

**Université de Montréal**

**Une nouvelle méthode smoothed particle hydrodynamics :  
simulation des interfaces immergées et de la dynamique  
Brownienne des molécules avec des interactions  
hydrodynamiques**

par

**Rodrigue Giselin Kéou Noutcheuwa**

Département de Physique

Faculté des arts et sciences

Thèse présentée à la faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de  
Philosophiæ Doctor (Ph.D.) en Physique

Décembre, 2012

© Rodrigue G. Kéou Noutcheuwa, 2012



**Université de Montréal**

Faculté des études supérieures

Cette thèse intitulée

**Une nouvelle méthode smoothed particle hydrodynamics :  
simulation des interfaces immergées et de la dynamique  
Brownienne des molécules avec des interactions  
hydrodynamiques**

présentée par

**Rodrigue Giselin Kéou Noutcheuwa**

a été évaluée par un jury composée des personnes suivantes :

<i>Président-rapporteur :</i>	Normand Mousseau
<i>Directeur de recherche :</i>	Robert Gwyn Owens
<i>Membre du Jury :</i>	Pierre Bastien
<i>Examineur externe :</i>	Gilles Ausias
<i>Représentant du doyen de la FAS :</i>	Normand Mousseau

Thèse acceptée le :

31 décembre 2012



# Sommaire

Dans cette thèse, nous présentons une nouvelle méthode smoothed particle hydrodynamics (SPH) pour la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles, même en présence des forces singulières. Les termes de sources singulières sont traités d'une manière similaire à celle que l'on retrouve dans la méthode Immersed Boundary (IB) de Peskin (2002) ou de la méthode régularisée de Stokeslets (Cortez, 2001). Dans notre schéma numérique, nous mettons en oeuvre une méthode de projection sans pression de second ordre inspirée de Kim et Moin (1985). Ce schéma évite complètement les difficultés qui peuvent être rencontrées avec la prescription des conditions aux frontières de Neumann sur la pression. Nous présentons deux variantes de cette approche : l'une, Lagrangienne, qui est communément utilisée et l'autre, Eulerienne, car nous considérons simplement que les particules SPH sont des points de quadrature où les propriétés du fluide sont calculées, donc, ces points peuvent être laissés fixes dans le temps.

Notre méthode SPH est d'abord testée à la résolution du problème de Poiseuille bidimensionnel entre deux plaques infinies et nous effectuons une analyse détaillée de l'erreur des calculs. Pour ce problème, les résultats sont similaires autant lorsque les particules SPH sont libres de se déplacer que lorsqu'elles sont fixes.

Nous traitons, par ailleurs, du problème de la dynamique d'une membrane immergée dans un fluide visqueux et incompressible avec notre méthode SPH.

La membrane est représentée par une spline cubique le long de laquelle la tension présente dans la membrane est calculée et transmise au fluide environnant. Les équations de Navier-Stokes, avec une force singulière issue de la membrane sont ensuite résolues pour déterminer la vitesse du fluide dans lequel est immergée la membrane. La vitesse du fluide, ainsi obtenue, est interpolée sur l'interface, afin de déterminer son déplacement. Nous discutons des avantages à maintenir les particules SPH fixes au lieu de les laisser libres de se déplacer.

Nous appliquons ensuite notre méthode SPH à la simulation des écoulements confinés des solutions de polymères non dilués avec une interaction hydrodynamique et des forces d'exclusion de volume. Le point de départ de l'algorithme est le système couplé des équations de Langevin pour les polymères et le solvant (CLEPS) (voir par exemple Oono et Freed (1981) et Öttinger et Rabin (1989)) décrivant, dans le cas présent, les dynamiques microscopiques d'une solution de polymère en écoulement avec une représentation bille-ressort des macromolécules. Des tests numériques de certains écoulements dans des canaux bidimensionnels révèlent que l'utilisation de la méthode de projection d'ordre deux couplée à des points de quadrature SPH fixes conduit à un ordre de convergence de la vitesse qui est de deux et à une convergence d'ordre sensiblement égale à deux pour la pression, pourvu que la solution soit suffisamment lisse. Dans le cas des calculs à grandes échelles pour les altères et pour les chaînes de bille-ressort, un choix approprié du nombre de particules SPH en fonction du nombre des billes  $N$  permet, en l'absence des forces d'exclusion de volume, de montrer que le coût de notre algorithme est d'ordre  $O(N)$ .

Enfin, nous amorçons des calculs tridimensionnels avec notre modèle SPH. Dans cette optique, nous résolvons le problème de l'écoulement de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques parallèles infinies et le problème de l'écoulement de Poiseuille dans une conduite rectangulaire infiniment longue. De plus, nous simulons en dimension trois des écoulements confinés entre deux

plaques infinies des solutions de polymères non diluées avec une interaction hydrodynamique et des forces d'exclusion de volume.

**Mots clés :** smoothed particle hydrodynamics (SPH), écoulement incompressible, méthode de projection, force singulière, membrane immergée, dynamique Brownienne, interactions hydrodynamiques, équations couplées de Langevin, écoulement confiné.



# Summary

In this thesis we develop a new smoothed particle hydrodynamics (SPH) method suitable for solving the incompressible Navier-Stokes equations, even with singular forces. Singular source terms are handled in a manner similar to that in the immersed boundary (IB) method of Peskin (2002) or in the method of regularized Stokeslets (Cortez, 2001). The numerical scheme implements a second-order pressure-free projection method due to Kim and Moin (1985) and completely obviates the difficulties that may be faced in prescribing Neumann pressure boundary conditions. We present two variants of this approach, one Lagrangian which is commonly used and one Eulerian, simply because we consider that the SPH particles are quadrature points on which the fluid properties are calculated, therefore, these points can be kept fixed in time.

The proposed SPH method is first tested on the planar start-up Poiseuille problem and a detailed error analysis is performed. For this problem, the results are similar whether the SPH particles are free to move or fixed on a regular grid.

Our hybrid SPH-IB method is then used to calculate the dynamics of a stretched immersed elastic membrane. The membrane is represented by a cubic spline along which the tension in the membrane is computed and transmitted to the surrounding fluid. The Navier-Stokes equations with singular force due to the membrane are then solved to determine the velocity of the fluid in which the membrane is immersed. The fluid velocity thus obtained is interpolated on the interface, to determine its displacement. We discuss the advantages, in this

problem, of fixing the SPH particles, rather than allowing them to move with the fluid.

A new coupled Brownian dynamics-SPH method for the computation of confined flows of non-dilute polymer solutions with full hydrodynamic interaction and excluded volume forces is next presented. The starting point for the algorithm is the system of coupled Langevin equations for polymer and solvent (CLEPS) (see Oono and Freed (1981) and Öttinger and Rabin (1989), for example) describing, in the present case, the microscopic dynamics of a flowing polymer solution with a bead-spring representation of the macromolecules. Numerical tests of some two-dimensional channel flows reveal that use of a second-order projection scheme coupled with fixed SPH quadrature points leads to second-order velocity convergence and almost second-order pressure convergence, provided that the solution is sufficiently smooth. In the case of large-scale dumbbell and bead-spring chain calculations, an appropriate scaling of the number of grid points as a function of the number of beads  $N$  ensures, in the absence of excluded volume forces, that the cost of our algorithm is  $O(N)$  flops.

Finally, we begin calculations in three dimensions with our SPH model. To this end, we solve in three dimensions the problem of Poiseuille flow between two infinite and parallel plates and the problem of Poiseuille flow in a rectangular infinitely long duct. In addition, we carry out three dimensional computations of confined flows of non-dilute polymer solutions with full hydrodynamic interaction and excluded volume forces.

**Key words** : smoothed particle hydrodynamics (SPH), incompressible flow, projection method, singular force, immersed boundary, Brownian dynamics, hydrodynamic interactions, fluctuating hydrodynamics, coupled Langevin equations, confined flows.

# Table des matières

<b>Sommaire</b>	<b>i</b>
<b>Summary</b>	<b>v</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>xiii</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xxi</b>
<b>Dédicace</b>	<b>xxiii</b>
<b>Remerciements</b>	<b>xxv</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
1.1 Généralités . . . . .	1
1.2 Les méthodes avec maillage . . . . .	2
1.3 Les méthodes sans maillage . . . . .	4
1.4 Smoothed particle hydrodynamics (SPH) . . . . .	5
1.4.1 Les avantages de la méthode SPH . . . . .	6
1.4.2 Les applications de la méthode SPH . . . . .	7
1.4.3 Problématique . . . . .	8
1.5 Objectifs de la thèse . . . . .	11
1.6 Organisation de la thèse . . . . .	12
1.7 Publications . . . . .	15

<b>2</b>	<b>Une nouvelle méthode SPH</b>	<b>17</b>
2.1	Modèles constitutifs des écoulements des fluides visqueux et incompressibles . . . . .	18
2.1.1	Le théorème transport de Reynolds . . . . .	18
2.1.2	La conservation de la masse . . . . .	18
2.1.3	La conservation de la quantité de mouvement . . . . .	19
2.1.4	Les équations de Navier-Stokes . . . . .	21
2.2	Un schéma de projection de second ordre . . . . .	22
2.3	Les formulations SPH . . . . .	25
2.3.1	La fonction et la longueur de lissage . . . . .	26
2.3.2	Erreur de l'approximation intégrale . . . . .	30
2.3.3	Forme discrète de l'approximation intégrale . . . . .	30
2.3.4	Le calcul du Laplacien . . . . .	32
2.4	Les conditions aux frontières . . . . .	37
2.4.1	La méthode des particules répulsives . . . . .	38
2.4.2	Méthode des points de référence et des particules fantômes . . . . .	39
2.4.3	Méthode des particules images . . . . .	41
2.5	La recherche des voisins . . . . .	44
2.6	Discrétisation des équations de projection . . . . .	46
2.6.1	La méthode PSPH-Lagrangienne (LPSPH) . . . . .	46
2.6.2	La méthode PSPH-Eulerienne (EPSPH) . . . . .	51
2.6.3	Avantages de la méthode EPSPH sur la méthode LPSPH . . . . .	53
2.6.4	Remarques sur la résolutions des équations des méthodes LPSPH et EPSPH . . . . .	55
2.7	Test numérique : écoulement de Poiseuille bidimensionnel . . . . .	57
2.7.1	Résolution analytique . . . . .	57
2.7.2	Résolution numérique . . . . .	59
2.7.3	Résultats obtenus des méthodes EPSPH et LPSPH . . . . .	62

2.8	Conclusion . . . . .	74
<b>3</b>	<b>Dynamique d'une interface immergée</b>	<b>77</b>
3.1	Modélisation de l'interface . . . . .	79
3.1.1	La densité de force exercée par l'interface . . . . .	79
3.1.2	Le déplacement de l'interface . . . . .	81
3.1.3	Représentation de l'interface et des forces . . . . .	82
3.2	Forme discrète des équations de l'interface élastique . . . . .	83
3.2.1	Utilisation des splines cubiques . . . . .	83
3.3	Forme discrète des équations de connexion . . . . .	84
3.4	Schéma d'évolution semi-implicite . . . . .	85
3.5	La description du problème . . . . .	87
3.5.1	La configuration de repos . . . . .	87
3.5.2	La configuration quelconque . . . . .	88
3.5.3	La configuration d'équilibre . . . . .	89
3.6	Résultats numériques . . . . .	90
3.6.1	Problème de la membrane stationnaire immergée . . . . .	90
3.6.2	Problème de la membrane non stationnaire immergée . . . . .	98
3.6.3	Résultats de la convergence . . . . .	109
3.7	Conclusion . . . . .	113
<b>4</b>	<b>Simulation des écoulements de suspension de chaînes de bille-haltère dans des géométries confinées avec des interactions hydrodynamiques</b>	<b>117</b>
4.1	Introduction . . . . .	117
4.1.1	Progrès récents . . . . .	120
4.1.2	Description du modèle proposé et la méthode numérique . . . . .	122
4.2	Modèle mathématique . . . . .	127
4.2.1	Équations du mouvement pour des chaînes de bille-ressorts . . . . .	127
4.2.2	Équations du mouvement pour solvant . . . . .	130

## Table des matières

---

4.3	Méthode numérique . . . . .	133
4.3.1	Un schéma de prédicteur-correcteur . . . . .	133
4.3.2	Les équations de Navier-Stokes (4.2.13)-(4.2.14) . . . . .	141
4.4	Résultats numériques . . . . .	144
4.4.1	Précision et ordre de convergence . . . . .	145
4.4.2	Résultats pour $We > 0$ . . . . .	152
4.5	Conclusion . . . . .	162
4.A	Dérivation de l'équation pour une bille (4.2.1). . . . .	166
4.A.1	Vitesse d'un petit cylindre se déplaçant lentement dans un domaine semi-infini à deux dimensions . . . . .	169
4.A.2	Relation entre les coefficients de friction d'entrée et effectif (temps-long) . . . . .	171
4.B	EDS discrète pour une seule particule en équilibre . . . . .	176
<b>5</b>	<b>Simulation en dimension trois</b>	<b>179</b>
5.1	Introduction . . . . .	179
5.2	Écoulement de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques in- finies et dans un canal rectangulaire . . . . .	180
5.2.1	Solutions analytiques . . . . .	180
5.2.2	Résolutions numériques . . . . .	183
5.3	Dynamique de polymères en suspension confinés dans un canal tridimensionnel entre deux plaques infinies . . . . .	188
5.3.1	Travaux effectués avec le canal rectangulaire . . . . .	196
5.4	Conclusion . . . . .	198
5.A	Relation entre les coefficients de friction d'entrée et effectif (temps- long) . . . . .	199
<b>6</b>	<b>Conclusion Générale</b>	<b>203</b>
6.1	Conclusion . . . . .	203

Table des matières

---

6.2 Recherche future . . . . .	207
<b>Bibliographie</b>	<b>211</b>



# Liste des figures

2.1	Gestion des conditions aux frontières par la méthode des points de référence et particules fantômes. . . . .	40
2.2	Gestion des conditions aux frontières par la méthode des particules images. Nous pouvons y voir les particules fluides ou réelles ainsi que leurs images par rapport à la frontière. . . . .	42
2.3	Les voisins d'une particule fluide $i$ : les voisins de la particule fluide sont toutes les particules situées dans un disque de rayon $2h$ et centré en $i$ qui sont étiquetées par $j$ dans la somme de l'équation (2.6.2) ; la particule $i$ est incluse dans cette somme. . . . .	47
2.4	Problème de Poiseuille dans le plan. Comparaison entre la solution exacte (2.7.4) et la solution numérique de la méthode EPSPH de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement. $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $N_x = N_y = 64$ , $h = 1.525\Delta x$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . .	63
2.5	Problème de Poiseuille dans le plan. Évolution de l'erreur en fonction du temps pour le problème de Poiseuille. (A) $h = 1.525\Delta x$ et (B) $h = 3\Delta x$ . $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . . . .	65
2.6	Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse à $t = 1.25 \times 10^{-2}$ en utilisant la méthode EPSPH en fonction du nombre de particules dans la direction $x$ . $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . . . .	67

2.7	Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse obtenue par Bierbrauer et al. [15] à $t = 1.25 \times 10^{-2}$ en fonction du nombre de particules $N_x$ dans la direction $x$ . . . . .	69
2.8	Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse à $t = 1.25 \times 10^{-2}$ en utilisant la méthode LPSPH en fonction du nombre de particules dans la direction $x$ . $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . . . .	70
2.9	Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse à $t = 1.25 \times 10^{-2}$ en utilisant la méthode EPSPH en fonction de la longueur de lissage $h$ . $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . . . .	71
3.1	Interface immergée : courbe lisse et fermée $\Gamma(t)$ . . . . .	79
3.2	Interface immergée : sa représentation discrète $\Gamma(t_n)$ . . . . .	82
3.3	Les configurations initiales, de repos et d'équilibre de la membrane élastique . . . . .	90
3.4	Membrane Hookéenne en équilibre. Coupe de la distribution de la pression $p^{1/2}$ calculée avec la méthode EPSPH le long de (A) $y = 0$ , (B) $x = 0$ , comparée avec les valeurs exactes. $T_0 = 3$ , $\mu = 0.1$ , $\rho = 1$ , $N_x = N_y = 70$ , $N_b = 140$ , $\Delta t = 0.1\Delta x$ , $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ , $h^* = 1.4h$ . . . . .	92

- 3.5 Membrane Hookéenne en équilibre. Évolution de l'erreur absolue moyenne de la pression calculée en se servant de la méthode LPSPH sans réinitialisation des particules fluides ((A)-(B)), méthode LPSPH avec réinitialisation des particules fluides ((C)-(D)) et méthode EPSPH ((E)-(F)). Les résultats montrés sur les figures (A), (C) et (E) ont été calculés avec initialement  $N_x = N_y = 40$ , alors que ceux des figures (B), (D) et (F) ont été calculés avec initialement  $N_x = N_y = 80$ . Pour tous les calculs,  $T_0 = 3$ ,  $\mu = 0.25$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_b = 360$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $2h = 2.25(\Delta x + \Delta y)$ ,  $h^* = 0.5h$ . . . . . 95
- 3.6 Membrane Hookéenne en équilibre. Erreurs absolues moyennes (A)-(B) : la pression et (C)-(D) : la vitesse, calculée avec la méthode EPSPH avec  $N_x = N_y$  pour les membranes fixe et libre. Pour (A) et (C)  $\mu = 0.25$  et pour (B) et (D)  $\mu = 1$ . Dans tous les cas  $T_0 = 3$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_b = 360$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $2h = 2.25(\Delta x + \Delta y)$  et  $h^* = 0.5h$ . . . . . 97
- 3.7 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial  $r_x(t)$  et du petit demi-axe initial  $r_y(t)$ .  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . — : Tan et al. [169], - - : méthode EPSPH . . . . . 99
- 3.8 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial  $r_x(t)$  et du petit demi-axe initial  $r_y(t)$ .  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . — : Tan et al. [169], - - : méthode EPSPH. (A)  $h^* = 1.75h$  et (B)  $h^* = 2.5h$  . . . . . 101
- 3.9 Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  et (B) pression  $p(\mathbf{x}, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 0.2$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . . 102

- 3.10 Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  et (B) pression  $p(\mathbf{x}, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 0.5$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . 103
- 3.11 Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  et (B) pression  $p(\mathbf{x}, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . 104
- 3.12 Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  et (B) pression  $p(\mathbf{x}, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 2$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . 105
- 3.13 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial et du petit demi-axe initial. - - :  $r_x(t)$ , — :  $r_y(t)$  calculés avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . . 106
- 3.14 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial et du petit demi-axe initial. - - :  $r_x(t)$ , — :  $r_y(t)$  calculés avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.025$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . . 107
- 3.15 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial et du petit demi-axe initial. - - :  $r_x(t)$ , — :  $r_y(t)$  calculés avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . . 108

- 3.16 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Distribution des particules fluide et Lagrangienne de la membrane calculée avec la méthode LPSPH aux temps (A)  $t = 0.200$ , (B)  $t = 0.250$ , (C)  $t = 0.275$  et (D)  $t = 0.285$ .  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . . . . . 110
- 3.17 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Conservation de l'aire du fluide contenu dans la membrane en fonction de  $N_x (= N_y)$  aux temps  $t = 1$  et  $2$ , calculée avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 1$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\rho = 1$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $N_b = 360$ ,  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ ,  $2h^* = 0.085$ . . . . . 113
- 3.18 Oscillations d'une membrane Hookéenne. Conservation de l'aire du fluide contenu dans la membrane en fonction de  $h^*$  aux temps  $t = 1$  et  $2$ , calculée avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 1$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\rho = 1$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $N_x = 74$ ,  $N_y = 74$ ,  $N_b = 148$ ,  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ . . . . . 114
- 4.1  $j$ -ième chaîne bille-ressort avec  $N$  billes.  $\mathbf{q}_k^{(j)} := \mathbf{r}_{k+1}^{(j)} - \mathbf{r}_k^{(j)}$  représente le vecteur bout-à-bout du  $k$ -ième ressort. . . . . 129
- 4.2 Graphiques des solutions de (4.4.11)-(4.4.12).  $Re = 1 \times 10^{-2}$ ,  $N_x = N_y = 80$ ,  $t = 1 \times 10^{-3}$ . (a)  $u(x, y, t)$ , (b)  $v(x, y, t)$ , (c)  $p(x, y, t)$ . . . . 153
- 4.3 Graphes log-log des emqs des solutions de (4.4.11)-(4.4.12) calculées sur tout  $(0, 1) \times (-1, 1)$  (courbes supérieures de (A) et (B)) et sur  $(0, 1) \times (-1, 1)$  moins un disque  $\Omega$  de rayon  $2h^* = 0.468$  centré en  $(0.5, 0)$  (courbes inférieures de (A) et (B)). (A) Emq de la vitesse (B) Emq de la pression. . . . . 154

4.4	Écoulement de Poiseuille dans le plan de 2500 haltères avec $We = 20$ . (A) Configurations initiales typiques (distribution uniforme). (B) Haltères après 4000 pas de temps. (C) Trajectoires des centres de masse de 5 haltères arbitrairement choisis pendant 4000 pas de temps. (D) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères après 4000 pas de temps. $Re = 2 \times 10^{-4}$ , $D = 30$ , $L = 10$ , $N_x = 60$ , $N_y = 100$ , $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ . . . . .	156
4.5	Écoulement de Poiseuille dans le plan de 2500 haltères avec $We = 20$ et $We = 30$ . (A) $We = 20$ , haltères après 4000 pas de temps. (B) $We = 30$ , haltères après 4000 pas de temps. (C) $We = 30$ . Trajectoires des centres de masse de 5 haltères arbitrairement choisis pendant 4000 pas de temps. (D) $We = 30$ . Distribution symétrisée des centres de masse des haltères après 4000 pas de temps. $Re = 2 \times 10^{-4}$ , $D = 30$ , $L = 10$ , $N_x = 60$ , $N_y = 100$ , $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ . . . . .	158
4.6	Écoulement de Poiseuille dans le plan avec une chaîne bille-ressort ayant 1000 billes à $We = 20$ et $We = 30$ . (A) Configuration initiale typique de la chaîne. (B) Chaîne après 40000 pas de temps, $We = 20$ . (C) Chaîne après 40000 pas de temps, $We = 30$ . (D) Trajectoires du centre de masse de la chaîne pendant 40000 pas de temps, $We = 20$ et $We = 30$ . $Re = 2 \times 10^{-4}$ , $D = 30$ , $L = 10$ , $N_x = 60$ , $N_y = 100$ , $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ . . . . .	160
4.7	Temps CPU moyen par itération en fonction du nombre de billes sur un ordinateur de bureau de 3.2GHz pour une simulation complète de chaînes de bille-ressort. (A) Maillage SPH fixe. $N_x = 20$ , $N_y = 160$ . (B) graphe log-log avec $N_x = N_y = \sqrt{N}$ . . . . .	163
4.8	○ : vitesse stationnaire $u_L(x(t), 0)$ calculée de (4.2.13)-(4.2.14) dans un canal. La courbe continue est le graphe de $u_L$ à partir de (4.A.24). $D = 1$ , $L = 2, 4, 8$ . . . . .	175

