne prend en compte qu'une partie seulement de l'énergie réelle du grain. La part d'énergie manquante est incluse dans l'énergie acoustique cinétique $E_{a,c}$ (5.4) qui est calculée sur l'intégralité du domaine $\Omega = (\Omega \setminus G) \cup G$.

5.1 Cas d'un grain seul

5.1.1 Paramètres de l'expérience

Pour cette première expérience avec un grain, nous conservons le maximum de paramètres de la section précédente afin de faciliter d'éventuelles comparaisons. On modélise donc un grain de rayon $R = 1$ mm au milieu d'un domaine rectangulaire de taille $L_x \times L_y = 80 \times 90$ mm (fig. 5.1a). La configuration des *PML* est celle d'un milieu infini tel qu'il est présenté figure A.1a puisque la génération d'une onde plane n'est plus nécessaire. Le milieu fluide est toujours composé d'eau ($\rho_0 = 1\,000$ kg/m³ et $c_0 = 1\,500$ m/s) tandis que le grain est en verre de masse volumique $\rho_g = 2\,500$ kg/m³.

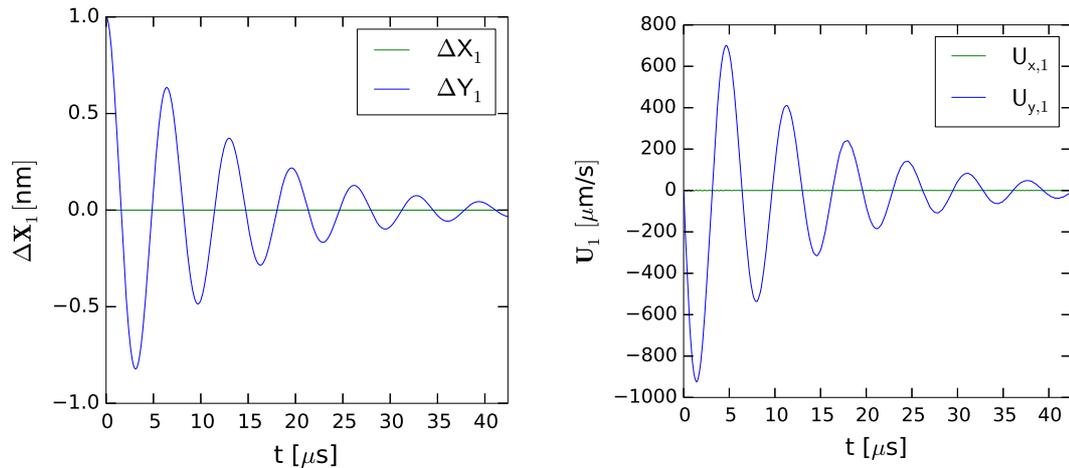
Le grain est relié à un ressort virtuel de raideur $k_g = 10$ GN/m de sorte que la pulsation des oscillations soit la même que celle de l'onde incidente de la figure 4.4 où la longueur d'onde adimensionnée était $\frac{\lambda}{d} = \pi$:

$$k_g = \left(\frac{2\pi c_0}{\lambda} \right)^2 V_1 (\rho_g - \rho_0) \quad (5.9)$$

L'écart initial est quant à lui fixé à $\Delta Y_1(t=0) = 1$ nm. Puisque la longueur d'onde minimale dans le milieu λ_{\min} ne change pas, les paramètres de discrétisation sont aussi les mêmes que ceux fig. 4.4 à savoir : $h = 0,25$ mm, $\Delta t = 59$ ns, $N_\lambda = 12$, $N_{\partial_{\min}} = 14$, $\kappa = 1,3$, la condition CFL $C = 0,5$ et le temps final $t_f = 42$ μ s.

5.1.2 Résultats dynamiques et acoustiques

La figure 5.2 présente les résultats numériques des deux composantes de l'écart du grain par rapport à la position d'équilibre $\Delta \mathbf{X}_1$ ainsi que de la vitesse du grain \mathbf{U}_1 . On note que la composante selon \mathbf{x} est nulle à la fois pour la position et la vitesse puisque



(a) composantes ΔX_1 et ΔY_1 de la position (b) composantes $U_{x,1}$ et $U_{y,1}$ de la vitesse

FIGURE 5.2 – Solutions numériques de la position par rapport à l'équilibre et de la vitesse du grain $k = 1$ en fonction du temps lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort virtuel dirigé selon l'axe \mathbf{y} et de raideur $k_g = 10\text{GN/m}$.

le ressort est dirigé selon l'axe \mathbf{y} . Les oscillations selon la composante \mathbf{y} sont amorties par la force hydrodynamique naturellement intégrée dans le modèle.

Les figure 5.3 et 5.4 montrent respectivement le champ de pression acoustique et le champ de vitesse acoustique au temps $t = 25\ \mu\text{s}$ ¹. Le grain se comporte comme un dipôle : c'est particulièrement visible sur la figure 5.4b. En effet, comme le grain est rigide, d'une part sa frontière est indéformable interdisant toute pulsation radiale de la sphère comme c'est possible pour une bulle de gaz par exemple (Strasberg, 1956). D'autre part le déplacement du centre du grain et le même que celui de toute sa frontière et est relié au champ de vitesse par la condition de saut de l'équation des ondes (2.23) (p. 39). Ainsi, quand le grain se dirige dans une direction donnée, il génère une surpression à l'avant et une dépression à l'arrière. De plus, il est aussi affecté par le champ de pression qu'il a lui-même généré autour de lui à cause de la force hydrodynamique qui le freine.

Du point de vue numérique, le démarrage abrupt de l'expérience génère ici une petite oscillation supplémentaire visible devant l'oscillation principale au premier plan de la figure 5.3. Enfin, on ne revient pas sur les constatations déjà réalisées dans le chapitre 4 sur les micro-oscillations et qui sont toujours valables lorsque le grain est lui-même source d'ondes acoustiques.

¹ ...et non $t = 54\ \mu\text{s}$ comme dans la figure 4.4 p. 72 puisqu'on économise ici le temps mis par l'onde incidente pour atteindre le grain.

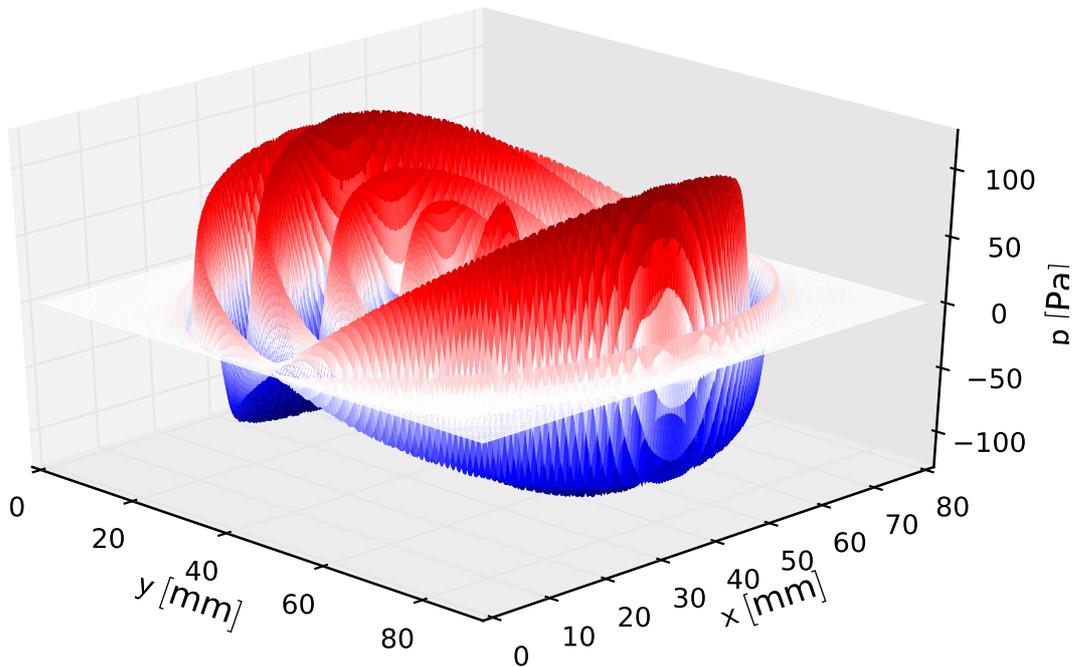


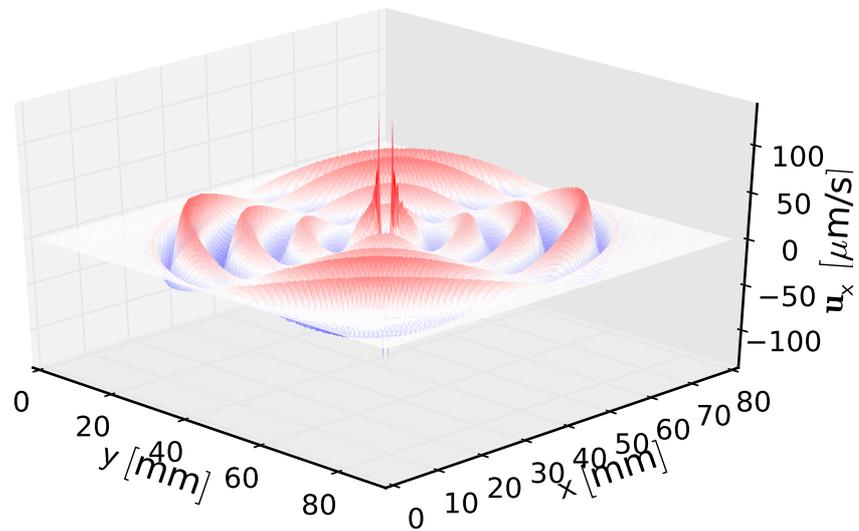
FIGURE 5.3 – Solution numérique du champ de pression à l’instant $t = 25 \mu\text{s}$ lors de l’oscillation d’un grain relié à un ressort de raideur $k_g = 10 \text{ GN/m}$.

5.1.3 Échanges d’énergie entre un grain et le fluide

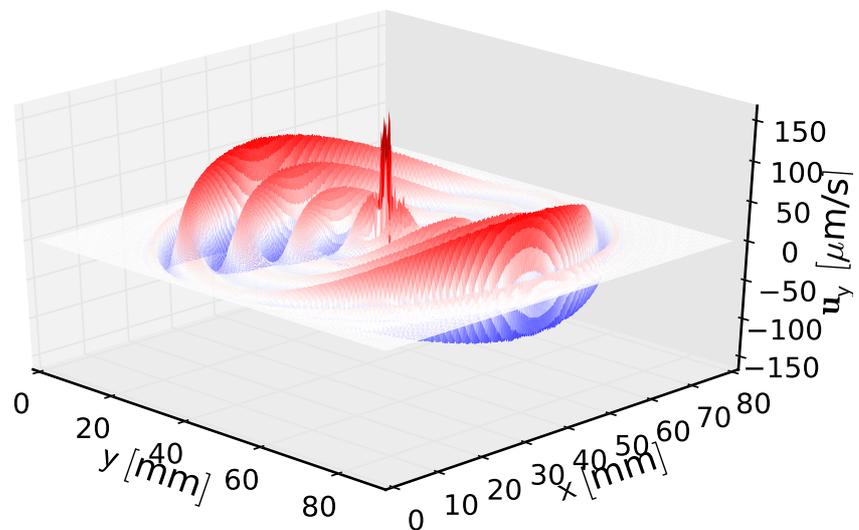
La répartition de l’énergie dans le système est représentée sur la figure 5.5. On peut observer sur la figure 5.5a que l’énergie total est quasiment conservée jusqu’à ce que l’énergie acoustique commence à être absorbée quand l’onde franchit les *PML* à $t = 26 \mu\text{s}$. On observe malgré tout une décroissance lente de l’énergie. En effet, bien que les schémas numériques utilisés pour discrétiser l’équation des ondes et le PFD soient symplectiques, le schéma de décomposition d’opérateur, lui, ne l’est pas. De plus, comme c’est seulement un schéma d’ordre 1 en temps, il génère une erreur de Δt^2 à chaque pas de temps.

On remarque également que l’énergie mécanique est convertie en énergie acoustique à mesure que le grain oscille. Le fait que ce transfert d’énergie n’est pas continu au cours du temps mais oscillatoire est uniquement due à notre définition de l’énergie. En effet une partie de l’énergie du grain délimitée par la courbe en tirets noirs, plus précisément $\frac{\rho_0}{\rho_g} \approx 42\%$, passe perpétuellement d’énergie mécanique à énergie acoustique et inversement. Elle correspond à l’énergie acoustique présente dans le domaine Ω à l’emplacement des grains et à l’origine des pics visibles sur les figures 5.3 et 5.4 (p. 91).

Les figures 5.5b et 5.5c montrent respectivement l’énergie mécanique et l’énergie acoustique dans le système. On remarque sur la figure 5.5b que le grain perd toute son



(a) composante selon x



(b) composante selon y

FIGURE 5.4 - Solution numérique du champ de vitesse réfléchi à l'instant $t = 25 \mu\text{s}$ lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort dirigé selon l'axe y et de raideur $k_g = 10 \text{GN/m}$

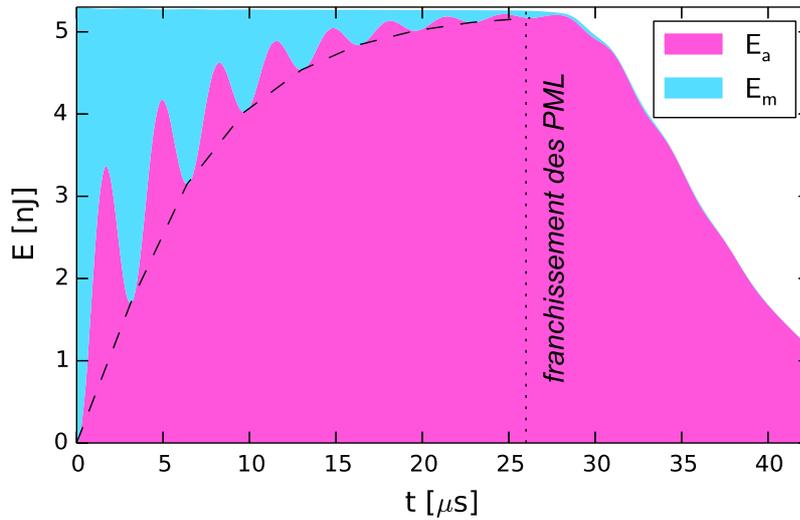
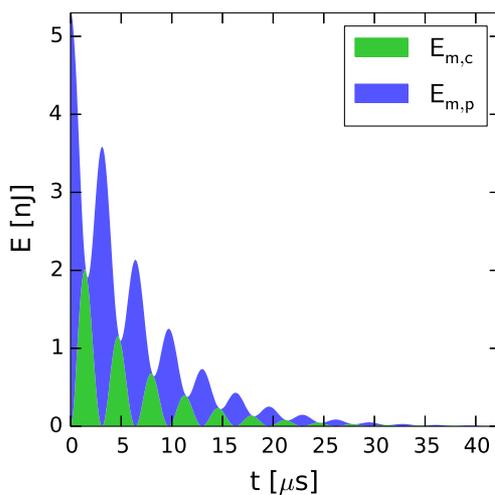
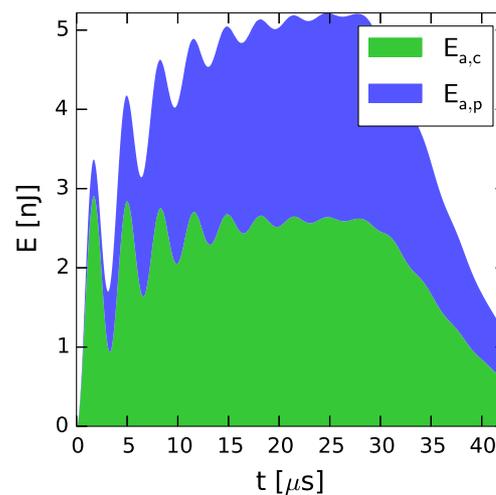
(a) énergie totale E (b) énergie mécanique E_m (c) énergie acoustique E_a

FIGURE 5.5 – Répartition de l'énergie dans le système au cours du temps lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort de raideur $k = 10 \text{ GN/m}$. L'énergie totale (a) est divisée en énergie mécanique (b) et énergie acoustique (c), elles-mêmes composées d'énergies cinétique et potentielle. La courbe en tirets noirs délimite l'énergie du grain (au dessus) et l'énergie du fluide (en dessous). La droite verticale au pointillé noir représente l'instant où le front d'onde franchit les *PML*.

énergie au profit de l'onde après une dizaine de périodes puisque les oscillations sont libres.

5.2 Cas de deux grains

5.2.1 Paramètres de l'expérience

Une seconde expérience est menée dans la configuration présentée en figure 5.1b (p. 88). Les grains sont espacés de 1 mm et tous deux reliés à leur propre ressort virtuel de même raideur k_g . Toutefois, seule le grain du bas $k = 1$ est initialement déplacé de sa position d'équilibre d'une distance $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$. Le domaine est toujours encadré par les *PML* mais ses dimensions sont réduites à $15 \text{ mm} \times 17 \text{ mm}$ et le rayon des grains à $R = 0,5 \text{ mm}$ afin de se focaliser sur la zone d'intérêt. Les masses volumiques et vitesses restent, quant à elles, inchangées.

En outre, la raideur des ressorts est changée pour $k_g = 105 \text{ GN/m}$ afin qu'elle correspondent à une longueur d'onde de $\lambda = 1 \text{ mm}$. Les paramètres de discrétisation qui en résultent sont les suivants : $h = 1/12 \text{ mm}$, $\Delta t = 20 \text{ ns}$, $N_\lambda = 12$, $N_{\partial_{\min}} = 14$, $\kappa = 1,2$, la condition CFL $C = 0,5$ et le temps final $t_f = 4,3 \mu\text{s}$.

5.2.2 Résultats dynamiques et acoustiques

La figure 5.6 représente les composantes selon \mathbf{y} de la position et de la vitesse de chacun des grains. Le second grain, initialement à l'équilibre, est mis en mouvement au bout d'environ $0,7 \mu\text{s}$, soit le temps pour l'onde diffusée par le grain du bas d'attendre le grain du haut. On remarque aussi que bien que ces deux grains ne soient pas en contact, les oscillations d'amplitude maximale $\Delta Y_1 = 1 \text{ nm}$ du premier grain sont capables de provoquer des oscillations d'amplitude $\Delta Y_2 = 0,2 \text{ nm}$ du second grain.

Les champs acoustiques correspondants sont dévoilés sur les figures 5.7 et 5.8 à l'instant $t = 4,3 \mu\text{s}$. À cet instant, les oscillations du grain du bas sont plus faibles que celles du grain du haut : cela se répercute sur le champ de pression dont l'amplitude est plus importante en haut qu'en bas. L'espace entre les grains est une zone particulière où une onde est constamment renvoyée d'un grain à l'autre.

La figure 5.8b permet d'observer ce que nous avons évoqué précédemment, à savoir la présence d'un champ de vitesse à l'intérieur du premier grain, directement relié à la vitesse du grain. Cela coïncide avec ce que l'on peut observer sur la figure 5.6b : à l'instant $t = 4,3 \mu\text{s}$, le grain 2 est à l'arrêt et le grain 1 en mouvement.

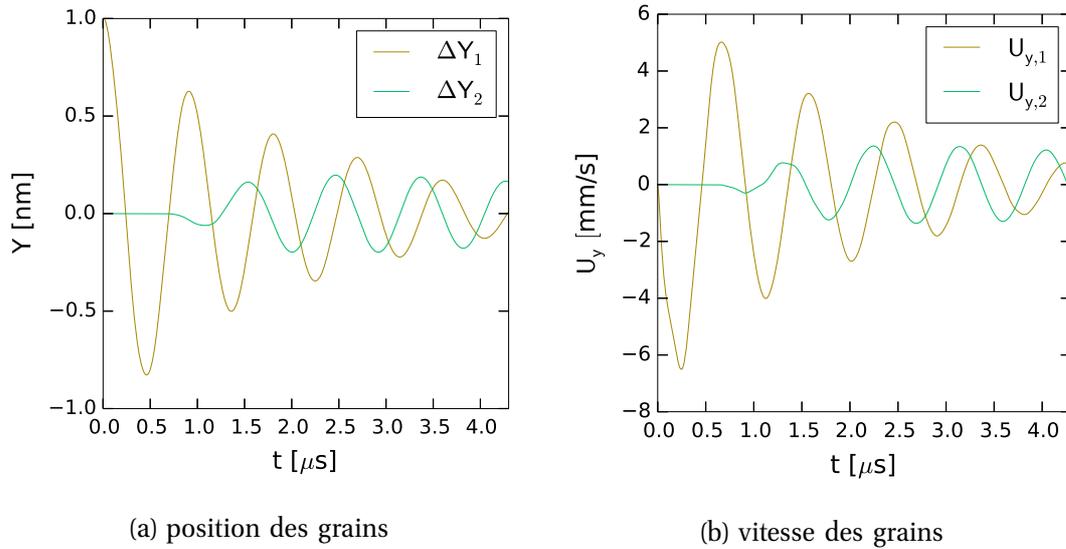


FIGURE 5.6 – Solutions numériques de la position et de la vitesse des grains $k = 1$ et $k = 2$ en fonction du temps lors de l'oscillation de ces grains reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ séparés d'une distance $1d$. Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché

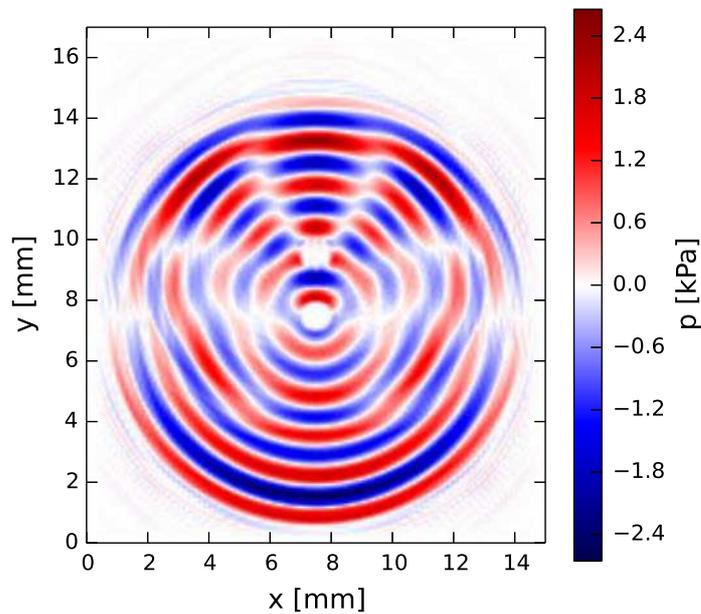


FIGURE 5.7 – Champ de pression à l'instant $t = 4,3 \mu\text{s}$ lors de l'oscillation de deux grains reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ séparés d'une distance $1d$. Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché

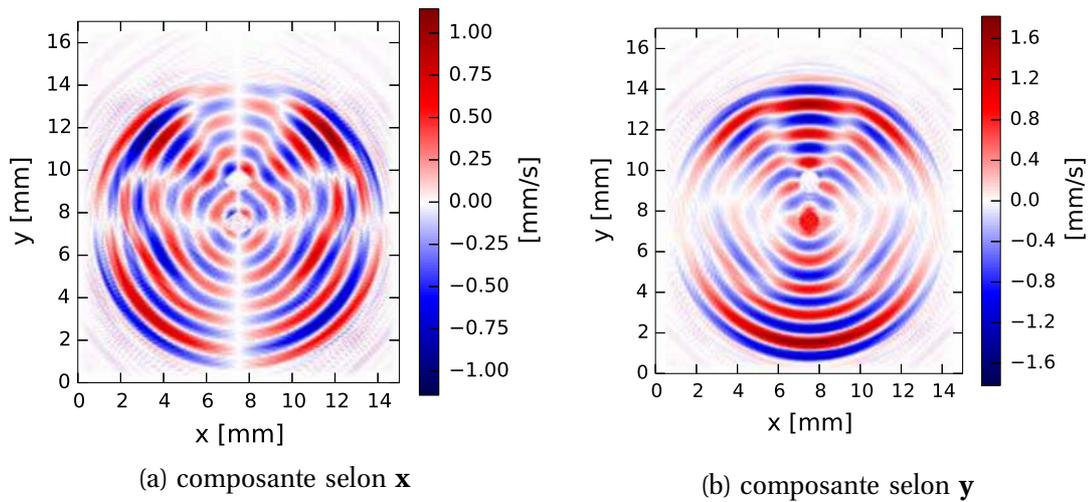


FIGURE 5.8 – Champ de vitesse à l’instant $t = 4,3 \mu\text{s}$ lors de l’oscillation de deux grains reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{GN/m}$ et séparés d’une distance $1d$. Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d’équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{nm}$ avant d’être lâché

5.2.3 Échanges d’énergie entre deux grains

Nous étudions à nouveau les échanges entre l’énergie acoustique E_a et l’énergie mécanique de chacun des grains $E_{m,1}$ et $E_{m,2}$ telles que ces notions sont définies p. 87. Les résultats de la figure 5.9 montrent que lors d’une première phase jusqu’à $0,7 \mu\text{s}$ on obtient le même comportement que pour le cas avec un seul grain. Lorsque l’onde atteint le second grain, l’énergie de celui-ci est stable. En effet, d’une part il reçoit en permanence de l’énergie diffusée par le premier grain, cette énergie même qui l’a mis en mouvement. D’autre part, puisque le deuxième grain est en train d’osciller, il diffuse aussi de l’énergie dans le fluide.

Par ailleurs une comparaison intéressante peut être faite lorsqu’on remplace l’eau par de l’air de masse volumique $\rho_0 = 1,2 \text{kg/m}^3$ et de vitesse des ondes $c_0 = 340 \text{m/s}$. On choisit une nouvelle raideur de ressort $k_g = 10 \text{GN/m}$ pour conserver la même longueur d’onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = 1$. Le pas de discrétisation spatiale est donc aussi inchangé $h = 1/12 \text{mm}$ mais la condition CFL mise à jour avec c_0 modifie le pas de discrétisation temporelle pour $\Delta t = 87 \text{ns}$.

Ces résultats présentés sur la figure 5.10 permettent de mettre en valeur l’utilité du code en milieu immergé par rapport au milieu sec. Dans ce cas précis, la plupart de l’énergie reste dans le premier grain qui oscille avec un amortissement négligeable. On peut néanmoins observer dans l’encart du bas que le grain du bas a diffusé environ 0,5% de son énergie à l’air en fin de simulation par rapport au 97% transférée à l’eau. Finalement, seule 0,000 1% de l’énergie du premier grain sera transférée au deuxième

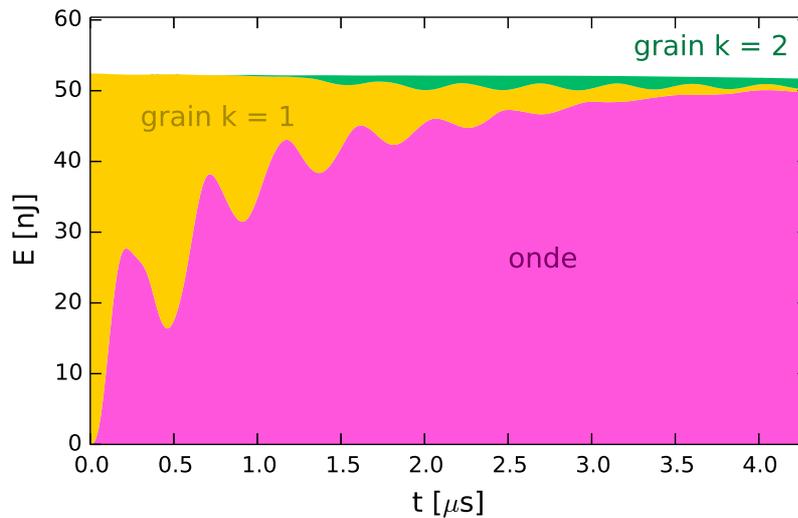


FIGURE 5.9 – Répartition de l'énergie dans le système au cours du temps lors de l'oscillation de deux grain reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ et immergés dans de l'eau ($\rho_0 = 1\,000 \text{ kg/m}^3$, $c_0 = 1\,500 \text{ m/s}$). Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché. L'énergie totale est décomposé en énergie acoustique et en énergies mécaniques pour chacun des grains $k = 1$ et $k = 2$

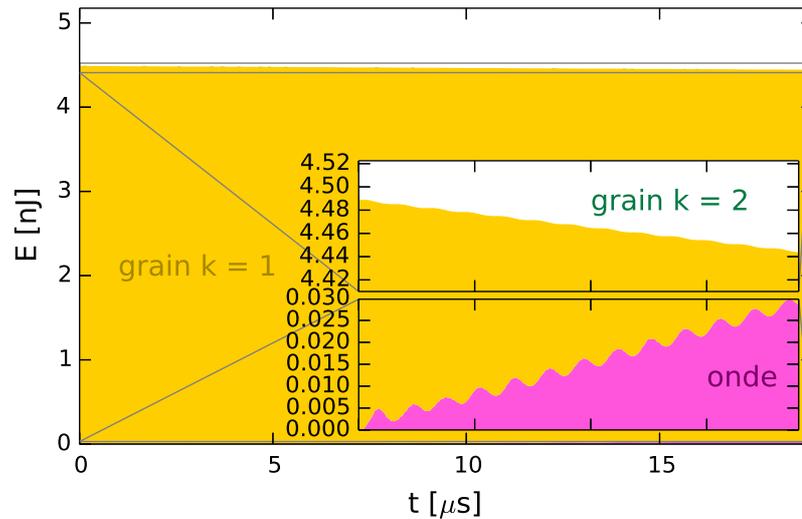


FIGURE 5.10 – Répartition de l'énergie dans le système au cours du temps lors de l'oscillation de deux grain reliés à leur propre ressort de raideur $k = 10 \text{ GN/m}$ dans de l'air ($\rho_0 = 1,2 \text{ kg/m}^3$, $c_0 = 340 \text{ m/s}$). Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché. L'énergie totale est décomposé en énergie acoustique et en énergies mécaniques pour chacun des grains $k = 1$ et $k = 2$. L'énergie mécanique du grain $k = 2$ est ici quasiment nulle de l'ordre de 0,000 1% de l'énergie totale à l'instant $t = 18 \mu\text{s}$.

grain. C'est un ordre de grandeur puisqu'on remarque dans l'encart du haut que cette énergie est bien inférieure à la perte d'énergie totale du schéma numérique.

5.3 Discussion

Les résultats présentent un aspect unique du modèle : la capacité pour chaque grain soumis à une force extérieure de rayonner dans l'espace. La méthode des domaines fictifs a déjà été développée dans ce sens pour modéliser les déformations et le son produit par la membrane d'une timbale soumise à une force (Rhaouti et coll., 1999). Dans leur cas, il n'y a pas la contrainte de rigidité et la condition de saut relie la normale au champ de vitesse $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ au déplacement d'une membrane souple. Cependant il est difficile de réaliser une comparaison directe des résultats numériques tant les deux applications sont différentes. En effet, notre modèle devant servir à modéliser un grand nombre de grains rigides mobiles dans un milieu immergé, il se place plus dans la lignée de celui de Glowinski et coll. (1999) qui simulent la sédimentation de grains mais avec les équations de Navier-Stokes.

Dans cet exemple, la force extérieure appliquée au grain était une simple force rappel. Mais appliqué au cas d'un milieu granulaire compact, un grain sera soumis aux forces de contact de ses voisins que l'on peut définir librement par des forces linéaires comme le ressort ou non-linéaires comme le modèle de Hertz (Agnolin et Roux, 2007). Dans l'air, nous avons pu constater qu'un grain diffusait une quantité d'énergie négligeable, permettant ainsi d'utiliser seulement un algorithme de dynamique moléculaire. Dans l'eau, il n'en est rien. Les grains diffusent une partie de leur énergie dans les pores du milieu granulaire et une autre partie est transmise directement par contact. De plus, la transmission de l'énergie diffusée n'est pas directe mais subit un retard du au temps pour l'onde de traverser le pore.

Finalement, cette expérience a permis de vérifier le comportement énergétique du modèle et la stabilité du schéma numérique. Toutefois, elle n'a pas permis de confronter les résultats dynamiques et acoustiques du modèle à une solution analytique : c'est l'objet du prochain chapitre.

Chapitre 6

Grain mobile soumis à une onde plane

Pour la dernière expérience numérique de ce chapitre, un grain libre et mobile est soumis à une onde plane. On rapproche ainsi les expériences des chapitres 4 et 5 en confrontant simultanément les résultats numériques acoustique et dynamique à une nouvelle solution analytique. Après avoir développé cette solution analytique, les résultats des champs de pression et de vitesse obtenus pour un grain mobile seront comparés à ceux obtenus pour un grain fixe (chapitre 4). Ensuite on étudiera l'évolution de l'erreur sur les champs acoustiques et la dynamique du grain en fonction de la discrétisation des maillages. Des résultats sur la vitesse du grain en fonction de la longueur d'onde de l'onde incidente seront présentés et confrontés à la solution analytique. Enfin, nous terminerons sur l'optimisation du rapport de maillages κ .

6.1 Solution analytique de la vitesse d'un grain mobile soumis à un son

Le problème de la vitesse d'un grain mobile soumis à une onde plane est plus rare que celui traité dans la section 4.2 (p. 67). Il a d'abord été brièvement traité par Lamb (1945, p. 514) en 3D dans le cas où la longueur d'onde incidente est très supérieure au diamètre de la sphère. Plus tard, Temkin et Leung (1976) ont réalisé une étude approfondie sur la vitesse d'une sphère rigide 3D soumise à une onde sonore dans un fluide infini et visqueux ne conduisant pas la chaleur. Ils obtiennent l'amplitude et le déphasage de la vitesse de la sphère par rapport au champ de vitesse incident à n'importe quelle longueur d'onde.

En suivant le raisonnement de Temkin et Leung (1976), nous développons ici une solution analogue en deux dimensions pour un fluide parfait : non-visqueux, incompressible et ne conduisant pas la chaleur. L'équation du champ de pression incident

complexe (4.6) (p. 67) et celle du champ de pression réfléchi complexe (4.8) sont toujours valables. Cependant, par ne pas surcharger les équations qui suivent, on ne mentionnera pas le terme temporel en $e^{-i\omega_s t}$. Par contre, une nouvelle expression de la constante B_n doit être trouvée car la condition au bord du disque est maintenant celle de l'équation (2.23) (p. 39). En utilisant l'équation (4.11), on peut réécrire l'équation (2.23) comme :

$$\frac{-i}{\omega_s \rho_0} \nabla \tilde{p} \cdot \mathbf{n}_1 = \tilde{\mathbf{U}}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \quad (6.1)$$

De plus, en prenant en compte la symétrie du problème, on sait que la vitesse du grain n'a qu'une seule composante parallèle à la direction de propagation :

$$\frac{-i}{\omega_s \rho_0} \frac{\partial \tilde{p}}{\partial r} = \tilde{U}_1 \cos(\theta - \theta_i) \quad (6.2)$$

Enfin, à partir des équations (4.10), (4.6) et (4.8), on peut calculer la dérivée partielle :

$$\frac{-i}{\omega_s \rho_0} \sum_{n=0}^{\infty} [\epsilon_n i^n S_{\max} k_s J'_n(k_s R) + B_n k_s H_n^{(1)'}(k_s R)] \cos(n(\theta - \theta_i)) = \tilde{U}_1 \cos(\theta - \theta_i) \quad (6.3)$$

avec $\epsilon_0 = 1$ quand $n = 0$ et $\epsilon_n = 2$ quand $n > 0$.

Par ailleurs, le grain est soumis au PFD (2.19) qui peut également s'écrire sous forme complexe :

$$-i\omega_s m_1 \tilde{U}_1 = \tilde{F}_1 \quad (6.4)$$

La force complexe s'écrit aussi avec l'équation (2.20) :

$$\tilde{F}_1 = -R \int_0^{2\pi} \tilde{p} \cos(\theta - \theta_i) d\theta \quad (6.5)$$

D'après l'équation (4.10), on peut injecter les équations (4.6) et (4.8) dans l'équation (6.5) :

$$\tilde{F}_1 = -R \int_0^{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} [\epsilon_n i^n S_{\max} J_n(k_s R) + B_n H_n^{(1)}(k_s R)] \cos(n(\theta - \theta_i)) \cos(\theta - \theta_i) d\theta \quad (6.6)$$

Or :

$$\int_0^{2\pi} \cos(n\theta) \cos(\theta) d\theta = \begin{cases} 0 & \text{quand } n = 0 \text{ et } n \geq 2 \\ \pi & \text{quand } n = 1 \end{cases} \quad (6.7)$$

Donc le seul mode pertinent est $n = 1$:

$$\tilde{F}_1 = -R\pi \left(2i S_{\max} J_1(k_s R) + B_1 H_1^{(1)}(k_s R) \right) \quad (6.8)$$

Enfin, on injecte l'équation (6.8) dans l'équation (6.4) pour obtenir une expression de la vitesse :

$$\tilde{U}_1 = \frac{-i}{\omega_s m_1} R \pi \left(2i S_{\max} J_1(k_s R) + B_1 H_1^{(1)}(k_s R) \right) \quad (6.9)$$

En remplaçant la masse du grain m_1 par $\rho_g \pi R^2$, on aboutit à :

$$\tilde{U}_1 = \frac{-i}{\omega_s \rho_g R} \left(2i S_{\max} J_1(k_s R) + B_1 H_1^{(1)}(k_s R) \right) \quad (6.10)$$

La constante B_n est alors fixée en identifiant terme à terme les équations (6.10) et (6.3) :

$$B_n = \begin{cases} -S_{\max} \frac{J'_0(k_s R)}{H_0^{(1)'}(k_s R)} & \text{si } n = 0 \\ -2 S_{\max} i \frac{k_s R J'_1(k_s R) - \frac{\rho_0}{\rho_g} J_1(k_s R)}{k_s R H_1^{(1)'}(k_s R) - \frac{\rho_0}{\rho_g} H_1^{(1)}(k_s R)} & \text{si } n = 1 \\ -2 S_{\max} i^n \frac{J'_n(k_s R)}{H_n^{(1)'}(k_s R)} & \text{si } n \geq 2 \end{cases} \quad (6.11)$$

Finalement, seule la constante B_1 est modifiée dans l'équation (6.11) par rapport à l'expression (4.9) donnée pour un grain fixe. Néanmoins, injecter l'équation (6.11) dans l'équation (6.10) nous donne accès à l'expression de la vitesse du grain complexe :

$$\tilde{U}_1 = -\frac{2 S_{\max}}{c_0} \frac{H_1^{(1)}(k_s R) J'_1(k_s R) - J_1(k_s R) H_1^{(1)'}(k_s R)}{\rho_g k_s R H_1^{(1)'}(k_s R) - \rho_0 H_1^{(1)}(k_s R)} \quad (6.12)$$

Il peut être plus intéressant d'exprimer l'équation (6.12) sous forme du rapport entre la vitesse du grain et l'amplitude du champ de vitesse incident. S_{\max} désignant l'amplitude du champ de pression, on appelle donc $u_0 = \frac{S_{\max}}{\rho_0 c_0}$ l'amplitude correspondante pour le champ de vitesse :

$$\frac{\tilde{U}_1}{u_0} = -2 \rho_0 \frac{H_1^{(1)}(k_s R) J'_1(k_s R) - J_1(k_s R) H_1^{(1)'}(k_s R)}{\rho_g k_s R H_1^{(1)'}(k_s R) - \rho_0 H_1^{(1)}(k_s R)} \quad (6.13)$$

Enfin, en utilisant les relations de récurrence des fonctions de Bessel et les formules de Wronskian (Abramowitz et Stegun, 1964, p. 360-361), on peut simplifier l'équation (6.13) en :

$$\frac{\tilde{U}_1}{u_0} = \frac{-4i \frac{\rho_0}{\rho_g}}{\pi k_s R \left[k_s R H_0^{(1)}(k_s R) - \left(\frac{\rho_0}{\rho_g} + 1 \right) H_1^{(1)}(k_s R) \right]} \quad (6.14)$$

Pour la suite du développement, on définit le module $U_1 = |\tilde{U}_1|$ et le déphasage $\eta = \arg(\tilde{U}_1)$ de la vitesse du grain complexe.

La figure 6.1 est la représentation graphique de l'équation (6.14) en fonction de la longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d}$ pour plusieurs masses volumiques. Elle nous renseigne sur la dynamique du grain soumis à une onde sonore monochromatique. D'une part, lorsque la longueur d'onde est très supérieure au diamètre du grain (ou $k_s R \ll 1$), l'amplitude de la vitesse du grain tend vers une constante que l'on peut calculer avec l'équation (6.14) (et les éq. 9.1.7 et 9.1.8 dans Abramowitz et Stegun, 1964, p. 360) :

$$\frac{U_1}{u_0} \sim \frac{2 \frac{\rho_0}{\rho_g}}{(k_s R)^2 \ln(k_s R) + \frac{\rho_0}{\rho_g} + 1} \quad (6.15)$$

d'où la limite :

$$\lim_{k_s R \rightarrow 0} \frac{U_1}{u_0} = \frac{2 \frac{\rho_0}{\rho_g}}{\frac{\rho_0}{\rho_g} + 1} \quad (6.16)$$

Ce résultat pour une sphère en deux dimensions est d'ailleurs à comparer à celui de Lamb (1945, p. 514) qui avait trouvé $\frac{3\rho_0/\rho_g}{2\rho_0/\rho_g+1}$ pour la sphère en trois dimensions. D'autre part, quand la longueur d'onde est très inférieure au diamètre du grain (ou $k_s R \gg 1$), l'amplitude de la vitesse du grain tend vers zéro. En d'autre terme à haute fréquence, l'onde incidente n'est plus capable de déplacer le grain. L'amplitude de la vitesse du grain est maximale quand la masse volumique du grain et celle du fluide sont les mêmes et décroît à mesure que la masse volumique du grain augmente. Ce comportement est logique : plus le grain est lourd, moins l'onde est capable de le déplacer.

On représente également sur la figure 6.2 le déphasage η de la vitesse complexe du grain par rapport à l'onde incidente. On constate que les oscillations du grain et celles de l'onde incidente sont en phase quand la longueur d'onde est très supérieure au diamètre du grain. En revanche, le déphasage augmente quand la longueur d'onde adimensionnée diminue. De plus, le déphasage diminue légèrement quand la masse volumique du grain augmente, l'effet étant moins prononcé que sur la figure 6.1.

Par analogie à la figure 4.2 (p. 70), la figure 6.3 présente la solution analytique des rapports de sections efficaces de diffusion tels qu'ils ont été décrits dans les équations (4.13) et (4.14) en prenant en compte la nouvelle valeur de B_n . Mais ces résultats sont indissociables des résultats de la figure 6.1 sur l'amplitude de la vitesse du grain. En effet, on remarque que les rapports de sections efficaces de diffusion diffèrent de ceux de la figure 6.3 uniquement quand l'amplitude de la vitesse du grain par rapport à celle de l'onde incidente n'est pas négligeable. Concrètement, l'onde rayonnée par le grain quand il oscille (par un processus analogue à celui observé dans la section 5) se superpose à l'onde réfléchiée par la surface du grain (section 4). Donc quand le grain n'oscille pas, on retrouve les mêmes résultats que dans la section 4.

Par ailleurs, on observe toujours deux comportements : l'un quand la longueur d'onde adimensionnée est supérieure à $\frac{\lambda}{d} \approx 2,5$ et l'autre quand elle est inférieure à

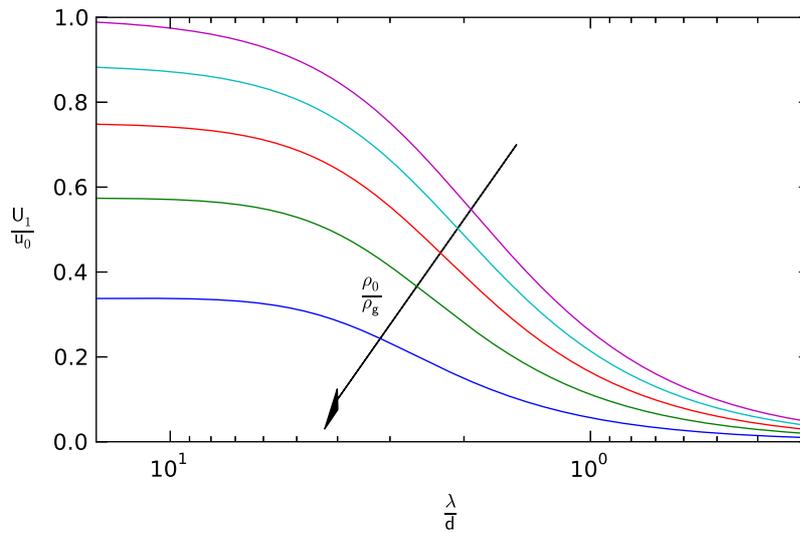


FIGURE 6.1 – Solution analytique du rapport de vitesses $\frac{U_1}{u_0}$ en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ pour les rapports de masse volumique $\frac{\rho_0}{\rho_g} = \{1; 0,8; 0,6; 0,4; 0,2\}$. U_1 est le module de la vitesse complexe du grain et u_0 l'amplitude du champ de vitesse de l'onde incidente. La courbe verte correspond à un résultat proche du rapport de masses volumiques entre l'eau et le verre.

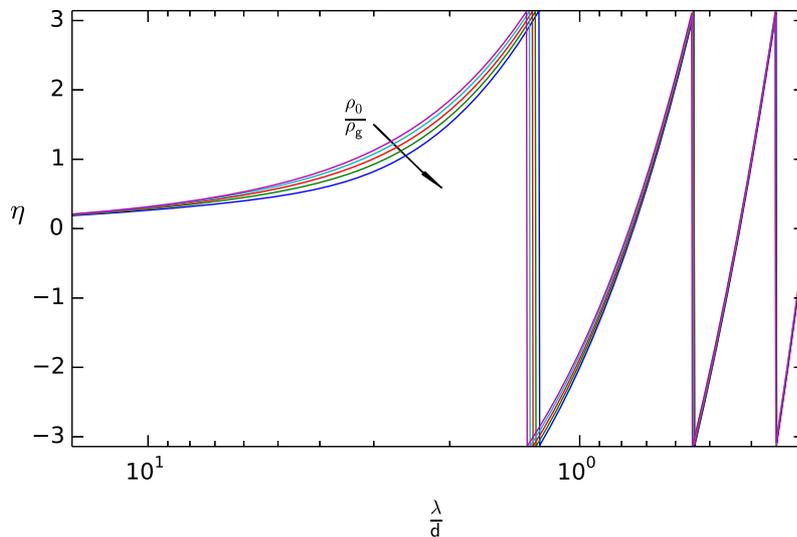


FIGURE 6.2 – Solution analytique du déphasage η entre la vitesse complexe du grain et le champ de vitesse incident en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ pour les rapports de masse volumique $\frac{\rho_0}{\rho_g} = \{1; 0,8; 0,6; 0,4; 0,2\}$.

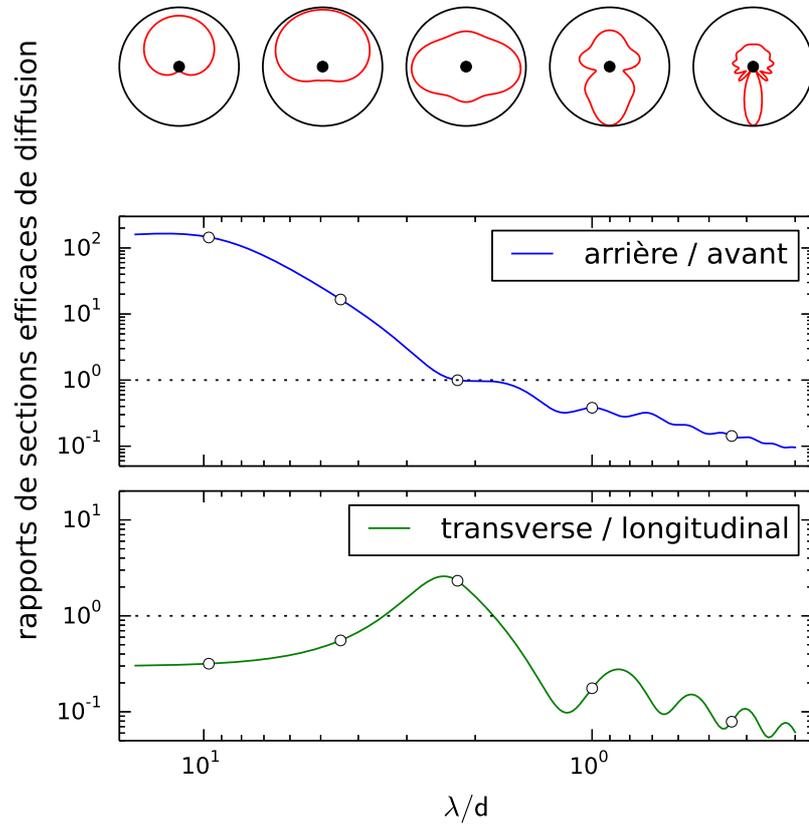


FIGURE 6.3 – Solution analytique des rapports de sections efficaces de diffusion lors de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide mobile. La courbe bleue du milieu représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ rétrodiffusé et celui diffusé vers l'avant du grain en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente. La courbe verte du bas représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ transverse et le champ longitudinal. En haut figurent cinq diagrammes de directivité du module de la fonction de forme pris pour cinq longueurs d'onde adimensionnées spécifiques (ronds blancs sur les courbes).

$\frac{\lambda}{d} \approx 2,5$. Lorsque la longueur d'onde est très supérieure au diamètre du grain, il n'y a quasiment pas de champ diffusé vers l'avant : le petit lobe à l'avant du grain que l'on observait sur la figure 4.2 est absent sur la figure 6.3. Enfin autour de la zone de transition $\frac{\lambda}{d} \approx 2,5$, les diffusions vers l'arrière et l'avant du grain sont les mêmes tandis que la diffusion transversale est 2 à 3 fois plus importante que la diffusion transverse.