5.1	Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. . . . .	182
5.2	Problème de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies. Solution numérique de la méthode EPSPH de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement au temps adimensionné $t = 0.0125$ . $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $N_x = N_y = 16$ , $N_z = 64$ , $h = 2.001\Delta z$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . . . .	184
5.3	Problème de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies. Comparaison entre la solution exacte (5.2.1) et la solution numérique de la méthode EPSPH de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement. $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ , $N_x = 24$ , $N_y = 16$ , $N_z = 50$ , $h = 2.001\Delta z$ , $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . . . . .	185
5.4	Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. (a) Solution stationnaire exacte. (b) Solution stationnaire approchée au temps adimensionné $t = 0.0125$ . $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.02$ , $h = 1.15(\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$ , $\Delta t = 1.0 \times 10^{-6}$ , $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ . . . . .	187
5.5	Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. Graphe de l'erreur de la vitesse pour deux maillages différents. $h = 1.15(\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$ , $\Delta t = 1.0 \times 10^{-6}$ , $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ . o— : $\Delta x = 0.050$ , $\Delta y = 0.067$ , $\Delta z = 0.033$ , - - : $\Delta x = 0.025$ , $\Delta y = 0.040$ , $\Delta z = 0.025$ , — : $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.020$ . . . . .	188
5.6	Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. Configuration typique initiale des haltères (distribution uniforme). $Re = 2 \times 10^{-4}$ , $H = 10$ , $L = 3$ , $D = 4$ , $N_x = 8$ , $N_y = 10$ , $N_z = 25$ , $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ . . . . .	190

- 5.7 Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. (a) et (c) Trajectoire de 10 haltères choisis de manière aléatoire. (b) et (d) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères. (a)-(b) :  $We = 20$ . (c)-(d) :  $We = 40$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $N_x = 6$ ,  $N_y = 8$ ,  $N_z = 20$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ . 191
- 5.8 Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. (a) et (c) Trajectoire de 10 haltères choisis de manière aléatoire. (b) et (d) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères. (a)-(b) :  $We = 20$ . (c)-(d) :  $We = 40$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $N_x = 8$ ,  $N_y = 10$ ,  $N_z = 25$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ . 193
- 5.9 Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. (a) et (c) Trajectoire de 10 haltères choisis de manière aléatoire. (b) et (d) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères. (a)-(b) :  $\Delta V = 0.01$ . (c)-(d) :  $\Delta V = 0.125$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $We = 20$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ . . . . . 195
- 5.10 Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. (a) Position initiale des tétraèdres dans le canal pour un hémocrite  $Ht = 0.6$  (selon [58]). (b) Position initiale des sphères dans le canal pour un hémocrite  $Ht = 0.4$  (selon [58]). 197
- 5.11  $\circ$  : vitesse stationnaire  $u_L(x(t), l/2, 0)$  calculée de (4.2.13)-(4.2.14) dans un canal. La courbe continue est le graphe de  $u_L$  à partir de (5.A.1).  $D = 1$ ,  $l = 2$ ,  $L = 2, 4, 8$ . . . . . 201

# Liste des tableaux

2.1	Problème de Poiseuille dans le plan. Temps CPU (divisé par $10^5$ ) en secondes en fonction de $h$ et $\Delta x$ pour des calculs sur un intervalle de temps adimensionné $[0, 1.25 \times 10^{-2}]$ . $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . Méthode EPSPH. . . . .	73
2.2	Problème de Poiseuille dans le plan. Temps CPU (divisé par $10^5$ ) en secondes en fonction de $h$ et $\Delta x$ pour des calculs sur un intervalle de temps adimensionné $[0, 1.25 \times 10^{-2}]$ . $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . Méthode LPSPH. . . . .	73
3.1	Oscillations d'une membrane Hookéenne. Erreurs maximales absolues de $p_{N_x}^{n+1/2}$ , $u_{N_x}^{n+1}$ et $v_{N_x}^{n+1}$ à $t = 0.0625$ calculées avec la méthode EPSPH. $T_0 = 1$ , $\mu = 0.05$ , $\Delta t = \Delta x$ , $N_b = 512$ , $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ , $2h^* = 0.085$ . . . . .	112
4.1	Vitesse stationnaire au point $(x(t), 0)$ dans un canal calculée à partir de (4.2.13)-(4.2.14). $D = 1$ , $L = 2, 4, 8$ . $u_\infty$ est calculé à partir de l'équation (4.A.24). $Z_{eff}$ est calculé en se servant de (4.A.21)-(4.A.22). . . . .	174

5.1 Vitesse stationnaire au point  $(x(t), l/2, 0)$  dans un canal calculée à partir de (4.2.13)-(4.2.14).  $D = 1, l = 2, L = 2, 4, 8$ .  $u_\infty$  est calculé à partir de l'équation (5.A.1).  $Z_{eff}$  est calculée en se servant de (4.A.21)-(4.A.22). . . . . 200

# Dédicace

*À mon Seigneur et Sauveur Jésus-Christ  
qui, au courant de l'été 1988 et durant les années qui ont suivi, a radicalement  
transformé ma vie. L'un des résultats étant qu'aujourd'hui, je sois en train de soutenir  
cette thèse.*

*"Everyone who is seriously interested in the pursuit of science becomes convinced that a spirit is  
manifest in the laws of the universe – a spirit vastly superior to man, and one in the face of  
which our modest powers must feel humble"*

Albert Einstein



# Remerciements

Je suis profondément reconnaissant à mon directeur de recherche, Robert G. Owens, de m'avoir introduit dans ce projet de recherche et de m'y avoir patiemment guidé. Son influence sur ma vie va bien au delà de l'encadrement académique qu'il m'a accordé. J'ai été profondément marqué par sa rigueur tant dans le domaine scientifique que dans d'autres aspects de la vie. J'espère vivement en avoir été contaminé. Je le remercie d'avoir toujours été disponible pour me recevoir afin de m'écouter et de discuter avec moi. Les nombreuses heures passées à discuter avec lui ont contribué à allumer en moi la flamme de l'amour pour la recherche.

Je remercie Marc Conti pour les discussions fort intéressantes que nous avons eues lorsqu'il travaillait également sur un problème d'interface immergée. Je dis merci au personnel du service informatique du Centre de Recherche Mathématiques (CRM) et du département de mathématiques de l'Université de Montréal pour leur aide qui m'a permis de mener à bien mes simulations numériques et pour leur patience à mon endroit.

J'adresse mes remerciements à mon épouse, Ethel Kéou, pour son soutien sans faille tout au long de ce projet. Je lui dis merci d'avoir accepté les périodes où j'ai été presque absent à cause de la pression de mes travaux. Je la remercie d'avoir été toujours à mes côtés même lorsqu'il m'est arrivé d'être de mauvaise humeur à cause des défis auxquels je faisais face. Je suis toujours reconnaissant à Dieu de nous avoir mis ensemble ; elle est une grande source de bénédiction

## Remerciements

---

pour moi.

Je remercie nos enfants Janice Ness Kéou et Adonia Salem Kéou pour leur gaieté qui a toujours contribué à alléger les peines de mon cœur. Je leur dis merci d'être des enfants avec qui il est facile de vivre ; cela m'a épargné des soucis qui auraient pu être une grande source de distraction.

Je remercie grandement ma maman, Anne Ngassop, pour son amour et ses sacrifices incessants à mon endroit. N'eût été sa présence à mes côtés pour m'aider à prendre soin des enfants durant ces nombreux mois, il est peu probable que cette thèse aurait été achevée maintenant. Sa contribution à ce travail est très grande ; je lui suis énormément reconnaissant pour cela. Je remercie mon papa, Jean Noutcheuwoué, qui dans mon enfance s'est grandement investi pour que je prenne goût aux études et me rende le plus loin possible ; cette semence a largement porté ses fruits.

Je remercie mon ami, Tafen Denyago, avec qui j'ai beaucoup partagé mes difficultés et qui m'a grandement soutenu. Je remercie madame Thérèse Kamga, son mari et les enfants, pour leur soutien à tous les niveaux et pour les nombreux appels depuis le Cameroun pour m'encourager à aller de l'avant. Merci à mon frère Espoir Tchachua dont le travail intense et la générosité ont toujours été une source de motivation pour moi. Merci à Madame Esther Mbah, dont les conseils m'ont toujours été précieux.

Je remercie Aude Sidoine et Calvin Wuntcha qui ont toujours été à mes côtés et dont l'amitié est une grande source d'équilibre pour moi. À mes bien-aimés frères et sœurs de la CMCI de Montréal, je ne saurais dire combien leur amour et leur soutien spirituel ont été d'une valeur inestimable pour moi. Je ne pourrais citer tous les noms ici, mais je porte dans mon cœur les marques du soutien que chacun d'eux m'a accordées.

Octave Keutiben, Nina Passo, Florence Wekape, Oscar Ngambo et Hortence Tchékane m'ont témoigné leur générosité en acceptant de relire ce travail et je

## Remerciements

---

leur dis merci.

Pour terminer, je dis merci à Dieu de m'avoir accordé la grâce de parvenir à ce niveau avec ce projet. Bien que nous puissions prétendre contrôler quelques aspects de nos vies, beaucoup de choses dans cette existence échappent totalement à notre contrôle. Je remercie le Seigneur d'avoir disposé toute chose dans ma vie et ses affaires, afin que je puisse parvenir à ce stade de la rédaction de cette thèse.



# Chapitre 1

## Introduction

### 1.1 Généralités

L'étude des fluides a, depuis de longues années, fait l'objet d'une attention particulière chez les chercheurs. Au troisième siècle avant Jésus-Christ, Archimède, savant grec, dans son traité de corps flottants, jette les bases de ce qui est appelé aujourd'hui l'hydrostatique. Plusieurs siècles après, notamment au 18e siècle, Daniel Bernoulli et Leonhard Euler établirent, à l'issue de plusieurs travaux expérimentaux, les bases mathématiques de l'étude des écoulements fluides. En 1822, Claude-Louis Navier développa de manière heuristique les équations régissant le comportement d'un fluide visqueux. Quelques années plus tard, George Stokes dériva sur des bases mathématiques solides l'étude des écoulements visqueux. Depuis lors, les chercheurs se sont davantage intéressés à l'étude des fluides afin d'avoir une parfaite maîtrise de leurs propriétés mécaniques et de leurs comportements lorsqu'ils s'écoulent. Ces connaissances permettent de formuler des modèles mathématiques décrivant avec plus de précision ce qui se passe en réalité dans les fluides qui contiennent ou pas des particules ou structures en suspension, ceci afin de mieux les comprendre et d'y

exercer un éventuel contrôle. Des conditions aux limites ainsi que des conditions initiales doivent être formulées à la suite des modèles mathématiques mis sur pied afin de déterminer des variables d'intérêt dans l'espace et/ou en fonction du temps.

Ces modèles mathématiques sont généralement des équations différentielles dont la résolution, pour des cas très particuliers, aboutit à des solutions analytiques. Pour la grande majorité des cas, la seule issue pour obtenir des solutions est le traitement numérique. Von Neumann et Lax ont été les instigateurs de l'utilisation de l'ordinateur dans la résolution des modèles mathématiques de la mécanique des fluides, Lax [90] a dit d'ailleurs à ce sujet que : "*The impact of computers on mathematics (both applied and pure) is comparable to the roles of telescopes in astronomy and microscopes in biology*". Contrairement aux calculs théoriques qui ne peuvent traiter des problèmes complexes, l'analyse numérique peut traiter de plusieurs processus physiques en même temps. De plus, les processus non linéaires peuvent être plus ou moins facilement abordés par l'analyse numérique.

Afin de résoudre numériquement les équations d'un modèle mathématique défini sur un domaine, la géométrie du domaine du problème à solutionner doit être divisée en composantes discrètes. Le choix de la technique de discrétisation dépend du type de méthode numérique que l'on veut employer pour résoudre le problème d'intérêt. Il existe essentiellement deux types de familles de méthodes numériques pour la résolution des problèmes en mécanique des fluides. À savoir, les méthodes avec maillage et les méthodes sans maillage.

## 1.2 Les méthodes avec maillage

Parmi les méthodes avec maillage, l'on distingue les méthodes avec maillage eulerien et les méthodes avec maillage lagrangien. Dans le sillage des méthodes avec maillage eulerien, l'on retrouve la méthode des volumes finis et la méthode

des différences finies qui a été largement utilisée pour la résolution numérique des problèmes en ingénierie et en science. Le principe de la méthode des différences finies est de remplacer les dérivées apparaissant dans le problème continu par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds d'un maillage. Ainsi, la première étape consiste à discrétiser le domaine d'étude par des maillages formés de grilles perpendiculaires. Ces grilles restent fixe dans l'espace, ce qui n'est pas le cas du fluide ou du matériau du domaine de calcul qui est libre de se déplacer à travers les cellules de la grille.

Des méthodes avec maillage lagrangien, la plus utilisée est la méthode des éléments finis. La méthode des éléments finis peut être utilisée dans un contexte eulerien ; cependant, elle est rendue populaire à cause de sa formulation lagrangienne [104, 189]. La méthode des éléments finis consiste, d'une manière générale, à approximer la solution d'une équation différentielle par une combinaison linéaire de fonctions connues. Cette méthode associe deux techniques mathématiques afin d'obtenir une approximation numérique de la solution analytique à des équations différentielles à savoir, la méthode des résidus pondérés qui permet de transformer le problème aux dérivées partielles en une forme intégrale ; et une technique d'approximation polynomiale de la solution recherchée du type nodal où les inconnues sont les valeurs de la fonction en des points bien définis appelés nœuds. La forme intégrale obtenue de la méthode des résidus pondérés, est évaluée élément par élément. Les bornes d'intégration de chaque intégrale correspondent aux frontières de l'élément. Plusieurs variantes de la méthode des résidus pondérés existent de nos jours. Les plus utilisées sont : la méthode de collocation, la méthode par sous-domaine, la méthode des moindres carrés et la méthode de Galerkin. Dans la formulation lagrangienne de la méthode des éléments finis, le maillage est fixé sur le fluide ou sur le matériau du domaine de calcul et se déplace donc avec celui-ci. Ainsi, le maillage se déforme avec le matériau

et il est plus facile de suivre une frontière et une interface en mouvement. Afin d'en apprendre davantage sur les méthodes numériques avec maillage, le lecteur est encouragé à consulter les références [3, 189]. À ce jour, les méthodes numériques avec maillage ont été les plus utilisées [106] et sont encore les méthodes qui prédominent dans les simulations numériques des problèmes pratiques en ingénierie et en science. Les articles [43, 93, 94, 136, 141, 165, 171, 172, 178] sont quelques exemples d'utilisation des méthodes avec maillage pour la résolution numérique des problèmes.

Malgré leur popularité, les méthodes numériques avec maillage présentent quelques difficultés dans plusieurs aspects qui limitent leur application à la résolution de plusieurs types de problèmes compliqués. Lorsque la géométrie du domaine de calcul est irrégulière ou complexe, il n'est pas du tout évident de construire avec ces méthodes un maillage approprié qui prend en compte toutes les irrégularités du domaine [106, 189]. La plupart des approches qui existent pour contourner cette difficulté exige des transformations mathématiques complexes qui peuvent parfois être plus coûteuses que résoudre le problème lui-même [103, 106]. Les méthodes numériques avec maillage rencontrent des difficultés énormes lorsqu'il faut solutionner les problèmes qui font intervenir des surfaces libres, des frontières déformables et des déformations extrêmement prononcées [102, 106].

### **1.3 Les méthodes sans maillage**

Afin de contourner ou alors de trouver une solution aux difficultés rencontrées avec les méthodes numériques avec maillage, la communauté scientifique s'est de plus en plus penchée sur le développement des méthodes numériques sans maillage. L'idée principale des méthodes sans maillage est de se servir de nœuds ou de particules organisées arbitrairement et n'ayant aucune connection

entre eux comme c'est le cas avec les méthodes avec maillage. Ces nœuds ou particules peuvent permettre de donner des solutions précises et numériquement stables aux équations de la dynamique des fluides quelles que soient les conditions aux frontières imposées.

À ce jour, il existe plusieurs méthodes numériques sans maillage parmi lesquelles nous pouvons citer, entre autres, diffuse element method (DEM), element free Galerkin (EFG) method, reproduced kernel particle (RKPM) method, meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) method, point interpolation method (PIM), fluid particle model et smoothed particle hydrodynamics (SPH). Les références [12, 73, 95, 101, 133] donnent assez de détails sur l'histoire, le développement, la théorie et les applications de ces méthodes numériques sans maillage. Certaines caractéristiques sont communes à toutes ces méthodes sans maillage ; cependant, elles présentent des différences dans leur processus d'approximation et de mise en œuvre.

Parmi toutes les méthodes sans maillage, nous nous sommes intéressés à une méthode unique dans les simulations de la dynamique de fluide, à savoir la méthode smoothed particle hydrodynamics (SPH). C'est une méthode sans maillage qui utilise des particules.

### **1.4 Smoothed particle hydrodynamics (SPH)**

La méthode smoothed particle hydrodynamics (SPH) permet d'obtenir numériquement la solution des équations de la dynamique des fluides en remplaçant le fluide par un ensemble de particules. Elle est sans maillage et est basée sur une formulation lagrangienne. Elle fut mise au point en 1977 par Gingold et Monaghan [53] et indépendamment la même année par Lucy [111]. La motivation pour la création de cette méthode est venue du besoin de résoudre les problèmes complexes que les méthodes dites eulériennes, comme la méthode des différences fi-

nies, la méthode des éléments finis ou la méthode des volumes finis avaient du mal à résoudre comme nous l'avons mentionné plus haut.

### 1.4.1 Les avantages de la méthode SPH

Plusieurs avantages sont liés à l'utilisation de la méthode SPH pour la résolution des problèmes en physique ou en mathématiques appliquées. Son utilisation n'est pas confinée à une géométrie particulière du système de calcul ; elle est facilement utilisable pour des géométries complexes en dimension 2 ou 3. Les problèmes avec frontières libres que l'on rencontre en astrophysique sont simples et naturels avec la méthode SPH, ce qui n'est pas le cas des méthodes avec maillage. Parce que la méthode SPH est une méthode sans maillage ou grille, elle permet de traiter beaucoup plus aisément, comparée aux autres méthodes, les problèmes qui font intervenir des déformations importantes que l'on rencontre dans les problèmes d'explosion, d'impact à grande vitesse et de pénétration. Avec la méthode SPH, il est simple de permettre aux frontières de se mouvoir ou se déformer. La modélisation de l'interaction de plusieurs phases d'un fluide limité par une surface libre se fait également plus facilement. Ainsi, les problèmes d'interface peuvent être plus faciles à traiter avec la méthode SPH qu'avec la méthode des différences finies. Par ailleurs, pour les problèmes dont l'objet d'intérêt n'est pas continu, comme l'interaction de plusieurs étoiles en astrophysique, il est pratique de concentrer les calculs dans les régions où se situent les étoiles. Le choix de la méthode SPH est idéal pour ce type de problème, car elle permet de gagner en mémoire et en temps de calcul. L'on rencontre également ce type de problèmes en nano et bio ingénierie. Enfin, il est plus facile d'implémenter numériquement la méthode SPH et l'extension en dimension trois se fait beaucoup plus aisément qu'avec les méthodes avec maillage. De plus, l'ajout d'autres processus physiques à un code implémenté avec la méthode SPH se fait

avec aisance.

### 1.4.2 Les applications de la méthode SPH

Au départ, c'était dans le but de simuler les phénomènes astrophysiques [120] qui font intervenir des variations très importantes de la densité ainsi que des géométries complexes et non symétriques que la méthode SPH a été introduite. C'est par la suite que son efficacité à pallier les difficultés rencontrées par les méthodes avec maillage, telles que décrites ci-dessus, a été explorée avec un très grand succès. Depuis son invention, elle a été étudiée et appliquée à plusieurs domaines parmi lesquels l'on peut citer les écoulements multi-phases [25, 68, 124], les écoulements avec surface libre [6, 159], les impacts et les explosions [108, 126], les écoulements viscoélastiques [38, 44] et même en mécanique du solide [34, 112]. Plusieurs autres domaines d'application de la méthode SPH sont décrites dans les récentes études approfondies menées par Cleary et al. [24] et Monaghan [123]. Cependant, on retrouve dans la littérature scientifique un grand nombre d'exemples de la méthode SPH testés sur des problèmes qui traditionnellement ont été résolus avec succès avec les méthodes avec maillages. Par exemple, la méthode SPH a été utilisée pour la simulation des écoulements autour des cylindres droits et d'autres corps [37, 65, 92, 168], l'écoulement de Poiseuille et de Hagen-Poiseuille [15, 65, 129, 134, 162], l'écoulement de Couette [15, 129, 134] et l'écoulement dans une cavité avec couvercle en mouvement ("lid-driven cavity flow") [19, 92, 184]. Ainsi, le champ d'application de la méthode SPH à la résolution des problèmes en physique et en mathématiques appliquées s'accroît d'année en année. Nos travaux ont permis d'étendre davantage ce champ d'application, car c'est la première fois à notre connaissance, que la méthode SPH est utilisée pour résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles avec une distribution de forces singulières.

### 1.4.3 Problématique

Afin de simuler la dynamique des fluides incompressibles, le défi consiste à s'assurer que l'équation de continuité est bien satisfaite. Pour y parvenir, la méthode SPH traditionnelle, encore appelée Weakly Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics "WCSPH"[32], que l'on retrouve dans les articles [5, 32, 53, 123, 119, 120, 127] par exemple, suppose que le fluide est légèrement compressible. Dans cette condition, la densité du fluide (ou encore de chaque particule fluide) est calculée au cours de chaque pas de temps. Le moyen le plus souvent adopté pour approximer l'incompressibilité du fluide est d'utiliser une équation d'état qui relie la pression à la densité volumique. Bien que cette équation d'état puisse avoir plusieurs formes (voir les articles mentionnés ci-dessus); l'élément essentiel est que le module de la vitesse du son utilisé dans cette équation doit être assez faible pour être pratique, mais être assez élevé pour maintenir la densité approximativement constante au cours de chaque pas de temps [15]. L'utilisation d'un module de la vitesse du son élevé entraîne une condition de Courant-Friedrich-Lewy (CFL) très sévère sur le pas de temps pour les calculs [32, 44, 65, 92, 129, 184]. Cette condition de quasi incompressibilité introduit certainement des erreurs qui proviennent des fluctuations de densité qui peuvent conduire à des oscillations importantes de la pression [92, 184]. Ces fluctuations peuvent entraîner de l'instabilité numérique. Par ailleurs, pour les problèmes dont la pression est le paramètre d'intérêt, les résultats obtenus seront probablement corrompus à cause des fluctuations de la densité. De plus, la compressibilité artificielle peut entraîner des problèmes avec la réflexion des ondes sonores aux frontières du domaine de calcul [32, 159]. Un traitement exact de l'incompressibilité doit prendre en compte la contrainte cinématique sur la vitesse qui veut que sa divergence soit nulle [32].