6.2 Résultats et comparaison avec le grain fixe

Pour la première expérience numérique, nous reprenons tous les paramètres de la section (4.3) (p. 69) afin de pouvoir comparer directement les représentations graphiques 3D des champs de pression et de vitesse obtenus avec un grain fixe. Les résultats du champ de pression réfléchi 6.4 et celui du champ de vitesse réfléchi sont représentés sur la figure 6.5. On constate d'abord que l'amplitude moyenne de l'onde réfléchie est inférieure à celle obtenue dans le cas d'un grain fixe. Inversement, l'amplitude de l'énergie à l'intérieur du grain est supérieure à celle observée quand le grain est fixe : c'est particulièrement flagrant en comparant la composante u_y (fig. 6.5b et fig. 4.5b p. 74). Ce résultat concorde avec nos conclusions sur les aspects énergétiques : le grain absorbe une partie de l'énergie de l'onde incidente pour osciller et réfléchit le reste. De plus, on note que la diffusion vers l'avant du grain est plus faible quand il est mobile que quand il est fixe tout comme le prédisait la solution analytique à cette longueur d'onde.

La position et la vitesse du grain au passage de l'onde incidente sont représentées sur la figure 6.6. L'onde incidente atteint le grain à l'instant $t = 23 \mu\text{s}$. Sur la figure 6.6a, on constate un décalage initial du grain de l'ordre de $0,25 \mu\text{m}$ du au temps mis par l'onde pour entourer totalement le grain. Durant ce laps de temps, le grain est poussé vers le bas sans retour possible parce que le champ de pression est positif autour de la partie haute du grain mais nulle en dessous. Par la suite, quand le grain est intégralement englobé par l'onde, des pressions positives et négatives alternent sur sa frontière. On remarque au passage que l'amplitude des oscillations de la vitesse du grain figure 6.6b représente environ 45% de celle de l'onde incidente d'amplitude $u_0 \approx 670 \mu\text{m/s}$ (vu que $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$) comme le prédit la solution analytique figure 6.1. Enfin, les composantes selon x de \mathbf{X}_1 et \mathbf{U}_1 sont nulles et donc en accord avec la symétrie du système.

6.3 Erreur relative en fonction de la discrétisation

Après ces observations, on effectue une seconde expérience numérique afin de calculer l'erreur totale relative commise sur l'intégralité des champs totaux p , u_x et u_y en fonction de la discrétisation. Certes, cette approche est différente de celle basée sur

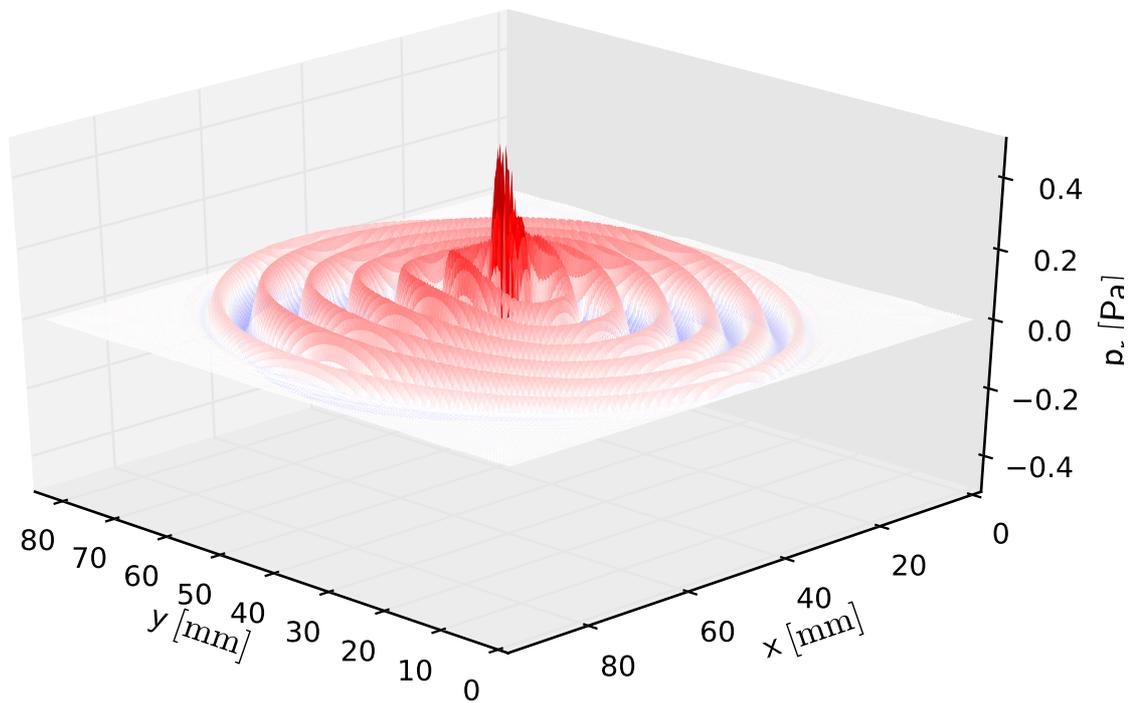
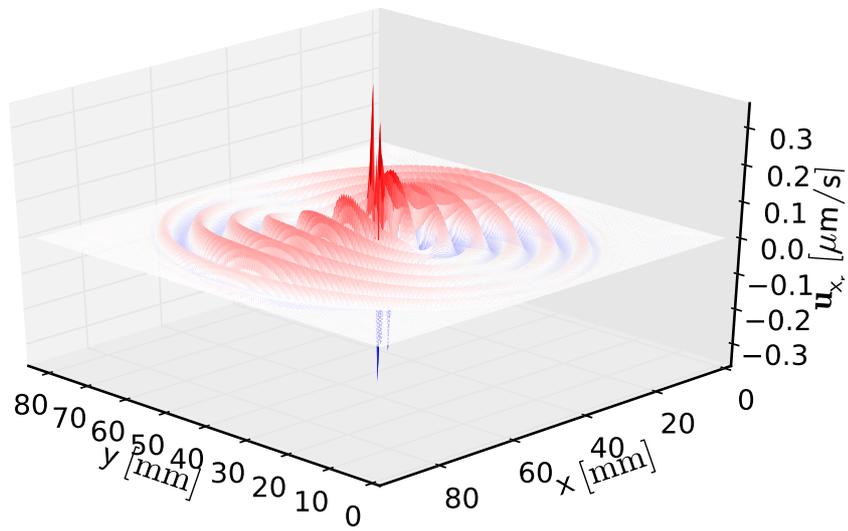
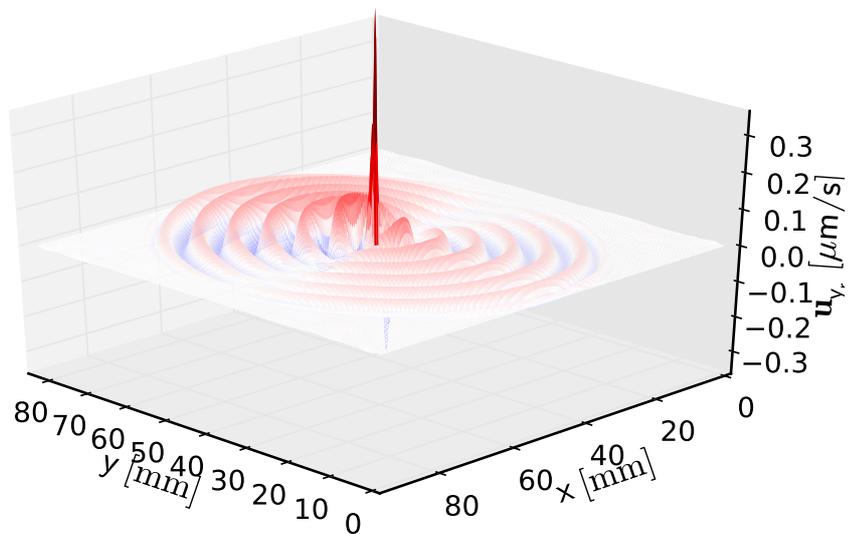


FIGURE 6.4 - Solution numérique du champ de pression réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain mobile. L'onde incidente est orientée du haut vers le bas (selon l'axe $-\mathbf{y}$) et le signal qui la génère est défini par la fonction $s_c(t)$ d'amplitude maximale $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$ et de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = \pi$.

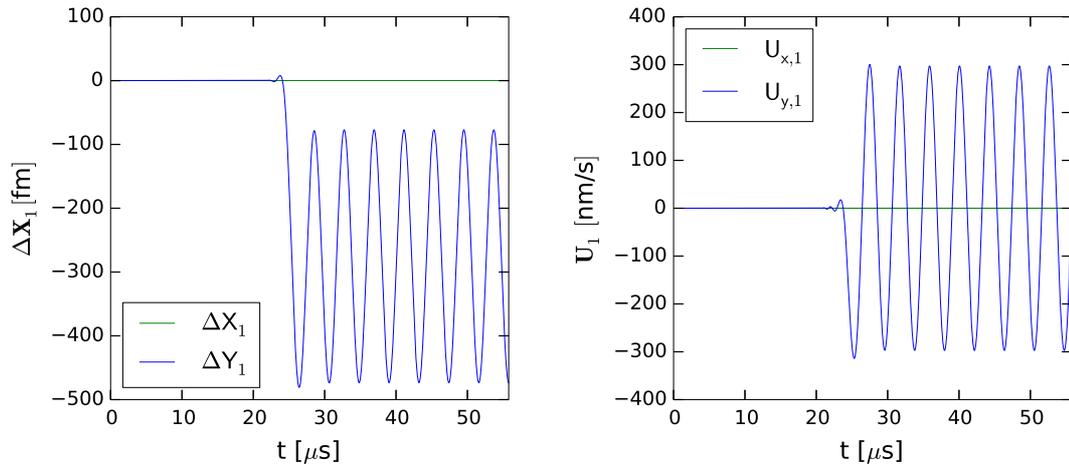


(a) composante selon x



(b) composante selon y

FIGURE 6.5 – Solution numérique du champ de vitesse réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain mobile.



(a) composantes ΔX_1 et ΔY_1 de la position (b) composantes $U_{x,1}$ et $U_{y,1}$ de la vitesse

FIGURE 6.6 – Solutions numériques de la position par rapport à l’instant initiale et de la vitesse du grain en fonction du temps quand il est soumis à une onde plane de longueur d’onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = \pi$.

l’étude des diagrammes de directivité abordée dans la section 4. Mais l’objectif n’est pas le même : les diagrammes de rayonnement permettaient de recueillir des informations précises sur l’origine de l’erreur afin de résoudre des problèmes liés aux éléments finis. Maintenant, il s’agit de quantifier l’erreur commise sur les champs acoustiques sur la dynamique du grain et d’étudier son évolution quand la discrétisation spatiale est raffinée.

Un grain de rayon $R = 0,5\text{ mm}$ est positionné aux coordonnées $(5; 4,5)\text{ mm}$ d’un domaine carré de côté $L_x = L_y = 10\text{ mm}$ dans la configuration d’un milieu semi-infini semi-périodique (fig. A.1b). La largeur des *PML* en haut et en bas du domaine est $10h$. La source localisée à $y_s = 8,3\text{ mm}$ génère une onde plane vers le bas dont le signal est défini par la fonction $s_c(t)$ (4.1) d’amplitude maximale $S_{\max} = 1,5\text{ Pa}$ (soit $1\text{ }\mu\text{m/s}$) et de longueur d’onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = 1$ (soit une fréquence de $f_s = 1,5\text{ MHz}$). La vitesse des ondes dans le fluide est $c_0 = 1\,500\text{ m/s}$ et sa masse volumique $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$. La masse volumique du matériau du grain est celle du verre $\rho_g = 2\,500\text{ kg/m}^3$. Enfin, les paramètres de discrétisation sont : $h = 1/12\text{ mm}$, $\Delta t = 22,6\text{ ns}$, $N_\lambda = 12$, $N_{\partial_{\min}} = 14$, $\kappa = 1,2$, la condition CFL $C = 0,58$ et le temps final $t_f = 6,7\text{ }\mu\text{s}$.

Les solutions numérique et analytique du champ de pression total et de la norme du champ de vitesse sont juxtaposées sur la figure 6.7. On peut remarquer qu’elles sont visuellement très semblables. Les seules différences sont d’ordre numérique avec la présence des *PML* sur une épaisseur de $L_{PML} = 0,8\text{ mm}$ en bas et en haut qui absorbent les ondes ainsi que l’artefact numérique du à la présence de la source à

TABLE 6.1 – Erreurs relatives sur les champs de pression et de vitesse calculés pour plusieurs discrétisations

$N_x \times N_y$	e_p	e_{u_x}	e_{u_y}
120^2	$1,44 \cdot 10^{-1}$	$2,38 \cdot 10^{-1}$	$1,47 \cdot 10^{-1}$
240^2	$9,19 \cdot 10^{-2}$	$1,28 \cdot 10^{-1}$	$9,01 \cdot 10^{-2}$
480^2	$8,00 \cdot 10^{-2}$	$1,09 \cdot 10^{-1}$	$7,93 \cdot 10^{-2}$

$y_s = 8,3$ mm.

La comparaison des solutions numérique et analytique s'effectue en dehors du grain et sur le carré de taille $[1,5; 8,5] \times [1; 8]$ mm afin d'éviter l'artefact lié à la source et les effets des conditions périodiques latérales. On définit l'erreur relative e_Φ portant sur un champ quelconque Φ et sur une période T_s comme :

$$e_\Phi = \sup_{t_{\text{ref}} \leq t \leq t_{\text{ref}} + T_s} \left(\frac{\|\Phi_{\text{num}} - \Phi_{\text{an}}\|_{L^2}}{\|\Phi_{\text{an}}\|_{L^2}} \right) \quad (6.17)$$

avec Ψ_{num} la solution numérique, Ψ_{an} une solution analytique et $t_{\text{ref}} = \frac{L_y}{c_0}$ le temps pour l'onde de traverser le milieu de haut en bas.

Les erreurs relatives pour le champ de pression p et les deux composantes du champ de vitesse u_x et u_y pour différents pas de discrétisation du maillage sont reportées dans le tableau 6.1. On note que l'évolution de l'erreur n'est pas optimale : elle ne s'améliore que d'un facteur 1,5 entre $h = \frac{1}{12}$ et $h = \frac{1}{24}$, puis d'un facteur 1,1 entre $h = \frac{1}{24}$ et $h = \frac{1}{48}$. Cela reflète encore la faiblesse de l'élément fini P_1 - P_0 auquel nous sommes limités.

Par ailleurs, on représente sur la figure 6.8 la vitesse du grain pour les trois discrétisations utilisées. On remarque sur la composante \mathbf{y} (parallèle à la direction de propagation, fig. 6.8a) que les résultats dynamiques sont très semblables quel que soit le pas de discrétisation. Néanmoins on peut observer à une échelle plus réduite les oscillations de la composante \mathbf{x} du champ de vitesse (fig. 6.8b). Comme il n'est pas censé se produire de déplacement dans cette direction, cette figure constitue une bonne estimation de l'erreur commise sur le mouvement du grain. On remarque que l'erreur maximale est améliorée d'un facteur 4 quand on double le nombre de pas de discrétisation du maillage régulier. Par conséquent l'évolution de l'erreur sur la dynamique est meilleure que pour l'acoustique. L'échelle du grain est plus grande que celle d'un élément fini, il est donc beaucoup moins sensible aux micro-oscillations des champs acoustiques.

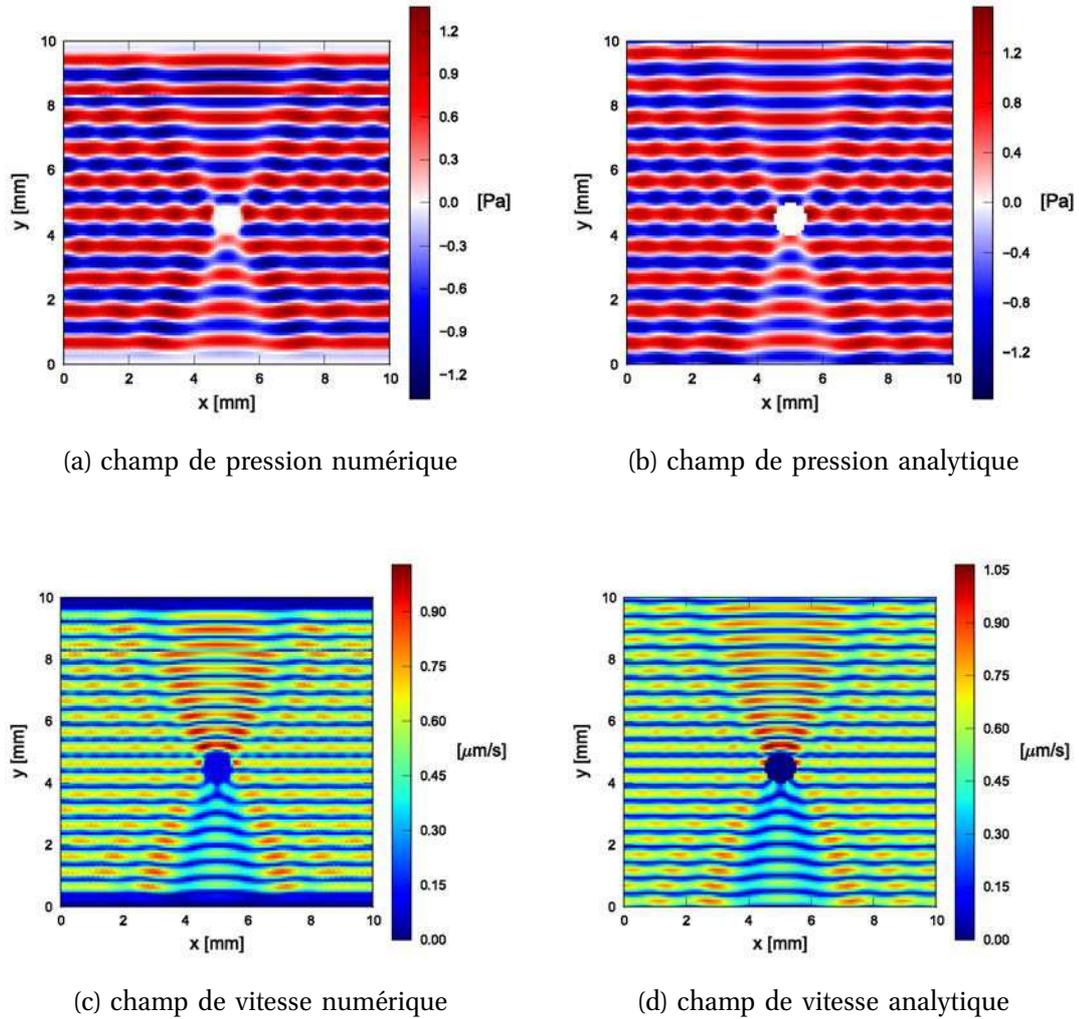


FIGURE 6.7 – Solutions numérique et analytique des champs de pression et de vitesse réfléchis à l'instant $t = 6,7 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide mobile. L'onde incidente est orientée du haut vers le bas (selon l'axe $-y$) et le signal qui la génère est défini par la fonction $s_c(t)$ d'amplitude maximale $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$ et de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = 1$

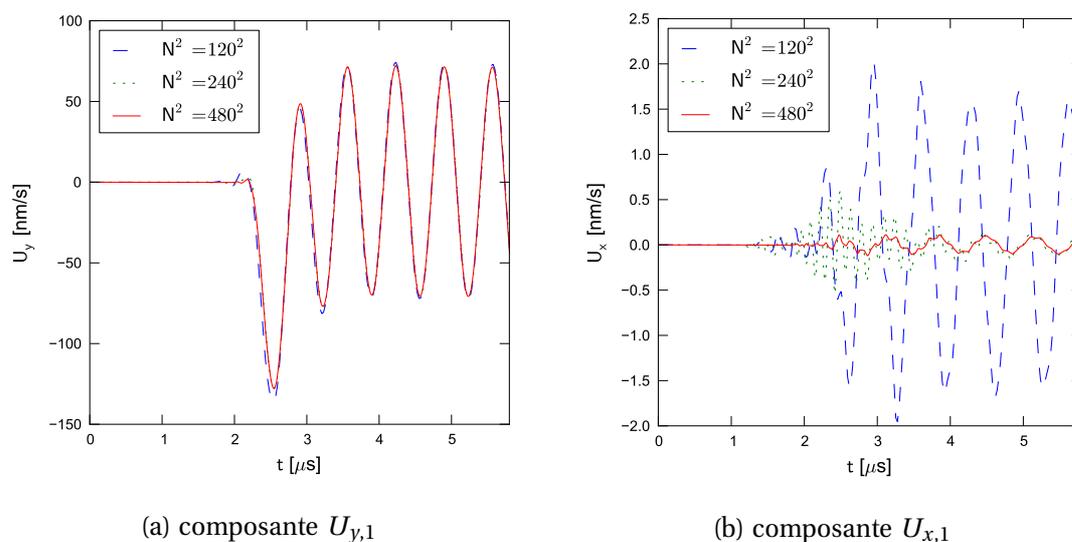


FIGURE 6.8 – Vitesse du grain en fonction du temps pour plusieurs pas de discrétisation temporel lors de la diffraction d'une onde plane, de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = 1$, par un grain rigide mobile

6.4 Vitesse d'un grain en fonction de la longueur d'onde de l'onde incidente

Comme nous l'avons fait pour le grain fixe dans la section 4, nous confrontons cette fois-ci la vitesse du grain à la solution analytique pour une série de longueurs d'onde adimensionnées. En effet, la solution analytique de la vitesse complexe du grain (6.14) (p. 103) prévoit que l'amplitude des oscillations du grain diminue avec la longueur d'onde adimensionnée (fig. 6.1) et que le déphasage par rapport à l'onde incidente augmente (fig. 6.2).

6.4.1 Paramètres de l'expérience

Des ondes planes harmoniques de différentes fréquences sont successivement envoyées sur un grain localisé en bas du domaine représenté sur la figure 6.9. On ne s'intéresse pas aux champs diffusés par le grain durant cette expérience. En revanche, afin d'enregistrer une dizaine d'oscillations du grain pour chaque longueur d'onde adimensionnée en milieu semi-périodique, le domaine doit être suffisamment grand pour que l'onde réfléchi par le grain ne l'atteigne pas une seconde fois. La simulation est d'ailleurs arrêtée avant que cela ne se produise. Donc les dimensions du domaine augmentent avec la longueur d'onde adimensionnée mais la distance entre le grain et les bords périodiques est toujours identique à celle entre la source et le grain. De même, les

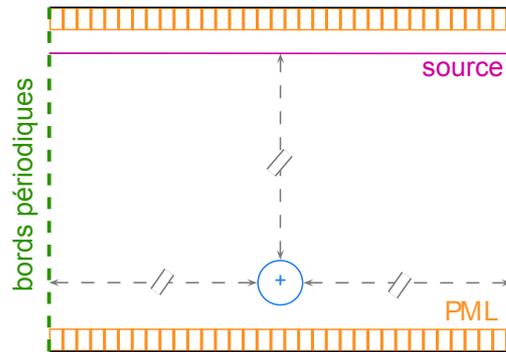


FIGURE 6.9 – Schéma de la configuration d'enregistrement des oscillations d'un grain soumis à une onde plane. La distance entre le grain et les bords périodiques et la même que celle entre le grain et la source.

temps d'arrivée de l'onde sur le grain ne sont pas comparables entre chaque simulation.

Pour cette expérience, le rayon du grain est $R = 1 \text{ mm}$ et sa masse volumique est de $\rho_g = 2\,400 \text{ kg/m}^3$ ¹. Les paramètres de l'eau sont inchangées : $\rho_0 = 1\,000 \text{ kg/m}^3$ et $c_0 = 1\,500 \text{ m/s}$. L'amplitude de la source est laissée à $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$. Les pas de discrétisation du modèle h , H et Δt sont calculés automatiquement avec les équations (3.1) et (3.2) p. 48 et (3.15) p. 55 selon la longueur d'onde adimensionnée. Les autres paramètres numériques sont fixés à : $N_\lambda = 12$, $N_{\partial_{\text{min}}} = 14$, $\kappa = 1,27$ et la condition CFL $C = 0,5$.

6.4.2 Résultats et méthodologie de post-traitement

Pour comparer la solution numérique à la solution analytique (6.14), deux enregistrements doivent être réalisés pour chaque longueur d'onde. D'abord la vitesse du grain \mathbf{U} est enregistrée quand il est soumis à l'onde plane \mathbf{U} . Ensuite, on supprime le grain et seule la valeur du champ de vitesse \mathbf{u}_0 est enregistrée à l'emplacement du centre du grain (l'indice zéro appliqué aux champs signifie « en l'absence du grain »).

Les résultats pour deux longueurs d'onde caractéristiques $\frac{\lambda}{d} = \frac{20\pi}{13} > 2,5$ et $\frac{\lambda}{d} = 1 < 2,5$ sont donnés à titre d'exemple sur la figure 6.10. En comparant les figures 6.10a et 6.10b, on retrouve les propriétés de la solution analytique énoncées dans la section 6.1. D'une part, l'amplitude des oscillations de la vitesse du grain diminue avec la longueur d'onde adimensionnée. D'autre part, un déphasage apparaît quand la longueur d'onde adimensionnée diminue. Par ailleurs, l'oscillation de faible amplitude de l'onde incidente au démarrage est simplement due à l'augmentation artificielle de N_λ (la raison a déjà

¹ masse volumique initialement choisie avant d'être remplacée par $\rho_g = 2\,500 \text{ kg/m}^3$ jugées plus proches des billes utilisées expérimentalement

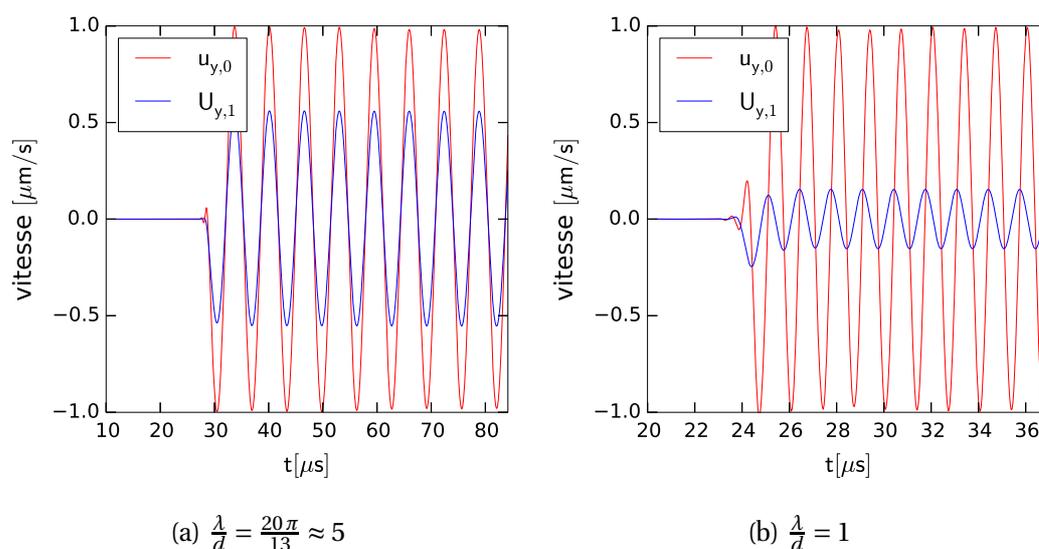


FIGURE 6.10 – Comparaison des composantes selon \mathbf{y} de la valeur du champ de vitesse à l'emplacement du grain (mais en l'absence de celui-ci) $u_{y,0}$ et de la vitesse du grain $U_{y,1}$ pour deux longueurs d'onde adimensionnées de l'onde incidente.

été abordée p. 76).

Enfin, en ne conservant que la norme des vecteurs \mathbf{U} et \mathbf{u} , on obtient le rapport $\frac{\|\mathbf{U}\|}{\|\mathbf{u}\|}$, équivalent de la solution analytique $\frac{U_1}{u_0}$. Toutefois, les deux signaux ne sont pas simplement divisés car cela générerait des problèmes numériques (division par zéro, etc.). Le rapport des vitesses est réalisé extremum à extremum : on obtient ainsi une vingtaine de valeurs. Les premières oscillations sont parfois ignorées puisqu'elles sont spécifiques à la mise en route de l'oscillateur et ne sont pas pris en compte par la solution analytique.

La moyenne des rapports de tous les extrema nous fournit ainsi une estimation du rapport de vitesses $\frac{\|\mathbf{U}\|}{\|\mathbf{u}\|}$ avec une bonne précision. Quant au déphasage η , il est calculé en utilisant une méthode numérique de corrélation croisée des deux signaux (fonction `correlate` de *SciPy*, Oliphant, 2007). Finalement, à partir des données d'une figure comme la 6.10a, on aboutit à une valeur de rapports d'amplitudes et une valeur de déphasage.

6.4.3 Amplitude et déphasage de la vitesse du grain

Les valeurs du rapport entre l'amplitude de la vitesse du grain $\|\mathbf{U}_1\|$ et celle de l'onde incidente $\|\mathbf{u}_0\|$ sont reportées sur la figure 6.11 pour des longueurs d'onde adimensionnées s'étalant de $\frac{\lambda}{d} = 0,25$ à 45. On constate que les résultats numériques sont proches de la solution analytique. La dynamique des deux courbes est la même mais

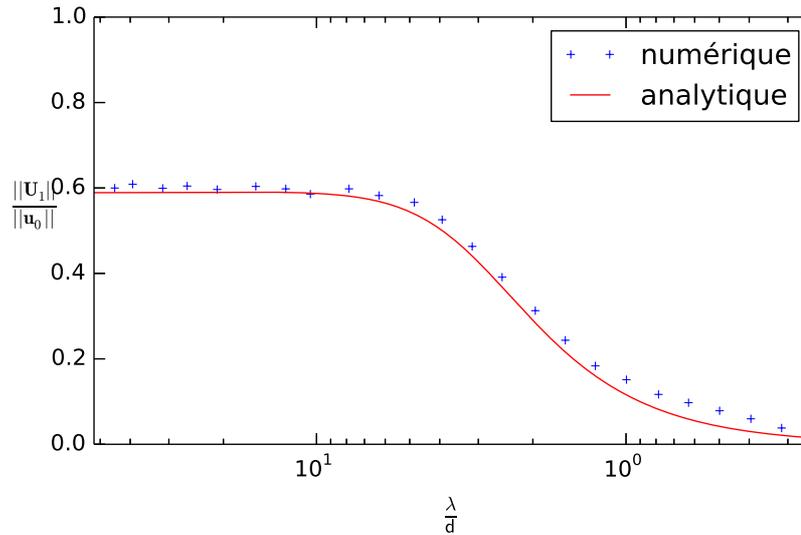


FIGURE 6.11 – Solutions numérique et analytique du rapport de vitesses $\frac{\|\mathbf{U}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|}$ en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ et pour $\rho_g = 2\,400\text{ kg/m}^3$, $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$. \mathbf{U}_1 représente la vitesse du grain et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain mais en l'absence de celui-ci.

les résultats numériques sont légèrement surestimés quand la longueur d'onde est petite par rapport au diamètre du grain. Les barres d'erreur liées au traitement numérique des résultats (moyenne des rapports d'amplitudes et calcul numérique du déphasage) sont négligeables.

À partir des données numériques, il est intéressant d'utiliser la solution analytique afin de retrouver quelles valeurs de ρ_g et R permettent d'ajuster au mieux les résultats numériques. Le résultat de l'ajustement analytique est présenté figure 6.12 : le meilleur résultat est obtenu pour $\rho_g = 2\,350\text{ kg/m}^3$ et le rayon $R = 0,91\text{ mm}$. Cela constitue une erreur relative de 2% pour la masse volumique et 9% pour le rayon du grain. Cependant le résultat de l'erreur sur le rayon est à prendre avec précaution car le rayon R est indissociable du nombre d'onde k_s dans l'équation (6.14). Il peut donc aussi servir à ajuster artificiellement la fréquence de l'onde incidente lors de l'ajustement analytique.

Par ailleurs, le coefficient de corrélation égal à 99,9% est excellent, confirmant que l'allure de la solution analytique est correctement retranscrite par le modèle. Ce résultat est une nette amélioration par rapport aux résultats de Imbert et McNamara (2012) générés avec l'élément fini mixte $RT_0-P_1^+$ où les points étaient éloignés de façon imprévisible de la solution analytique à petite longueur d'onde adimensionnée.

Le déphasage entre les oscillations de la vitesse du grain et la valeur du champ

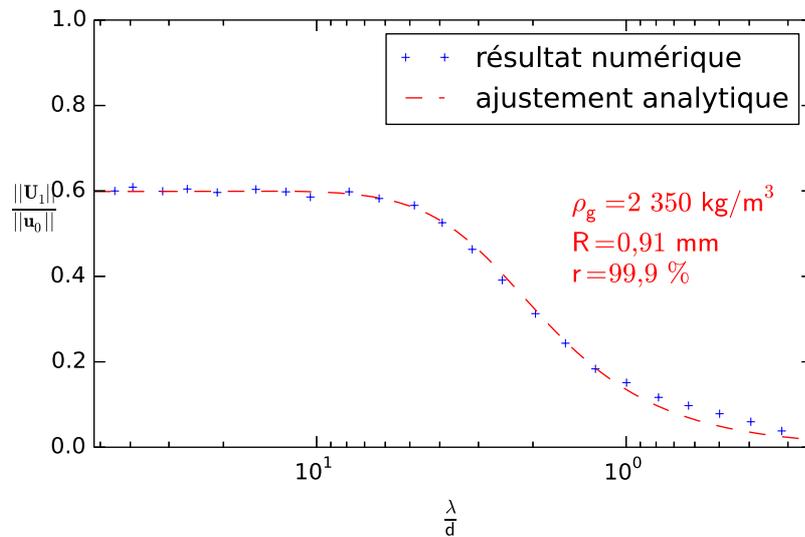


FIGURE 6.12 - Ajustement analytique du rapport de vitesses $\frac{\|\mathbf{U}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|}$ en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ et pour $\rho_g = 2\,400 \text{ kg/m}^3$, $\rho_0 = 1\,000 \text{ kg/m}^3$ et $R = 1 \text{ mm}$. \mathbf{U}_1 représente la vitesse du grain et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain mais en l'absence de celui-ci. r est ici le coefficient de corrélation entre les données numériques et l'ajustement analytique.

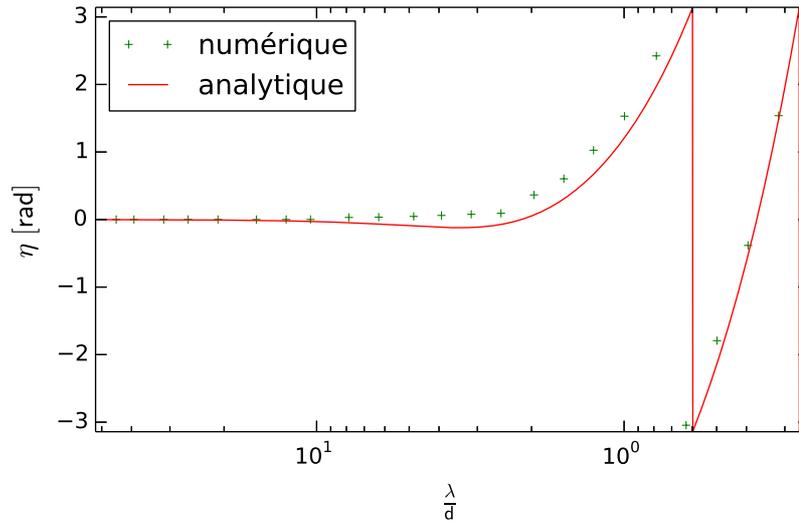


FIGURE 6.13 – Solutions numérique et analytique du déphasage entre la vitesse du grain \mathbf{U}_1 et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain (mais en l'absence de celui-ci) en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ et pour $\rho_g = 2\,400\text{ kg/m}^3$, $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$.

de vitesse à l'emplacement du centre du grain est tracé sur la figure 6.13 avec sa solution analytique en fonction de la longueur d'onde adimensionnée. On constate que l'allure des deux courbes est la même mais que le modèle éprouve quelques difficultés à prendre en compte le faible déphasage négatif jusqu'à $\frac{\lambda}{d} \approx 2,5$. Ensuite, cet écart est maintenu jusqu'à $\frac{\lambda}{d} \approx 0,6$.

Enfin, on se place à très grande longueur d'onde $\frac{\lambda}{d} = 21$ pour observer l'évolution du rapport de vitesse $\frac{\|\mathbf{U}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|}$ pour des rapports de masses volumiques $\frac{\rho_g}{\rho_0}$ compris entre 0,1 (billes en argent massif dans de l'eau) et 0,91 (billes de plastique dans de l'eau). Ce comportement limite de l'équation (6.14) quand $k_s R$ (et donc $\frac{\lambda}{d}$ infini) tend vers zéro est prédit par l'équation (6.16) (p. 104). On remarque que l'écart par rapport à la solution analytique est sensiblement le même quel que soit le rapport de masses volumiques pour une longueur d'onde adimensionnée donnée.

6.5 Optimisation du rapport de maillages

Le rapport de maillages κ propre à la méthode des domaines fictifs est déterminant pour la convergence de la méthode (Girault et Glowinski, 1995). Pour faire simple, Glowinski et coll. (1999, p. 775) expliquent que le conditionnement du système à résoudre à chaque pas de temps (dans notre cas, (3.24) p. 59) requiert que $h \ll H$ tandis que la

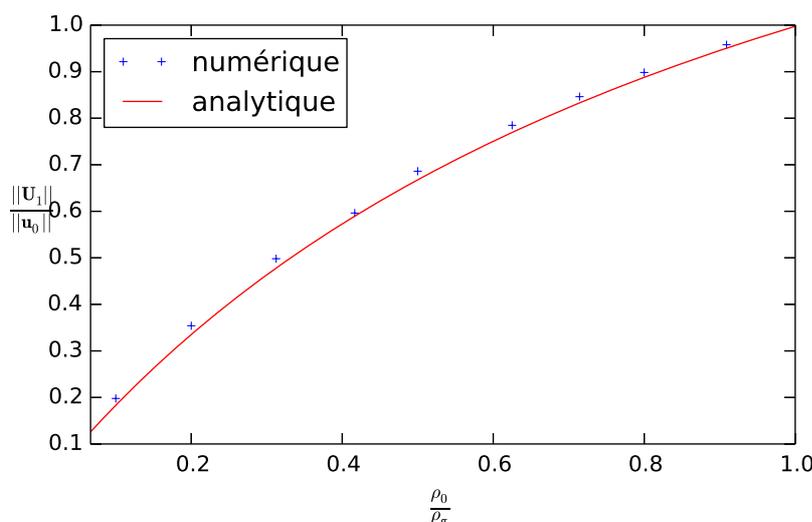


FIGURE 6.14 – Solutions numérique et analytique du rapport de vitesses $\frac{\|\mathbf{U}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|}$ en fonction du rapport de masses volumiques $\frac{\rho_0}{\rho_g}$ et pour $\frac{\lambda}{d} = 21$. \mathbf{U}_1 représente la vitesse du grain et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain mais en l'absence de celui-ci.

précision requiert que $H \ll h$. D'où le compromis suivant :

$$1 \leq \kappa \leq 2 \quad (6.18)$$

Durant ce chapitre plusieurs valeurs différentes de κ ont été prises sans pour autant donner d'explications. Le fait est que dans la littérature, outre la condition (6.18), il y a peu d'information sur la valeur à donner à ce paramètre. Cette valeur est toujours fixée de façon empirique par les auteurs de méthodes de domaines fictifs : $\kappa = 1,2$ (Bécache et coll., 2009), $1 \leq \kappa \leq \sqrt{2}$ (Glowinski et coll., 1995), $1,8 \leq \kappa \leq 2$ (Glowinski et coll., 1997), etc. Les équations résolues, les éléments finis utilisés, ainsi que les modes de construction des maillages tout aussi variés peuvent expliquer cette diversité de résultat.

Partant de ces constatations, nous reproduisons les résultats obtenus dans la section précédente 6.4.3 en changeant uniquement le paramètre κ de $\frac{1,5}{\sqrt{2}}$ à $\frac{2}{\sqrt{2}}$. En outre, on définit les fonctions coût J_U du rapport de vitesses $\frac{\|\mathbf{U}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|}$ et J_η du déphasage η calculées pour chaque valeur de κ à partir de l'écart quadratique entre solutions numérique et

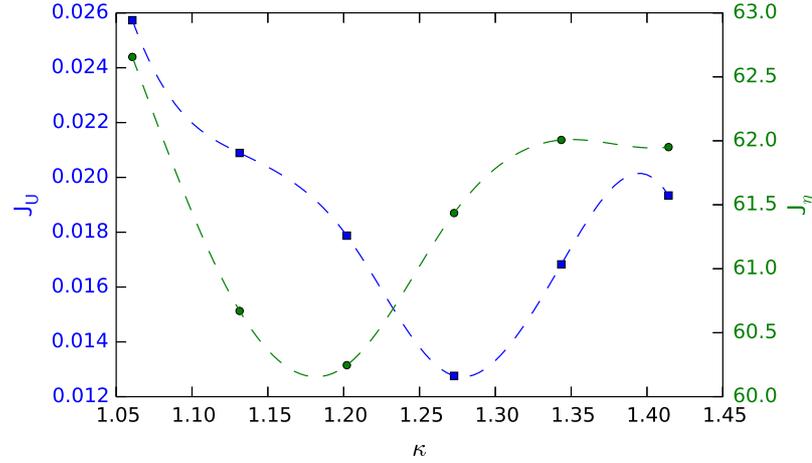


FIGURE 6.15 – Fonctions coûts J_U et J_η associées respectivement au rapport de vitesses $\frac{\|\mathbf{u}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|}$ et au déphasage η en fonction du rapport de maillages κ . Les courbes au pointillé joignant les points sont des splines pour faciliter la lecture du graphique.

analytique :

$$J_U = \sum_{i=1}^{N_{\lambda/d}} \frac{\left(\frac{\|\mathbf{u}_1\|}{\|\mathbf{u}_0\|} \Big|_i - \frac{|\tilde{U}_1|}{u_0} \Big|_i \right)^2}{\frac{|\tilde{U}_1|}{u_0} \Big|_i^2} \quad (6.19)$$

$$J_\eta = \sum_{i=1}^{N_{\lambda/d}} \frac{(\eta_{\text{num}} \Big|_i - \eta_{\text{an}} \Big|_i)^2}{\eta_{\text{an}} \Big|_i^2} \quad (6.20)$$

avec $N_{\lambda/d}$ le nombre de longueurs d'ondes adimensionnées utilisées dans les figures 6.11 et 6.13.

Les résultats sont représentés sur la figure 6.15 : en bleu pour J_U et vert J_η . Les points sont reliés au pointillé par des splines pour mettre en valeur la forme de chacune des courbes. Elles forment toutes les deux un creux correspondant à la valeur de κ qui minimise l'erreur. Étonnamment, ces minima ne désignent pas le même rapport κ : on trouve 1,27 pour le rapport des vitesses et 1,18 pour le déphasage des vitesses. Par conséquent, la valeur optimale de κ se situe entre ces deux valeurs.

6.6 Discussion

Plusieurs aspects du modèle ont été abordés au cours de cette section. Au travers de la solution analytique et des comparaisons avec le cas du grain fixe, nous avons constaté des différences notables par rapport aux modèles basés sur un grain rigide

fixe. D'une part l'amplitude de l'onde réfléchie par un grain mobile dépend à la fois du contraste de masses volumiques $\frac{\rho_0}{\rho_g}$ et du déplacement des grains ce qui rend notre modèle plus réaliste que le modèle du grain fixe uniquement basé sur la géométrie des grains. Qui plus est, l'hypothèse de corps rigide indispensable à la méthode de dynamique moléculaire est toujours préservée par notre

D'autre part, cette diminution d'amplitude implique une réduction de l'énergie acoustique au profit de l'énergie mécanique. Nous avons remarqué qu'un grain rigide immergé libre de ses mouvements soumis à un son effectuait un mouvement oscillatoire. L'amplitude de la vitesse du grain et le déphasage par rapport à l'onde incidente ont été entièrement caractérisés. L'information principale qui en ressort est qu'un grain mobile n'est quasiment plus affecté par une onde incidente dès lors que sa longueur d'onde adimensionnée est très inférieure à $\frac{\lambda}{d} \ll 1$. Le modèle n'est donc plus utile en dessous de cette longueur d'onde adimensionnée. Toutefois, ce n'est pas gênant puisqu'il est destiné à être utilisé dans un milieu granulaire compact où les micro-oscillations des grains génèrent des sons à des longueurs d'onde plus grande (Thirot et coll., 2012). De plus, les analyses multi-échelles expérimentales (Le Gonidec et Gibert, 2007) sont réalisées pour des longueur d'onde $\frac{\lambda}{d} > 1$

Nous avons aussi pu constater que le rapport de densités $\frac{\rho_0}{\rho_g}$ contrôlait aussi l'amplitude des oscillations de la vitesse du grain. La confrontation des résultats numériques avec la solution analytique a également permis d'estimer les limites actuelles du modèle. Par exemple, il permet de comparer le résultat obtenu avec deux matériaux de masses volumiques différentes, comme du verre et de l'acier, mais n'est pas suffisamment précis pour comparer deux types de verre avec des masses volumiques très proches. Enfin nous avons trouvé une valeur adéquate pour le rapport de maillages κ .

Tous ces résultats peuvent être rapprochés de ceux de Hickling et Wang (1966) qui ont comparé les résultats de la diffusion d'une sphère 3D mobile rigide à ceux d'une sphère élastique. Comme nous l'avons fait pour le disque, ils montrent que l'effet des vibrations de la sphère rigide sur le champ diffusé commence à s'estomper quand $\frac{\lambda}{d} < 0,6$. Par ailleurs en comparant avec le modèle de la sphère élastique, ils concluent que les résultats obtenus avec ces deux modèles sont similaires pour des longueurs d'ondes adimensionnées supérieures à $\frac{\lambda}{d} > \frac{\pi}{2}$. Or, les modèles 2D et 3D ne sont pas foncièrement différents pour ces longueurs d'onde : pour s'en convaincre, il suffit de comparer les rapports de sections efficaces de diffusion figure 4.2 et la figure 4 de Le Gonidec et Gibert (2007, p. 6). On peut donc parfaitement extrapoler ce constat à la sphère 2D.

Par conséquent, ces résultats montrent une nouvelle fois que notre modèle basé sur des grains rigides mobiles est tout à fait apte à simuler de façon réaliste la propagation d'ondes acoustiques dans un milieu granulaire. De plus, cette méthode numérique prend en compte toute la dynamique des grains et permet donc d'accéder à des quantités physiques dont n'ont pas accès les modèles numériques habituellement utilisés en

acoustique. Nous pouvons donc envisager de le tester à plus grande échelle au cours du prochain chapitre.

Chapitre 7

Suspension de grains mobiles soumis à une impulsion

Le modèle est finalement appliqué à une suspension aléatoire de grains mobiles immergés afin de le tester à plus grande échelle. Dans cette expérience, on observe la propagation au cours du temps d'une impulsion de courte durée à travers ce milieu hétérogène. L'objectif futur de cette application est de pouvoir observer les changements dans le signal reçu quand on change des paramètres du modèle comme la fréquence de l'onde incidente, la fraction volumique de la suspension ou la masse volumique des grains.

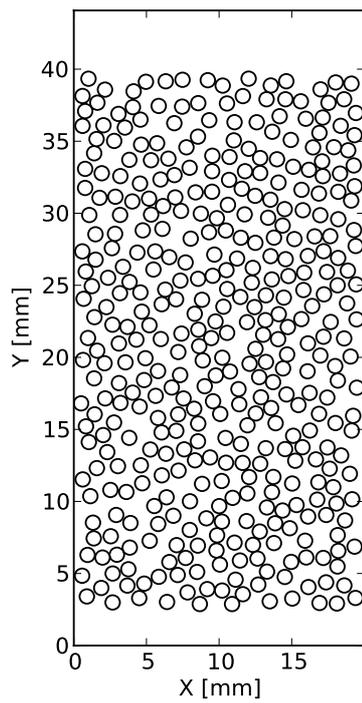
7.1 Paramètres de l'expérience

7.1.1 Géométrie du domaine

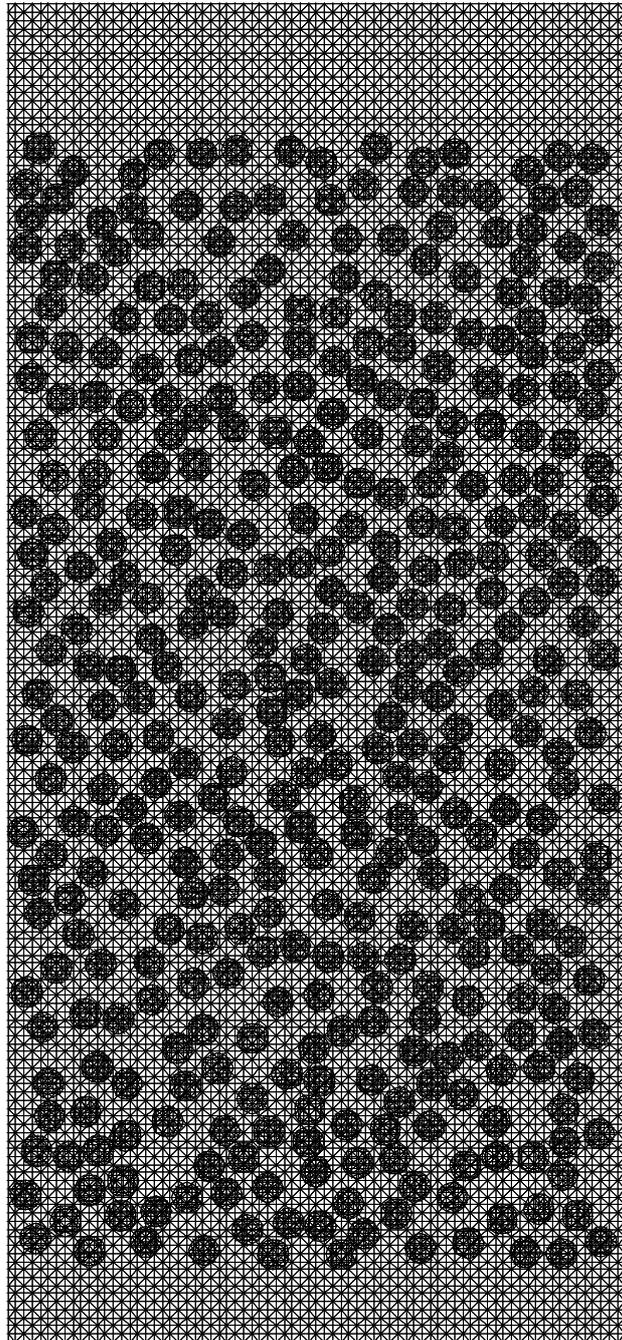
On répartit 400 grains de façon aléatoire dans un domaine semi-infini semi-périodique rectangulaire (schéma A.1b p. 136) de largeur $L_x = 20\text{ mm}$ et de hauteur $L_y = 48\text{ mm}$. Les grains ont tous le même rayon $R = 0,5\text{ mm}$ et donc le même volume V . Les positions des grains sont reportées sur la figure 7.1a. Du fait des bords périodiques latéraux, cela revient à modéliser une suspension de largeur infinie. La hauteur moyenne de la suspension est de $\Delta L_y = 36\text{ mm}$ à partir de laquelle on peut déduire la fraction volumique :

$$\phi = \frac{N_g V}{L_x \Delta L_y} \approx 44\% \quad (7.1)$$

Les grains sont en verre de masse volumique $\rho_g = 2\,500\text{ kg/m}^3$. La matrice fluide est composée d'eau de masse volumique $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$ et de vitesse de propagation $c_0 = 1\,500\text{ m/s}$. La gravité est absente et les grains ne sont soumis qu'à la force hydrodynamique liée au passage de l'onde acoustique.