Dans le souci de résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles sur

les maillages eulériens, les approches habituellement utilisées font usage d'une méthode de projection qui est un schéma à pas fractionnaire pour imposer la condition d'incompressibilité dans les calculs. La méthode de projection a été introduite en 1968 par Chorin [22] et a été largement appliquée à la méthode des différences finies [141, 178]. Cette approche a été pour la première fois appliquée à la méthode SPH en 1999 par Cummins et Rudman [32] qui lui ont donné le nom de Projection Smoothed Particle Hydrodynamics (PSPH), nom que nous allons adopter dans notre travail. Lee et al. [92] ont mis sur pied une méthode SPH incompressible dont ils se sont servis pour résoudre les problèmes d'écoulement autour d'un cylindre carré, d'écoulement dans une cavité avec couvercle en mouvement et le problème de rupture de barrage. Ils ont trouvé que pour tous ces problèmes, leur méthode SPH incompressible donnait des profils de vitesse et de pression plus lisses qu'avec la méthode WCSPH. En outre, le temps CPU qu'ils ont obtenu avec leur méthode SPH incompressible était de 2 à 20 fois inférieur au temps obtenu avec la méthode WCSPH. Brown et al. [18], Guermond et al. [56], Hosseini et Feng [65] ainsi que d'autres auteurs ont souligné l'existence d'un problème important avec l'application des conditions de Neumann aux frontières pour la pression utilisée dans plusieurs schémas de projection pour la correction de la pression que l'on retrouve dans les travaux, par exemple de Cummins et Rudman [32] et Lee et al. [92]. Typiquement, des conditions aux frontières de Neumann nulles sont imposées à l'équation de Poisson satisfaite par la pression. Cependant, dans plusieurs situations d'écoulement comme, pour des problèmes ayant des frontières ouvertes, ou pour des écoulements autour des obstacles ou dans un canal ayant une section variable, la composante normale de la pression n'est pas nulle sur la frontière. Ainsi, ce choix de conditions aux frontières conduit à des couches numériques aux frontières qui a comme conséquence l'imprécision des calculs. Hosseini et Feng [65] ont évité ce problème en utilisant le schéma de projection rotationnelle de Timmermans et al. [173] et ont imposé

une condition de Neumann non-homogène sur la pression qui a été démontrée qu'elle est compatible avec l'équation de la quantité de mouvement linéaire.

Les problèmes qui nuisent sérieusement à la précision et à la stabilité des simulations avec SPH, dues au regroupement des particules, (distribution non isotrope), ont été bien documentés dans la littérature scientifique (voir par exemple, [43, 68, 184]). Lorsque le milieu ou la matière d'intérêt subit une contrainte d'extension (étirement), le mouvement des particules devient instable, ce qui a pour conséquence de pousser les particules SPH à former des grumeaux. Ce comportement peut à terme conduire à l'explosion des calculs. Monaghan [122] a démontré que l'instabilité d'extension ("tensile instability") présente dans les méthodes SPH va entraîner un regroupement non physique des particules. Il a démontré comment cette instabilité pouvait être retirée en utilisant une contrainte artificielle. L'idée principale de cette contrainte artificielle est d'introduire une force de répulsion de faible portée entre des paires de particules voisines pour les empêcher de trop se rapprocher lorsque les deux particules sont dans un état de contrainte d'extension qui tend à favoriser une attraction plus ou moins intense entre elles. Hu et Adams [69, 70] ont géré le problème de regroupement des particules dans leur méthode de projection pour SPH en corrigeant la position des particules avec une méthode itérative non-linéaire. Chaniotis et al. [19] ont remédié au problème du désordre des particules en réinitialisant de manière périodique les particules SPH sur un maillage uniforme et en interpolant les propriétés des particules précédentes sur la position des nouvelles particules. Xu et al. [184] ont appliqué l'idée du changement de la position des particules. Cette idée avait été proposée dans le contexte de la méthode du volume fini par Nestor et al. [132]. Les auteurs de [184] ont légèrement déplacé les particules des lignes de courant et se sont servis de développement en série de Taylor pour corriger les variables hydrodynamiques. Les résultats qu'ils ont obtenus pour les champs de pression ne contenaient plus d'oscillations non physiques pour toutes les va-

leurs du nombre de Reynolds. Des résultats similaires pouvaient tout aussi bien être obtenus avec la stratégie de réinitialisation de Chaniotis et al [19].

## 1.5 Objectifs de la thèse

La motivation de notre travail est de proposer une approche modifiée de la méthode PSPH introduite par Cummins et Rudman [32] appropriée à la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles avec des forces singulières. Contrairement à eux, qui utilisent une méthode explicite pour le calcul de la vitesse intermédiaire dans la première étape de la méthode de projection, nous utilisons une méthode implicite pour le calcul de la vitesse intermédiaire qui, comme nous le savons, est plus stable. De plus, nous ne résolvons pas un problème de Poisson sur la pression dans le second pas de la méthode de projection comme ils le font, ainsi que plusieurs autres auteurs [57, 98, 158]. Nous résolvons plutôt un problème de Poisson sur une fonction scalaire qui permet à la fin d'un pas de temps de calcul de trouver la vitesse et la pression du fluide. Cette approche est adaptée de la méthode de projection proposée par Kim et Moin [81] et que Brown et al [18] ont appelée méthode de projection PmIII ; ils ont également démontré qu'elle est d'ordre 2. Nous évitons complètement ainsi le problème lié à l'imposition d'une condition de Neumann homogène sur la pression à la frontière.

Une autre différence importante entre notre méthode de projection SPH et celle des auteurs qui proposent des corrections à la position des particules afin d'éviter le regroupement des particules [19, 65, 68, 69, 184] est que nous introduisons la notion de particules SPH fixes. Puisque les particules fluides SPH peuvent simplement être considérées comme des points de quadrature qui permettent de déterminer les paramètres du fluide, il nous est venu l'idée de leur donner un comportement eulérien, c'est-à-dire que ces particules restent fixes

dans le temps. Pour une certaine classe de problèmes, en particulier, ceux qui font intervenir des forces singulières, cette approche a un certain nombre d'avantages comme nous le verrons dans la suite de notre travail. Pour les problèmes que nous avons résolus et que nous allons présenter ici, la réinitialisation périodique comme dans [19], n'offre aucun avantage.

Lorsque nous utiliserons la méthode de projection appliquée à SPH avec les particules fluides mobiles, nous parlerons de la méthode de *Projection Smoothed Particle Hydrodynamics Lagrangienne* "LPSPH ". Et lorsque nous utiliserons la méthode de projection appliquée à SPH avec les particules fluides fixes, nous parlerons de la méthode de *Projection Smoothed Particle Hydrodynamics Eulérienne* "EPSPH ".

## 1.6 Organisation de la thèse

Cette thèse présente une nouvelle méthode SPH ainsi que les applications que nous en avons fait. La suite est organisée de la manière suivante :

Dans le **Chapitre 2**, nous allons dans un premier temps obtenir, sans entrer dans les détails, les équations qui modélisent la dynamique d'un fluide visqueux et incompressible qui est notre champ d'intérêt. Ces équations décrivent comment la vitesse, la pression et la densité d'un fluide en mouvement sont reliées. Ces équations ont été obtenues indépendamment par G. G. Stokes en Angleterre et M. Navier en France au début des années 1800. Elles sont une extension des équations d'Euler, car elles font intervenir les effets de la viscosité sur l'écoulement du fluide. Pour le type de problèmes que nous voulons résoudre, il n'est pas possible d'obtenir les solutions analytiques des équations de Navier-Stokes, à l'exception des écoulements simples de Couette et de Poiseuille. Pour cette raison, il nous faut donner une expression discrète de ces équations que nous allons résoudre numériquement sur ordinateur. Pour cela, nous allons présen-

ter le schéma de discrétisation temporelle dont nous avons fait mention dans la section précédente. Et par la suite, nous décrirons de manière détaillée la discrétisation SPH de la méthode de projection PmIII. Nous allons ensuite appliquer notre méthode SPH à la résolution du problème de l'écoulement simple de Poiseuille. Nous comparons les profils de vitesse que nous obtenons avec la solution exacte. La précision et l'ordre de convergence de nos calculs sont comparés avec ceux de Bierbrauer et al. [15].

Dans le **chapitre 3**, nous nous intéressons aux problèmes d'interface qui ont plusieurs applications dans le domaine de la dynamique des fluides. Dans plusieurs problèmes d'écoulement de fluide en ingénierie et en mathématiques appliquées, le fluide est séparé en plusieurs régions par des frontières ou des interfaces. Dans certains cas, les interfaces exercent une force sur le fluide. Comme exemple de ce cas, nous pouvons citer les problèmes rencontrés dans les systèmes de biofluides. À titre illustratif, on a la dynamique de l'écoulement sanguin à travers les valves cardiaques ; la valve (ici l'interface) exerce une force sur le sang (le fluide) et se déplace simultanément avec la vitesse locale du fluide. Cette formulation du problème a été abordée, entre autres, par Meisner et al. [116] et par Peskin [141, 142]. En physiologie cardiovasculaire, l'on peut retrouver comme applications, l'agrégation plaquettaire pendant la coagulation du sang [50, 183] et la déformation des globules rouges dans un écoulement cisailé [36]. Le problème d'interface est également rencontré dans le domaine de la locomotion aquatique [29, 63, 188] et le vol des insectes [117, 118]. Nous allons appliquer notre méthode SPH à la simulation de la dynamique d'une membrane élastique sous tension et immergée dans un fluide visqueux et incompressible. La membrane est Hookéenne et exerce le long de sa courbe une force singulière sur le fluide environnant. Nous allons présenter de manière détaillée toutes les équations qui vont permettre au final de simuler le comportement de la membrane. Et enfin, nous présenterons les résultats que nous avons obtenus de nos calculs.

Le **chapitre 4** porte sur l'application de notre méthode SPH à la simulation de la dynamique Brownienne d'un écoulement confiné des solutions non diluées de polymères avec interaction hydrodynamique et des forces d'exclusion de volume. Dans une grande variété d'applications allant de la transformation des polymères et la rhéologie à la génétique, le comportement dynamique des solutions de polymères confinées dans des petits canaux pendant l'écoulement est d'une importance considérable. Plusieurs de ces applications impliquent directement l'écoulement ou l'électrophorèse de gouttelettes en suspension, des particules ou de longues chaînes de polymères de molécules. La récente émergence des appareils microfluidiques comme les outils d'analyse biochimique a conduit à un intérêt renouvelé à la physique des polymères confinés. Nous nous sommes intéressés au phénomène de migration des polymères des parois de confinement vers le centre de l'écoulement. Le point de départ de notre algorithme est le système couplé des équations de Langevin pour le polymère et le solvant (Coupled Langevin equations for polymer and solvent (CLEPS), voir Oono et Freed (1981) et Öttinger et Rabin (1989), par exemple), qui décrit, dans le cas présent, les dynamiques microscopiques d'une solution de polymère s'écoulant avec une représentation bille-ressort des macromolécules. La manière dont les forces sur les billes sont transmises au fluide est d'une importance cruciale pour le succès de notre schéma numérique. Nous adoptons une approche qui n'est pas sans rappeler la méthode de Stokeslets régularisés (Cortez, 2001). Nous présenterons toutes les équations du modèle de polymère de même que les résultats que nous avons obtenus de nos simulations numériques.

Contrairement à tout ce que nous aurons fait jusqu'ici qui sont des calculs effectués en dimension deux, nous nous intéressons dans le **chapitre 5** à faire des calculs en dimension trois avec notre méthode SPH. Dans un premier temps, nous allons faire le calcul de l'écoulement cisailé simple de Poiseuille entre deux plaques infinies en dimension trois. Nous allons comparer les résultats numé-

riques avec les résultats analytiques. Nous allons également résoudre numériquement le problème de Poiseuille simple dans un canal parallélépipédique. Nous allons aussi comparer les résultats numériques avec la solution analytique à l'état stationnaire. Ensuite, nous allons appliquer notre méthode SPH à la simulation de la dynamique Brownienne d'un écoulement confiné des solutions non diluées de polymères avec interaction hydrodynamique et des forces d'exclusion de volume entre deux plaques infinies en dimension trois. Ceci est une généralisation tridimensionnelle du problème que nous avons abordé dans le chapitre 4.

Enfin, nous présentons dans le **chapitre 6** une conclusion générale et faisons mention d'idées pour la suite des travaux de recherche.

## 1.7 Publications

Le travail présenté dans cette thèse a conduit à la publication de deux articles scientifiques, à savoir,

1. R. K. Noutcheuwa and R. G. Owens, A new incompressible smoothed particle hydrodynamics-immersed boundary method, *Int. J. Numer. Anal. Mod. B* 3 (2012) 126-167.
2. R. K. Noutcheuwa and R. G. Owens, A mixed Brownian dynamics - SPH method for the simulation of flows of suspensions of bead-spring chains in confined geometries with hydrodynamic interaction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 166 (2011) 1327-1346.



## Chapitre 2

# Une nouvelle méthode SPH

Dans ce chapitre, nous allons nous étendre sur une présentation détaillée des formulations SPH que nous avons mises sur pied, à savoir la méthode de projection SPH Lagrangienne (LPSPH) et la méthode de projection SPH Eulérienne (EPSPH). Dans un premier temps, nous allons présenter les équations qui régissent la dynamique des fluides que nous allons utiliser tout au long de notre travail, à savoir les équations de Navier-Stokes. Afin de pouvoir résoudre numériquement ces équations, nous allons présenter leur discrétisation temporelle qui est une méthode de projection. Par la suite, après avoir présenté les idées de base de la méthode SPH fondées sur la théorie d'interpolation, nous allons rigoureusement obtenir la forme discrète des équations de projection desquelles nous ferons ressortir les schémas LPSPH et EPSPH. Nous allons également nous attarder sur des aspects techniques de l'implémentation numérique, à savoir les conditions aux frontières et le déplacement des particules fluides pour le schéma LPSPH. Pour terminer, nous allons présenter nos résultats pour le problème de l'écoulement de Poiseuille en comparaison avec la solution exacte. La précision et l'ordre de convergence de nos schémas SPH seront comparés avec ceux de Bierbrauer et al [15].

## 2.1 Modèles constitutifs des écoulements des fluides visqueux et incompressibles

Les modèles mathématiques qui décrivent les écoulements des fluides ont pour objectif de décrire qualitativement et quantitativement les propriétés des fluides pour mieux les connaître et apporter des solutions à des problèmes qui font intervenir ces fluides. La plupart des modèles sont basés sur les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Avant de présenter ces équations, nous allons énoncer un théorème dont nous allons nous servir pour les obtenir.

### 2.1.1 Le théorème transport de Reynolds

Il stipule que si  $V(t)$  est un *volume matériel*<sup>1</sup>, et  $F(\mathbf{x}, t)$  est une fonction scalaire, vectorielle ou tensorielle quelconque, alors,

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} F dV = \int_{V(t)} \left( \frac{DF}{Dt} + F \nabla \cdot \mathbf{u} \right) dV, \quad (2.1.1)$$

où  $\mathbf{u}$  est la vitesse du fluide et  $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla$  est la dérivée matérielle ou lagrangienne définie comme étant la dérivée obtenue en suivant l'élément de fluide dans son déplacement.

### 2.1.2 La conservation de la masse

La masse de fluide qui occupe un volume matériel  $V(t)$  est  $\int_{V(t)} \rho dV$  où  $\rho$  est la densité du fluide. Le théorème de transport de Reynolds nous permet donc d'écrire :

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = \int_{V(t)} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) dV. \quad (2.1.2)$$

---

<sup>1</sup>volume déformable et constant qui suit l'écoulement

En vertu de la conservation de la masse,

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho dV = 0, \quad (2.1.3)$$

d'où,

$$\int_{V(t)} \left( \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} \right) dV = 0. \quad (2.1.4)$$

Puisque cette dernière relation est vraie pour tout volume fermé  $V$  et la fonction à intégrer est continue, nous avons :

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.1.5)$$

Pour un fluide incompressible ( $\frac{D\rho}{Dt} = 0$ )<sup>2</sup>, on arrive à la conclusion suivante :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (2.1.6)$$

### 2.1.3 La conservation de la quantité de mouvement

Considérons notre volume matériel  $V(t)$  ayant pour frontière  $S(t)$  avec comme vecteur normal unitaire  $\mathbf{n}$ .

Pour un fluide quelconque, la force totale exercée sur  $S(t)$  par le fluide extérieur à  $V(t)$  est  $\int_{S(t)} \mathbf{S}_n dS$ ,  $\mathbf{S}_n$  étant le vecteur des contraintes agissant sur  $S(t)$ . La quantité de mouvement de ce volume matériel est  $\int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV$  où  $\mathbf{u}$  est sa vitesse.

En prenant en compte la contribution de toute autre force par unité de masse notée  $\mathbf{F}$  (la gravité, par exemple), la conservation de la quantité de mouvement nous permet d'écrire que :

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV = \int_{S(t)} \mathbf{S}_n dS + \int_{V(t)} \rho \mathbf{F} dV. \quad (2.1.7)$$

---

<sup>2</sup> $\rho$  est une constante quand on suit la particule dans son déplacement

Cette relation équivaut à :

$$\frac{d}{dt} \int_{V(t)} \rho \mathbf{u} dV = \int_{S(t)} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{V(t)} \rho \mathbf{F} dV, \quad (2.1.8)$$

où  $\boldsymbol{\sigma}$  est le tenseur des contraintes associé au vecteur des contraintes  $S_n$ .

L'utilisation du théorème de transport de Reynolds et celui de la divergence nous permet d'obtenir pour un fluide incompressible,

$$\int_{V(t)} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} dV = \int_{V(t)} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} dV + \int_{V(t)} \rho \mathbf{F} dV; \quad (2.1.9)$$

cela est identique à :

$$\int_{V(t)} \left( \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{F} \right) dV = 0. \quad (2.1.10)$$

Puisque le choix du volume est arbitraire et la fonction à intégrer est continue, nous avons :

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{F}. \quad (2.1.11)$$

La décomposition de  $\boldsymbol{\sigma}$  donne,

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}, \quad (2.1.12)$$

où  $p$  est la pression,  $\mathbf{I}$  est le tenseur identité et  $\boldsymbol{\tau}$  est le tenseur des extra-tensions ou le déviateur des contraintes qui est associé à la viscosité du fluide. Les équations (2.1.6) et (2.1.11) sont communément utilisées pour modéliser l'écoulement des fluides incompressibles. À ces équations, il faut ajouter une équation qui relie le tenseur des extra-tensions au taux de déformation des éléments de fluides. Une telle équation est appelée *équation constitutive* qui ne prend donc pas en compte les effets non mécaniques sur le tenseur des contraintes.

Pour un fluide homogène à viscosité constante, l'hypothèse de linéarité entre

$\boldsymbol{\tau}$  et  $\nabla \mathbf{u}$  ainsi qu'une relation isotrope entre le tenseur des extra-contraintes et les gradients de la vitesse permettent de conclure que [1] :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \dot{\boldsymbol{\gamma}}, \quad (2.1.13)$$

où  $\mu$  est la viscosité et  $\dot{\boldsymbol{\gamma}} = \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T$  est le tenseur des taux de déformations. On dit alors que le fluide est newtonien. Les références [11, 72, 88, 145] peuvent être consultées pour avoir davantage d'informations sur la dérivation des équations de la dynamique des fluides, des discussions détaillées sur la physique de ces équations ainsi que leurs analyses mathématiques.

#### 2.1.4 Les équations de Navier-Stokes

En résumé de ce que nous venons de voir, les équations qui régissent la dynamique d'un fluide newtonien, visqueux et incompressible dans un domaine de dimension  $d$ ,  $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ , encore appelées équations de Navier-Stokes sont :

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \quad \text{à l'intérieur de } \Omega, \quad (2.1.14)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \text{à l'intérieur de } \Omega, \quad (2.1.15)$$

et nous allons considérer les conditions aux frontières de Dirichlet et les conditions initiales suivantes :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_b, \quad \text{sur } \partial\Omega \text{ (la frontière de } \Omega), \quad (2.1.16)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0. \quad (2.1.17)$$

Tout au long de notre travail, la densité du fluide  $\rho$  et la viscosité  $\mu$  seront des constantes fixes dans  $\Omega$  bien qu'il soit facile avec la méthode SPH de laisser varier ces quantités d'une région matérielle à une autre du fluide. Le terme  $\mathbf{F}$  dans

(2.1.14) prend en compte toutes les forces extérieures qui agissent sur le fluide comme la gravité ou une distribution de force singulière due à une membrane immergée, par exemple.  $\mathbf{u}_b$  dans (2.1.16) est la vitesse du fluide à la frontière du domaine  $\Omega$  et  $\mathbf{u}_0$  est la valeur initiale de  $\mathbf{u}$ .

## 2.2 Un schéma de projection de second ordre

Afin de régler le problème lié à la faible compressibilité du fluide dans la méthode Weakly Compressible Smoothed Particle Hydrodynamics (WCSPH) pour la simulation des écoulements des fluides incompressibles, nous avons choisi d'appliquer la discrétisation SPH au schéma de projection qui prend en compte l'incompressibilité du fluide dans les calculs et dont plusieurs formes existent dans la littérature (voir, par exemple, [18, 32, 56, 109, 159]). Nous avons utilisé dans notre travail une variante de la méthode de projection proposée par Kim et Moin [81] que Brown et al [18] ont appelé méthode de projection PmIII. Dénons par  $\mathbf{F}^n$  la somme de toutes les forces extérieures qui agissent sur le fluide au temps  $t_n = n\Delta t$ ; le schéma de la méthode de projection pour les équations (2.1.14) - (2.1.17) se présente comme suit :

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + ((\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u})^{n+1/2} = \frac{\nu}{2}\nabla^2(\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^*) + \frac{\mathbf{F}^n}{\rho}, \quad \text{à l'intérieur de } \Omega, \quad (2.2.1)$$

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^*|_{\partial\Omega} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_b, \quad (2.2.2)$$

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u}^* = \boldsymbol{\tau} \cdot \left( \mathbf{u}_b + \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \varphi^{n+1} \right) \Big|_{\partial\Omega}, \quad (2.2.3)$$

$$\frac{\Delta t}{\rho} \nabla^2 \varphi^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad \text{à l'intérieur de } \Omega, \quad (2.2.4)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \varphi^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (2.2.5)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \varphi^{n+1}, \quad (2.2.6)$$

où  $\mathbf{u}^*$ ,  $\mathbf{u}^n$ ,  $\mathbf{u}^{n+1}$  sont respectivement, la vitesse intermédiaire, et les évaluations de  $\mathbf{u}$  aux temps  $t_n = n\Delta t$  et  $t_{n+1} = (n+1)\Delta t$ . La dérivée convective qui apparaît à gauche de l'équation (2.2.1) est une approximation d'Adams-Bashforth de second ordre de cette dérivée au pas de temps  $(n+1/2)\Delta t$  :

$$((\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u})^{n+1/2} := \frac{3}{2}((\mathbf{u}^n \cdot \nabla)\mathbf{u}^n) - \frac{1}{2}((\mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla)\mathbf{u}^{n-1}),$$

faisant intervenir les évaluations aux pas de temps  $n\Delta t$  et  $(n-1)\Delta t$ . Bien qu'il soit connu que la méthode d'Adams-Bashforth d'ordre deux est faiblement instable pour des problèmes de convection pure, cela ne devrait pas poser de problème dans le cas présent où notre schéma est pour une simulation de fluide visqueux (voir, par exemple, pages 31-35 de [161]). Nous notons la viscosité cinématique par  $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ .  $\mathbf{n}$  et  $\boldsymbol{\tau}$  sont respectivement le vecteur unitaire normal et tangentiel à la frontière  $\partial\Omega$  de  $\Omega$ .

Nous pouvons voir à travers les équations (2.2.1) - (2.2.6) que la méthode de projection est une forme de discrétisation temporelle de l'équation de la quantité de mouvement (2.1.14) qui permet de découpler, le calcul de la pression et de la vitesse ; au risque de subir une erreur de fractionnement. Ainsi, durant chaque pas de temps, il faut calculer séparément des équations pour obtenir la vitesse et la pression au lieu du système couplé (2.1.14). Le schéma général de cette méthode est le suivant : au début de chaque pas de temps, une vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}^*$  est calculée en utilisant l'équation de la quantité de mouvement et en ignorant la contrainte d'incompressibilité. Ensuite, cette vitesse intermédiaire est projetée dans l'espace des champs vectoriels incompressibles (sans divergence) afin de trouver la vitesse  $\mathbf{u}^{n+1}$  et la pression  $p^{n+1/2}$  à la fin du pas de temps, ceci via une équation de Poisson sur une fonction scalaire qu'il faudra déterminer pendant ce pas de temps.

L'équation (2.2.6) introduite dans l'équation (2.2.1) nous permet d'obtenir :

$$\frac{-1}{\rho} \nabla p^{n+1/2} = \frac{-1}{\rho} \nabla \varphi^{n+1} + \frac{\mu}{2\rho} \Delta t \nabla^2 \left( \frac{1}{\rho} \nabla \varphi^{n+1} \right) \quad (2.2.7)$$

d'où l'équation pour la mise à jour de la pression est,

$$p^{n+1/2} = \varphi^{n+1} - \frac{\mu}{2} \Delta t \nabla^2 \left( \frac{1}{\rho} \varphi^{n+1} \right) + \text{cte}, \quad (2.2.8)$$

ou encore,

$$p^{n+1/2} = \varphi^{n+1} - \frac{\mu}{2} \nabla \cdot \mathbf{u}^* + \text{cte}. \quad (2.2.9)$$

Des conditions de Neumann homogènes (équation (2.2.5)) ont été imposées pour l'approximation de la fonction scalaire  $\varphi^{n+1}$  sur la frontière. Afin de pouvoir faire les calculs, il faut prescrire  $\varphi^{n+1}$  quelque part dans le domaine car la matrice issue des équations (2.2.4) et (2.2.5) est singulière ; nous y revenons à la Section 2.6.4. Ces conditions de Neumann sur  $\varphi^{n+1}$  donnent lieu à des conditions frontières sur  $\mathbf{u}^*$  (voir équations (2.2.2) et (2.2.3)) dans lesquelles  $\nabla \tilde{\varphi}^{n+1}$  est une approximation de  $\nabla \varphi^{n+1}$  sur la frontière. Selon Kim et Moin [81], utiliser  $\nabla \tilde{\varphi}^{n+1} = \nabla \varphi^n$  est une approximation suffisante pour conserver la précision d'ordre 2 du schéma de projection. Par ailleurs, Brown et al. [18] proposent une extrapolation plus précise à partir des valeurs  $\Phi^{n-1}$  et  $\varphi^n$  à savoir,  $\nabla \tilde{\varphi}^{n+1} = 2\nabla \varphi^n - \nabla \varphi^{n-1}$  qui est d'ordre deux mais qui donne des erreurs plus petits. Cependant, cette extrapolation n'a pas été adoptée dans nos travaux.

Notons qu'en prenant le produit scalaire de chaque terme de l'équation (2.2.7) avec un vecteur unitaire normal  $\mathbf{n}$  sur la frontière, nous pouvons obtenir une expression pour  $\partial p^{n+1/2} / \partial n$ . En se servant de (2.2.5)-(2.2.6) et ensuite de (2.2.1),

puis de (2.2.2) nous obtenons,

$$\begin{aligned}
 \nabla p^{n+1/2} \cdot \mathbf{n} &= \nabla \varphi^{n+1} \cdot \mathbf{n} - \frac{\mu \Delta t}{2} \nabla^2 \left( \frac{1}{\rho} \nabla \varphi^{n+1} \right) \cdot \mathbf{n}, \\
 &= -\frac{\mu}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^{n+1}) \cdot \mathbf{n}, \\
 &= \left[ \frac{\mu}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n+1}) - \rho \left( \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} \right) - \rho ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u})^{n+1/2} + \mathbf{F}^n \right] \cdot \mathbf{n}, \\
 &= \left[ \frac{\mu}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n+1}) - \rho \left( \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} \right) - \rho ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u})^{n+1/2} + \mathbf{F}^n \right] \cdot \mathbf{n},
 \end{aligned} \tag{2.2.10}$$

et ceci est cohérent (ou conforme) avec la discrétisation temporelle de l'équation de la quantité de mouvement linéaire. Nous évitons ainsi les fluctuations numériques que l'on observe avec d'autres schémas de projection (voir les discussions dans [18, 56, 65], par exemple).

## 2.3 Les formulations SPH

Dans la méthode SPH, l'état d'un système est représenté par un ensemble de particules qui possèdent des propriétés individuelles et se déplacent selon les équations de conservation qui gouvernent ce système. Elle est une description lagrangienne du mouvement basée sur la notion de particules qui se déplacent en emportant avec elles toutes les informations physiques. Dans un problème donné, toutes les variables et données qui constituent le problème (coordonnées spatiales, vitesses, pression, etc) sont liées et indexées à chacune des particules.

La méthode SPH est essentiellement basée sur la notion d'interpolation intégrale. Cette interpolation commence avec l'identité suivante :

$$f(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{x}', \tag{2.3.1}$$

pour tout domaine  $\Omega$  dans lequel  $f$  est définie et qui contient le point  $\mathbf{x}'$ . Afin que la relation (2.3.1) puisse être utilisée dans les calculs numériques discrets, la valeur approximative  $\langle f(\mathbf{x}) \rangle$  de la fonction  $f$  en un point dans un domaine est donnée par :

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \quad (2.3.2)$$

où la fonction delta a été remplacée par  $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$  qui est un noyau ou une fonction de lissage. Dans ce contexte,  $h$  est la longueur de lissage.

### 2.3.1 La fonction et la longueur de lissage

La fonction de lissage occupe une place importante dans la méthode SPH. Certains auteurs disent que son choix est semblable à l'utilisation de schémas différents dans la méthode des différences finies. Le choix de la fonction de lissage va affecter la précision, l'efficacité et la stabilité de l'algorithme qui en résulte. D'une manière générale, la fonction de lissage est une fonction lisse et continue dont la dérivée première (et habituellement la dérivée seconde) est lisse et continue. Elle a généralement la forme d'une cloche qui permet pour une particule SPH donnée d'étaler ses propriétés vers les particules voisines. Afin d'être une bonne approximation de la fonction delta, la fonction de lissage  $W$  doit satisfaire certaines propriétés à savoir,

1. La condition de normalisation : l'aire ou le volume sous la courbe de la fonction de lissage doit être égale à l'unité.

$$\int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 1. \quad (2.3.3)$$

2. La condition de la fonction delta : lorsque la longueur de lissage  $h$  tend

vers 0, la fonction de lissage devient la fonction delta,

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (2.3.4)$$

3. La propriété de compacité : elle nécessite que la fonction de lissage soit zéro au delà de son support compact,

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = 0 \text{ pour } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| > kh, \quad (2.3.5)$$

pour une certain  $k > 0$ .

4. La fonction de lissage doit être positive à l'intérieur de son support compact,

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) \geq 0 \text{ pour } |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \leq kh. \quad (2.3.6)$$

5. La fonction de lissage encore appelée noyau doit être sphériquement symétrique et paire,

$$W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) = W(-(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), h). \quad (2.3.7)$$

6. Enfin, la fonction de lissage doit décroître assez rapidement à mesure que l'on s'éloigne de la particule centrale  $\mathbf{x}$ .

La forme générale de la fonction de lissage est la suivante,

$$W(r, h) = \frac{\sigma}{h^d} f\left(\frac{r}{h}\right), \quad (2.3.8)$$

où  $\sigma$  est une constante,  $d$  est la dimension du problème et  $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$ . Ce noyau est donc une fonction à support compact. Toute fonction qui satisfait les conditions (2.3.3)-(2.3.7) peut être utilisée comme fonction de lissage. Plusieurs

fonctions sont proposées dans la littérature [38, 52, 107] allant de la gaussienne à la fonction spline de degré 5. Une spline est une fonction définie par morceaux par des polynômes. Dans [52] par exemple, on retrouve une liste de 20 fonctions à support compact pour lesquelles  $k = 2$  pour les propriétés 3 et 4 que nous avons énoncées ci-dessus. Nous avons fait usage dans nos travaux de la fonction spline cubique [15, 44, 123] qui est la moins coûteuse dans la gamme des fonctions splines :

$$W(r, h) = w_0 \begin{cases} \frac{2}{3} - q^2 + \frac{1}{2}q^3, & 0 \leq q < 1; \\ \frac{1}{6}(2 - q)^3, & 1 \leq q < 2; \\ 0, & q \geq 2, \end{cases} \quad (2.3.9)$$

où  $w_0$  vaut respectivement  $\frac{15}{7\pi h^2}$  et  $\frac{3}{2\pi h^3}$  pour les problèmes bidimensionnels et tridimensionnels,  $q = \frac{r}{h}$ ,  $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}'|$  et  $k$  dans (2.3.5) est égal à 2. La longueur de lissage  $h$  contrôle l'étendue de la zone d'une particule SPH donnée. Plus  $h$  est grand, plus la zone d'influence d'une particule SPH donnée est importante et ainsi, un nombre important d'autres particules entre dans sa zone d'influence. Pour un problème donné, la longueur de lissage attribuée aux particules SPH peut être constante, c'est-à-dire être la même pour toutes les particules pendant tout le temps de calcul. Pour les calculs, plusieurs auteurs [5, 24, 31, 44, 123, 162] proposent d'utiliser une relation de proportionnalité entre la longueur de lissage  $2h$  et la distance initiale de séparation entre les particules. Cette relation de proportionnalité peut prendre l'une des formes suivantes :

$$h = k\Delta d, \quad (2.3.10)$$

tel que  $\Delta d = \max(\Delta x, \Delta y)$ ,

$$h = k\Delta d', \quad (2.3.11)$$

tel que  $\Delta d' = \min(\Delta x, \Delta y)$ , ou alors,

$$h = k\left(\frac{\Delta x + \Delta y}{2}\right); \quad (2.3.12)$$

avec  $k \in [1.01, 2]$ . Ceci n'est valable que pour les problèmes pour lesquels il n'apparaît presque pas ou très peu de variation de la densité des particules réelles au cours des calculs dans le domaine de simulation. Nous verrons à la Section 2.7.2 les conditions qui doivent s'appliquer sur  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  et  $h$  pour l'obtention de bonnes précisions dans les calculs.

Pour les problèmes dans lesquels apparaissent des variations importantes de la densité des particules réelles d'une région à une autre dans le domaine de calcul, une longueur de lissage différente doit être attribuée à chaque particule réelle. La longueur de lissage à attribuer à chaque particule réelle doit prendre en compte la densité de particules autour d'elle. Les références [103, 123, 120] donnent plus d'informations sur la procédure à suivre pour l'implémentation des longueurs de lissage variables dans les problèmes qui l'exigent.

### 2.3.2 Erreur de l'approximation intégrale

L'erreur de l'interpolation intégrale (équation(2.3.2)) peut être estimée en utilisant le développement en série de Taylor de  $f(\mathbf{x}')$  autour de  $\mathbf{x}$ . Si  $f$  est dérivable, l'on obtient :

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{x}) \rangle &= \int_{\Omega} \left[ f(\mathbf{x}) + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + O((\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2) \right] W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}', \\ &= f(\mathbf{x}) \int_{\Omega} W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' \\ &\quad + O(h^2). \end{aligned} \tag{2.3.13}$$

En utilisant la propriété (2.3.3) et en observant que  $(\mathbf{x} - \mathbf{x}')W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$  est une fonction impaire de  $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$  si bien que,

$$\int_{\Omega} (\mathbf{x} - \mathbf{x}') W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h) d\mathbf{x}' = 0, \tag{2.3.14}$$

on obtient que,

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = f(\mathbf{x}) + O(h^2). \tag{2.3.15}$$

Ainsi, si l'approximation intégrale (2.3.2), qui est le fondement de la méthode SPH, est évaluée exactement,  $\langle f(\mathbf{x}) \rangle$  est une approximation d'ordre 2 en  $h$  de  $f$ .

### 2.3.3 Forme discrète de l'approximation intégrale

Pour les travaux numériques, il nous faut trouver une forme discrète de l'intégrale (2.3.2). Désignons par  $\mathcal{B}(\mathbf{x}, h)$  un disque (ou une sphère) de rayon  $2h$  centré en  $\mathbf{x}$  qui constitue ainsi le support de la fonction de lissage  $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h)$ . Afin d'appliquer la règle de quadrature typiquement utilisée dans les méthodes SPH pour l'évaluation de l'intégrale du membre de droite de (2.3.2) lorsque  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ , le vecteur position de la  $i$ -ième particule fluide, nous devons assigner à chaque

particule fluide à l'intérieur de  $\mathcal{B}(\mathbf{x}, h)$  un indice  $j$ , une masse  $m_j$  et une densité  $\rho_j$  (égale à la densité du fluide) dans lequel  $j = 1, \dots, N$  et  $N$  est le nombre de particules à l'intérieur de  $\mathcal{B}(\mathbf{x}, h)$ . Ainsi, l'aire ( $d = 2$ ) ou le volume ( $d = 3$ ) attribuée à la  $j$ -ième particule SPH est  $m_j/\rho_j$  et  $\sum_{j=1}^{N_p} m_j/\rho_j = \text{Meas}(\mathcal{D})$ . Ensuite, en désignant par  $f_j$  l'approximation SPH de  $f$  en  $\mathbf{x}_j$  pour  $j = 1, \dots, N$ , nous obtenons l'approximation numérique

$$f_i = \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f_j W_{ij}, \quad (2.3.16)$$

à  $f(\mathbf{x}_i)$  pour laquelle  $W_{ij} = W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$ . Cette relation signifie que la propriété  $f$  (par exemple la densité, la vitesse, etc) de la  $i$ -ième particule est obtenue en faisant la somme de la contribution de toutes les particules présentes dans le domaine  $\mathcal{B}(\mathbf{x}, h)$  qui délimite le support de  $W$  d'après la condition donnée par l'équation (2.3.5).

### Le calcul du gradient

L'approximation de la dérivée spatiale  $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}$  est obtenue en remplaçant  $f(\mathbf{x})$  par  $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}$  dans l'équation (2.3.2). Après intégration par parties, l'application du théorème de la divergence et en supposant que le domaine d'intégration  $\mathcal{B}(\mathbf{x}, h)$  est inclus dans le domaine du problème  $\Omega$ , d'où l'utilisation de la condition (2.3.5) [44, 106], on obtient :

$$\left( \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right)_i = - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f_j \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_j}, \quad (2.3.17)$$

où

$$\frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i} = \left( \frac{\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j}{r} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}, \quad (2.3.18)$$

$r = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2$  étant la distance entre la  $i$ -ième et  $j$ -ième particule.

Pour nos travaux, nous nous sommes servis d'une autre forme de calcul de

la dérivée spatiale en utilisant la dérivée d'une fonction rationnelle. Dans cette approche [26, 32, 106, 120], on va de la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left( \frac{f(\mathbf{x})}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \frac{f(\mathbf{x})}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{x}}, \quad (2.3.19)$$

qui donne,

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \rho \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left( \frac{f(\mathbf{x})}{\rho} \right) + \frac{f(\mathbf{x})}{\rho^2} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{x}} \right]. \quad (2.3.20)$$

Nous utilisons ensuite la formule (2.3.17) pour discrétiser les gradients qui apparaissent dans (2.3.20) pour finalement obtenir,

$$\left( \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right)_i \approx \rho_i \sum_{j=1}^N m_j \left( \frac{f(\mathbf{x}_i)}{\rho_i^2} + \frac{f(\mathbf{x}_j)}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i}, \quad (2.3.21)$$

dans laquelle, nous nous servons du résultat suivant :

$$\frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i} = - \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_j}. \quad (2.3.22)$$

Signalons ici que pour les points qui ont des vecteurs positions  $\mathbf{x}_i$  à une distance inférieure à  $2h$  de la frontière, une attention particulière doit être apportée aux procédures ci-dessus puisqu'une partie de la frontière de  $\mathcal{B}(\mathbf{x}, h)$  se trouve à l'extérieur du domaine d'écoulement  $\Omega$ . Nous y remédions par l'introduction de particules dites fantômes dans une région de profondeur  $2h$  à l'extérieur de la frontière  $\partial\Omega$ . Les détails de cela seront présentés à la section 2.4.

### 2.3.4 Le calcul du Laplacien

Afin de pouvoir discrétiser les termes contenant des dérivées secondes suivant la méthode SPH, nous nous sommes inspirés de la technique proposée par

Viau et al. [181] pour discrétiser le terme de diffusion,

$$\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (Q \nabla T).$$

Exprimé en dimension un, nous avons,

$$\frac{1}{\rho} \left( \frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} + Q \frac{d^2T}{dx^2} \right).$$

Pour trouver la formulation SPH de l'expression ci-dessus, on commence par un développement en série de Taylor de  $T(x')$  et  $Q(x')$  autour de  $x$ , soit :

$$Q(x') = Q(x) + (x' - x) \frac{dQ}{dx} + \frac{1}{2} (x' - x)^2 \frac{d^2Q}{dx^2} + \dots \quad (2.3.23)$$

$$T(x') = T(x) + (x' - x) \frac{dT}{dx} + \frac{1}{2} (x' - x)^2 \frac{d^2T}{dx^2} + \dots \quad (2.3.24)$$

Ces deux dernières équations nous permettent d'obtenir,

$$[Q(x') - Q(x)][T(x') - T(x)] = (x' - x)^2 \frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} + O(x - x')^3, \quad (2.3.25)$$

ce qui nous permet par intégration d'écrire,

$$\int_{x'} \frac{[Q(x') - Q(x)][T(x') - T(x)]}{x' - x} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \approx \int_{x'} (x' - x) \frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx'. \quad (2.3.26)$$

Les dérivées de  $Q$  et  $T$  dans le membre de droite de cette dernière relation, étant évaluées en  $x$  peuvent être sorties de l'intégrale ; et en nous servant de l'équation (2.3.22), nous obtenons,

$$\int_{x'} \frac{[Q(x') - Q(x)][T(x') - T(x)]}{x' - x} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \approx - \frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} \int_{x'} (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x'}(x - x', h) dx'. \quad (2.3.27)$$

Or l'intégrale du membre de droite devient,

$$\begin{aligned} \int_{x'} (x' - x) \frac{\partial W}{\partial x'}(x - x', h) dx' &= (x' - x)W(x - x', h) \Big|_{\partial B(x, h)} - \int_{x'} W(x - x', h) dx' \\ &= -1, \end{aligned} \quad (2.3.28)$$

car  $(x' - x)W \Big|_{\partial B(x, h)} = 0$  et  $\int_{x'} W(x - x', h) dx' = 1$  Ainsi,

$$\frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} = - \int_{x'} \frac{[Q(x') - Q(x)][T(x') - T(x)]}{x - x'} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx'. \quad (2.3.29)$$

Par ailleurs, l'équation (2.3.24) nous donne :

$$\frac{T(x') - T(x)}{x - x'} = -\frac{dT}{dx} + \frac{1}{2}(x - x') \frac{d^2T}{dx^2} + O(x - x')^2 \quad (2.3.30)$$

donc,

$$\begin{aligned} - \int_{x'} \frac{T(x') - T(x)}{x - x'} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' &\approx \int_{x'} \frac{dT}{dx} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{x'} (x - x') \frac{d^2T}{dx^2} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx'. \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

Or,

$$\begin{aligned} \int_{x'} \frac{dT}{dx} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' &= \frac{dT}{dx} \frac{\partial}{\partial x} \int_{x'} W dx' \\ &= \frac{dT}{dx} \frac{\partial}{\partial x} (1) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.3.32)$$

Et comme nous l'avons vu de (2.3.28),

$$\int_{x'} (x - x') \frac{d^2T}{dx^2} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' = -\frac{d^2T}{dx^2};$$

nous obtenons que,

$$\frac{d^2T}{dx^2} = -2 \int_{x'} \frac{T(x') - T(x)}{x - x'} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \quad (2.3.33)$$

soit,

$$Q \frac{d^2T}{dx^2} = -2Q \int_{x'} \frac{T(x') - T(x)}{x - x'} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx'. \quad (2.3.34)$$

De (2.3.29) et (2.3.34), nous obtenons,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \left( \frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} + Q \frac{d^2T}{dx^2} \right) &= -\frac{1}{\rho} \int_{x'} \frac{[Q(x') - Q(x)][T(x') - T(x)]}{x - x'} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx' \\ &\quad - \frac{2}{\rho} Q \int_{x'} \frac{T(x') - T(x)}{x - x'} \frac{\partial W}{\partial x}(x - x', h) dx', \end{aligned} \quad (2.3.35)$$

ce qui nous donne,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_i} \left( \frac{dQ}{dx} \frac{dT}{dx} + Q \frac{d^2T}{dx^2} \right)_i &= -\frac{1}{\rho_i} \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(Q_j - Q_i)(T_j - T_i)}{x_i - x_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} \\ &\quad - \frac{2}{\rho_i} Q_i \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(T_j - T_i)}{x_i - x_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i} \\ &= \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{(Q_j + Q_i)(T_i - T_j)}{x_i - x_j} \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (2.3.36)$$

En une dimension quelconque, nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho_i} (\nabla Q \cdot \nabla T + Q \nabla^2 T)_i &= \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{(Q_i + Q_j)(T_i - T_j)}{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_i} \\ &= \sum_j \frac{m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{(Q_j + Q_i)(T_i - T_j)}{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2^2} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \cdot \nabla_i W_{ij}, \end{aligned} \quad (2.3.37)$$

avec  $\nabla_i \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i}$ .

Cette dernière relation est celle qui a été trouvée par Viau et al. [181]. De celle-

ci, il ressort que,

$$(\nabla \cdot (Q \nabla T))_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{(Q_j + Q_i)}{r^2} T_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} \quad (2.3.38)$$

avec  $T_{ij} = T_i - T_j$ ,  $\mathbf{x}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$  et  $r = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2$ . Remplaçons  $Q$  par 1 et  $T$  par  $\mathbf{u}$ ; nous obtenons :

$$\nabla^2 \mathbf{u} = 2 \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \frac{1}{r^2} \mathbf{u}_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}, \quad (2.3.39)$$

Soit,

$$\left( \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \right)_i = 2 \sum_j \frac{\mu_i m_j}{\rho_i \rho_j} \frac{1}{r^2} \mathbf{u}_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}. \quad (2.3.40)$$

Sachant que la viscosité du fluide est sensiblement constante,  $\mu_i \approx \mu_j$ , on peut écrire  $\mu_i = \frac{\mu_i + \mu_j}{2}$ . De même, la densité du fluide étant constante puisque nous avons affaire à un fluide incompressible,  $\rho_i \approx \rho_j$  alors  $\rho_i \rho_j \approx \frac{(\rho_i + \rho_j)^2}{4}$ .

Ainsi, la relation (2.3.40) devient,

$$\left( \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \right)_i = \sum_j m_j \times \frac{4}{(\rho_i + \rho_j)^2} \times \frac{(\mu_i + \mu_j)}{2} \times \frac{2}{r^2} \mathbf{u}_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}; \quad (2.3.41)$$

de laquelle nous obtenons,

$$\left( \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \right)_i = \sum_j \frac{4 m_j (\mu_i + \mu_j) \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{(\rho_i + \rho_j)^2 (r^2 + \eta^2)} \mathbf{u}_{ij}, \quad (2.3.42)$$

avec  $\mathbf{u}_{ij} = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j$ . Cette dernière relation est la forme discrète proposée par Shao et Lo [109, 159].  $\eta$  est un petit nombre introduit pour maintenir le dénominateur différent de zéro.