(a) positions des grains



(b) maillage des domaines

FIGURE 7.1 – Positions des grains dans la suspension et triangulation du domaine régulier et du domaine fictif

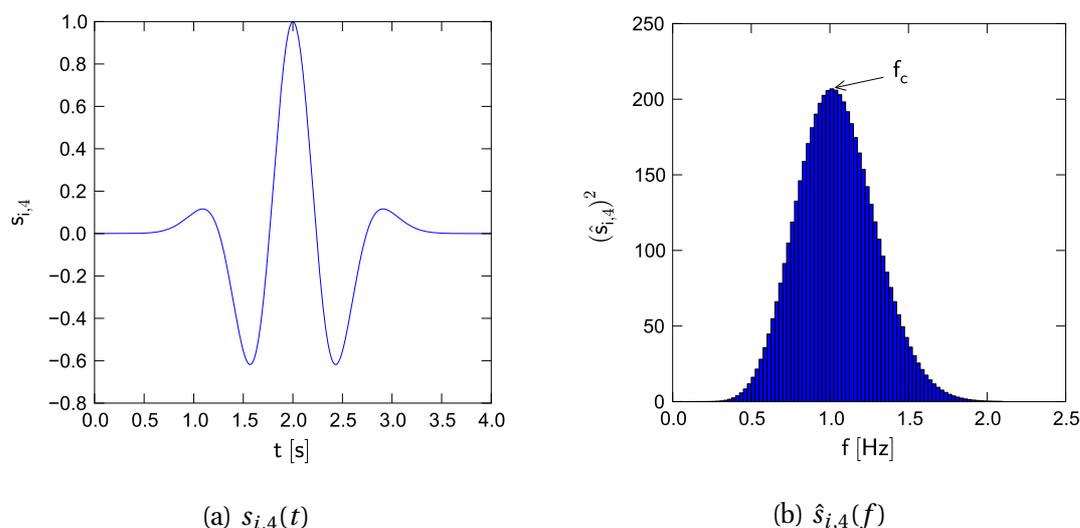


FIGURE 7.2 – Impulsion gaussienne : représentation graphique de la fonction $s_{i,4}$ en fonction du temps (a) et carré de la transformée de Fourier discrète du signal en fonction de la fréquence (b). La fréquence où $(\hat{s}_{i,4})^2$ est maximale est la fréquence centrale f_c .

7.1.2 Impulsion gaussienne

Les fonctions gaussiennes (ou leurs dérivées) servent à produire des impulsions uniques couvrant tout une gamme de fréquences. Définissons la dérivée quatrième d'une fonction gaussienne par la formule suivante :

$$s_{i,4}(t) = S_{\max} \left[\frac{16}{3} \left(\pi f_s \left(t - \frac{1}{f_s} \right) \right)^4 - 8 \left(\pi f_s \left(t - \frac{1}{f_s} \right) \right)^2 + 1 \right] e^{-2 \left(\pi f_s \left(t - \frac{1}{f_s} \right) \right)^2} \quad (7.2)$$

La figure 7.2a est une représentation graphique de la fonction $s_{i,4}(t)$ pour $S_{\max} = 1$, $f_s = 0,5\text{Hz}$ et $t = [0;4]$ s. On remarque que cette fonction possède cinq extrema distincts. Le signal 7.2a a été préalablement étendu à l'intervalle $t = [0;40]$ s pour augmenter la résolution de sa transformée de Fourier discrète présentée fig. 7.2b. Sur cette figure, on observe que l'impulsion gaussienne couvre une certaine gamme de fréquences autour d'une fréquence dominante appelée « fréquence centrale » f_c .

Nous caractériserons l'impulsion gaussienne avec sa fréquence centrale plutôt que f_s car elle est plus pertinente du point de vue de l'acoustique. Les fréquences f_c et f_s sont liées par la relation suivante dans le cas d'une dérivée quatrième de gaussienne (Popa, 2010) :

$$f_c = \sqrt{o_s} f_s \quad (7.3)$$

avec o_s l'ordre de dérivation de la gaussienne (ici 4). Pour nos expériences, l'amplitude

de la source est fixée à $S_{\max} = 1,5 \text{ Pa}$ (soit $u_0 = 1 \mu\text{m/s}$). La ligne source est positionnée à la hauteur $y_s = 44 \text{ mm}$.

La largeur des PMLs en haut et en bas du domaine est $L_{PML} = 10 h$. Les paramètres de discrétisation sont : $h = 185 \mu\text{m}$ (pour $N_\lambda = 12$), le rapport de maillages $\kappa = 1,2$ avec $N_{\partial_{\min}} = 10$ et le pas de temps $\Delta t = 37 \text{ ns}$ (pour $C = 0,43$). La durée de la simulation est de $35,5 \mu\text{s}$ et le temps de calcul est de 18 min ¹. La superposition des deux maillages est représentée sur la figure 7.1b.

7.2 Résultats de la propagation de l'onde dans la suspension

Pour cette expérience la fréquence centrale de la source est $f_c = 150 \text{ kHz}$ (soit $\frac{\lambda}{d} = 10$). On se place dans l'hypothèse où la longueur d'onde incidente est très supérieure au diamètre du grain. Les figures 7.3b à 7.6b montrent des instantanés du champ de pression p (a), de la vitesse \mathbf{U}_k et de la norme de l'accélération \mathbf{A}_k de chaque grain (b) et de la norme du champ de vitesse $\|\mathbf{u}\|$ (c) au cours de la propagation dans le milieu. L'onde se propage du haut du domaine vers le bas. Les trois extrema de forte amplitude sont nettement reconnaissables en début de simulation à la fois sur les figures 7.3a et 7.3c. À mesure que l'onde se propage dans la suspension, chaque grain mis en mouvement rétro-diffuse une partie de l'énergie qu'il reçoit et l'amplitude de l'onde incidente diminue. On observe donc en fin de simulation sur la figure 7.6b des réflexions dans toute la suspension.

On note aussi que les vitesses et accélérations des grains sont naturellement liées aux champs acoustiques qui les entourent. Bien que l'onde ait une direction privilégiée (vers le bas), le mouvement des grains peut localement être affecté par les réflexions provenant de ses voisins, ce qui explique le sens des vecteurs vitesses qui n'est pas toujours parallèle à \mathbf{y} , y compris dans la figure 7.3b.

Une seconde expérience est réalisée avec une fréquence centrale de $f_c = 750 \text{ kHz}$, soit une longueur d'onde adimensionnée autour de $\frac{\lambda}{d} = 2$. Les résultats sont présentés en début et fin de simulation sur la figure 7.7. En comparant les figures 7.6a et 7.7c, on remarque d'abord que l'onde pénètre beaucoup moins dans la suspension lorsque la longueur d'onde incidente est plus faible. Dans cette configuration, le phénomène de diffusion multiple des ondes est prédominant. En effet, en s'aidant des diagrammes de directivité de la solution analytique 6.3 (p. 106), on comprend qu'à cette longueur d'onde, la majeure partie de l'énergie reçue par un grain est diffusée sur les côtés. Cela explique pourquoi la vitesse de propagation effective de l'onde dans la suspension est moins importante. Par ailleurs, on constate aussi que l'ordre de grandeur des vitesses des grains est bien inférieur dans ce cas. On remarque également sur la figure 7.7c la

1. avec un processeur *Intel Core i7 950* cadencé à $3,07 \text{ GHz}$

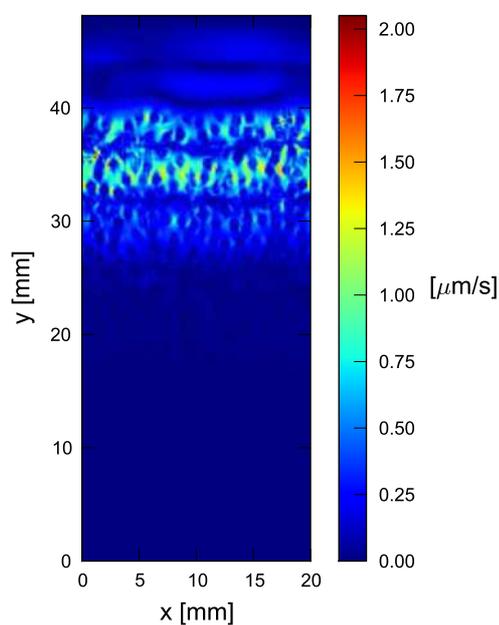
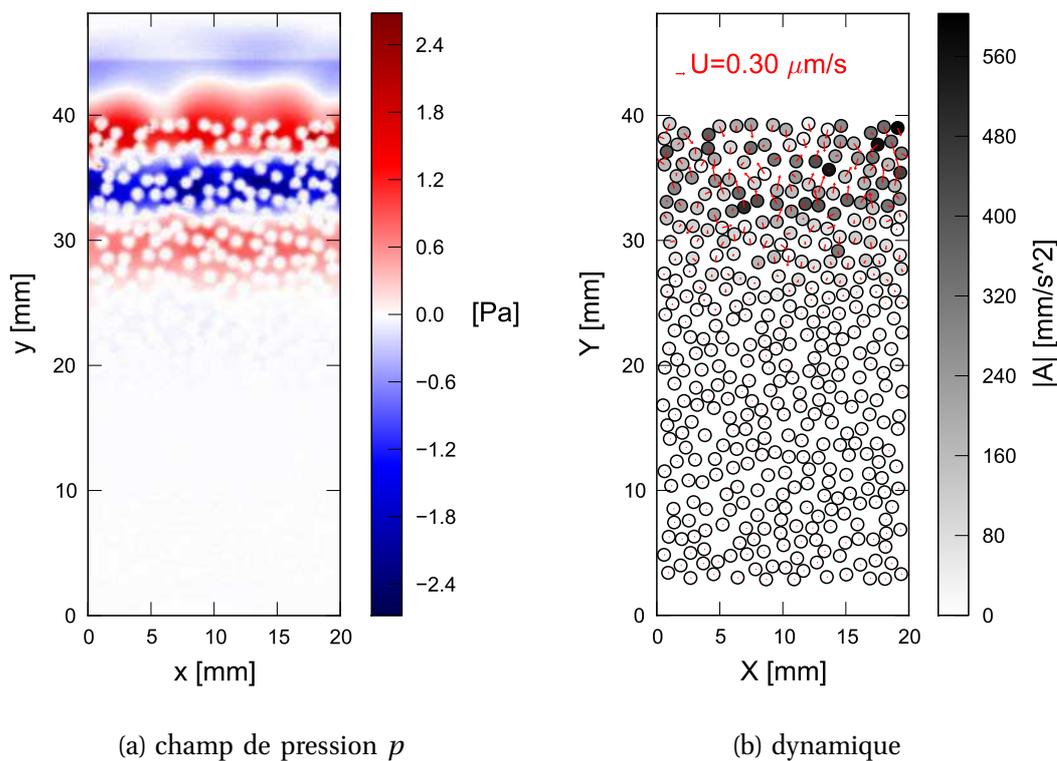


FIGURE 7.3 – Propagation d’une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150$ kHz dans une suspension granulaire à l’instant $t = 20 \mu\text{s}$. La figure (a) montre le champ de pression acoustique, la figure (b) les positions, vitesses (dont la valeur est proportionnelle à la longueur des flèches rouges) et accélérations (en niveau de gris) de chaque grain et la figure (c) la norme du champ de vitesse.

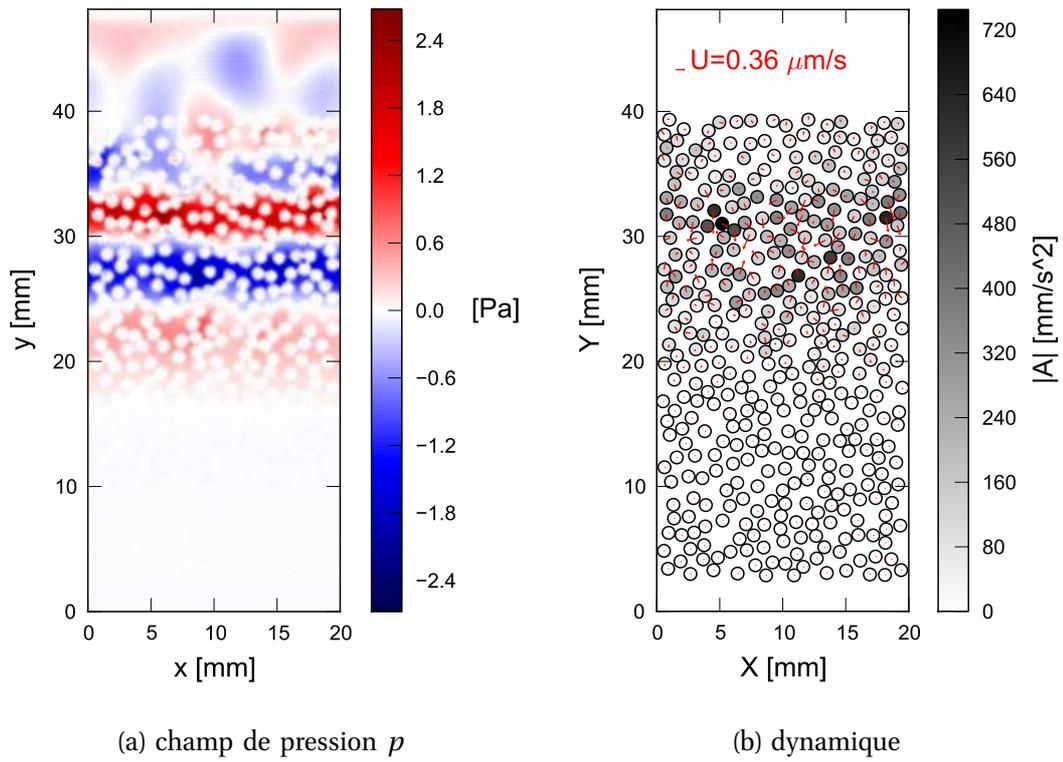


FIGURE 7.4 – Propagation d’une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150\text{ kHz}$ dans un suspension granulaire à l’instant $t = 25\ \mu\text{s}$.

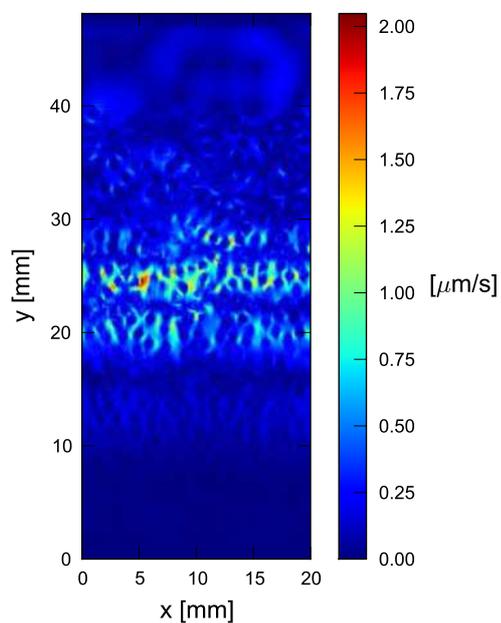
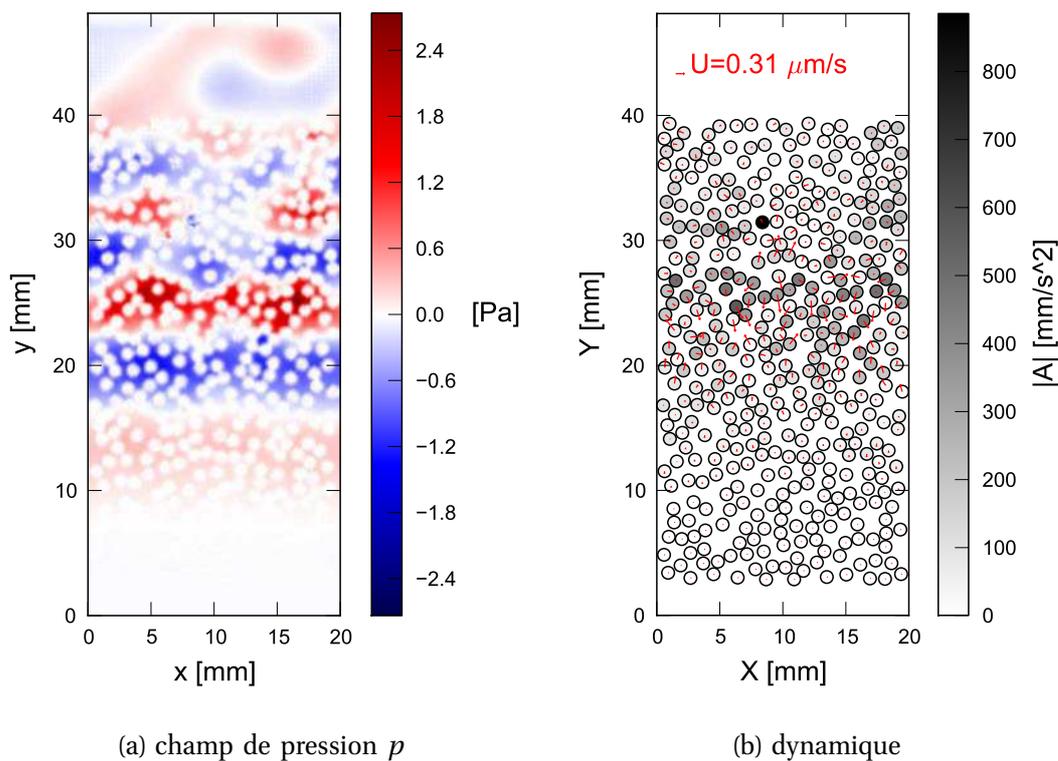
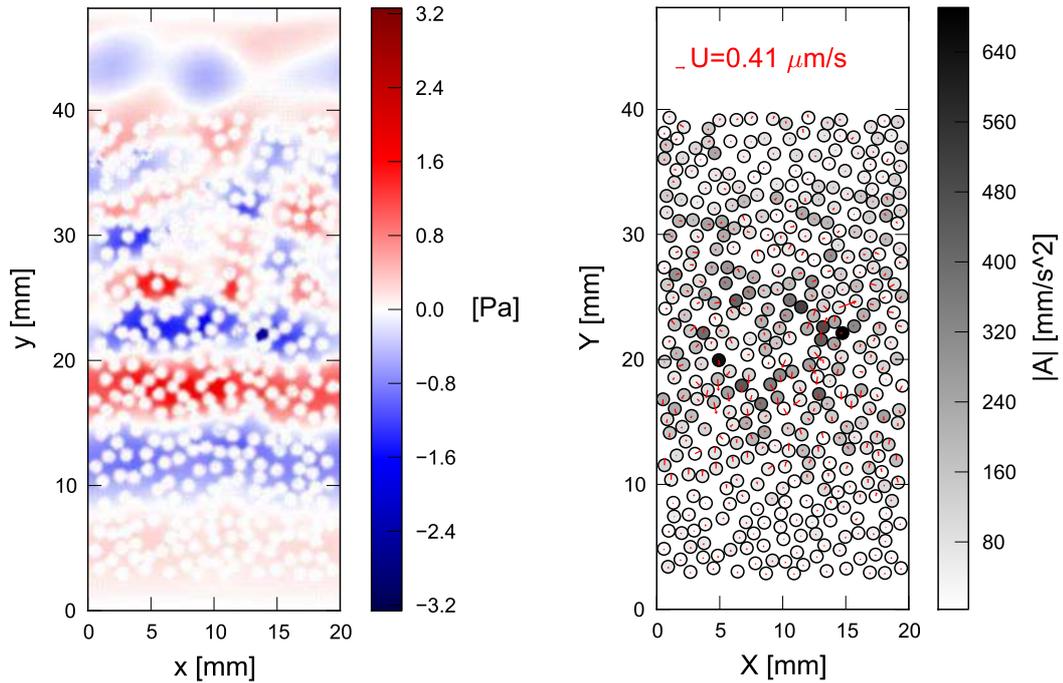


FIGURE 7.5 – Propagation d’une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150 \text{ kHz}$ dans un suspension granulaire à l’instant $t = 30 \mu\text{s}$.

(a) champ de pression p

(b) dynamique

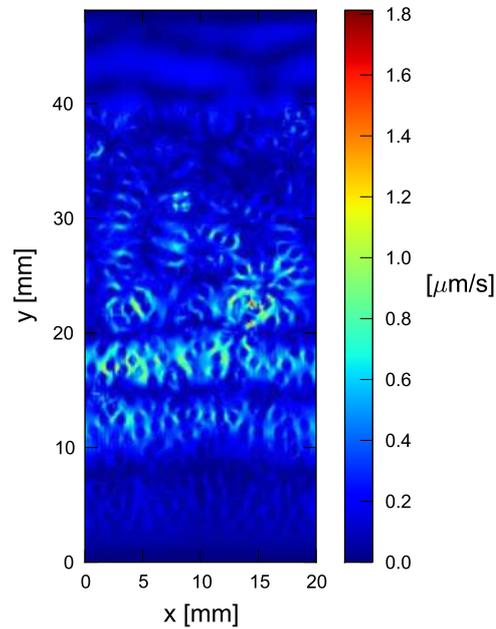
(c) norme du champ de vitesse $\|\mathbf{u}\|$

FIGURE 7.6 – Propagation d’une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150\text{kHz}$ dans un suspension granulaire à l’instant $t = 35 \mu\text{s}$.

complexité de l'onde réfléchi vers le haut du domaine.

7.3 Discussion

La simulation de la suspension est une étude préalable à celle du milieu granulaire compact et néanmoins indispensable. D'abord elle permet de vérifier que le modèle est applicable à une grande quantité de grains. Ensuite, une simple impulsion réfléchie par ce type de milieu paraît déjà difficile à interpréter, sans soumettre en plus les grains à des forces de contact. Cela nécessite d'utiliser notamment des techniques plus poussées comme l'analyse multi-échelle basée sur la transformée d'ondelettes (Le Gonidec et coll., 2002). Combinée aux théories de milieux effectifs comme celle de (Waterman et Truell, 1961), elles permettent de remonter expérimentalement aux paramètres qui caractérisent le milieu granulaire (Le Gonidec et Gibert, 2007).

Par ailleurs, l'utilité d'un modèle basé sur des grains rigides mobiles pour étudier des suspensions de sable est confirmée par Sheng et Hay (1988). Le but de leur étude était de déterminer lequel des modèles de sphères élastiques, rigides mobiles ou rigides immobiles s'ajustait le mieux aux données expérimentales. En s'appuyant sur les résultats expérimentaux de Flammer (1962) réalisés sur des suspensions de sable, ils montrent que les meilleurs résultats sont obtenus avec le modèle de grains mobiles. Sheng et Hay (1988) expliquent entre autre que l'échec du modèle élastique, pourtant plus élaboré, vient du fait qu'il n'y a pas de modes de résonances internes dans un grain de sable de forme quelconque. De plus, le succès du modèle de grains rigides mobiles par rapport aux grains fixes démontre une nouvelle fois l'importance de l'inertie des grains et de leur mobilité dans ce type de problèmes.