Dans l'équation (2.3.38), remplaçons Q par  $\frac{1}{\rho}$  et T par P ; nous obtenons :

$$\begin{aligned} \left( \nabla \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right) \right)_i &= \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left( \frac{1}{\rho_i} + \frac{1}{\rho_j} \right) \frac{1}{r^2} P_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij} \\ &= \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left( \frac{\rho_i + \rho_j}{\rho_i \rho_j} \right) \frac{1}{r^2} P_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \vec{\nabla}_i W_{ij} \end{aligned} \quad (2.3.43)$$

Sachant que le fluide est incompressible,  $\rho_i \approx \rho_j$ , on peut écrire  $\rho_i + \rho_j \approx \frac{4(\rho_i \rho_j)}{\rho_i + \rho_j}$  ; d'où,

$$\left( \nabla \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right) \right)_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} \left( \frac{4}{\rho_i + \rho_j} \right) \frac{P_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{(r^2 + \eta^2)}. \quad (2.3.44)$$

Cette forme de discrétisation est celle qui est proposée par Cummins et Rudman [32]. Si dans cette dernière nous posons  $\rho_j \approx \frac{\rho_i + \rho_j}{2}$  alors nous obtenons :

$$\left( \nabla \left( \frac{1}{\rho} \nabla P \right) \right)_i = \sum_j \frac{8m_j}{(\rho_j + \rho_j)^2} \frac{P_{ij} \mathbf{x}_{ij} \cdot \nabla_i W_{ij}}{(r^2 + \eta^2)} \quad (2.3.45)$$

L'équation (2.3.45) est une forme de discrétisation proposée par Shao et Lo [109, 159].

## 2.4 Les conditions aux frontières

La modélisation des conditions aux limites en SPH pour la résolution des problèmes requiert une attention particulière. En effet, le succès de toute simulation numérique d'un problème défini dans un domaine borné passe par une très bonne gestion des conditions aux frontières du problème. Le problème est un peu délicat ici en ce sens que, l'obtention d'une grandeur physique en un point donné nécessite comme nous l'avons vu, un lissage sur le voisinage de ce point. L'on constate qu'une difficulté se présente pour les points situés près des frontières du problème ainsi que dans les emplacements qui ne présentent pas

assez d'espace pour lisser. Plusieurs possibilités et différentes alternatives sont proposées dans la littérature pour la bonne gestion des conditions aux frontières en SPH. Nous présentons ici trois approches qui sont communément utilisées.

### 2.4.1 La méthode des particules répulsives

Une approche pour la gestion des conditions aux frontières est celle qui consiste à modéliser les parois du domaine avec des particules (*particules frontières*) qui exercent une force répulsive sur les particules du fluide. Une telle force qui a déjà été utilisée dans [121], est celle de Lennard-Jones qui décrit les interactions moléculaires. Un autre modèle de force souvent utilisé est celle proposée par Monaghan [123, 125, 127]. Elle se décrit comme suit : pour une particule  $i$  du fluide, la force totale par unité de masse agissante sur elle est donnée par la relation :

$$\mathbf{f}_i = \sum_k \mathbf{f}_{ik} = \sum_k \frac{m_k}{m_i + m_k} B(x, y) \mathbf{n}_k, \quad (2.4.1)$$

où  $\mathbf{f}_{ik}$  est la force par unité de masse exercée par la  $k$ -ième particule frontière sur la  $i$ -ième particule de fluide.  $\mathbf{n}_k$  est le vecteur unitaire normal localisé sur la particule  $k$ . En considérant que  $y$  est dans la direction normale à la paroi et que  $x$  est dans la direction tangentielle à celle-ci,  $B(x, y)$  est une fonction choisie de manière à s'assurer que  $B$  croisse rapidement lorsque  $y$  tend vers zéro (pour empêcher la pénétration dans la paroi) et la variation suivant  $x$  doit assurer que la force ressentie par une particule qui se déplace parallèlement à la paroi soit toujours une constante.

## 2.4.2 Méthode des points de référence et des particules fantômes

Une autre méthode utilisée pour pallier aux problèmes des conditions aux frontières est la méthode des points de référence et des particules fantômes [44, 129]. Cette approche consiste à créer sur une distance, au moins égale à la longueur de lissage à partir de la paroi, plusieurs lignes de particules dites *fantômes*. L'on crée également dans le domaine de calcul, contenant les particules réelles, une ligne de points dits de *référence* situés à une distance normale à la paroi, comparable à la distance minimale initiale des particules réelles (voir figure 2.1). En chacun de ces points de référence, l'on détermine la vitesse  $\mathbf{u}_r$  du fluide qui lui est associé ; cette vitesse de référence est ensuite utilisée avec la vitesse de la paroi  $\mathbf{u}_b$  par extrapolation linéaire pour obtenir la vitesse  $\mathbf{u}_f$  de chacune des particules fantômes  $f$  qui lui (point de référence donné) sont associées de façon à satisfaire les conditions aux frontières. La vitesse du fluide en un point de référence  $r$  peut être obtenue au moyen de l'interpolation normalisée suivante [44] :

$$\mathbf{u}_r = \frac{\sum_j (m_j / \rho_j) \mathbf{u}_j W_{rj}}{\sum_j (m_j / \rho_j) W_{rj}}, \quad (2.4.2)$$

où la sommation sur  $j$  couvre toutes les particules fluides (particules réelles) voisines. Cependant, contrairement au travail de Fang et al [44], nous avons réalisé que de meilleurs résultats étaient obtenus avec l'ajout des particules frontières dans la sommation sur  $j$  comme nous le verrons par la suite. Si  $d_r$  est la distance du point de référence  $r$  normale à la paroi et  $d_f$  est la distance d'une particule fantôme à la paroi, définie sur la droite normale à cette paroi et passant par le point  $r$ , l'on obtient une vitesse  $\mathbf{u}_f$  de la particule fantôme au moyen d'une fonction

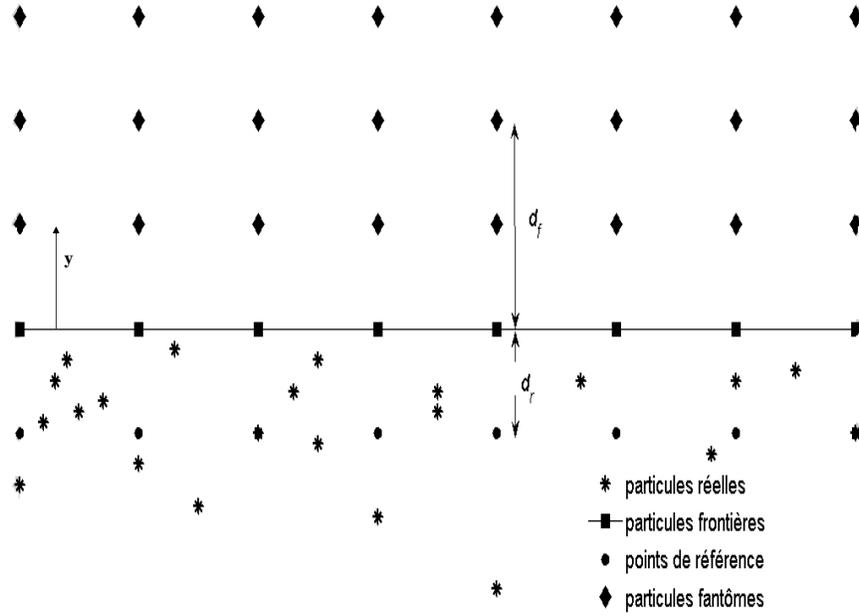


FIG. 2.1: Gestion des conditions aux frontières par la méthode des points de référence et particules fantômes.

d'interpolation linéaire de la forme,

$$\mathbf{F}(y) = \mathbf{a}'y + \mathbf{b}', \quad (2.4.3)$$

qui satisfait aux conditions,

$$\mathbf{F}(-d_r) = \mathbf{u}_r, \quad (2.4.4)$$

$$\mathbf{F}(d_f) = \mathbf{u}_f; \quad (2.4.5)$$

où  $y$  est l'axe orienté vers la particule fantôme  $f$  suivant une direction ortho-

gonale à la paroi ;  $y = 0$  sur cette paroi. Nous obtenons aisément que,

$$\mathbf{a}' = \frac{\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_r}{d_f + d_r}, \quad \text{et} \quad \mathbf{b}' = \frac{d_r \mathbf{u}_f + d_f \mathbf{u}_r}{d_f + d_r}. \quad (2.4.6)$$

Nous voulons que  $\mathbf{F}(0) = \mathbf{u}_b$  alors nous obtenons que,

$$\mathbf{u}_f = \left(1 + \frac{d_f}{d_r}\right) \mathbf{u}_b - \frac{d_f}{d_r} \mathbf{u}_r. \quad (2.4.7)$$

Les points de référence ainsi que les particules fantômes sont créés uniquement au début de la simulation et conservent leur position fixe tout au long, bien qu'ils soient pourvus chacun d'une vitesse. Ajoutons qu'il est tout à fait possible d'effectuer une extrapolation quadratique pour obtenir la vitesse à attribuer aux particules fantômes. Pour cela, il faudrait avoir deux lignes de points de référence contrairement à une seule ligne dans le cas d'une extrapolation linéaire. Il va sans dire que l'extrapolation quadratique ou d'ordre supérieur va exiger l'ajout d'autres fonctions au code et entraîner inévitablement une augmentation du temps de calcul.

### 2.4.3 Méthode des particules images

La méthode des particules images que nous avons adoptée dans nos travaux, pour la bonne gestion des conditions aux frontières, consiste à créer à l'extérieur de la paroi des particules dites *images* [32, 109, 159] qui sont miroirs pour les particules de fluide (*particules réelles*) qui se trouvent une distance au plus égale à  $2h$  de cette paroi. Ainsi pour chaque particule de fluide  $i$  proche d'une frontière, c'est-à-dire que la distance qui la sépare de la paroi est inférieure ou égale à  $2h$ , l'on crée une particule image  $i'$  qui est son image par rapport à cette même paroi (voir la figure 2.2). Chaque particule image porte les mêmes propriétés (masse, densité, viscosité) que la particule dont elle est image. Par contre la vitesse de

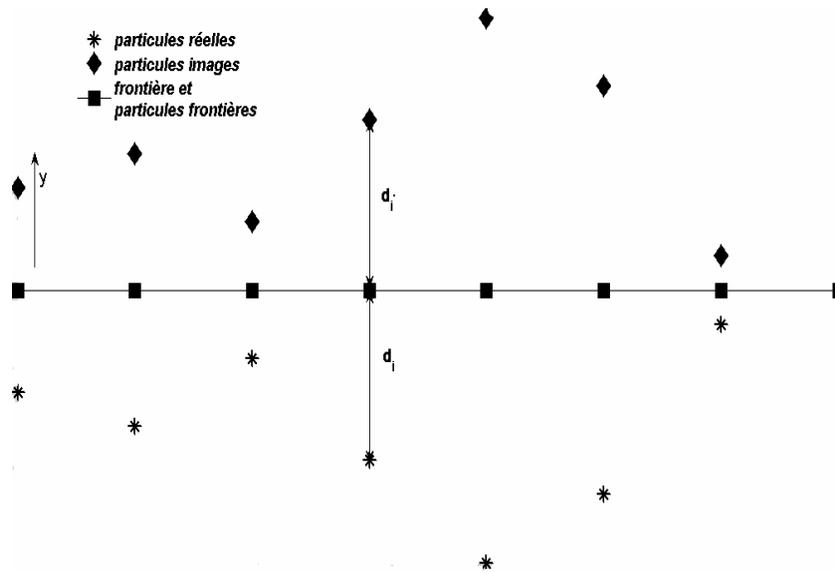


FIG. 2.2: Gestion des conditions aux frontières par la méthode des particules images. Nous pouvons y voir les particules fluides ou réelles ainsi que leurs images par rapport à la frontière.

chaque particule image doit être obtenue en fonction de la vitesse de la particule fluide dont elle est image de façon à satisfaire aux conditions de non glissement et de non pénétration sur la paroi. Pour cela, en considérant que  $y$  est dans la direction normale à la frontière, on effectue une extrapolation linéaire entre la vitesse de la particule fluide  $\mathbf{u}_i$  et la vitesse de la paroi  $\mathbf{u}_b$  au moyen d'une fonction de la forme,

$$\mathbf{F}(y) = \mathbf{a}y + \mathbf{b}, \quad (2.4.8)$$

qui satisfait aux conditions,

$$\mathbf{F}(-d_i) = \mathbf{u}_i, \quad (2.4.9)$$

$$\mathbf{F}(d_{i'}) = \mathbf{u}_{i'}, \quad (2.4.10)$$

où  $y$  est l'axe orienté dans la direction normale à la paroi,  $d_i$  et  $d_{i'}$  sont respectivement la distance de la particule  $i$  et de son image  $i'$  par rapport à la paroi. Nous avons  $y = 0$  sur cette paroi. Nous obtenons aisément que,

$$\mathbf{a} = \frac{\mathbf{u}_{i'} - \mathbf{u}_i}{d_{i'} + d_i}, \quad \text{et} \quad \mathbf{b} = \frac{d_i \mathbf{u}_{i'} + d_{i'} \mathbf{u}_i}{d_{i'} + d_i}. \quad (2.4.11)$$

Nous voulons que  $\mathbf{F}(0) = \mathbf{u}_b$  et, sachant que  $d_i = d_{i'}$  (car les particules  $i$  et  $i'$  sont équidistantes de la paroi), nous obtenons,

$$\mathbf{u}_{i'} = 2\mathbf{u}_b - \mathbf{u}_i \quad (2.4.12)$$

qui est la vitesse associée à chaque particule image connaissant la vitesse de la particule fluide dont elle est issue. De même, pour satisfaire la condition de Neumann homogène (2.2.5)

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \varphi^{n+1} = 0$$

sur la frontière, la valeur  $\varphi_{i'}$  de la particule image est donnée par  $\varphi_{i'} = \varphi_i$ . Les particules images sont créées au début de chaque pas de temps de calcul lorsque l'on utilise la méthode LPSPH au cours de la simulation, car comme nous l'avons dit, elles ne sont que des miroirs des particules réelles par rapport à la frontière. Par contre, ces particules images sont créées une seule fois lorsque l'on utilise la méthode EPSPH.

Signalons ici que Bierbrauer et al. [15] proposent une autre approche dans la gestion des conditions de non glissement aux frontières qui consiste à se servir de l'équation de la quantité de mouvement pour approximer la vitesse à attribuer aux particules images. L'idée principale est de se servir d'une discrétisation de second ordre par la méthode des différences finies des équations de Navier-

Stokes sur la frontière. Leur méthode a montré que la condition aux frontières pour la vitesse était respectée avec une erreur d'ordre quatre en fonction de la distance d'une particule fluide de la frontière, pourvu que cette distance soit suffisamment petite.

Pour ce qui est des frontières ouvertes, nous utilisons les conditions aux limites périodiques dans la direction de l'écoulement. Ainsi, toute particule réelle qui sort d'une extrémité du domaine, rentre par l'autre ; cela assure la non perte de la matière ou masse au cours de la simulation. Aussi, toute particule réelle qui est située à une extrémité du domaine interagit avec les particules réelles situées à l'extrémité opposée. Donc, ce comportement cyclique des conditions de parois périodiques doit absolument être pris en compte dans la résolution des équations d'écoulement.

### 2.5 La recherche des voisins

Étant donné que la fonction de lissage  $W$  est à support compact, seules les particules comprises dans un rayon  $2h$  de la  $i$ -ième particule vont avoir une contribution non nulle dans (par exemple) la somme qui apparaît à l'équation (2.3.16). Il est donc indispensable de trouver une méthode de recherche des voisins qui soit optimale et par conséquent permet d'alléger cette opération. L'approche la plus coûteuse et lourde, mais qui soit simple et naturelle, consiste à balayer, pour chaque particule, toutes les particules (soit  $N$ ) qui constituent le domaine et ne retenir que celles qui sont à une distance au plus égale à  $2h$  par rapport à la particule d'intérêt. Cette approche est de l'ordre de  $O(N^2)$  en temps de calcul. D'autres algorithmes, beaucoup plus rapides, ont été mis sur pied dont certains peuvent être retrouvés dans les références [62], [105], [128], [182] et [187]. Nous allons faire usage d'un algorithme jugé efficace pour des problèmes dans lesquels l'on utilise une longueur de lissage constante. Nous l'appellerons la *mé-*

thode du tri par boîte [5, 103, 119, 78].

L'algorithme du tri par boîte consiste à découper le domaine ou l'espace de travail en grilles de côté de longueur  $2h$ . Rappelons ici que  $2h$  est le rayon de la base du noyau dont nous avons parlé avant. Cette grille, selon le besoin, a une forme rectangulaire ou parallélépipédique. Pour chaque boîte à laquelle on attribue une étiquette  $(i, j, k)$ , on fait une liste de toutes les particules qu'elle contient et on enregistre également le nombre total des particules qu'elle renferme. Signalons ici que cette liste et le nombre total des particules doivent être mis à jour à la fin de chaque pas de temps. Pour chaque particule fluide, l'on repère facilement la boîte à laquelle elle appartient; disons  $(i_0, j_0, k_0)$ . Sachant que la longueur de lissage est de  $2h$ , alors toutes les particules qui contribueront à déterminer les propriétés de la particule d'intérêt se trouvent toutes dans les boîtes voisines, y compris la boîte dans laquelle elle appartient. Ces boîtes sont telles que :

$$i_0 - 1 \leq i \leq i_0 + 1, \quad (2.5.1)$$

$$j_0 - 1 \leq j \leq j_0 + 1, \quad (2.5.2)$$

$$k_0 - 1 \leq k \leq k_0 + 1. \quad (2.5.3)$$

Cette recherche localisée des voisins de chaque particule résulte en un gain considérable du temps de calcul qui est de l'ordre de  $O(N \log N)$ ,  $N$  étant le nombre total des particules fluides. Pour des problèmes qui requièrent la variation de la longueur de lissage pendant un pas de temps de calcul, situations rencontrées lorsque la densité des particules varie grandement d'une région à une autre sur le domaine de calcul, plusieurs auteurs [4, 9, 10, 62, 103, 105, 114, 115, 128] recommandent l'utilisation de l'algorithme dit *en arbre*.

## 2.6 Discrétisation des équations de projection

Fort de ce qui précède, où nous avons vu les éléments fondamentaux de la méthode SPH, nous pouvons maintenant procéder à la discrétisation des équations de projection (2.2.1) à (2.2.9). Nous présenterons de ce fait, nos schémas Lagrangiens et Euleriens de la méthode SPH.

### 2.6.1 La méthode PSPH-Lagrangienne (LPSPH)

Afin de résoudre un problème, faisant intervenir un fluide newtonien, visqueux et incompressible, il faut solutionner les équations issues de la méthode de projection présentée à la Section 2.2. En nous servant des formulations SPH vues ci-dessus, la formulation lagrangienne de l'équation (2.2.1) pour le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}_i^*$  de chaque particule fluide (ou réelle)  $i$  est,

$$\frac{\mathbf{u}_i^* - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 (\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^*) \right]_i + \left[ \frac{\mathbf{F}^n}{\rho} \right]_i. \quad (2.6.1)$$

Nous avons choisi l'équation (2.3.42) pour la forme discrète du Laplacien. L'équation (2.6.1) devient,

$$\frac{\mathbf{u}_i^* - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t} = \sum_j \frac{2m_j(\mu_i + \mu_j)[(\mathbf{u}_i^* - \mathbf{u}_j^*) + (\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_j^n)] \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}}{(\rho_i + \rho_j)^2} + \frac{\mathbf{F}_i^n}{\rho_i}, \quad (2.6.2)$$

$j$  est l'indice donné aux particules situées dans un disque centré en la particule  $i$  et de rayon  $r = \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2$ ; voir la figure (2.3). Les particules  $j$  sont ainsi les particules voisines de la particule  $i$ . Après arrangement de cette dernière équation,

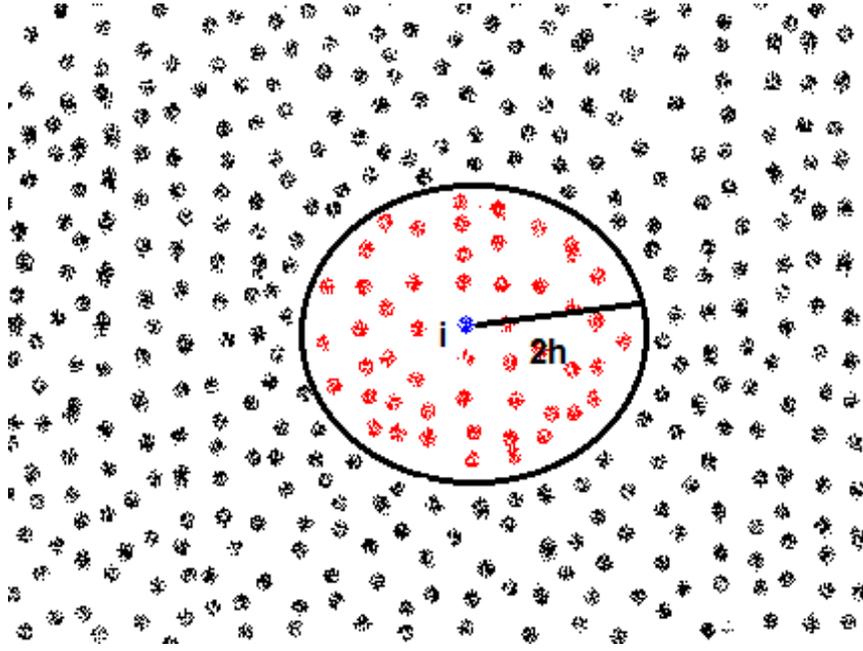


FIG. 2.3: Les voisins d'une particule fluide  $i$  : les voisins de la particule fluide sont toutes les particules situées dans un disque de rayon  $2h$  et centré en  $i$  qui sont étiquetées par  $j$  dans la somme de l'équation (2.6.2) ; la particule  $i$  est incluse dans cette somme.

nous obtenons,

$$(1 - \sum_{j \neq i} a_{ij}) \mathbf{u}_i^* + \sum_{j \neq i} a_{ij} \mathbf{u}_j^* = \mathbf{u}_i^n + \sum_{j \neq i} a_{ij} (\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_j^n) + \Delta t \frac{\mathbf{F}_i^n}{\rho_i}, \quad (2.6.3)$$

avec,

$$a_{ij} = \frac{2\Delta t m_j (\mu_i + \mu_j) \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2}{(\rho_i + \rho_j)^2} \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \quad (2.6.4)$$

Pour la gestion des conditions aux frontières, nous avons utilisé la méthode des *particules images*. Comme nous l'avons vu à la Section 2.4.3, pour une particule réelle  $i$  située proche de la frontière, la vitesse intermédiaire de sa particule image

$i'$ , en nous servant des équations (2.2.2), (2.2.3) et (2.4.12), est donnée par,

$$\mathbf{u}_{i'}^* = 2 \left( \mathbf{u}_b + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial\Omega} \right) - \mathbf{u}_i^*.$$

Des particules dites frontières sont placées sur la frontière solide et se déplacent avec la même vitesse que la frontière. Nous utilisons les conditions aux limites périodiques dans la direction de l'écoulement pour les frontières ouvertes.

En prenant en compte ces conditions aux limites, l'équation (2.6.3) devient,

$$\begin{aligned} & \left( 1 - \sum_{\substack{j \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \right) \mathbf{u}_i^* + \sum_{\substack{j \in \Omega \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \mathbf{u}_j^* + \sum_{\substack{j \in \partial\Omega \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \left( \mathbf{u}_b + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial\Omega} \right) \\ & \quad + \sum_{j \notin \Omega} \mathbf{a}_{ij} \left\{ 2 \left( \mathbf{u}_b + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial\Omega} \right) - \tilde{\mathbf{u}}_j^* \right\} \\ & \quad = \mathbf{u}_i^n + \sum_{j \neq i} \mathbf{a}_{ij} (\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_j^n) + \Delta t \frac{\mathbf{F}_i^n}{\rho_i}, \quad (2.6.5) \end{aligned}$$

qui équivaut à

$$\begin{aligned} & \left( 1 - \sum_{\substack{j \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \right) \mathbf{u}_i^* + \sum_{\substack{j \in \Omega \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \mathbf{u}_j^* - \sum_{j \notin \Omega} \mathbf{a}_{ij} \tilde{\mathbf{u}}_j^* = \mathbf{u}_i^n + \sum_{j \neq i} \mathbf{a}_{ij} (\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_j^n) \\ & \quad - \sum_{j \in \partial\Omega} \mathbf{a}_{ij} \left( \mathbf{u}_b + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial\Omega} \right) \\ & \quad - 2 \sum_{j \notin \Omega} \mathbf{a}_{ij} \left( \mathbf{u}_b + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial\Omega} \right) + \Delta t \frac{\mathbf{F}_i^n}{\rho_i}, \quad (2.6.6) \end{aligned}$$

$\tilde{\mathbf{u}}_j^*$  étant la valeur de la vitesse intermédiaire pour la particule dont l'image est le  $j$ -ième point.  $\Omega$  est le domaine de calcul qui ne renferme que les particules réelles et  $\partial\Omega$  est sa frontière.  $\mathbf{a}_{ij}$  est donné par l'équation (2.6.4).

Ainsi, pour un problème dans le plan, il faut résoudre deux systèmes d'équations afin de trouver les composantes horizontale et verticale de la vitesse inter-

médiaire de chaque particule réelle. Par contre pour les problèmes en dimension trois, il faudra en résoudre trois. L'obtention de cette vitesse intermédiaire permettra de calculer l'équation de Poisson (2.2.4) qui prend la forme,

$$(\nabla^2 \varphi^{n+1})_i = \frac{1}{\Delta t} (\rho \nabla \cdot \mathbf{u}^*)_i. \quad (2.6.7)$$

Nous choisissons comme forme discrète de la divergence de  $\mathbf{u}^*$  l'équation (2.3.21) qui nous permet d'obtenir,

$$\begin{aligned} (\nabla \cdot \mathbf{u}^*)_i &= \rho_i \sum_{j \in \Omega} m_j \left( \frac{\mathbf{u}_j^{\beta}}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{u}_i^{*\beta}}{\rho_i^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} \\ &= \rho_i \sum_{j \in \Omega} m_j \left( \frac{\mathbf{u}_j^{\beta}}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{u}_i^{*\beta}}{\rho_i^2} \right) (x_i^\beta - x_j^\beta) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}, \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

avec  $i \in \Omega$ ; et le Laplacien de  $\varphi^{n+1}$  est

$$(\nabla^2 \varphi^{n+1})_i = \sum_{j \in \Omega} \frac{4m_j(\varphi_i^{n+1} - \varphi_j^{n+1})}{(\rho_i + \rho_j)} \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}, i \in \Omega. \quad (2.6.9)$$

Ainsi, l'équation de Poisson devient,

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{j \neq i \\ j \in \Omega}} b_{ij} (\varphi_i^{n+1} - \varphi_j^{n+1}) &= \\ \frac{\rho_i^2}{\Delta t} \sum_{\substack{j \neq i \\ j \in \Omega}} m_j \left( \frac{\mathbf{u}_j^{\beta}}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{u}_i^{*\beta}}{\rho_i^2} \right) (x_i^\beta - x_j^\beta) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}, \end{aligned} \quad (2.6.10)$$

qui équivaut à

$$\sum_{\substack{j \neq i \\ j \in \Omega}} b_{ij} \varphi_i^{n+1} - \sum_{\substack{j \neq i \\ j \in \Omega}} b_{ij} \varphi_j^{n+1} - \sum_{\substack{j \neq i \\ j \in \Omega}} b_{ij} \tilde{\varphi}_j^{n+1} =$$

$$\frac{\rho_i^2}{\Delta t} \sum_{\substack{j \neq i \\ j \in \Omega}} m_j \left( \frac{\mathbf{u}_j^{*\beta}}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{u}_i^{*\beta}}{\rho_i^2} \right) (\mathbf{x}_i^\beta - \mathbf{x}_j^\beta) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}, \quad i \in \Omega, \quad (2.6.11)$$

avec

$$\mathbf{b}_{ij} = \frac{4m_j}{(\rho_i + \rho_j)} \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \quad (2.6.12)$$

$\mathbf{u}_i^{*\beta}$  et  $\mathbf{x}_i^\beta$  sont, respectivement, la  $\beta$ -ième composante de la vitesse intermédiaire et de la position de la particule  $i$ ,  $\tilde{\varphi}_j^{n+1}$  étant la valeur de  $\varphi$  pour la particule dont l'image est le  $j$ -ième point.

Après l'obtention de la vitesse intermédiaire et de la fonction scalaire, l'on obtient la vitesse de chaque particule réelle du fluide, à la fin du pas de temps, au moyen de l'équation (2.2.6) dont la forme discrète est la suivante ;

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^* - \Delta t \sum_j m_j \left( \frac{\varphi_j^{n+1}}{\rho_j^2} + \frac{\varphi_i^{n+1}}{\rho_i^2} \right) (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \quad (2.6.13)$$

La pression s'obtient de la forme discrète de l'une des équations (2.2.8) et (2.2.9) ; ainsi,

$$P_i^{n+1/2} = \varphi_i^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \sum_j \frac{4m_j(\mu_i + \mu_j)}{(\rho_i + \rho_j)^2} (\varphi_i^{n+1} - \varphi_j^{n+1}) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} + \text{cte}, \quad (2.6.14)$$

ou

$$P_i^{n+1/2} = \varphi_i^{n+1} - \frac{\mu_i \rho_i}{2} \sum_j m_j \left( \frac{\mathbf{u}_j^{*\beta}}{\rho_j^2} + \frac{\mathbf{u}_i^{*\beta}}{\rho_i^2} \right) (\mathbf{x}_i^\beta - \mathbf{x}_j^\beta) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} + \text{cte}. \quad (2.6.15)$$

Les équations (2.6.3), (2.6.11) et (2.6.13) - (2.6.15) sont les formes lagrangiennes discrètes des équations issues de la méthode projection que nous appelons, *Projection Smoothed Particle Hydrodynamics Lagrangienne* (LPSPH). Cette appellation tient du fait que nous laissons les particules se déplacer avec la vitesse du fluide. La position de chaque particule fluide  $i$ , à la fin de chaque pas de temps, est obtenue au moyen de,

$$\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n + \frac{1}{2}(\mathbf{u}_i^{n+1} + \mathbf{u}_i^n)\Delta t; \quad (2.6.16)$$

où  $\mathbf{x}^n$  et  $\mathbf{x}^{n+1}$  est la position d'une particule fluide aux temps  $t_n = n\Delta t$  et  $t_{n+1} = (n+1)\Delta t$ .

## 2.6.2 La méthode PSPH-Eulerienne (EPSPH)

La méthode SPH standard ou traditionnelle est une méthode Lagrangienne sans maille dans laquelle le problème à solutionner est discrétisé en utilisant des particules qui sont libres de se déplacer. Nous nous sommes intéressés à l'idée d'attribuer un comportement Eulerien aux particules utilisées pour la discrétisation dans le but de palier au problème d'instabilité d'extension dont nous avons longuement parlé à la Section 1.4.3. Pour cela, nous avons ajouté les termes convectifs à gauche de l'équation (2.2.1) qui devient,

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u})^{n+1/2} = \frac{\gamma}{2} \nabla^2 (\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^*) + \frac{\mathbf{F}^n}{\rho}. \quad (2.6.17)$$

L'équation (2.6.17) est une formulation Eulerienne dans laquelle, les termes convectifs sont discrétisés suivant un schéma explicite d'Adams-Bashforth de

second ordre ; ce qui donne

$$((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u})^{n+1/2} = \frac{3}{2} (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n - \frac{1}{2} (\mathbf{u}^{n-1} \cdot \nabla) \mathbf{u}^{n-1}. \quad (2.6.18)$$

L'équation (2.6.17) avec les équations (2.2.2) - (2.2.6) sont la formulation eulérienne de la méthode de projection.

Puisque les termes convectifs sont obtenus à partir des vitesses aux temps  $t = (n-1)\Delta t$  et  $t = n\Delta t$  qui sont connues, alors elles sont envoyées au membre de droite de l'équation (2.6.17). Ce sont les seuls termes pour lesquels nous n'avons pas encore présenté les formes discrètes suivant SPH.

Sachant que le gradient d'une fonction  $f$  suivant SPH est donnée par,

$$(\nabla f)_i = \rho_i \sum_j m_j \left( \frac{f_i}{\rho_i^2} + \frac{f_j}{\rho_j^2} \right) (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}; \quad (2.6.19)$$

son produit scalaire avec un vecteur  $\mathbf{u}_i$  donne

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla f)_i = \rho_i \sum_j m_j \left( \frac{f_i}{\rho_i^2} + \frac{f_j}{\rho_j^2} \right) \mathbf{u}_i \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \quad (2.6.20)$$

En remplaçant,  $f$  par  $\mathbf{u}$ , nous obtenons que

$$\begin{aligned} [(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u})^{n+1/2}]_i &= \frac{3\rho_i}{2} \sum_j m_j \left( \frac{\mathbf{u}_i^n}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{u}_j^n}{\rho_j^2} \right) \mathbf{u}_i^n \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} - \\ &\quad \frac{\rho_i}{2} \sum_j m_j \left( \frac{\mathbf{u}_i^{n-1}}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{u}_j^{n-1}}{\rho_j^2} \right) \mathbf{u}_i^{n-1} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \end{aligned} \quad (2.6.21)$$

Cette dernière expression doit être ajoutée à droite de l'équation (2.6.4) pour le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}_i^*$  de chaque particule réelle  $i$  du domaine du problème à solutionner. Ainsi, nous avons,

$$\begin{aligned}
 (1 - \sum_{\substack{j \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij}) \mathbf{u}_i^* + \sum_{\substack{j \in \Omega \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \mathbf{u}_j^* - \sum_{\substack{j \notin \Omega \\ j \neq i}} \mathbf{a}_{ij} \tilde{\mathbf{u}}_j^* &= \mathbf{u}_i^n + \sum_{j \neq i} \mathbf{a}_{ij} (\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_j^n) - \sum_{j \in \partial \Omega} \mathbf{a}_{ij} \mathbf{u}_b \\
 &- \sum_{j \in \partial \Omega} \mathbf{a}_{ij} \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial \Omega} - 2 \sum_{j \notin \Omega} \mathbf{a}_{ij} \left( \mathbf{u}_b + \Delta t \left[ \frac{1}{\rho} \nabla \varphi \right]_{\partial \Omega} \right) \\
 &+ \Delta t \frac{3\rho_i \Delta t}{2} \sum_j m_j \left( \frac{\mathbf{u}_i^n}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{u}_j^n}{\rho_j^2} \right) \mathbf{u}_i^n \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} \\
 &- \frac{\rho_i \Delta t}{2} \sum_j m_j \left( \frac{\mathbf{u}_i^{n-1}}{\rho_i^2} + \frac{\mathbf{u}_j^{n-1}}{\rho_j^2} \right) \mathbf{u}_i^{n-1} \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} \\
 &+ \Delta t \frac{\mathbf{F}_i^n}{\rho_i}. \quad (2.6.22)
 \end{aligned}$$

Les équations (2.6.11), (2.6.13), (2.6.14), (2.6.15) et (2.6.22) sont utilisées pour les calculs par la méthode que nous appelons, *Projection Smoothed Hydrodynamics Eulérienne* (EPSPH).

### 2.6.3 Avantages de la méthode EPSPH sur la méthode LPSPH

La méthode EPSPH présente des avantages importants qu'il est bon de souligner ici, bien que nous allions y revenir dans les sections ci-après et même dans le chapitre suivant. L'avantage majeur qu'a la méthode EPSPH sur la méthode LPSPH, comme nous verrons dans la suite, est le gain dans le temps de calcul. En effet, dans la méthode LPSPH, l'on doit, à cause du déplacement des particules, trouver au début de chaque pas de temps, les voisins de chaque particule réelle du domaine de calcul. Cette recherche des voisins prend beaucoup plus de temps à mesure que l'on augmente le nombre de particules utilisées pour les calculs. Beaucoup de temps est ainsi gagné par la méthode EPSPH, car la recherche des voisins de chaque particule, qui reste fixe tout au long des calculs, se fait une seule fois lors de l'initialisation du problème.

L'autre conséquence déplaisante du changement de la liste des particules voisines dans la méthode LPSPH est que les coefficients des matrices issues des

équations (2.2.1) et (2.2.4) du schéma de projection doivent être recalculés au cours de chaque pas de temps. Ainsi, beaucoup de temps est gagné avec l'utilisation de la méthode EPSPH, puisque toutes les particules ont la même liste de voisins pendant toutes les simulations, ce qui signifie que la recherche des voisins et la construction des coefficients des matrices pour la détermination de  $\mathbf{u}^*$  et  $\varphi^{n+1}$  peut se faire une seule fois au début des calculs. Le non changement des coefficients des matrices signifie également que dans l'éventualité de l'utilisation d'un préconditionneur pour la résolution des équations (2.2.1) et (2.2.4) basé sur une décomposition incomplète, ce préconditionneur est calculé une seule fois.

Un autre avantage de la méthode EPSPH est le fait que, les particules étant fixes ou statiques, la densité des particules reste toujours constante sur tout le domaine de calcul. Cela n'est pas toujours le cas avec la méthode LPSPH qui oblige donc parfois à utiliser une longueur de lissage qui varie d'une particule à une autre et qui est fonction de la densité des particules dans le voisinage de chacune. Et l'on doit parfois redistribuer (ou réinitialiser) les particules au bout d'un certain temps de calcul comme l'ont proposé Chianotis et al. [19] afin de résoudre ce problème. Cette redistribution des particules que nous avons explorée et que nous verrons dans le chapitre suivant laisse parfois à désirer.

### 2.6.4 Remarques sur la résolutions des équations des méthodes LPSPH et EPSPH

Nous voulons signaler ici que, le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}^*$  et de la fonction scalaire  $\varphi$  de chaque particule SPH pour les deux méthodes présentées ci-dessus passe par la résolution, comme nous le montrent les équations, des systèmes d'équations de la forme,

$$A\mathbf{X} = \mathbf{d}, \quad (2.6.23)$$

où  $\mathbf{X}$  peut être soit l'ensemble d'une des composantes  $x$  et  $y$  de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}_i^*$  ou l'ensemble constitué des  $\varphi_i$ .  $\mathbf{d}$  est le membre de droite qui résulte donc de chacune de ces équations.

L'utilisation des méthodes directes pour résoudre ces systèmes est moins efficace, car elles sont très coûteuses en temps de calcul à cause de la dimension de la matrice carrée  $A$  qui est en pratique très grande de l'ordre de  $10^3$  et plus. Pour cela donc, nous avons fait recours aux méthodes itératives plus efficaces pour les matrices creuses de grande taille. En étudiant nos équations, nous avons trouvé qu'en multipliant par  $m_i$  les équations (2.6.6) et (2.6.22), pour le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}_i^*$  de chaque particule fluide, nous obtenions des systèmes d'équations dont les matrices sont symétriques (i.e.  $A = A^T$ ) et définies positives (i.e. pour tout vecteur non nul  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$ , on a  $\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0$ ).

Ainsi, nous avons utilisé pour les résoudre la méthode du gradient conjugué préconditionné qui veut que les systèmes à résoudre aient des matrices symétriques et définies positives. Sachant que,  $A \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ , et pour un vecteur initial  $\mathbf{x}^* \in \mathfrak{R}^n$  donné, la méthode du gradient conjugué consiste à calculer une succession  $\mathbf{X}_m$  de solutions approchées au système (2.6.23) à l'aide d'une famille de

sous-espaces vectoriels  $\zeta_m$  de dimension  $m$  en imposant les conditions,

$$\mathbf{x}_m \in \mathbf{x}^* + \zeta_m$$

et

$$\mathbf{b} - A\mathbf{x}_m \perp \zeta_m.$$

La condition d'orthogonalité est dite condition de *Petrov-Galerkin*. Elle permet de caractériser de manière unique  $\mathbf{x}_m$  dans le sous-espace affine  $\mathbf{x}^* + \zeta_m$ . Les sous-espaces sont généralement emboîtés :  $\zeta_m \subset \zeta_{m+1}$ .  $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}$  est toujours la solution du système. Sous certaines hypothèses, le vecteur  $\mathbf{x}_m$  est une bonne approximation de cette solution. Cependant, l'on voudrait toujours mettre fin à l'algorithme pour des valeurs de  $m$  petites devant  $n$ . Les espaces d'approximation  $\zeta_m$  qui sont utilisés dans les calculs sont des sous-espaces de Krylov <sup>3</sup>

On convient que  $\zeta_0(A, \mathbf{x}) = \mathbf{0}$ . Pour accélérer la méthode du gradient conjugué, on peut transformer le système linéaire et le processus qui en découle est le préconditionnement.

Nous n'avons pas eu à construire la résolution numérique de cette méthode ; nous avons utilisé la fonction prédéfinie *pcg* ("preconditionned conjugate gradient") du logiciel Matlab pour la résolution. Et nous nous sommes servis de la fonction *cholinc* de Matlab, qui effectue une décomposition incomplète de Cholesky, pour obtenir la matrice de préconditionnement à utiliser pour accélérer la convergence de la solution lors de la résolution du système d'équations (2.6.23) au moyen de *pcg*.

Pour le problème de Poisson sur  $\varphi^{n+1}$ , le système d'équations discret qui en résulte est rendu symétrique en multipliant l'équation (2.6.11) par  $m_i$ . Cependant, la matrice de ce système est singulière ; donc la solution du problème de

---

<sup>3</sup>**Définition** : Soit  $A \in \mathfrak{R}^{n \times n}$  une matrice inversible et  $\mathbf{x} \in \mathfrak{R}^n$ ,  $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$  ; le sous-espace de Krylov d'ordre  $m$  associé à la matrice  $A$  et au vecteur  $\mathbf{x}$ , noté  $\zeta_m(A, \mathbf{x})$ , est le sous-espace vectoriel généré par les  $m$  vecteurs :  $\mathbf{x}, A\mathbf{x}, A^2\mathbf{x}, \dots, A^{m-1}\mathbf{x}$ .

Poisson sur  $\varphi^{n+1}$  est toujours déterminée à une constante près. Pour rendre ce système défini positif, nous avons premièrement multiplié l'équation (2.6.11) par le signe moins. Nous ajoutons ensuite un à un élément  $a_{ii}$  quelconque sur la diagonale de la matrice de discrétisation  $A$ ; cet élément  $a_{ii}$  devient  $a_{ii} + 1$  ce qui a pour effet de fixer une constante ( $\varphi_i^{n+1} = 0$ ) au point  $x_i$  du domaine de calcul et rendre de ce fait la matrice inversible. Le système ainsi modifié est résolu de manière itérative avec la méthode du gradient conjugué préconditionné comme décrite ci-dessus.

## 2.7 Test numérique : écoulement de Poiseuille bidimensionnel

La première application de nos méthodes EPSPH et LPSPH est la résolution du problème de l'écoulement cisailé simple de Poiseuille entre deux plaques infinies et parallèles. Ainsi, nous allons calculer la vitesse  $\mathbf{u}$  d'un fluide ayant une viscosité constante dans un canal bidimensionnel  $\Omega = \{(x, y) : x \in (-\infty, \infty), y \in (0, H)\}$  d'épaisseur  $H$ . Des conditions de non glissement sont imposées aux frontières solides en  $y = 0$  et en  $y = H$ . Le fluide initialement au repos est mis en mouvement par une force  $\mathbf{F} = (F, 0)$  avec  $F > 0$  (voir l'équation (2.1.14)).

### 2.7.1 Résolution analytique

Pour le problème de Poiseuille qui nous intéresse, la vitesse locale du fluide à tout instant  $t$  est de la forme  $\mathbf{u} = u_x(y, t)\hat{x}$ ,  $\hat{x}$  étant le vecteur unitaire dans la direction de l'écoulement. Dans cet écoulement, le terme convectif non-linéaire des équations de Navier-Stokes est nul. La projection de ces équations sur les axes, en l'absence de toute force externe agissant sur le fluide, nous conduit à

l'obtention de la solution non stationnaire, pour cet écoulement, qui est définie par

$$u_{ex,x}(x, y, t) = -\frac{F}{2\nu}y(y - H) - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4FH^2}{\nu\pi^3(2n+1)^3} \sin\left(\frac{\pi y}{H}(2n+1)\right) \exp\left(-\nu\frac{(2n+1)^2\pi^2}{H^2}t\right) \quad (2.7.1)$$

et

$$u_{ex,y}(x, y, t) = 0. \quad (2.7.2)$$

De la solution stationnaire, nous pouvons définir une vitesse maximale du fluide  $u_{max}$  qui s'exprime comme

$$u_{max} = \frac{FH^2}{8\nu}. \quad (2.7.3)$$

Si nous utilisons maintenant  $u_{max}$  comme vitesse caractéristique et  $H$  comme longueur caractéristique, la solution adimensionnée  $\hat{u}_{ex} = (\hat{u}_{ex,x}, \hat{u}_{ex,y})$  de la vitesse exacte que nous venons de trouver devient

$$\hat{u}_{ex,x}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = -4\hat{y}(\hat{y} - 1) - \frac{32}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^3} \sin((2n+1)\pi\hat{y}) \exp\left(-\frac{(2n+1)^2\pi^2}{Re}\hat{t}\right), \quad (2.7.4)$$

$$\hat{u}_{ex,y}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = 0, \quad (2.7.5)$$

où les variables adimensionnées sont définies par,

$$\hat{u}_{ex} = u/u_{max}, \quad \hat{x} = x/H, \quad \hat{y} = y/H, \quad \hat{t} = tu_{max}/H, \quad (2.7.6)$$

et où

$$Re := \frac{\rho H u_{\max}}{\mu},$$

est le nombre de Reynolds. Nous avons ainsi déterminé la solution analytique du problème dit de Poiseuille. Nous allons par la suite trouver numériquement la solution de ce problème et la comparer avec la solution exacte. Dans la présentation des résultats numériques, à moins d'avoir des indications contraires, toutes les variables seront adimensionnées. Afin d'alléger la notation, nous allons laisser tomber les accents circonflexes sur ces variables.

## 2.7.2 Résolution numérique

Pour nos simulations, le domaine de calcul est bidimensionnel et carré :

$$\Omega_C = \{(x, y) : a \leq x \leq b, a \leq y \leq b\}, \quad (2.7.7)$$

avec des conditions de non glissement et de non pénétration  $\mathbf{u}_b = \mathbf{0}$  sur les parois supérieure  $y = a$  et inférieure  $y = b$ . Les conditions aux frontières périodiques sont utilisées en  $x = a$  et  $b$  de telle sorte qu'avec la méthode LPSPH les particules qui sortent d'une extrémité du domaine rentrent par l'autre. De cette manière, le nombre total des particules SPH dans le rectangle de calcul demeure constant. Les particules SPH qui se trouvent à une extrémité du domaine de calcul interagissent avec celles qui se trouvent à l'extrémité opposée. Initialement, un total de  $N_x N_y$  particules sont placées sur une grille régulière dont les nœuds ont pour coordonnées  $(x_i, y_j)$  ( $i = 1, \dots, N_x$ ,  $j = 1, \dots, N_y$ ) où

$$x_i = a + (i - 1)\Delta x, \quad y_j = a + (j - 1/2)\Delta y, \quad (2.7.8)$$

et les distances entre les particules dans les deux directions de coordonnées sont données par  $\Delta x = (b - a)/N_x$  et  $\Delta y = (b - a)/N_y$ . Dans la méthode EPSPH

les particules SPH conservent leurs positions initiales tout au long des calculs alors que dans la méthode LSPH, elles se déplacent avec la vitesse locale du fluide. Notons cependant que malgré le mouvement des particules SPH dans la méthode LSPH l'espacement inter-particules dans la direction- $x$  reste en tout temps égal à  $\Delta x$  pour le problème test de l'écoulement de Poiseuille.