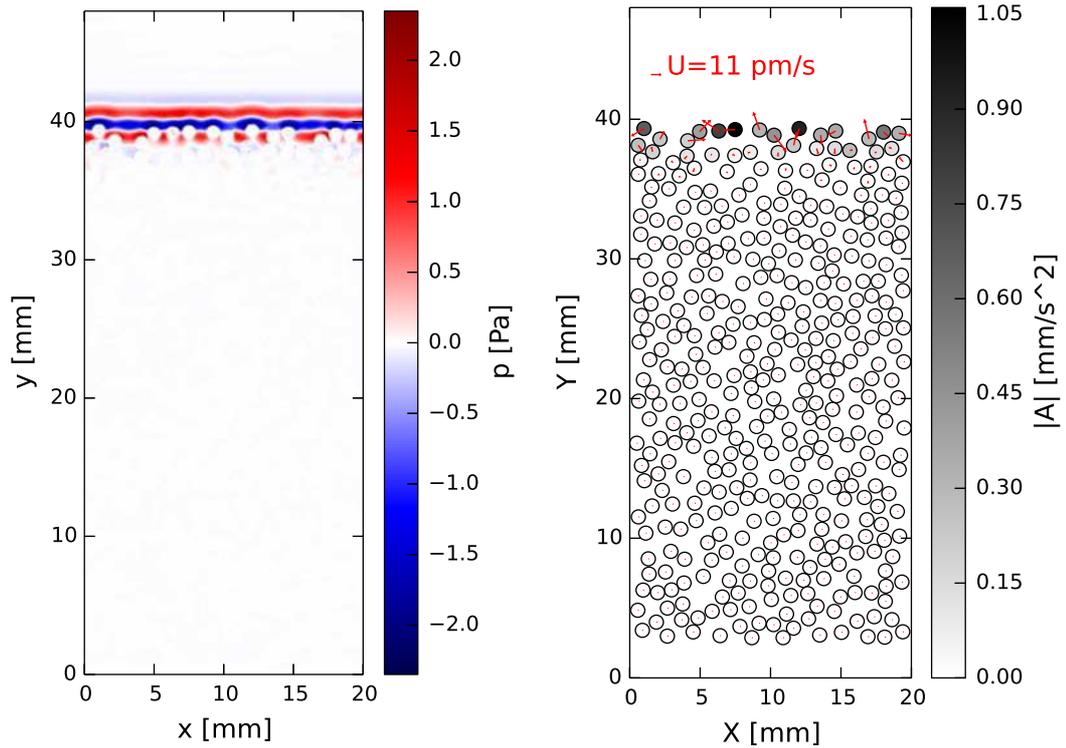
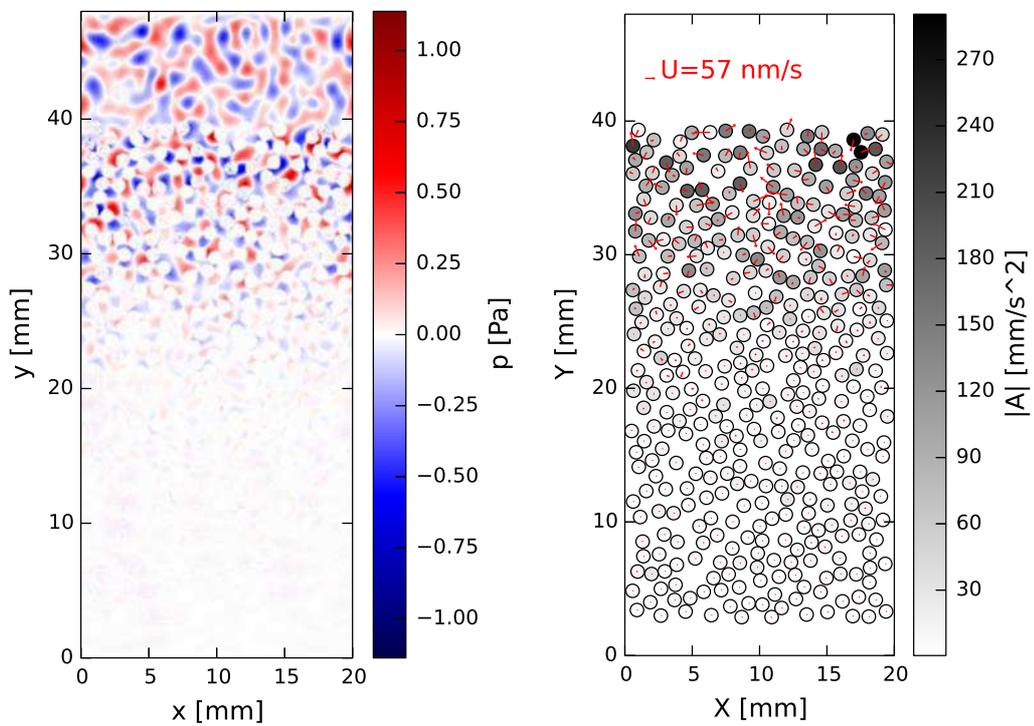
(a) champ de pression p à $t = 7 \mu\text{s}$ (b) dynamique à $t = 7 \mu\text{s}$ (c) champ de pression p à $t = 35 \mu\text{s}$ (d) dynamique à $t = 35 \mu\text{s}$

FIGURE 7.7 – Propagation d’une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 750 \text{ kHz}$ dans un suspension granulaire aux instants $t = 7 \mu\text{s}$ et $t = 35 \mu\text{s}$

Conclusions et perspectives

L'objectif de notre travail était de développer un modèle numérique permettant de coupler une méthode discrète gérant la dynamique d'un milieu granulaire avec une méthode continue simulant la propagation d'ondes acoustiques dans un liquide entourant les grains. Nous avons donc réalisé un état des méthodes numériques potentiellement applicables à ce type de problème. Le résultat de cet état de l'art nous a conduit vers la méthode des domaines fictifs basée sur des multiplicateurs de Lagrange distribués de Glowinski et coll. (1999). Toutefois, cette méthode utilisée à l'origine pour simuler la sédimentation de grains rigides mobiles n'avait pas d'homologue acoustique. Nous avons donc construit notre propre méthode des domaines fictifs pour coupler le mouvement de grains rigides aux ondes acoustiques. À partir de la formulation mathématique du modèle, nous avons construit un schéma numérique simple permettant le couplage avec un algorithme standard de dynamique moléculaire.

Puis, nous avons confronté plusieurs aspects du modèle à des solutions analytiques au travers d'expériences numériques simples. Ces expériences nous ont permis de justifier nos choix d'éléments finis et établir les limites du modèle. Nous avons aussi pu valider les aspects énergétiques essentiels dans le couplage des méthodes discrète et continue. En effet, l'originalité de ce modèle permet à un grain immergé soumis à une force de se déplacer tout en diffusant des ondes acoustiques dans le fluide environnant. Inversement, une onde incidente sur un grain est aussi capable de le mettre en mouvement.

Enfin, l'expérience finale a consisté à propager une onde plane : d'abord sur un grain rigide mobile, puis sur une suspension de plusieurs centaines de grains. La confrontation des résultats numériques aux solutions analytiques a permis de mieux comprendre le comportement dynamique d'un grain en fonction de paramètres tels que la fréquence de l'onde incidente ou le rapport de masses volumiques entre le fluide et le grain. De plus, l'erreur commise avec le modèle a pu être estimée tant sur le plan acoustique que dynamique.

FreeFEM++ nous a permis de développer et tester efficacement notre méthode des domaines fictifs. Néanmoins, nous atteignons les limites d'exploitation du logiciel pour développer davantage le modèle. En effet, les éléments finis triangulaires ne sont pas utiles à notre problème et pourraient être remplacés par des éléments finis rectangu-

lares permettant par exemple de faire cohabiter les champs de vitesse et de pression sur des grilles décalées. D'autre part, la construction du système linéaire doit être optimisée afin de tirer partie pleinement du maillage régulier de la méthode des domaines fictifs. De même, l'utilisation de *solvers* parallèles devrait permettre d'accélérer la résolution du système.

Des travaux sont en cours afin d'approfondir les résultats acoustiques obtenus avec la suspension de grains mobiles en s'appuyant sur une analyse multi-échelle basée sur des théories de milieux effectifs. Cette étude permettra de mieux interpréter le signal acoustique réfléchi par le milieu granulaire en fonction de paramètres tels que la fraction volumique, l'amplitude ou la fréquence de l'onde incidente. Ce nouveau modèle numérique viendra compléter des études récentes à la fois théoriques et expérimentales sur les propriétés acoustiques des milieux granulaires.

Annexe A

Conditions aux limites alternatives

Dans cette section, des alternatives aux conditions aux bords sont présentées afin de réaliser les expériences numériques de la partie 2. Dans un premier cas, on considère que le domaine Ω est infini (fig. A.1a), en d'autres termes que les ondes qui arrivent sur la frontière Γ sortent du domaine sans être réfléchies vers l'intérieur. Dans un second cas, on laisse le milieu infini sur les frontières hautes et basses de Γ et on impose une périodicité du milieu dans le sens horizontal (fig. A.1b). Physiquement d'une part, cette alternative permet de simuler un milieu granulaire horizontalement infini mais d'épaisseur finie. Numériquement d'autre part, les bords périodiques sur les frontières gauches et droites de Γ permettent aussi d'implémenter une source d'ondes planes.

A.1 Milieu infini

En acoustique, simuler un milieu homogène infini revient à imposer des conditions aux limites absorbantes sur la frontière Γ . Et pour cause, une onde acoustique qui se propage s'éloigne naturellement de son point d'origine et n'y reviendra jamais à moins qu'elle rencontre des obstacles et qu'elle soit réfléchi. Dans le cadre d'expériences acoustiques par exemple, le son est rarement confiné dans le système et peut se propager dans toute la salle et au-delà, d'où la nécessité de simuler ce comportement.

A.1.1 Conditions aux limites absorbantes

Il existe plusieurs méthodes pour absorber numériquement les ondes, la plupart sont basées sur des bandes (ou « couches » ou encore « zones ») accolées à la frontière du domaine (fig. A.1a). Les plus simples, communément appelées « éponges », se contentent d'ajouter des termes d'amortissement dans l'équation des ondes (Israeli et Orszag, 1981) pour tous les points à l'intérieur de la bande. Dans ce cas, l'amplitude de l'onde décroît lentement à mesure qu'elle se propage dans l'éponge : il faut donc

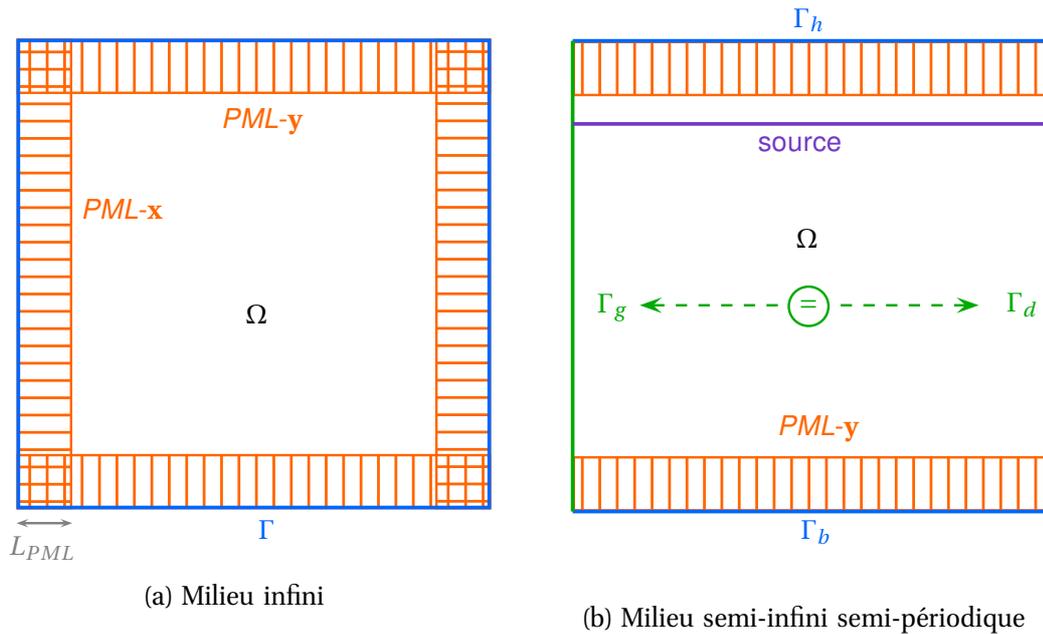


FIGURE A.1 – Conditions aux limites pour un milieu infini et pour un milieu semi-infini semi-périodique

plusieurs dizaines de points pour l’annihiler (Imbert, 2010, p. 28). De plus, le passage du domaine conventionnel au domaine de l’éponge est perçu par l’onde comme une discontinuité et génère des réflexions parasites.

A.1.2 Couches absorbantes parfaitement adaptées

Les couches absorbantes parfaitement adaptées (ou PML) ont été spécialement développées pour absorber l’onde sans réflexions parasites (Berenger, 1994). Ainsi, près de 90 % de l’onde est absorbée dès l’entrée dans la PML et l’onde est totalement annihilée au bout de quelques points seulement (Imbert, 2010, p. 28). Toutefois, leur construction est plus compliquée car elle nécessite de travailler avec des champs de pression et des champs de vitesses artificiels. En effet, chaque champ est découplé en étant projeté selon les axes \mathbf{x} et \mathbf{y} ce qui double de fait la quantité de mémoire nécessaire : par exemple le champ p sera séparé en champs p_x et p_y . Heureusement, de nombreuses autres versions des PML ont vu le jour ce qui a permis d’optimiser la méthode.

Notre choix s’est porté sur des PML dont la formulation est basée sur l’étirement des coordonnées dans le plan complexe (Chew et Weedon, 1994). D’une part la construction de ces PML est plus intuitive que la formulation originelle de Berenger (1994). D’autre part, cette version permet de travailler avec les champ de pression et de vitesse physiques p et \mathbf{u} dans tout le domaine Ω .

Bokil et Glowinski (2005) ont adapté la version des *PML* basée sur l'étirement des coordonnées à l'équation des ondes acoustiques : le lecteur pourra s'y référer pour connaître les détails de la construction. En résumé, de nouvelles variables r et \mathbf{w} sont adjointes respectivement aux champs p et \mathbf{u} ainsi que deux équations supplémentaires au système (3.11) p. 52. La formulation obtenue en utilisant cette méthode pour le sous-problème de l'équation des ondes (section 3.2.2.1 p. 55) semi-discrétisée en espace revient à trouver $(\mathbf{u}_h, \mathbf{w}_h, p_h, r_h) \in \times \mathbb{V}_h \times \mathbb{V}_h \times \mathbb{Q}_h \times \mathbb{Q}_h$ tels que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} \rho_0 \frac{\partial \mathbf{u}_h}{\partial t} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} S_{xy} \rho_0 \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} r_h \nabla \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} = 0 \\ \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}_h}{\partial t} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} S_{yx} \mathbf{u}_h \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{w}_h}{\partial t} \cdot \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} \\ \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \frac{\partial p_h}{\partial t} q_h \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\sigma_x}{\rho_0 c_0^2} p_h q_h \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{w}_h q_h \, d\mathbf{x} = 0 \\ \int_{\Omega} \frac{\partial r_h}{\partial t} q_h \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \sigma_y r_h q_h \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \frac{\partial p_h}{\partial t} q_h \, d\mathbf{x} \\ r_h = 0 \quad \text{sur } \Gamma \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

$\forall \mathbf{v}_h \in \mathbb{V}_h$ et $q_h \in \mathbb{Q}_h$, avec :

$$S_{xy} = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}, \quad S_{yx} = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}$$

et pour $\ell = x, y$:

$$\sigma_{\ell} = \begin{cases} \sigma_{\max} \left(\frac{L_{PML} - \ell}{L_{PML}} \right)^2 & \text{si } \ell < L_{PML} \\ 0 & \text{si } L_{PML} \leq \ell \leq (L_{\ell} - L_{PML}) \\ \sigma_{\max} \left(\frac{\ell - (L_{\ell} - L_{PML})}{L_{PML}} \right)^2 & \text{si } \ell > (L_{\ell} - L_{PML}) \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Un choix courant pour la valeur de σ_{\max} est celui de Collino et Tsogka (2001), à savoir :

$$\sigma_{\max} = \frac{3c_0}{2L_{PML}} \log_{10} \left(\frac{1}{R_{\text{th}}} \right) \quad (\text{A.3})$$

De plus, ils montrent que 99,9% de l'onde est absorbée pour une largeur $L_{PML} = 10h$ et le coefficient de réflexion théorique $R_{\text{th}} = 10^{-4}$. Aussi, nous choisirons ces paramètres-ci lors des simulations utilisant les *PML*.

Cette méthode a pour avantage de faire coïncider en dehors des bandes des *PML* les champs r et p d'un côté et \mathbf{u} et \mathbf{w} de l'autre. Pour s'en convaincre, il suffit de remplacer σ_{ℓ} par sa valeur fournie par l'équation (A.2) dans les intégrales du système

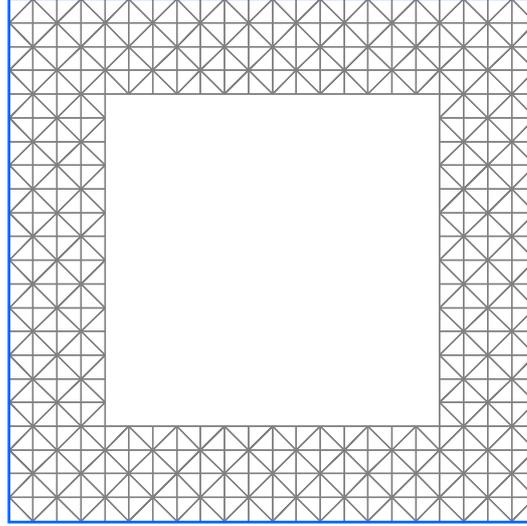


FIGURE A.2 – Triangulation \mathcal{T}_{Π_h} des *PML* pour une largeur $L_{PML} = 4h$ dans le cas d'un milieu infini

(A.1) : plusieurs termes s'annulent en dehors de la zone des *PML*. On peut donc se passer de définir r et \mathbf{w} partout dans Ω : ils peuvent n'exister que dans les *PML* ce qui économise de la mémoire. Autrement dit, on peut définir les espaces de dimension finie \mathbb{V}'_h et \mathbb{Q}'_h suivants par analogie aux espaces \mathbb{V}_h et \mathbb{Q}_h :

$$\mathbb{V}'_h = \{\mathbf{w}_h \in (C^0(\Pi_h))^N \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Pi_h}, \mathbf{w}_h|_K = (P_1)^N\} \quad (\text{A.4})$$

$$\mathbb{Q}'_h = \{r_h \in L^2(\Pi_h) \mid \forall K \in \mathcal{T}_{\Pi_h}, r_h|_K = P_0\} \quad (\text{A.5})$$

avec Π le domaine des *PML* (en orange fig. A.1). La figure A.2 présente \mathcal{T}_{Π_h} , la triangulation du domaine Π dans le cas du milieu infini (fig. A.1a). En s'appuyant sur l'algorithme 2 (p. 55) on peut maintenant discrétiser le système (A.1) en utilisant l'algorithme 5.

A.2 Milieu semi-infini semi-périodique avec source

Le cas d'un milieu semi-infini semi-périodique représenté fig. A.1b (p. 136) est intéressant pour utiliser une source d'ondes planes. Bien entendu la source est un élément facultatif dans notre modèle puisque les grains eux-mêmes peuvent générer des ondes acoustiques. En pratique, les transducteurs acoustiques utilisés en expérience sont des sources d'ondes sphériques ; du moins on peut les considérer comme telle quand les transducteurs sont à quelques centimètres seulement du milieu à sonder. En revanche, si la hauteur des transducteurs est très supérieure à la largeur du milieu sondé, on peut considérer que la source est à « l'infini ». Dès lors, la courbure de l'onde sphérique devient négligeable et elle s'apparente à une onde plane.

initialisation de $p_h^0, r_h^0, \mathbf{u}_h^0$ et \mathbf{w}_h^0 ;

pour $n = 0$ **a** N_t **faire**

trouver $p_h^{n+\frac{1}{2}} \in \mathbb{Q}_h$ tel que :

$$\int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2} \left(\frac{1}{\Delta t} + \sigma_x \right) p_h^{n+\frac{1}{2}} q_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} = \int_{\Omega} \frac{1}{\rho_0 c_0^2 \Delta t} p_h^n q_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} - \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u}_h^n q_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} \quad \forall q_h \in \mathbb{Q}_h \quad (\text{A.6})$$

trouver $r_h^{n+\frac{1}{2}} \in \mathbb{Q}'_h$ tel que :

$$\int_{\Pi} \left(\frac{1}{\Delta t} + \sigma_y \right) r_h^{n+\frac{1}{2}} q'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} = \int_{\Pi} \frac{r_h^n}{\Delta t} q'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} + \int_{\Pi} \frac{p_h^{n+\frac{1}{2}} - p_h^n}{\Delta t} q'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} \quad \forall q'_h \in \mathbb{Q}'_h \quad (\text{A.7})$$

mettre à jour $p_h^{n+\frac{1}{2}} \Big|_{\Pi} \leftarrow r_h^{n+\frac{1}{2}} \Big|_{\Pi}$ dans les bandes des *PML* ;

trouver $\mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} \in \mathbb{V}_h$ tel que :

$$\int_{\Omega} \rho_0 \left(\frac{1}{\Delta t} + S_{xy} \right) \mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{v}_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} = \int_{\Omega} p_h^{n+\frac{1}{2}} \nabla \cdot \mathbf{v}_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} + \int_{\Omega} \frac{\rho_0}{\Delta t} \mathbf{u}_h^n \cdot \mathbf{v}_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} = 0 \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathbb{V}_h \quad (\text{A.8})$$

trouver $\mathbf{w}_h^{n+\frac{1}{2}} \in \mathbb{V}'_h$ tel que :

$$\int_{\Pi} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{w}_h^{n+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{v}'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} = \int_{\Pi} \frac{1}{\Delta t} \mathbf{w}_h^n \cdot \mathbf{v}'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} + \int_{\Pi} \frac{\mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}_h^n}{\Delta t} \cdot \mathbf{v}'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} - \int_{\Pi} S_{yx} \mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} \cdot \mathbf{v}'_h \, \mathbf{d}\mathbf{x} \quad \forall \mathbf{v}'_h \in \mathbb{V}'_h \quad (\text{A.9})$$

mettre à jour $\mathbf{u}_h^{n+\frac{1}{2}} \Big|_{\Pi} \leftarrow \mathbf{w}_h^{n+\frac{1}{2}} \Big|_{\Pi}$ dans les bandes des *PML* ;

fin

Algorithme 5: Schéma numérique pour l'équation des ondes avec des *PML*

A.2.1 Conditions aux limites semi-périodiques

Cela nécessite de remplacer la condition de Dirichlet (2.7) sur Γ (p. 35) par la condition mixte suivante :

$$p(0, y) = p(L_x, y) \quad \text{sur } \Gamma_g \cup \Gamma_d \quad (\text{A.10})$$

$$p(x, 0) = p(x, L_y) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_b \cup \Gamma_h \quad (\text{A.11})$$

avec Γ_g , Γ_d , Γ_b et Γ_h respectivement les frontières gauche, droite, en bas et en haut de Γ (voir aussi fig. A.1b). De plus, on rajoute une condition similaire pour obtenir la semi-périodicité du champ de vitesse :

$$\mathbf{u}(0, y) = \mathbf{u}(L_x, y) \quad \text{sur } \Gamma_g \cup \Gamma_d \quad (\text{A.12})$$

L'implémentation de conditions périodiques est prise en charge dans FreeFEM++ et ne pose pas de problème particulier.

A.2.2 Terme source

Une onde plane est générée numériquement d'après le principe de Huygens (Serway, 1992, p. 154) en utilisant plusieurs sources sphériques équidistantes et disposées sur une ligne droite (en violet fig. A.1b). Les ondes sphériques générées par chacune des sources interfèrent de manière constructive avec celles des sources voisines. Les conditions aux limites semi-périodiques décrites dans la section A.2.1 précédente permettent justement d'obtenir une infinité de sources et donc un front d'onde rectiligne. La ligne source est localisée à quelques éléments en dessous de la *PML* supérieure. De cette façon, le front d'onde qui se dirige vers le haut est immédiatement absorbé tandis que celui qui se dirige vers le bas se propage dans le milieu.

Bibliographie

- M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN, éditeurs. *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, vol. 55 de *Applied Mathematics Series*. National Bureau of Standards, tenth édition, juin 1964.
- I. AGNOLIN et J.-N. ROUX : Internal states of model isotropic packings. III. Elastic properties. *Physical Review E*, 76(6):061304, décembre 2007. doi : 10.1103/PhysRevE.76.061304.
- B. J. ALDER et T. E. WAINWRIGHT : Studies in Molecular Dynamics. I. General method. *Journal of Chemical Physics*, 31(2):459–466, août 1959. doi : 10.1063/1.1730376.
- M. P. ALLEN et D. J. TILDESLEY : *Computer Simulation of Liquids*. Oxford Science Publications. Oxford University Press, 1996. ISBN 0-19-855645-4.
- K. J. ARROW, L. HURWICZ et H. UZAWA, éditeurs. *Studies in linear and non-linear programming*, vol. 2 de *Stanford Mathematical Studies in the Social Sciences*. Stanford University Press, 1958.
- I. BABUŠKA : The finite element method with Lagrange multipliers. *Numerische Mathematik*, 20(3):179–192, 1973. doi : 10.1007/BF01436561.
- P. W. BARBER et S. C. HILL : *Light Scattering by Particles : Computational Methods*, vol. 2 de *Advanced series in applied physics*. World Scientific, Singapore, 1990. ISBN 997150832X.
- J.-P. BERENGER : A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, 114(2):185–200, octobre 1994. doi : 10.1006/jcph.1994.1159.
- F. BERTRAND, P. A. TANGUY et F. THIBAUT : A three-dimensional fictitious domain method for incompressible fluid flow problems. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 25(6):719–736, septembre 1997.
- G. A. BIRD : *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, vol. 42 de *Oxford Engineering Science*. Oxford University Press, deuxième édition, juin 1994. ISBN 978-0198561958.

- V. BOKIL : *Computational methods for wave propagation problems in unbounded domains*. Thèse de doctorat, University of Houston, USA, mai 2003.
- V. BOKIL et R. GLOWINKSI : An operator splitting scheme with a distributed Lagrange multiplier based fictitious domain method for wave propagation problems. *Journal of Computational Physics*, 205(1):242–268, mai 2005. doi : 10.1016/j.jcp.2004.10.040.
- F. BREZZI : On the existence, uniqueness and approximation of saddle point problems arising from Lagrange multipliers. *Revue française d'automatique, informatique, recherche opérationnelle - Analyse numérique*, 8(2):129–151, 1974. URL http://archive.numdam.org/article/M2AN_1974__8_2_129_0.pdf.
- F. BREZZI, M.-O. BRISTEAU, L. P. FRANCA, M. MALLET et G. ROGÉ : A relationship between stabilized finite element methods and the galerkin method with bubble functions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 96(1):117–129, avril 1992. doi : 10.1016/0045-7825(92)90102-P.
- F. BREZZI et M. FORTIN : *Mixed and Hybrid Finite Element Methods*, vol. 15 de *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1991. ISBN 0387975829.
- N. V. BRILLIANTOV, F. SPAHN et J.-M. HERTZSCH : Model for collisions in granular gases. *Physical Review E*, 53(5):5382–5392, mai 1996. doi : 10.1103/PhysRevE.53.5382.
- E. BÉCACHE, P. JOLY et C. TSOGKA : An analysis of new mixed finite elements for the approximation of wave propagation problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37(4):1053–1084, mars 2000. doi : 10.1137/S0036142998345499.
- E. BÉCACHE, P. JOLY et C. TSOGKA : Fictitious domains, mixed finite elements and perfectly matched layers for 2-D elastic wave propagation. *Journal of Computational Acoustics*, 9(3):1175–1201, septembre 2001. doi : 10.1016/S0218-396X(01)00096-6.
- E. BÉCACHE, J. RODRÍGUEZ et C. TSOGKA : Convergence results of the fictitious domain method for a mixed formulation of the wave equation with a Neumann boundary condition. *ESAIM Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 43(2):377–398, mars 2009. doi : 10.1051/m2an :2008047.
- W. C. CHEW et W. H. WEEDON : A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates. *Microwave and Optical Technology Letters*, 7(13):599–604, septembre 1994. doi : 10.1002/mop.4650071304.
- G. COHEN et S. FAUQUEUX : Mixed finite elements with mass-lumping for the transient wave equation. *Journal of Computational Acoustics*, 8(1):171–188, mars 2000. doi : 10.1016/S0218-396X(00)00011-X.

- F. COLLINO, P. JOLY et F. MILLOT : Fictitious domain method for unsteady problems : application to electromagnetic scattering. *Journal of Computational Physics*, 138(2):907–938, décembre 1997. doi : 10.1006/jcph.1997.5849.
- F. COLLINO et C. TSOGKA : Application of the perfectly matched absorbing layer model to the linear elastodynamic problem in anisotropic heterogeneous media. *Geophysics*, 66(1):294–307, janvier 2001. doi : 10.1190/1.1444908.
- R. COURANT, K. FRIEDRICHS et H. LEWY : On the partial difference equations of mathematical physics. AEC research and development report NYO-7689, AEC Computing and Applied Mathematics Center, New York University, septembre 1956. URL <http://www.archive.org/stream/onpartialdiffere00cour#page/n0/mode/2up>. Traduit de l'allemand par P. Fox à partir du papier initialement publié dans *Mathematische Annalen* 100 (1928).
- M. J. CROCKER, éditeur. *Handbook of acoustics*. Wiley, 1998. ISBN 0-471-25293-X.
- M. CROUZEIX et P.-A. RAVIART : Conforming and nonconforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations I. *ESAIM Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 7(R3):33–75, 1973. URL http://archive.numdam.org/article/M2AN_1973__7_3_33_0.pdf.
- P. A. CUNDALL et O. D. L. STRACK : A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29(1):47–65, mars 1979. doi : 10.1680/geot.1979.29.1.47.
- M. A. DABLAÏN : The application of high-order differencing to the scalar wave equation. *Geophysics*, 51(1):54–66, janvier 1986. doi : 10.1190/1.1442040.
- T. A. DAVIS : *Direct Methods for Sparse Linear Systems*. Fundamentals of algorithms. SIAM, 2006. ISBN 0-89871-613-6.
- T. A. DAVIS et I. S. DUFF : An unsymmetric-pattern multifrontal method for sparse LU factorization. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 18(1):140–158, janvier 1997. doi : 10.1137/S0895479894246905.
- B. DELAUNAY : Sur la sphère vide. *Bulletin de l'Académie des Sciences de l'URSS - Classe des sciences mathématiques et naturelles*, (6):793–800, 1934. URL <http://mi.mathnet.ru/eng/izv4937>.
- C. DEPOLLIER : Éléments d'acoustique. Cours de l'Université du Maine, décembre 2008.
- M. DURANTEAU : *Dynamique granulaire à l'état critique*. Thèse de doctorat, Université de Rennes 1, 2013.

- H. C. ELMAN et G. H. GOLUB : Inexact and preconditioned Uzawa algorithms for saddle point problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 31(6):1645–1661, décembre 1994. doi : 10.1137/0731085.
- L. EULER : *Introduction à l'analyse infinitésimale*, vol. 1. Barrois, Paris, 1796. Traduite du latin en français par J. B. Labey.
- G. H. FLAMMER : Ultrasonic measurement of suspended sediment. Dans *Contributions to General Geology*, vol. 1141 de *Geological Survey Bulletin*, ch. A. United States Government Printing Office, Washington, 1962. URL <http://books.google.fr/books?id=fbYPAAAAIAAJ>.
- E. G. FLEKKØY et H. J. HERRMANN : Lattice boltzmann models for complex fluids. *Physical A : Statistical Mechanics and its Applications*, 199(1):1–11, octobre 1993. doi : 10.1016/0378-4371(93)90091-H.
- A. FORTIN et A. GARON : Les éléments finis : de la théorie à la pratique. <http://www.mathappl.polymtl.ca/MTH6207/EF.pdf>, 1997.
- S. GAUTIER et D. GIBERT : cattering from a fractal surface : acoustical experiments and comparison with near-nadir models. *Icarus*, 167(2):453–463, février 2004. doi : 10.1016/j.icarus.2003.10.004.
- C. W. GEAR : The numerical integration of ordinary differential equations. *Mathematics of Computation*, 21:146–156, 1967. doi : 10.2307/2004155.
- C. GEUZAIN et J.-F. REMACLE : Gmsh : a 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309–1331, septembre 2009. doi : 10.1002/nme.2579.
- V. GIRAULT et R. GLOWINSKI : Error analysis of a fictitious domain method applied to a Dirichlet problem. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 12(3):487–514, octobre 1995. doi : 10.1007/BF03167240.
- R. GLOWINSKI et Y. KUZNETSOV : On the solution of the Dirichlet problem for linear elliptic operators by a distributed Lagrange multiplier method. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences - série I - Mathématiques*, 327(7):693–698, décembre 1998. doi : 10.1016/S0764-4442(99)80103-7.
- R. GLOWINSKI et S. LAPIN : Solution of a wave equation by a mixed finite element - fictitious domain method. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 4(4):431–444, janvier 2004. doi : 10.2478/cmam-2004-0024.

- 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(3-4):283-303, 1994. doi : 10.1016/0045-7825(94)90135-X.
- R. GLOWINSKI, T.W. PAN, T.I. HESLA et D.D. JOSEPH : A distributed Lagrange multiplier / fictitious domain method for particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(5):755-794, août 1999. doi : 10.1016/S0301-9322(98)00048-2.
- R. GLOWINSKI, T.W. PAN, T.I. HESLA, D.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. doi : 10.1006/jcph.2000.6542.
- R. GLOWINSKI, T.W. PAN et J. PERIAUX : A Lagrange multiplier / fictitious domain method for the Dirichlet problem - generalization to some flow problems. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, 12(1):87-108, février 1995. doi : 10.1007/BF03167383.
- R. GLOWINSKI, T.W. PAN et J. PERIAUX : Fictitious domain methods for incompressible viscous flow around moving rigid bodies. Dans J. R. WHITEMAN, éditeur : *The Mathematics of Finite Elements and Applications*, Brunel University, 1997. 1996 MAFELAP Conference, Wiley.
- R. GLOWINSKI, T.W. PAN et J. PÉRIAUX : Distributed Lagrange multiplier methods for incompressible viscous flow around moving rigid bodies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151(1-2):181-194, janvier 1998. doi : 10.1016/S0045-7825(97)00116-3.
- R. GLOWINSKI, T.W. PAN, R. O. WELLS JR. et X. ZHOU : Wavelet and finite element solutions for the neumann problem using fictitious domains. *Journal of Computational Physics*, 126(1):40-51, juin 1996. doi : 10.1006/jcph.1996.0118.
- E. HAIRER, C. LUBICH et G. WANNER : Geometric numerical integration illustrated by the Störmer-Verlet method. *Acta Numerica*, 12:399-450, mai 2003. doi : 10.1017/S0962492902000144.
- F. HECHT : *FreeFem++*. Laboratoire Jacques-Louis Lions, Université Pierre et Marie Curie, Paris, third édition, 2012. URL <http://www.freefem.org/ff++/ftp/freefem++doc.pdf>.
- E. HEIKKOLA, Y. A. KUZNETSOV, P. NEITTAANMÄKI et J. TOIVANEN : Fictitious domain methods for the numerical solution of two-dimensional scattering problems. *Journal of Computational Physics*, 145(1):89-109, septembre 1998. doi : 10.1006/jcph.1998.6014.

- H. J. HERRMANN et S. LUDING : Modeling granular media on the computer. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 10(4):189–231, août 1998. doi : 10.1007/s001610050089.
- H. HERTZ : Über die berührung fester elastischer körper. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, 92:156–171, 1881. URL <http://www.lajss.org/HistoricalArticles/Hertz.pdf>. texte en allemand.
- M. R. HESTENES et E. STIEFEL : Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 49(6):409–436, décembre 1952. URL <http://nvlpubs.nist.gov/nistpubs/jres/049/6/V49.N06.A08.pdf>.
- R. HICKLING et N. M. WANG : Scattering of sound by a rigid movable sphere. *Journal of the Acoustical Society of America*, 39(2):276–279, février 1966. doi : 10.1121/1.1909887.
- H. H. HU : Direct simulation of flows of solid-liquid mixtures. *International Journal of Multiphase Flow*, 22(2):335–352, avril 1996. doi : 10.1016/0301-9322(95)00068-2.
- J. D. HUNTER : Matplotlib : a 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering*, 9(3):90–95, may 2007. doi : 10.1109/MCSE.2007.55. URL <http://matplotlib.org>.
- D. IMBERT : Imagerie sismique 3D de structures complexes. Rapport de stage, Université de Rennes I, Centre de Géosciences de MINES ParisTech, Fontainebleau, septembre 2010.
- D. IMBERT et S. McNAMARA : Fictitious domain method to model a movable rigid body in a sound wave. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3–4):267–285, 2012. doi : 10.1515/jnum-2012-0014.
- M. ISRAELI et S. A. ORSZAG : Approximation of radiation boundary conditions. *Journal of Computational Physics*, 41(1):115–135, mai 1981. doi : 10.1016/0021-9991(81)90082-6.
- P. JOLY et L. RHAOUTI : Fictitious domains, H(div) finite elements and Neumann condition : the inf-sup condition. *Comptes rendus de l'Académie des Sciences - série I - Mathématiques*, 328(12):1225–1230, juin 1999.
- S. KER, Y. LE GONIDEC et D. GIBERT : Multiscale seismic attributes : source-corrected wavelet response and application to high-resolution seismic data. *Geophysical Journal International*, 190(3):1746–1790, juillet 2012. doi : 10.1111/j.1365-246X.2012.05601.x.
- 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, décembre 2000. doi : 10.1002/1097-0363(20001230)34 :8<651 : :AID-FLD61>3.0.CO ;2-D.

- D. KOSLOFF et D. KESSLER : Seismic numerical modeling. Dans Y. DESAUBIES, A. TARANTOLA et J. ZINN-JUSTIN, éditeurs : *Oceanographic and Geophysical Tomography*, Houches Summer Session, p. 249–312, Les Houches, France, octobre 1990. Elsevier Science. ISBN 9780444887795.
- W. KUTTA : Beitrag zur näherungsweise Integration totaler Differentialgleichungen. *Zeitschrift für Mathematik und Physik*, 46:435–453, 1901. texte en allemand.
- H. LAMB : *Hydrodynamics*. Dover publications, New York, sixième édition, 1945. ISBN 0486602567-9780486602561.
- P. D. LAX et A. N. MILGRAM : Parabolic equations. Dans L. BERS, S. BOCHNER et F. JOHN, éditeurs : *Contributions to the Theory of Partial Differential Equations*, vol. 33 de *Annals of Mathematics Studies*, ch. 9, p. 167–190. Princeton University Press, 1954. ISBN 9780691095844.
- Y. LE GONIDEC et D. GIBERT : Multiscale analysis of waves reflected by granular media : Acoustic experiments on glass beads and effective medium theories. *Journal of Geophysical Research - Solid Earth*, 112(B5):B05103, mai 2007. doi : 10.1029/2006JB004518.
- Y. LE GONIDEC, D. GIBERT et J.-N. PROUST : Multiscale analysis of waves reflected by complex interfaces : basic principles and experiments. *Journal of Geophysical Research - Solid Earth*, 107(B9):ESE 4-1 – ESE 4-16, septembre 2002. doi : 10.1029/2001JB000558.
- 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. doi : 10.1137/0731054.
- J. LI, T. ARBOGAST et Y. HUANG : Mixed methods using standard conforming finite elements. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(5–8):680–692, janvier 2009. doi : 10.1016/j.cma.2008.10.002.
- B. LOMBARD : *Modélisation numérique de la propagation des ondes acoustiques et élastiques en présence d'interface*. Thèse de doctorat, Université de la Méditerranée, Aix-Marseille, janvier 2002.
- B. LOMBARD et J. PIRAUX : Numerical treatment of two-dimensional interfaces for acoustic and elastic waves. *Journal of Computational Physics*, 195(1):90–116, mars 2004. doi : 10.1016/j.jcp.2003.09.024.
- B. LOMBARD, J. PIRAUX, C. GÉLIS et J. VIRIEUX : Free and smooth boundaries in 2-D finite-difference schemes for transient elastic waves. *Geophysical Journal International*, 172:252–261, 2008. doi : 10.1111/j.1365-246X.2007.03620.x.

- G. I. MARCHUK : *Splitting and alternating direction methods*, vol. 1 de *Handbook of Numerical Analysis*. Elsevier, 1990. doi : 10.1016/S1570-8659(05)80035-3.
- B. MAURY : A fat boundary method for the Poisson problem in a domain with holes. *Journal of Scientific Computing*, 16(3):319–339, septembre 2001. doi : 10.1023/A :1012821728631.
- S. McNAMARA : Méthode Dynamique Moléculaire. Dans F. RADJAÏ et F. DUBOIS, éditeurs : *Modélisation numérique discrète de matériaux granulaires*, Traité MIM - Mécanique et ingénierie des matériaux, ch. 1, p. 25–48. Hermès-Lavoisier, septembre 2010. ISBN 978-2-7462-2976-1.
- H. M. MOURAD, J. DOLBOW et I. HARARI : A bubble-stabilized finite element method for dirichlet constraints on embedded interfaces. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 69(4):772–793, janvier 2006. doi : 10.1002/nme.1788.
- O. MOURAILLE et S. LUDING : Sound wave propagation in weakly polydisperse granular materials. *Ultrasonics*, 48(6–7):498–502, novembre 2008. doi : 10.1016/j.ultras.2008.03.009.
- O. MOURAILLE, W. A. MULDER et S. LUDING : Sound wave acceleration in granular materials. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2006(7):P07023, juillet 2006. doi : 10.1088/1742-5468/2006/07/P07023.
- N. NERONE, M. A. AGUIRRE, A. CALVO, D. BIDEAU et I. IPPOLITO : Instabilities in slowly driven granular packing. *Physical Review E*, 67:011302, 2003. doi : 10.1103/PhysRevE.67.011302.
- J. C. NÉDÉLEC : Mixed finite elements in \mathbb{R}^3 . *Numerische Mathematik*, 35(3):315–341, 1980. doi : 10.1007/BF01396415.
- T. E. OLIPHANT : Python for scientific computing. *Computing in Science & Engineering*, 9(3):10–20, mai 2007. doi : 10.1109/MCSE.2007.58. URL <http://www.scipy.org>.
- J. PARVIZIAN, A. DÜSTER et E. RANK : Finite cell method - h - and p -extension for embedded domain problems in solid mechanics. *Computational Mechanics*, 41(1):121–133, décembre 2007. doi : 10.1007/s00466-007-0173-y.
- N. A. PATANKAR, P. SINGH, D. D. JOSEPH, R. GLOWINSKI et T.-W. PAN : A new formulation of the distributed Lagrange multiplier / fictitious domain method for particulate flow. *International Journal of Multiphase Flow*, 26(9):1509–1524, septembre 2000. doi : 10.1016/S0301-9322(99)00100-7.
- A. N. PATI, K. LADIPO, D. PANIAGUA et R. GLOWINSKI : Three dimensional fluid-structure interaction under pulsatile flow by using distributed Lagrange multiplier method. *Mathematical and Computer Modelling*, 53(1–2):21–41, janvier 2011. doi : 10.1016/j.mcm.2010.07.009.

- C. S. PESKIN : The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11:479–517, janvier 2002. doi : 10.1017/S0962492902000077.
- A. POPA : An optimization of Gaussian UWB pulses. Dans A. GRAUR, S. G. PENTIUC, C. TURCU, V. POPA, C. TURCU, A. D. POTORAC et E. COCA, éditeurs : *The 10th International Conference on Development and Application Systems*, p. 156–160, Suceava, Roumanie, mai 2010. Stefan cel Mare University of Suceava, Faculty of Electrical Engineering and Computer Science. URL <http://www.dasconference.ro/cd2010/data/abstracts.pdf>.
- V. L. POPOV : *Contact Mechanics and Friction*, ch. 5, p. 55–70. Springer Berlin Heidelberg, 2010. ISBN 978-3-642-10802-0. doi : 10.1007/978-3-642-10803-7_5.
- C. POTEL et M. BRUNEAU : *Acoustique Générale - Équations différentielles et intégrales, solutions en milieux fluide et solide, applications*. Technosup. Ellipse, 2006. ISBN 2729828052.
- P. A. RAVIART et J. M. THOMAS : A mixed finite element method for 2-nd order elliptic problems. Dans I. GALLIGANI et E. MAGENES, éditeurs : *Mathematical Aspects of Finite Element Methods*, vol. 606 de *Lecture Notes in Mathematics*, p. 292–315, Rome, Italy, 1977. Springer. ISBN 978-3-540-08432-7. doi : 10.1007/BFb0064470.
- L. RHAOUTI, A. CHAIGNE et P. JOLY : Time-domain modeling and numerical simulation of a kettledrum. *Journal of the Acoustical Society of America*, 105(6):3545–3562, 1999. doi : 10.1121/1.424679.
- C. RUNGE : Ueber die numerische auflösung von differentialgleichungen. *Mathematische Annalen*, 46:167–178, 1895. doi : 10.1007/BF01446807. texte en allemand.
- Y. SAAD : *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, vol. 66 de *Classics in Applied Mathematics*. SIAM, deuxième édition, 2011. ISBN 978-1-611970-72-2.
- Y. SAAD et M. H. SCHULTZ : GMRES : a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7(3):856–869, juillet 1986. doi : 10.1137/0907058.
- V. K. SAUL'EV : On the solution of some boundary value problems on high performance computers by fictitious domain method. *Siberian Mathematical Journal*, 4:912–925, 1963.
- T. SCHWAGER et T. PÖSCHEL : Coefficient of restitution and linear-dashpot model revisited. *Granular Matter*, 9(6):465–469, novembre 2007. doi : 10.1007/s10035-007-0065-z.
- R. A. SERWAY, éditeur. *Physique 3 - Optique et physique moderne*. De Boeck-Wesmael, Bruxelles, troisième édition, 1992. ISBN 2-8041-1606-9.

- J. SHENG et A. E. HAY : An examination of the spherical scatterer approximation in aqueous suspension of sand. *Journal of the Acoustical Society of America*, 83(2):598–610, février 1988. doi : 10.1121/1.396153.
- L. STARON, J.-P. VILOTTE et F. RADJAI : Preavalanche instabilities in a granular pile. *Physical Review Letters*, 89(20):204302, novembre 2002. doi : 10.1103/PhysRevLett.89.204302.
- G. STRANG : On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3):506–517, septembre 1968. doi : 10.1137/0705041.
- M. STRASBERG : Gas bubbles as sources of sound in liquids. *Journal of the Acoustical Society of America*, 28(1):20–26, janvier 1956. doi : 10.1121/1.1908212.
- W. C. SWOPE, H. C. ANDERSEN, H. BERENS et K. R. WILSON : A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules : Application to small water clusters. *Journal of Chemical Physics*, 76(1):637–649, janvier 1982. doi : 10.1063/1.442716.
- S. TEMKIN et C.-M. LEUNG : On the velocity of a rigid sphere in a sound wave. *Journal of Sound and Vibration*, 49(1):75–92, novembre 1976. doi : 10.1016/0022-460X(76)90758-6.
- J.-L. THIROT, Y. LE GONIDEC et B. KERGOSIEN : Acoustic emissions in granular structures under gravitational destabilization. Dans B. B. J. LINDE, J. PACZKOWSKI et N. PONIKWICKI, éditeurs : *Acoustics of ordered and disordered granular structures*, vol. 1433 de *AIP Conference Proceedings*, p. 143–146, Gdańsk, Poland, 2012. International Congress on Ultrasonics 2011, AIP. ISBN 978-0-7354-1019-0. doi : 10.1063/1.3703157.
- V. TOURNAT, V. Y. ZAITSEV, V. E. GUSEV, V. NAZAROV, P. BÉQUIN et B. CASTAGNÈDE : Probing weak forces in granular media through nonlinear dynamic dilatancy : clapping contacts and polarization anisotropy. *Physical Review Letters*, 92:085502, 2004. doi : 10.1103/PhysRevLett.92.085502.
- C. TSOGKA : *Modélisation mathématique et numérique de la propagation des ondes élastiques tridimensionnelles dans des milieux fissurés*. Thèse de doctorat, Université de Paris IX Dauphine, France, décembre 1999.
- L. VERLET : Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical Review*, 159(1):98–103, juillet 1967. doi : 10.1103/PhysRev.159.98.
- J. VIRIEUX : P-SV wave propagation in heterogeneous media : velocity-stress finite-difference method. *Geophysics*, 51(4):889–901, avril 1986. doi : 10.1190/1.1442147.

- A. WACHS, G. VINAY, G. FERRER, J. KOUAKOU, C. DAN et L. GIROLAMI : PeliGRIFF : a parallel DEM-DLM/FD method for DNS of particulate flows with collisions. *International Journal of Aerospace and Mechanical Engineering*, 4(4):185–191, 2010.
- O. R. WALTON et R. L. BRAUN : Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *Journal of Rheology*, 30(5):949–981, octobre 1986. doi : 10.1122/1.549893.
- P. C. WATERMAN et R. TRUPELL : Multiple scattering of waves. *Journal of Mathematical Physics*, 2(4):512–537, juillet–août 1961. doi : 10.1063/1.1703737.
- F. JR. WILLIAMSON : Richard Courant and the finite element method : a further look. *Historia Mathematica*, 7(4):369–378, novembre 1980. doi : 10.1016/0315-0860(80)90001-4.
- V. Y. ZAITSEV, P. RICHARD, R. DELANNAY, V. TOURNAT et V. E. GUSEV : Pre-avalanche structural rearrangements in the bulk of granular medium : Experimental evidence. *EPL*, 83(6):64003, septembre 2008. doi : 10.1209/0295-5075/83/64003.
- C. ZHANG et R. J. LEVEQUE : The immersed interface method for acoustic wave equations with discontinuous coefficients. *Wave Motion*, 25(3):237–263, mai 1997. doi : 10.1016/S0165-2125(97)00046-2.