Afin de pouvoir comparer nos résultats avec ceux de Bierbrauer et al. [15] nous avons choisi les paramètres physiques suivants :  $\mu = 0.001 \text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $H = 0.001 \text{m}$ ,  $\rho = 1000 \text{kg m}^{-3}$  et la valeur maximale de la vitesse dans la direction de l'écoulement est  $u_{\max} = 1.25 \times 10^{-5} \text{ms}^{-1}$ . Ce choix de paramètres conduit à un nombre de Reynolds,  $Re = \rho u_{\max} H / \mu = 0.0125$ . Après avoir adimensionné toutes les variables comme nous l'avons expliqué dans la Section 2.7.1, le problème est résolu dans le domaine de calcul  $\Omega_C = [0, 1] \times [0, 1]$ .

L'erreur moyenne quadratique (emq) de la vitesse calculée  $\mathbf{u}^{n+1}$  au pas de temps  $(n + 1)$  est définie par

$$(\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}^{n+1})_{emq} := \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \left( \sum_{i=1}^{N_x N_y} \|\mathbf{u}_{ex}(\mathbf{x}_i, (n + 1)\Delta t) - \mathbf{u}_i^{n+1}\|_2^2 \right)^{1/2}, \quad (2.7.9)$$

où  $\mathbf{u}_{ex}$  est la solution exacte, dont les composantes sont données en (2.7.4)-(2.7.5). Puisque tous les calculs des erreurs effectués par Bierbrauer et al. [15] ont été faits au moyen de la norme (2.7.9), nous allons l'adopter dans la présentation de nos résultats. Nous pouvons analyser l'ordre de l'erreur en supposant que sa grandeur s'exprime en fonction d'une puissance de la longueur de lissage  $h$ ; ainsi, on a  $E(h) \propto h^p$ . Le logarithme du rapport des erreurs pour deux choix successifs  $h_1$  et  $h_2$  de la longueur de lissage nous permet d'obtenir un ordre de convergence de la solution entre ces deux choix; cet ordre est :

$$\text{Ordre de convergence} = \left| \frac{\log(\|E(h_1)\|_2 / \|E(h_2)\|_2)}{\log(h_1/h_2)} \right|. \quad (2.7.10)$$

Dans l'équation (2.3.17) la formule SPH pour le gradient d'une fonction  $f$  en une particule SPH  $i$  était donnée par

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\right)_i \approx - \sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f_j \frac{\partial W_{ij}}{\partial \mathbf{x}_j}, \quad (2.7.11)$$

de sorte que, en une dimension, pour une distribution fixe et uniforme des articles SPH, la formule correspondante pour la dérivée d'une fonction  $f$  en un point  $x_i$  devient

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_i \approx - \sum_{j=1}^{N_x} f_j \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_j} \Delta x, \quad (2.7.12)$$

où  $\Delta x := x_j - x_{j-1}$  ( $j = 2, \dots, N_x$ ) est l'espacement constant inter-particules. Quinlan et al. [150] ont obtenu la formule unidimensionnelle suivante pour l'erreur commise en utilisant l'approximation SPH (2.7.12) dans le cas où les particules sont équidistantes et fixes pour la dérivée d'une fonction  $f$  en une particule  $i$  :

$$\begin{aligned} \left(\frac{df}{dx}\right)_i + \sum_{j=1}^{N_x} f_j \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_j} \Delta x &= -\frac{h^2}{2} \left(\frac{d^3 f}{dx^3}\right)_i \int s^2 \widehat{W} ds + O(h^4) \\ &+ \left(\frac{\Delta x}{h}\right)^{\beta+2} \frac{B_{\beta+2}}{(\beta+2)!} (1 - 2^{-\beta-1}) \left\{ \left(\frac{df}{dx}\right)_i [4\widehat{W}_{s=2}^{(\beta+2)} + 2(\beta+1)\widehat{W}_{s=2}^{(\beta+1)}] + O(h^2) \right\} \\ &+ O\left(\left[\frac{\Delta x}{h}\right]^{\beta+4}\right). \end{aligned} \quad (2.7.13)$$

Dans (2.7.13),  $W_{ij} = W(x_i - x_j, h)$  est l'évaluation en la  $j$ -ième particule SPH de la fonction de lissage centrée en  $x_i$  et dont le support est l'intervalle  $[x_i - 2h, x_i + 2h]$  pour un  $h > 0$ . La régularité de la frontière de  $W$  est définie par  $\beta$  de sorte que la  $\beta$ -ième dérivée et toutes les dérivées inférieures de la fonction de lissage valent zéro sur la frontière de son support compact.  $\widehat{W} = \widehat{W}(s)$  est la fonction de lissage adimensionnée définie par  $\widehat{W}(s) = hW(x - x_i, h)$  où  $s := (x - x_i)/h$ . Dans la relation (2.7.13), les exposants enfermés dans les parenthèses représentent les

dérivées à l'ordre indiqué.  $B_{\beta+2}$  représente le  $(\beta + 2)$ -ième nombre de Bernoulli. Il découle de la relation (2.7.13) que la méthode SPH est cohérente dans ce cas seulement si  $h$  et  $\Delta x/h$  tendent vers zéro. De même, en dénotant par  $N_n$  le nombre de voisins sur une distance de  $2h$ , nous avons besoin que  $N_x \rightarrow \infty$  et  $N_n \rightarrow \infty$  avec  $N_n/N_x \rightarrow 0$  [153].

Bien que le problème de Poiseuille plan soit unidimensionnel dans l'espace, il est résolu, comme nous l'avons dit avant, dans un domaine bidimensionnel  $\Omega_C$ . Afin d'avoir un bon aperçu du comportement de l'erreur de la vitesse et nous inspirant de (2.7.13), nous supposons une réécriture de cette erreur, au moins pour  $\Delta x$  et  $h$  suffisamment petits, de la forme

$$(\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}^{n+1})_{emq} = Ah^2 + B \left( \frac{\Delta x}{h} \right)^{\beta+2} + \text{t.o.s}, \quad (2.7.14)$$

où  $A, B$  sont des constantes positives et "t.o.s" représente la somme des termes d'ordre supérieur et des termes d'erreur  $O(\Delta t^2)$  due au schéma de projection PmIII décrit à la Section 2.2. Dans l'analyse des erreurs de notre schéma EPSPH dans la section suivante, nous allons supposer que tous les termes regroupés dans t.o.s. sont négligeables, au moins pour  $\Delta x, h$  et  $\Delta t$  suffisamment petits. La régularité à la frontière  $\beta$  pour notre fonction de lissage  $W$  donnée en (2.3.9) est égale à 2 parce que la dérivée d'ordre 3 de la spline cubique n'est pas nulle sur la frontière du support compact. Dans la relation (2.7.14), le premier terme à droite de l'égalité représente l'erreur de lissage alors que le deuxième terme à droite de l'égalité représente l'erreur de discrétisation.

### 2.7.3 Résultats obtenus des méthodes EPSPH et LPSPH

La figure 2.4 montre une comparaison qualitative aux temps adimensionnels allant de  $1.25 \times 10^{-5}$  à  $1.25 \times 10^{-2}$ , du profil des vitesses, entre les résultats numériques et la solution analytique du problème de Poiseuille dans un canal

infini. La solution exacte pour  $u_x$  est donnée par l'équation (2.7.4) et la solution numérique a été calculée en se servant du schéma EPSPH. Les calculs effectués avec la méthode LPSPH ont donné des résultats presque identiques à ceux de la figure 2.4. Tous les résultats qui sont montrés ont été obtenus avec  $N_x \times N_y = 64 \times 64$  particules SPH (correspondant à une distance inter-particules de  $\Delta x = 1/64$ ) avec une longueur de lissage de  $h = 1.525\Delta x$  et un pas de temps fixe de  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . On y voit un très bon accord entre les solutions numériques et analytiques. Donc, qualitativement, les méthodes EPSPH et LPSPH sont très satisfaisantes. Les points en contact avec les parois solides restent fixes dans l'espace et dans le temps ; cela est une caractéristique de la solution qui est très bien reproduite par nos calculs.

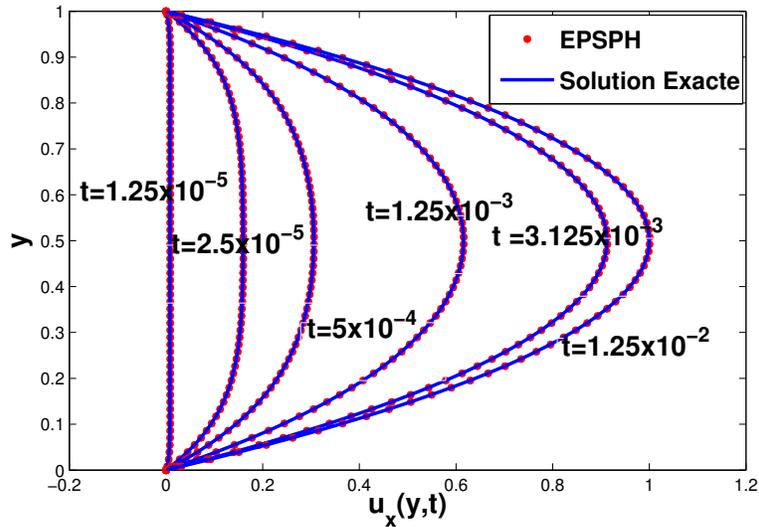


FIG. 2.4: Problème de Poiseuille dans le plan. Comparaison entre la solution exacte (2.7.4) et la solution numérique de la méthode EPSPH de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement.  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $h = 1.525\Delta x$ ,  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

La figure 2.5 (A) et (B) montre, pour deux longueurs de lissage  $h = 1.525\Delta x$  et  $h = 3.00\Delta x$ , le comportement de l'erreur en fonction du temps jusqu'au temps adimensionné  $T = 1.25 \times 10^{-2}$ . On y observe que lorsque le maillage est raffiné,

c'est-à-dire que  $\Delta x$  est de plus en plus petit, la valeur asymptotique atteinte par l'erreur est plus petite et est atteinte assez rapidement. Pour les maillages de plus en plus grossiers ( $\Delta x = 1/16, 1/24, 1/32$ ), l'on observe, dans un premier temps, une croissance abrupte de l'erreur qui est plus prononcée lorsque  $h/\Delta x = 3.00$ . Cela est toujours suivi par une croissance de l'erreur qui, cette fois, est monotone jusqu'à un peu plus du mi-chemin avant la fin des calculs, où les erreurs atteignent leurs valeurs asymptotiques. On peut observer dans tous les cas, qu'au temps adimensionné  $t = 1.25 \times 10^{-2}$ , les erreurs semblent être indépendantes du temps, ce qui indique que la composante en  $x$  de la vitesse peut être comme totalement stationnaire en ce point. Nous tournons maintenant notre attention sur l'effet de la longueur de lissage sur l'erreur de calcul de la vitesse, et à la lumière de ce que nous venons de mentionner, nous calculerons ces erreurs au temps final  $t = 1.25 \times 10^{-2}$ .

Les résultats de ces calculs sont présentés à la figure 2.6 montrant le log de l'erreur de la vitesse, pour plusieurs valeurs du rapport  $h/\Delta x$ , en fonction du log de  $\Delta x$ . On peut observer que pour une valeur donnée de  $\Delta x$  la grandeur de l'erreur n'est pas monotone en fonction de  $h$ . Par ailleurs, à mesure que  $\Delta x$  décroît, la convergence quadratique, comme on peut l'observer avec  $h/\Delta x \in [1.525, 4]$  et les plus grandes valeurs de  $\Delta x$ , semblent se perdre. Ces deux phénomènes peuvent s'expliquer, au moins qualitativement, sur la base de la relation (2.7.14). En fixant le rapport  $\frac{h}{\Delta x}$  entre la longueur de lissage et la distance inter-particules égale à  $\alpha$  dans (2.7.14) et écrivant  $\beta = 2$ , on obtient

$$(\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}^{n+1})_{emq} \sim A\alpha^2\Delta x^2 + B\alpha^{-4}, \quad (2.7.15)$$

de sorte qu'en dérivant les deux membres en fonction de  $\alpha$  et en posant le résultat

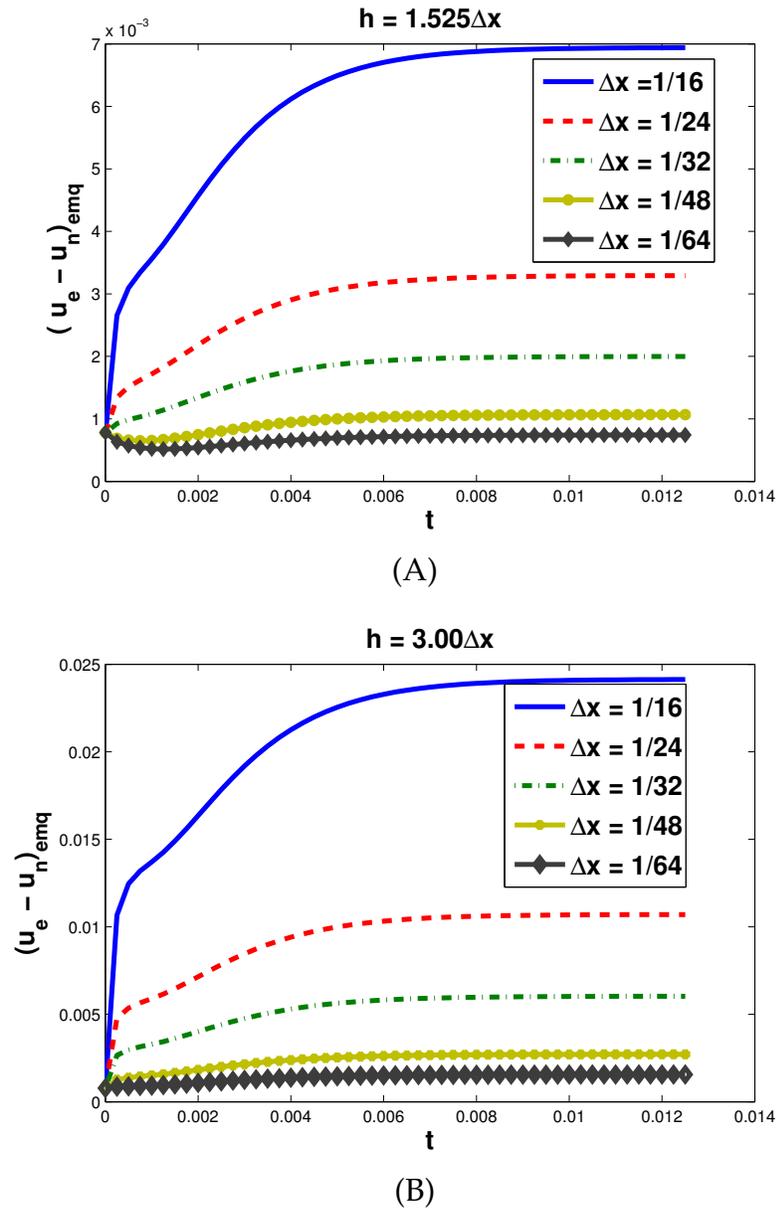


FIG. 2.5: Problème de Poiseuille dans le plan. Évolution de l'erreur en fonction du temps pour le problème de Poiseuille. (A)  $h = 1.525\Delta x$  et (B)  $h = 3\Delta x$ .  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

égal à zéro conduit au minimum d'une valeur optimale

$$\alpha = \alpha_{\text{opt}} := \left( \frac{2B}{A\Delta x^2} \right)^{1/6}. \quad (2.7.16)$$

Ainsi, l'erreur est supposée décroître à mesure que  $\alpha$  croît jusqu'à ce que cette dernière soit égale à la valeur optimale  $\alpha_{\text{opt}}$  donnée en (2.7.16). Notons que l'évaluation approximative de  $\alpha_{\text{opt}}$  en (2.7.16) dépend de  $\Delta x$  de sorte qu'à mesure que la distance inter-particules varie, les courbes de l'erreur pour plusieurs valeurs de  $\alpha$  peuvent se croiser les unes avec les autres. La détermination de A et B dans (2.7.15) par l'application de la méthode des moindres carrés aux six données de la figure 2.6, qui correspondent à  $\Delta x = 1/16$  (la plus grande valeur de  $\Delta x$  utilisée) conduit de (2.7.16) à une valeur de  $\alpha_{\text{opt}}$  égale à 1.43.

Pour une valeur fixe de  $\alpha > 1$  et  $\Delta x$  suffisamment grand, nous nous attendons à ce que de (2.7.15) l'erreur de lissage  $A\alpha^2\Delta x^2$  domine sur l'erreur de discrétisation  $B\alpha^{-4}$  et bien plus davantage pour de grandes valeurs de  $\alpha$ . Lorsque cela est vérifié et en prenant les logs, nous voyons que

$$\log_{10} \left( (u_{\text{ex}} - u^{n+1})_{\text{emq}} \right) \sim \log_{10}(A\alpha^2) - 2\log_{10}(1/\Delta x), \quad (2.7.17)$$

de sorte que la pente des courbes de l'erreur doit être approximativement égale à -2, au moins pour  $\log_{10}(1/\Delta x)$  suffisamment petit et  $\alpha$  suffisamment grand. Une inspection de la figure 2.6 confirme cela.

Finalement, sur la figure 2.6 nous voyons que pour  $\Delta x$  suffisamment petit nous commençons à perdre la convergence d'ordre deux, particulièrement pour des valeurs de  $\alpha$  petites. Nous rapportant toujours à (2.7.15) cette observation peut s'expliquer par le fait que les erreurs de lissage ne dominent plus sur les erreurs de troncature et l'erreur de discrétisation  $B\alpha^{-4}$  pourrait ne plus être négligée.

En comparant les erreurs de lissage de nos calculs numériques de la méthode EPSPH de la figure 2.6 avec ceux de Bierbrauer et al. [15] à la figure 2.7, nous notons que les erreurs du premier cas sont plus petites et que l'ordre de convergence correspondant est plus élevé. L'ordre de convergence des calculs de Bier-

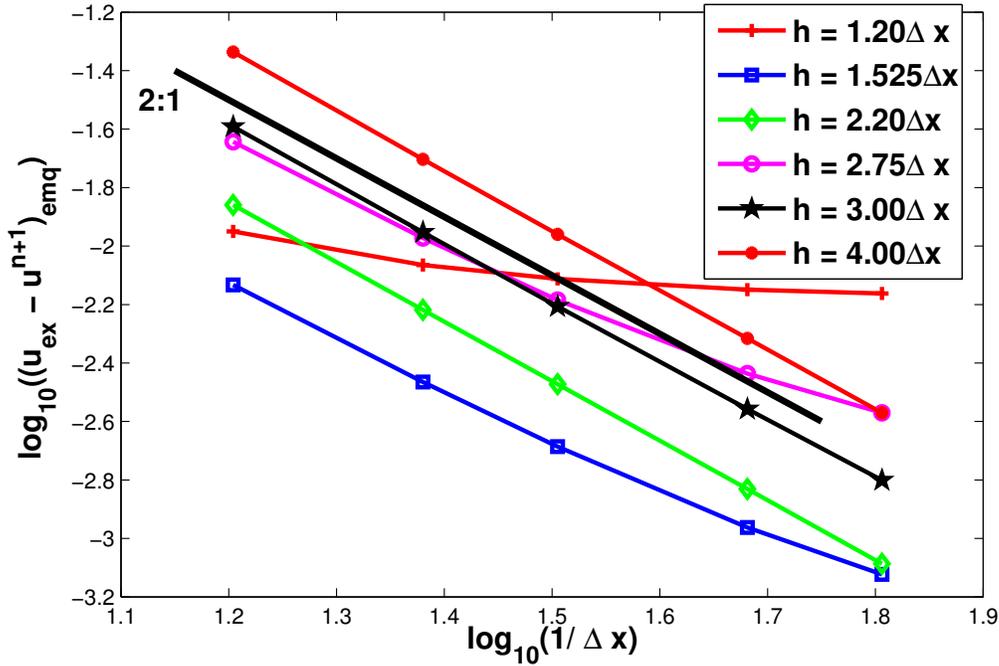


FIG. 2.6: Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse à  $t = 1.25 \times 10^{-2}$  en utilisant la méthode EPSPH en fonction du nombre de particules dans la direction  $x$ .  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

brauer et al. semble pour certains cas être meilleurs que 1 mais plus petit que 2. Puisque l'ordre  $O(h^2)$  de l'erreur de lissage prédite en (2.3.13) ne peut être exactement obtenu que si on a un ensemble de points de quadrature équidistants sur un maillage Cartésien comme nous l'avons dans nos calculs avec la méthode EPSPH [135], il est tentant d'attribuer les différences dans l'ensemble des deux résultats (ceux de Bierbrauer et al. et les nôtres) à l'espacement non uniforme de particules SPH dans les calculs de [15]. Cependant, il existe des arguments qui vont à l'encontre de cette conclusion. Premièrement, comme l'ont mentionné les auteurs dans [15], étant donné le faible nombre de Reynolds dans ces calculs, le déplacement des particules est limité. Nous ajoutons également que les particules qui se trouvent sur une ligne  $y = \text{constante}$  maintiennent leur espacement initial. Deuxièmement, même dans le cas où les particules SPH seraient

désordonnées, l'erreur de lissage dominant serait le même, au moins pour  $h$  suffisamment grand. L'expression correspondante à (2.7.13) donnée par Quinlan et al. [150] dans le cas où les particules ont des positions arbitraires (voir leur équation (23)) est compliquée et ne permet pas une analyse facile. Néanmoins, elle prédit des termes qui sont d'ordre un en  $\Delta x/h$  et d'ordre  $h^{-1}$  pour la longueur de lissage. Malgré la différence lorsque  $h$  devient plus petit, l'erreur de lissage est néanmoins dominée par un terme d'ordre  $O(h^2)$  pour  $h$  suffisamment grand. Troisièmement, nous avons les solutions du même problème de Poiseuille avec la méthode LPSPH et les résultats sont présentés à la figure 2.8. Un coup d'œil rapide sur la figure 2.8 montre que le déplacement des particules dans ce cas semble avoir eu très peu d'impact sur les résultats de l'erreur de lissage.

Il se peut que la raison réelle du faible ordre de précision dans les calculs de Bierbrauer et al. [15] ait quelque chose à voir avec l'approche adoptée par ces auteurs dans la gestion et l'implémentation des conditions aux frontières (voir Section 2.4.3) [14].

L'analyse de l'erreur de Quinlan et al. [150] dans le cas où les particules sont désordonnées peut expliquer pourquoi, à mesure que  $\Delta x$  décroît (et  $h$  également), on observe un revers sur quelques unes des courbes d'erreur de Bierbrauer et al. [15]. Bien sûr, la contribution de plus en plus croissante de l'erreur de discrétisation (proportionnelle à  $\Delta x/h$  si l'analyse de Quinlan et al. est applicable) sur l'erreur totale de troncature à mesure que  $\Delta x$  décroît pourrait également jouer un rôle dans ce revers.