Index

- énergie, 87
- algorithme d'Uzawa, 59
- algorithme de prédiction-correction, 57
- algorithme de Verlet-vitesses, 56
- coercivité, 37
- condition CFL, 55
- condition de Neumann, 39
- conditions aux limites, 135
- conservation de l'énergie, 44
- convergence, 50
- couches absorbantes parfaitement adaptées, 136
- degrés de liberté, 51
- diagramme de directivité, 73
- discrétisation spatiale, 47, 82
- discrétisation temporelle, 53
- dynamique moléculaire, 56
- échanges énergétiques, 91, 96
- élément de Raviart-Thomas, 50, 78
- élément fini, 51
- élément fini de Lagrange, 50, 80
- éléments finis mixtes, 26, 50
- énergie, 44
- équation combinée du mouvement, 40
- équation d'état, 35
- équation de continuité, 35
- équation de Navier-Stokes, 34
- équations des ondes, 35
- erreur, 80, 107
- espace combiné des variations, 40
- espace de dimension finie, 51
- espace de Hilbert, 36
- espace de Sobolev, 36
- espace des fonctions de carré sommable, 36
- espace fonctionnel, 36
- expériences numériques, 63
- fonction de forme, 68
- force de rappel du ressort, 87
- forme bilinéaire, 36
- forme matricielle, 59
- forme variationnelle, *voir* formulation faible
- formulation faible, 36
- formule de Green, 37
- fraction volumique, 123
- FreeFEM++, 47
- grain fixe soumis à une onde plane, 65
- grain mobile soumis à une onde plane, 101
- grains mobiles soumis à une force de rappel, 87
- impulsion gaussienne, 125
- longueur d'onde adimensionnée, 68
- maillage, 22, 25, 27, 48, 49
- méthode d'interface immergée, 23
- méthode de décomposition d'opérateurs, 53
- méthode des différences finies, 22, 53
- méthode des domaines fictifs, 27, 40
- méthode des éléments finis, 24
- methodes discrettes, 19
- multiplicateurs de Lagrange, 28, 42

perfectly matched layers, voir couches absorbantes parfaitement adaptées
principe fondamental de la dynamique, 38

ressort, 87

schéma d'Euler semi-implicite, 55

schéma d'Euler symplectique, voir schéma d'Euler semi-implicite

schéma numérique, 47

section efficace de diffusion, 68

solution analytique, 67, 101

source, 140

suspension, 123

théorème de Lax-Milgram, 37

théorie de Mie, 68

Glossaire

- \mathbf{A}_k accélération du grain k . 57
- C condition CFL. 55
- c_0 vitesse de propagation d'une onde acoustique dans le fluide. 34
- CFL** Courant-Friedrichs-Lewy. 22, 55, 67, 114
- CG** gradient conjugué. 56
- Δt pas de discrétisation temporelle. 53
- ∂G frontière du domaine G . 33
- E énergie totale du système. 44, 87
- E_a énergie acoustique. 88
- $E_{a,c}$ énergie acoustique cinétique. 88
- $E_{a,p}$ énergie acoustique potentielle. 88
- EDP** équation aux dérivées partielles. 21
- E_m énergie mécanique. 88
- $E_{m,c}$ énergie mécanique cinétique. 88
- $E_{m,p}$ énergie mécanique potentielle. 88
- ESIM** *Explicit Simplified Interface Method*. 23
- f_c fréquence centrale d'une impulsion gaussienne. 125
- f_∞ fonction de forme. 68
- \mathbf{F}_k force extérieure quelconque appliquée au grain k . 39
- f_s fréquence de la source. 65
- G domaine contenant l'ensemble des grains. 33
- \mathbf{g} accélération de la pesanteur. 34
- Γ frontière du domaine Ω . 33

GMRES généralisation de la méthode de minimisation du résidu. 56

H longueur maximale des côtés des triangles sur la frontière du maillage \mathcal{T}_{GH} . 50, 52

h pas de discrétisation spatiale (hauteur du triangle K) du maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} . 48, 51

H^1 espace de Sobolev d'ordre 1. 36

$H^{1/2}$ ensemble des traces au bord des fonctions de H^1 . 36

$H(\text{div})$ espace de Sobolev d'ordre 1 avec fonctions vectorielles. 37

$H_n^{(1)}$ fonction de Hankel du premier type. 67

J_η fonction coût associée au déphasage. 119

J_n fonction de Bessel de première espèce. 67

J_U fonction coût associée au rapport de vitesses. 119

K élément triangulaire. 50, 51

κ rapport entre le pas de discrétisation spatiale du maillage \mathcal{T}_{GH} et celui de \mathcal{T}_{Ω_h} . 43, 50

k_g coefficient de raideur du ressort. 87

k_s nombre d'onde de la source. 67, 68

L^2 espace de l'ensemble des fonctions de carré sommable. 36

λ multiplicateurs de Lagrange dans le domaine G . 42

λ_∂ multiplicateurs de Lagrange sur la frontière ∂G . 42

$\Lambda_{\partial H}$ espace de dimension finie approximant l'espace des multiplicateurs de Lagrange surfaciques de G . 52

Λ_H espace de dimension finie approximant l'espace des multiplicateurs de Lagrange internes à G . 52

L_{PML} largeur des PML . 137

L_x longueur du domaine Ω selon l'axe x . 34

L_y longueur du domaine Ω selon l'axe y . 34

MD dynamique moléculaire. 56

m_k masse du grain k . 38

μ fonction test du multiplicateur de Lagrange λ_G . 43

μ_∂ fonction test du multiplicateur de Lagrange $\lambda_{\partial G}$. 43

N nombre de dimensions du domaine. 36, 39

- $N_{\partial_{\min}}$ nombre de points minimum à utiliser pour discrétiser la frontière des grains. 50, 82
- N_g nombre de grains. 33
- \mathbf{n}_Γ vecteur unitaire normal sortant de la frontière Γ . 38
- \mathbf{n}_k vecteur unitaire normal sortant de la frontière ∂G_k . 33
- N_λ nombre de points utilisés pour discrétiser une longueur d'onde. 48
- N_t nombre de pas de discrétisation temporelle. 53
- Ω domaine contenant l'ensemble du système : fluide et grains réunis. 33, 34
- $\Omega \setminus G$ domaine contenant le fluide. 33
- ω_s pulsation de la source. 67
- P champ de pression. 34
- p variation du champ de pression autour de la pression moyenne. 35, 39
- P_{0h} élément de Lagrange d'ordre 0 constant par morceaux. 50
- P_{1h} élément de Lagrange d'ordre 1 continu par morceaux. 51
- P_{1h}^+ élément de Lagrange d'ordre 1 continu par morceau enrichi d'une fonction bulle. 78
- FPD** principe fondamental de la dynamique. 20, 33, 34, 38, 39, 56
- Π domaine des PML. 138
- PML** *Perfectly Matched Layer*. 26, 136
- q fonction test de la variation du champ de pression acoustique. 37
- \mathbb{Q}_h espace de dimension finie approximant l'espace de variation des champs pression dans le domaine Ω . 51
- \mathbb{Q}'_h espace de dimension finie approximant l'espace de variation des champs pression dans le domaine Π . 138
- r variation du champ de pression adjointe au champ p dans les PML. 137
- ρ champ de masse volumique. 34
- ρ_0 masse volumique du fluide. 34
- ρ_g masse volumique du matériau qui compose les grains. 34
- R_k rayon du grain k . 34
- RT_{0h} élément de Raviart-Thomas. 50, 78
- R_{th} coefficient de réflexion théorique pour les *PML*. 137

- s_c fonction définissant le signal source continu. 65
 σ_d section efficace de diffusion. 69
 S_{\max} amplitude maximale de la source. 65
 \mathcal{T}_{G_H} triangulation du domaine G . 48, 52
 \mathcal{T}_{Π_h} triangulation du domaine Π . 138
 \mathcal{T}_{Ω_h} triangulation du domaine Ω . 48
 \mathbf{u} champ de vitesse acoustique. 34, 35
 \mathbf{U}_k vitesse du grain k . 38
UMFPACK *unsymmetric multifrontal sparse LU factorization package*. 56
 \mathbf{v} fonction test du champ de vitesse acoustique. 37
 \mathbb{V}_h espace de dimension finie approximant l'espace du champ de vitesse dans le domaine Ω . 51
 \mathbf{V}_k fonction test de la vitesse du grain k . 39
 \mathbb{V}'_h espace de dimension fini approximant l'espace du champ de vitesse dans le domaine Π . 138
 \mathbf{w} champ de vitesse adjoint au champ \mathbf{u} dans les PML. 137
 \mathbb{W}_G espace combiné des variations pour le domaine G avec la contrainte de mouvement d'un corps rigide. 42
 $\tilde{\mathbb{W}}_G$ espace combiné des variations pour le domaine G . 41
 \mathbb{W} espace combiné des variations pour le domaine Ω avec la contrainte de mouvement d'un corps rigide. 42
 $\tilde{\mathbb{W}}_{\Omega \setminus G}$ espace combiné des variations pour le domaine $\Omega \setminus G$. 40
 \mathbf{X}_k position du grain k . 55, 57

Table des figures

1.1	Schéma de l'interpénétration de deux particules avec la méthode de dynamique moléculaire (ou modèle de sphères molles). $\hat{\mathbf{n}}$ et $\hat{\mathbf{t}}$ sont les vecteurs unitaires du référentiel de la collision et δ la distance d'interpénétration.	21
1.2	Maillage d'un disque par la méthode des différences finies. Le contour rouge en marches d'escalier représente la discrétisation du disque bleu en pointillés. Les points de calcul se situent aux intersections des droites grises.	23
1.3	Maillage d'un disque par la méthode des éléments finis.	25
1.4	Maillage d'un disque par la méthode des domaines fictifs. Le maillage gris est totalement indépendant du maillage rouge.	27
1.5	Maillage d'un disque par la méthode des domaines fictifs basée sur les multiplicateurs de Lagrange distribués : un maillage régulier (en vert) et l'autre non structuré (en pourpre).	29
2.1	Schéma du système avec les différents ensembles	34
3.1	Maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} (a) où sont définies les variables physiques et le maillage non structuré \mathcal{T}_{G_H} (b) supportant les multiplicateurs de Lagrange. La figure (c) représente la superposition de ces deux maillages tels qu'ils sont utilisés par la méthode des domaines fictifs.	49
3.2	Élément fini triangulaire K (isocèle rectangle de hauteur h) avec les degrés de liberté du champ de vitesse \mathbf{u} et de la variation du champ de pression p pour l'élément fini mixte P_1-P_0	52
3.3	Organigramme simplifié de l'algorithme basé sur la méthode de décomposition d'opérateurs	54
4.1	Schéma de l'expérience numérique d'un grain soumis à une onde plane	66

- 4.2 Solution analytique des rapports de sections efficaces de diffusion lors de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide fixe. La courbe bleue du milieu représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ rétrodiffusé et celui diffusé vers l'avant du grain en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente. La courbe verte du bas représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ transverse et le champ longitudinal. En haut figurent cinq diagrammes de directivité du module de la fonction de forme pris pour cinq longueurs d'onde adimensionnées spécifiques (ronds blancs sur les courbes). Un diagramme de directivité est une représentation graphique en coordonnées polaires de l'amplitude de la solution en fonction de l'angle d'observation. 70
- 4.3 Solution numérique des champs de pression total (a) et incident (b) à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain fixe. L'onde incidente est orientée du haut vers le bas (selon l'axe $-y$) et le signal qui la génère est défini par la fonction $s_c(t)$ d'amplitude maximale $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$ et de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{a} = \pi$. . . 71
- 4.4 Solution numérique du champ de pression réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain fixe. Les surfaces rouges correspondent à une valeur de champ de pression positive, blanches à une valeur nulle et bleues à une valeur négative; la luminosité est inversement proportionnelle à la valeur du champ de pression. 72
- 4.5 Solution numérique du champ de vitesse réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain fixe. Les surfaces rouges correspondent à une valeur de champ de pression positive, blanches à une valeur nulle et bleues à une valeur négative; la luminosité est inversement proportionnelle à la valeur du champ de vitesse. 74
- 4.6 Module du champ de pression réfléchi (a) avec un cercle blanc au pointillé de rayon $r = 20 R$ localisant les données sélectionnées pour tracer le diagramme de directivité du module du champ de pression réfléchi (b). Les diagrammes (c) et (d) sont construits de la même manière pour représenter les modules des composantes du champ de vitesse. 75
- 4.7 Degrés de liberté du champ de vitesse \mathbf{u} et du champ de pression p pour les éléments finis mixtes P_1-P_0 , $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$ 76

4.8 Diagramme de directivité du module des champs de pression réfléchis, numérique et analytique, pour quatre longueurs d'onde adimensionnées $\frac{\lambda}{d}$ différentes et avec l'élément fini mixte P_1-P_0 , lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . 77

4.9 Diagramme de directivité du module des champs de pression réfléchis, numérique et analytique, pour quatre longueurs d'ondes adimensionnées $\frac{\lambda}{d}$ différentes et l'élément fini mixte $RT_0-P_1^+$, lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . 79

4.10 Diagramme de directivité du module des champs de pression réfléchis, numérique et analytique, pour quatre longueurs d'ondes adimensionnées $\frac{\lambda}{d}$ différentes et l'élément fini mixte $P_1-P_1^+$, lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . 81

4.11 Schéma des positions successives adoptées par le centre du grain \mathbf{X}_1 par rapport au maillage en vue de calculer l'erreur liée à la position . . 82

4.12 Diagramme de directivité de l'erreur du module du champ de pression réfléchi numérique selon la position du maillage \mathcal{T}_{GH} par rapport au maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} , pour les éléments finis mixtes $RT_0-P_1^+$ et $P_1-P_1^+$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide fixe. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . La longueur d'onde adimensionnée vaut $\frac{\lambda}{d} = \pi$ et le rapport de maillages est fixé à $\kappa = 1,15$ pour cette expérience. 83

4.13 Diagramme de directivité de l'erreur du module du champ de pression réfléchi numérique selon la position du maillage \mathcal{T}_{GH} par rapport au maillage régulier \mathcal{T}_{Ω_h} en fonction du nombre de points utilisés pour discrétiser la frontière du grain. Les valeurs du champ de pression sont celles prises à une distance $r = 10R$ du centre du grain \mathbf{X} . La longueur d'onde adimensionnée vaut $\frac{\lambda}{d} = \pi$ et le rapport de maillages est fixé à $\kappa = 1,15$ pour cette expérience. L'élément fini est l'élément $P^1-P_1^+$ 84

5.1 Schéma des deux configurations utilisées dans le chapitre 5. Les deux grains sont reliés à leur propre ressort de raideur k_g . Le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta\mathbf{Y}_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché 88

5.2 Solutions numériques de la position par rapport à l'équilibre et de la vitesse du grain $k = 1$ en fonction du temps lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort virtuel dirigé selon l'axe \mathbf{y} et de raideur $k_g = 10 \text{ GN/m}$ 90

5.3	Solution numérique du champ de pression à l'instant $t = 25 \mu\text{s}$ lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort de raideur $k_g = 10 \text{ GN/m}$	91
5.4	Solution numérique du champ de vitesse réfléchi à l'instant $t = 25 \mu\text{s}$ lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort dirigé selon l'axe y et de raideur $k_g = 10 \text{ GN/m}$	92
5.5	Répartition de l'énergie dans le système au cours du temps lors de l'oscillation d'un grain relié à un ressort de raideur $k = 10 \text{ GN/m}$. L'énergie totale (a) est divisée en énergie mécanique (b) et énergie acoustique (c), elles-mêmes composées d'énergies cinétique et potentielle. La courbe en tirets noirs délimite l'énergie du grain (au dessus) et l'énergie du fluide (en dessous). La droite verticale au pointillé noir représente l'instant où le front d'onde franchit les <i>PML</i>	93
5.6	Solutions numériques de la position et de la vitesse des grains $k = 1$ et $k = 2$ en fonction du temps lors de l'oscillation de ces grains reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ séparés d'une distance $1d$. Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché	95
5.7	Champ de pression à l'instant $t = 4,3 \mu\text{s}$ lors de l'oscillation de deux grains reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ séparés d'une distance $1d$. Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché .	95
5.8	Champ de vitesse à l'instant $t = 4,3 \mu\text{s}$ lors de l'oscillation de deux grains reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ et séparés d'une distance $1d$. Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché .	96
5.9	Répartition de l'énergie dans le système au cours du temps lors de l'oscillation de deux grain reliés à leur propre ressort de raideur $k = 105 \text{ GN/m}$ et immergés dans de l'eau ($\rho_0 = 1\,000 \text{ kg/m}^3$, $c_0 = 1\,500 \text{ m/s}$). Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché. L'énergie totale est décomposé en énergie acoustique et en énergies mécaniques pour chacun des grains $k = 1$ et $k = 2$	97
5.10	Répartition de l'énergie dans le système au cours du temps lors de l'oscillation de deux grain reliés à leur propre ressort de raideur $k = 10 \text{ GN/m}$ dans de l'air ($\rho_0 = 1,2 \text{ kg/m}^3$, $c_0 = 340 \text{ m/s}$). Seul le grain $k = 1$ est initialement décalé de la position d'équilibre du ressort de $\Delta Y_1(t = 0) = 1 \text{ nm}$ avant d'être lâché. L'énergie totale est décomposé en énergie acoustique et en énergies mécaniques pour chacun des grains $k = 1$ et $k = 2$ L'énergie mécanique du grain $k = 2$ est ici quasiment nulle de l'ordre de $0,000\,1\%$ de l'énergie totale à l'instant $t = 18 \mu\text{s}$. . .	98

6.1 Solution analytique du rapport de vitesses $\frac{U_1}{u_0}$ en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ pour les rapports de masse volumique $\frac{\rho_0}{\rho_g} = \{1; 0,8; 0,6; 0,4; 0,2\}$. U_1 est le module de la vitesse complexe du grain et u_0 l'amplitude du champ de vitesse de l'onde incidente. La courbe verte correspond à un résultat proche du rapport de masses volumiques entre l'eau et le verre. 105

6.2 Solution analytique du déphasage η entre la vitesse complexe du grain et le champ de vitesse incident en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ pour les rapports de masse volumique $\frac{\rho_0}{\rho_g} = \{1; 0,8; 0,6; 0,4; 0,2\}$ 105

6.3 Solution analytique des rapports de sections efficaces de diffusion lors de la diffraction d'une onde plane par un disque rigide mobile. La courbe bleue du milieu représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ rétrodiffusé et celui diffusé vers l'avant du grain en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente. La courbe verte du bas représente le rapport de sections efficaces de diffusion entre le champ transverse et le champ longitudinal. En haut figurent cinq diagrammes de directivité du module de la fonction de forme pris pour cinq longueurs d'onde adimensionnées spécifiques (ronds blancs sur les courbes). 106

6.4 Solution numérique du champ de pression réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain mobile. L'onde incidente est orientée du haut vers le bas (selon l'axe $-\mathbf{y}$) et le signal qui la génère est défini par la fonction $s_c(t)$ d'amplitude maximale $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$ et de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = \pi$ 108

6.5 Solution numérique du champ de vitesse réfléchi à l'instant $t = 54 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain mobile. 109

6.6 Solutions numériques de la position par rapport à l'instant initiale et de la vitesse du grain en fonction du temps quand il est soumis à une onde plane de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = \pi$ 110

6.7 Solutions numérique et analytique des champs de pression et de vitesse réfléchis à l'instant $t = 6,7 \mu\text{s}$ lors de la diffraction d'une onde plane par un grain rigide mobile. L'onde incidente est orientée du haut vers le bas (selon l'axe $-\mathbf{y}$) et le signal qui la génère est défini par la fonction $s_c(t)$ d'amplitude maximale $S_{\text{max}} = 1 \text{ Pa}$ et de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = 1$ 112

6.8 Vitesse du grain en fonction du temps pour plusieurs pas de discrétisation temporel lors de la diffraction d'une onde plane, de longueur d'onde adimensionnée $\frac{\lambda}{d} = 1$, par un grain rigide mobile 113

6.9	Schéma de la configuration d'enregistrement des oscillations d'un grain soumis à une onde plane. La distance entre le grain et les bords périodiques et la même que celle entre le grain et la source.	114
6.10	Comparaison des composantes selon \mathbf{y} de la valeur du champ de vitesse à l'emplacement du grain (mais en l'absence de celui-ci) $u_{y,0}$ et de la vitesse du grain $U_{y,1}$ pour deux longueurs d'ondes adimensionnées de l'onde incidente.	115
6.11	Solutions numérique et analytique du rapport de vitesses $\frac{\ \mathbf{U}_1\ }{\ \mathbf{u}_0\ }$ en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ et pour $\rho_g = 2\,400\text{ kg/m}^3$, $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$. \mathbf{U}_1 représente la vitesse du grain et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain mais en l'absence de celui-ci.	116
6.12	Ajustement analytique du rapport de vitesses $\frac{\ \mathbf{U}_1\ }{\ \mathbf{u}_0\ }$ en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ et pour $\rho_g = 2\,400\text{ kg/m}^3$, $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$ et $R = 1\text{ mm}$. \mathbf{U}_1 représente la vitesse du grain et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain mais en l'absence de celui-ci. r est ici le coefficient de corrélation entre les données numériques et l'ajustement analytique.	117
6.13	Solutions numérique et analytique du déphasage entre la vitesse du grain \mathbf{U}_1 et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain (mais en l'absence de celui-ci) en fonction de la longueur d'onde adimensionnée de l'onde incidente $\frac{\lambda}{d}$ et pour $\rho_g = 2\,400\text{ kg/m}^3$, $\rho_0 = 1\,000\text{ kg/m}^3$	118
6.14	Solutions numérique et analytique du rapport de vitesses $\frac{\ \mathbf{U}_1\ }{\ \mathbf{u}_0\ }$ en fonction du rapport de masses volumiques $\frac{\rho_0}{\rho_g}$ et pour $\frac{\lambda}{d} = 21$. \mathbf{U}_1 représente la vitesse du grain et \mathbf{u}_0 le champ de vitesse à l'emplacement du grain mais en l'absence de celui-ci.	119
6.15	Fonctions coûts J_U et J_η associées respectivement au rapport de vitesses $\frac{\ \mathbf{U}_1\ }{\ \mathbf{u}_0\ }$ et au déphasage η en fonction du rapport de maillages κ . Les courbes au pointillé joignant les points sont des splines pour faciliter la lecture du graphique.	120
7.1	Positions des grains dans la suspension et triangulation du domaine régulier et du domaine fictif	124
7.2	Impulsion gaussienne : représentation graphique de la fonction $s_{i,4}$ en fonction du temps (a) et carré de la transformée de Fourier discrète du signal en fonction de la fréquence (b). La fréquence où $(\hat{s}_{i,4})^2$ est maximale est la fréquence centrale f_c	125

7.3	Propagation d'une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150\text{kHz}$ dans un suspension granulaire à l'instant $t = 20\mu\text{s}$. La figure (a) montre le champ de pression acoustique, la figure (b) les positions, vitesses (dont la valeur est proportionnelle à la longueur des flèches rouges) et accélérations (en niveau de gris) de chaque grain et la figure (b) la norme du champ de vitesse.	127
7.4	Propagation d'une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150\text{kHz}$ dans un suspension granulaire à l'instant $t = 25\mu\text{s}$	128
7.5	Propagation d'une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150\text{kHz}$ dans un suspension granulaire à l'instant $t = 30\mu\text{s}$	129
7.6	Propagation d'une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 150\text{kHz}$ dans un suspension granulaire à l'instant $t = 35\mu\text{s}$	130
7.7	Propagation d'une impulsion gaussienne de fréquence centrale $f_c = 750\text{kHz}$ dans un suspension granulaire aux instants $t = 7\mu\text{s}$ et $t = 35\mu\text{s}$	132
A.1	Conditions aux limites pour un milieu infini et pour un milieu semi-infini semi-périodique	136
A.2	Triangulation \mathcal{T}_{Π_h} des PML pour une largeur $L_{PML} = 4h$ dans le cas d'un milieu infini	138

Liste des tableaux

6.1	Erreurs relatives sur les champs de pression et de vitesse calculés pour plusieurs discrétisations	III
-----	--	-----

Liste des Algorithmes

1	Méthode de décomposition d'opérateurs de Marchuk	53
2	Schéma semi-implicite d'Euler	55
3	Algorithme de Verlet-vitesses	58
4	Algorithme d'Uzawa de gradient conjugué	60
5	Schéma numérique pour l'équation des ondes avec des <i>PML</i>	139

Résumé

Lorsqu'une onde acoustique se propage dans un milieu granulaire, elle est susceptible de provoquer la mobilité des grains, aussi infime soit-elle. Inversement, la mobilité d'un grain dans une matrice fluide peut induire un champ acoustique et dans les deux cas, l'énergie acoustique peut être transférée à la fois au travers des pores et des contacts entre grains. Nous avons mis au point un modèle original permettant de considérer ces deux modes de transfert d'énergie pour simuler la propagation d'ondes acoustiques dans les milieux granulaires immergés. Dans le cas des milieux granulaires secs, l'inertie du fluide est telle que l'énergie transférée dans l'air peut être négligée et le milieu modélisé avec des algorithmes de type « dynamique moléculaire ». Au contraire, dans le cas de milieux immergés, l'énergie portée par le fluide ne peut pas être négligée et nous montrons que la méthode des domaines fictifs basée sur les multiplicateurs de Lagrange distribués permet de coupler les équations de la dynamique et l'équation d'onde. Nous utilisons la méthode des éléments finis pour propager l'onde dans le fluide, les grains étant modélisés en 2D par des sphères rigides et incompressibles afin de satisfaire les hypothèses de l'algorithme de dynamique moléculaire. Les résultats du modèle sur des expériences numériques simples mais pour lesquelles existent des solutions analytiques de l'acoustique mettent en évidence la validité du nouveau modèle. Nous en donnons une illustration pour l'étude des interactions subies par un empilement réaliste de multiples grains mobiles soumis à un signal acoustique.

Abstract

When an acoustic wave propagates through a granular medium, it causes the grains to move, usually very slightly. In the same way, the movement of a grain embedded in a fluid matrix generates an acoustic wave. In both cases, acoustic energy is transmitted by the fluid and by the inter-granular contacts. We have developed a new numerical model for simulating wave propagation in submerged granular media that takes into account these two modes of energy transport. For the case of dry granular media, the grains are embedded in air whose inertia is so low that the energy it carries can be neglected. These media can be modeled with "Molecular Dynamics" or related methods. On the contrary, when granular media are submerged in water, the energy carried by the fluid cannot be neglected, rendering their modelization much more difficult. We use the fictitious domain method with distributed Lagrange multipliers to couple the equation of motion of the grains to the wave equation of the fluid. We use finite elements to propagate the wave in the fluid, and the grains are modeled in 2D by rigid, incompressible spheres compatible with the hypotheses of Molecular Dynamics. To validate the model, we perform series of numerical experiments whose results are compared to analytic solutions from acoustics. We also perform a simulation with hundreds of grains under an incident wave to demonstrate the possibilities of the model.