Une évidence supplémentaire de l'utilité de (2.7.14) comme aide à la compréhension du comportement de l'erreur encourue avec la méthode EPSPH pour le problème de Poiseuille peut être donnée en référence à la figure 2.9. Pour  $\Delta x$  fixe, l'erreur de lissage proportionnelle à  $h^2$  domine sur l'erreur de discrétisation qui est proportionnelle  $(\Delta x/h)^4$  pour  $h$  suffisamment grand. L'ordre de grandeur ici

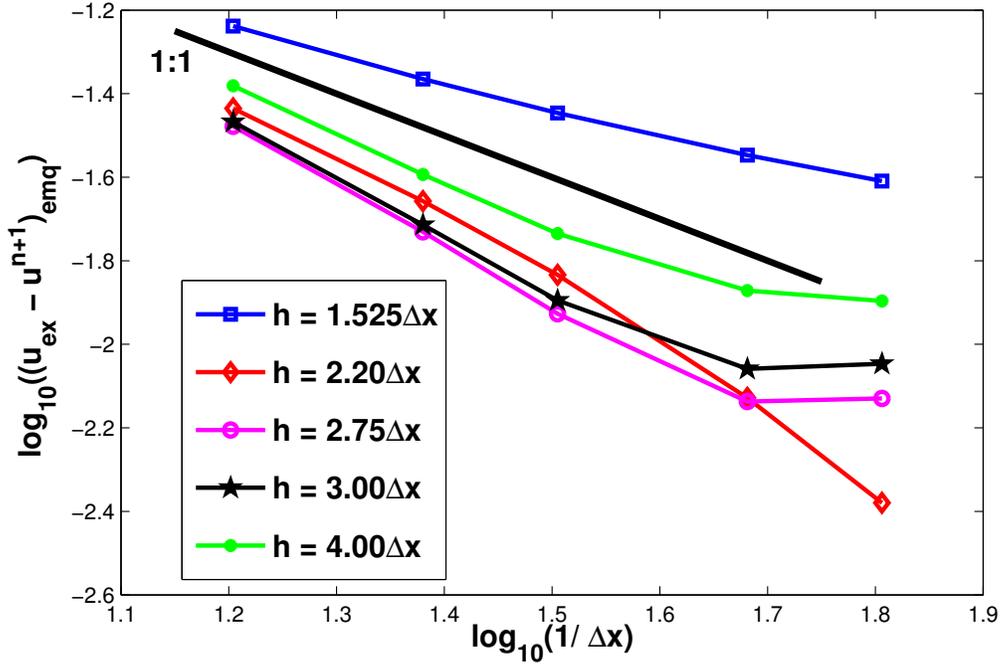


FIG. 2.7: Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse obtenue par Bierbrauer et al. [15] à  $t = 1.25 \times 10^{-2}$  en fonction du nombre de particules  $N_x$  dans la direction  $x$ .

dépend bien sûr de  $\Delta x$ . Dans ce régime, nous aurons,

$$\log_{10} \left( (u_{ex} - u^{n+1})_{emq} \right) \sim \log_{10}(A) + 2 \log_{10}(h), \quad (2.7.18)$$

et ceci explique la pente de 2 pour  $h$  suffisamment grand pour toutes les courbes log-log de l'erreur de la figure 2.9. Lorsque  $h$  est suffisamment petit (encore, précisément *combien petit* est suffisamment petit dépend de  $\Delta x$ ) le terme de l'erreur de discrétisation dans (2.7.14) va dominer et nous aurons

$$\log_{10} \left( (u_{ex} - u^{n+1})_{emq} \right) \sim \log_{10}(B\Delta x^4) - 4 \log_{10}(h), \quad (2.7.19)$$

de sorte que dans ce régime, la pente de la courbe de l'erreur sur un graphique

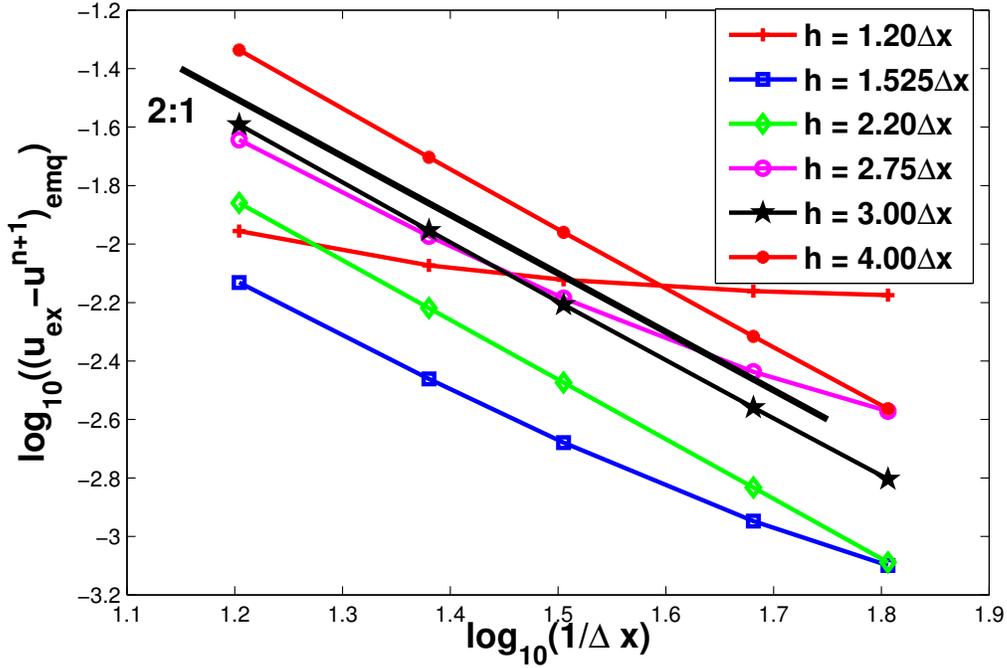


FIG. 2.8: Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse à  $t = 1.25 \times 10^{-2}$  en utilisant la méthode LPSPH en fonction du nombre de particules dans la direction  $x$ .  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

log-log est de -4. Ceci est plus qu'évident pour les plus grandes valeurs de  $\Delta x$  sur la figure 2.9. Pour  $\Delta x = 1/24$ , par exemple, la droite qui passe par la première et la deuxième valeur a une pente de  $-3.85$ . Il est important de remarquer, cependant, qu'à mesure que nous augmentons  $\Delta x$  sur la figure 2.9, la pente de la droite joignant les points de données correspondant aux deux plus petites valeurs de  $h$  décroît véritablement. Ceci est dû au fait que, comme nous l'avons mentionné avant, l'approximation

$$(\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}^{n+1})_{emq} \sim Ah^2 + B \left( \frac{\Delta x}{h} \right)^{\beta+2}, \quad (2.7.20)$$

est supposée être valide uniquement pour  $\Delta x$  et  $h$  suffisamment petits. À mesure que la valeur de  $\Delta x$  ou de  $h$  augmente, les termes d'ordre supérieur (dans "t.o.s")

de (2.7.14)) deviennent de plus en plus important et, de plus, A et B pourraient ne plus de manière justifiée être considérés comme constants.

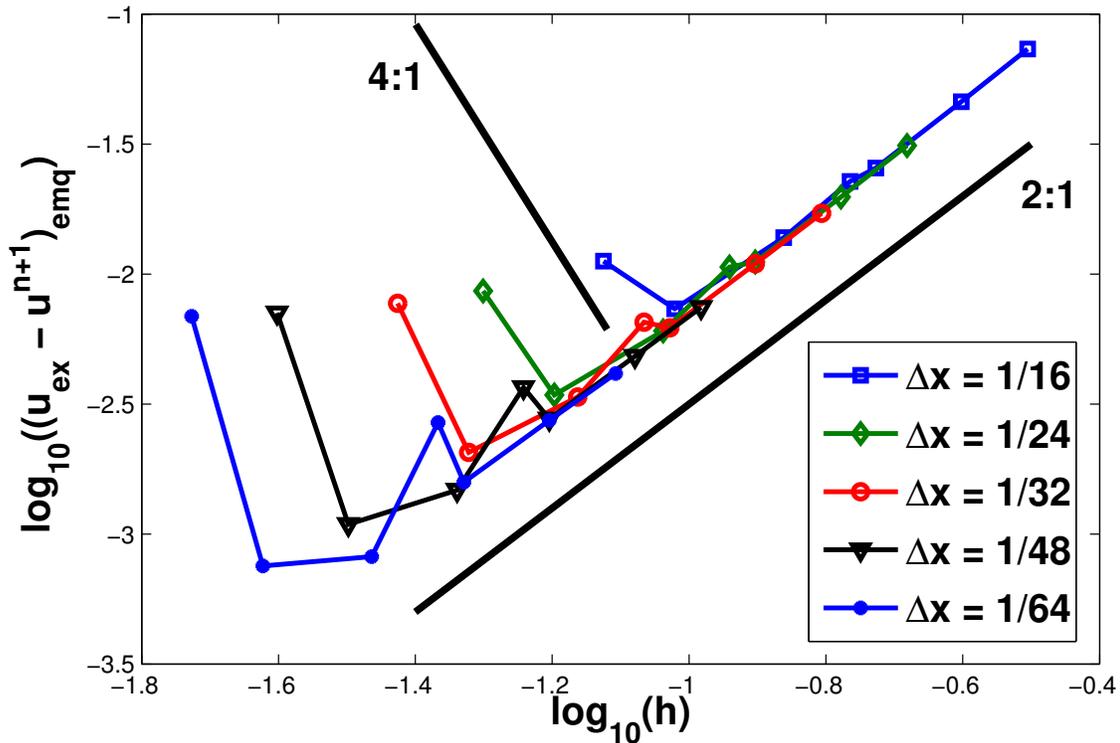


FIG. 2.9: Problème de Poiseuille dans le plan. Graphe log-log de l'erreur de la vitesse à  $t = 1.25 \times 10^{-2}$  en utilisant la méthode EPSPH en fonction de la longueur de lissage  $h$ .  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

Une étude attentive des données des courbes des figures 2.6 et 2.8 révèle que les erreurs obtenues avec la méthode EPSPH sont uniquement légèrement inférieures à celles de la méthode LPSPH. Dans le cas présent, le grand gain pour avoir rendu fixe les particules SPH ne se trouve pas dans la précision des résultats, mais plutôt comme nous en avons fait la remarque à la Section 2.6.3, dans le faible coût de calcul. Les tableaux 2.1 et 2.2 montrent les temps CPU (divisés par  $10^5$ ) en secondes pour la résolution du problème de l'écoulement de Poiseuille dans le plan au moyen des méthodes EPSPH et LPSPH sur un ordinateur de

2.66GHz ayant 4GB de Ram. Dans les colonnes de chacun des tableaux, on a pour un  $\Delta x$  donné, le temps de calcul en fonction de la longueur de lissage  $h$ . Et pour chaque ligne, on a pour une longueur  $h$  de lissage donnée, le temps de calcul en fonction de  $\Delta x$ . Les calculs ont été effectués sur un intervalle de temps adimensionné  $[0, 1.25 \times 10^{-2}]$  avec un pas de temps dimensionné de  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . Nous pouvons observer que pour les deux méthodes, EPSPH et LPSPH, le temps de calcul pour un  $\Delta x$  donné augmente comme attendu en fonction de la longueur de lissage  $h$ . Ainsi, plus  $h$  est grand, plus les calculs sont coûteux en temps de calcul parce que plus  $h$  est grand, plus l'on inclut un grand nombre de particules dans le voisinage d'une particule donnée pour déterminer ses propriétés (vitesse, pression, etc). En outre, plus on raffine le maillage, c'est-à-dire que plus l'on augmente le nombre de particules fluides pour les simulations, plus le coût des calculs augmente. Cependant, le coût des calculs lié au raffinage du maillage est moins élevé que le coût de calcul lié à l'accroissement de la longueur de lissage  $h$ . Pour les calculs équivalents la méthode EPSPH est entre 2.83 et 5.25 fois plus rapide que la méthode LPSPH. Il y a deux raisons à cela. En premier, en choisissant de rendre fixes (Eulériens) les particules mobiles (Lagrangiennes) de la méthode SPH traditionnelle, nous avons fixé les particules voisines de chaque particule fluide. Ainsi, les voisines de chaque particule fluide, pour tous les pas de temps de calcul, sont connues dès l'initialisation du problème d'intérêt, ce qui n'est pas le cas avec l'approche lagrangienne qui est utilisée dans la littérature. Contrairement à la méthode EPSPH où la recherche des particules voisines est faite une seule fois au début des calculs, la recherche des particules voisines se fait à la fin de chaque pas de temps dans la méthode LPSPH, ce qui a un impact considérable sur le coût des calculs surtout lorsque le nombre de particules fluides utilisées pour les calculs est très élevé.

Par ailleurs, pour un problème comme celui de l'écoulement de Poiseuille, pour lequel la viscosité du fluide reste inchangée tout au long des calculs, de

même que la densité du fluide, les quantités  $\mu_i$ ,  $\rho_i$  et  $m_i$  à attribuer à chaque particule fluide restent constantes. Dans ces conditions, les coefficients des matrices pour le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}^*$  (2.6.22) et pour le calcul de  $\varphi^{n+1}$  (2.6.10) dans le schéma de projection sont construits une seule fois dans la méthode EPSPH au début des calculs et sont réutilisés tout au long des calculs, puisque les particules fluides sont maintenues fixes. Cela n'est pas le cas avec la méthode LPSPH, car étant donné que les particules fluides se déplacent, il faut absolument refaire le calcul des coefficients des matrices pour le calcul de  $\mathbf{u}^*$  et  $\varphi^{n+1}$  au début de chaque pas de temps dans les simulations. Cela a bien évidemment un grand impact sur le coût de la résolution du problème d'intérêt.

	$\Delta x = 1/16$	$\Delta x = 1/24$	$\Delta x = 1/32$	$\Delta x = 1/48$	$\Delta x = 1/64$
$h = 1.20\Delta x$	0.035022	0.067669	0.113006	0.239269	0.415746
$h = 1.525\Delta x$	0.046215	0.089396	0.147856	0.311473	0.540184
$h = 2.20\Delta x$	0.090997	0.178537	0.294559	0.617233	1.060960
$h = 2.75\Delta x$	0.147899	0.287261	0.472361	0.982132	1.677688
$h = 3.00\Delta x$	0.203369	0.391393	0.640025	1.306324	2.274285
$h = 4.00\Delta x$	0.333689	0.645198	1.042638	2.120318	3.552049
$h = 5.00\Delta x$	0.669753	1.283128	2.119406	4.022646	7.023340

TAB. 2.1: Problème de Poiseuille dans le plan. Temps CPU (divisé par  $10^5$ ) en secondes en fonction de  $h$  et  $\Delta x$  pour des calculs sur un intervalle de temps adimensionné  $[0, 1.25 \times 10^{-2}]$ .  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . Méthode EPSPH.

	$\Delta x = 1/16$	$\Delta x = 1/24$	$\Delta x = 1/32$	$\Delta x = 1/48$	$\Delta x = 1/64$
$h = 1.20\Delta x$	0.099005	0.187561	0.319504	0.714037	1.323536
$h = 1.525\Delta x$	0.127923	0.252388	0.424687	0.948320	1.760337
$h = 2.20\Delta x$	0.274136	0.538272	0.908807	2.010848	3.731087
$h = 2.75\Delta x$	0.475463	0.930296	1.573539	3.561883	6.672354
$h = 3.00\Delta x$	0.571796	1.116098	1.891615	4.573303	10.035217
$h = 4.00\Delta x$	1.197621	2.303141	3.975691	9.391495	18.396347
$h = 5.00\Delta x$	2.277747	5.864076	10.2052380	21.126515	-

TAB. 2.2: Problème de Poiseuille dans le plan. Temps CPU (divisé par  $10^5$ ) en secondes en fonction de  $h$  et  $\Delta x$  pour des calculs sur un intervalle de temps adimensionné  $[0, 1.25 \times 10^{-2}]$ .  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . Méthode LPSPH.

## 2.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une nouvelle méthode SPH pour la simulation des écoulements de fluides incompressibles. Dans cette méthode, les équations de Navier-Stokes sont discrétisées dans le temps au moyen d'un schéma de projection sans pression, initialement proposé par Kim et Moin [81]. En plus de l'application de la condition d'incompressibilité sur la vitesse du fluide, nous avons démontré une caractéristique de la méthode de projection, à savoir que le calcul de la dérivée normale de la pression sur la frontière est conforme avec l'équation linéaire de la quantité de mouvement discrétisée par rapport au temps. Cette consistance contraste avec d'autres schémas de projections SPH [32, 92] dans lesquels des conditions aux frontières de Neumann homogènes pour la pression ont été imposées. Par notre approche, nous évitons complètement les couches limites numériques qui pourraient apparaître lorsque d'autres schémas de projection sont utilisés. Nous avons établi deux variantes de notre méthode SPH, l'une, lagrangienne, appelée LPSPH et l'autre, appelée EPSPH.

L'application de notre méthode SPH à la résolution du problème de l'écoulement de Poiseuille entre deux plaques infinies bi-dimensionnelles a donné des résultats qui sont en très bon accord avec les solutions exactes. Nous avons observé que nos calculs ont donné des résultats beaucoup plus précis que ceux de Bierbrauer et al. [15]. D'autre part, l'évidence numérique a été présentée pour montrer que les deux variantes de notre méthode SPH ont une erreur de troncature de  $O(\Delta t^2, h^2, (\Delta x/h)^4)$ .

En maintenant fixes les particules SPH, cela conduit indéniablement à une perte de la flexibilité associée aux méthodes sans maillage et une limitation est

placée sur les classes de problèmes qui pourraient être résolues. Un aspect positif est, comme nous l'avons vu, un gain considérable du temps de calcul avec l'utilisation des particules SPH fixes lorsque le problème résolu le permet. De plus, bien que ce ne soit pas très pertinent pour le problème de Poiseuille, il y a également des avantages dans la précision des calculs avec l'utilisation d'une distribution uniforme de particules fixes. Par ailleurs, les problèmes peuvent être toujours résolus sur des domaines de calcul ayant des géométries compliquées puisque rien dans la méthode n'oblige les particules SPH fixes à être rangées d'une certaine façon précise. Cela en fait une méthode forte intéressante et prometteuse.



# Chapitre 3

## Dynamique d'une interface immergée

La résolution numérique des problèmes faisant intervenir des interactions entre les fluides et des corps élastiques immergés présente de nos jours encore de grands défis à relever par la communauté scientifique. Ces corps immergés peuvent s'étirer et se déformer en réponse au mouvement du fluide. Le défi majeur consiste à gérer le couplage hydrodynamique à deux sens entre le fluide et le corps élastique qui exerce une force sur le fluide. Comme nous l'avons mentionné à la Section 1.6 du chapitre 1, ce type de problème est rencontré dans plusieurs domaines, par exemple, l'agrégation plaquettaire pendant la coagulation du sang, la déformation des globules rouges dans un écoulement cisailé, la locomotion aquatique et le vol des insectes.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'application de notre modèle SPH à la résolution du problème d'une interface immergée dans un fluide visqueux et incompressible. À ce jour, ce problème a été largement traité dans la littérature [93, 94, 96, 97, 141, 178], mais les résultats de résolution de ce type de problème ont été essentiellement obtenus avec les méthodes de différences finies, éléments

finis et volumes finis. Notre objectif est de traiter ce problème avec le modèle SPH et de comparer nos résultats avec ceux qui existent.

Considérons une interface fermée et gonflée qui, initialement, est à l'équilibre. Si l'on provoque une petite perturbation de cette interface, on s'attend à qu'elle revienne, avec le temps, vers sa position d'équilibre. Ce problème que nous voulons résoudre fut abordé pour la première fois par Tu et Peskin [178] pour tester leur méthode Immersed Boundary (IB). Il a ensuite servi à tester la méthode Immersed Interface Method (IIM) pour les équations de Stokes développées par Leveque et Li [94] et pour les équations de Navier-Stokes (voir par exemple, [93, 169]). Li et Lai [97] ont traité du problème stationnaire qui en résulte. En 2009, Hosseini et Feng [64], en suivant une idée précédente de Tanaka et Takano [170] et Tsubota et al. [176, 177], ont utilisé une méthode SPH pour modéliser le transport de globules rouges bi-dimensionnels dans les capillaires. Des billes et des ressorts furent utilisés pour modéliser la membrane et des équations de mouvement différentes furent écrites pour les particules de la membrane du globule rouge, celles-ci faisant intervenir des forces de flexion et des forces d'extension élastique. L'approche que nous proposons ici est différente et pose un grand problème à la méthode IB de Peskin [143] dans laquelle les forces élastiques générées dans la membrane sont transmises au fluide environnant.

Nous allons dans un premier temps, présenter de manière détaillée toutes les équations qui modélisent la membrane immergée ainsi que celles qui représentent le couplage fluide membrane. Ensuite, nous allons aborder le problème de la dynamique de la membrane dans son état d'équilibre, pour enfin terminer par le problème de la membrane immergée non stationnaire et observer son comportement dans le temps.

### 3.1 Modélisation de l'interface

#### 3.1.1 La densité de force exercée par l'interface

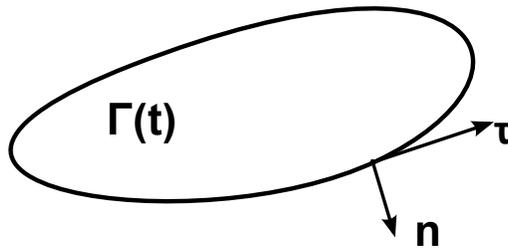


FIG. 3.1: Interface immergée : courbe lisse et fermée  $\Gamma(t)$

Appelons  $\Gamma(t)$  une simple courbe lisse et fermée, comme le montre la figure 3.1 qui représente une membrane Hookéenne élastique immergée dans un fluide visqueux et bi-dimensionnel. Lorsque la membrane est au repos (non étirée) sa longueur est notée  $L_0$  et nous notons par  $s \in [0, L_0]$  la longueur d'arc de la membrane dans son état de repos, mesurée à partir d'un point de référence arbitraire.  $s$  sera utilisé dans les paragraphes à venir pour étiqueter un point matériel de la membrane. Lorsque la membrane est sous tension, la force  $\mathbf{F}$  dans le membre de droite de l'équation (2.1.14) va inclure une force de réaction de la membrane élastique sur le fluide environnant qui, en l'absence d'une accélération de la membrane, sera simplement la force singulière élastique due à l'état d'étirement de la membrane. Nous représentons par

$$\mathbf{X}(s, t) = (X(s, t), Y(s, t)),$$

le vecteur position d'un point matériel sur l'interface dont l'étiquette est  $s$  au temps  $t$ . Appelons  $T = T(s, t)$  la tension dans un petit élément de la membrane au temps  $t$ . Nous allons considérer que la membrane est hookéenne comme l'ont fait plusieurs auteurs avant nous (voir par exemple, [91, 93, 178]), de sorte que

la tension est une fonction linéaire de l'étirement de la membrane par rapport à sa position initiale de repos. Ainsi, l'on utilise une loi de Hooke linéaire pour exprimer en  $\mathbf{X}(s, t)$ , la tension  $T$  dans la membrane qui donne,

$$T = T_0 \left( \left\| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right\|_2 - 1 \right), \quad (3.1.1)$$

où  $T_0$  est une constante appelée le module d'Young qui caractérise la raideur de l'interface. Plus  $T_0$  est grand, plus l'interface est raide et plus l'intensité de la densité de force induite dans cette interface est importante. Nous pouvons remarquer que lorsque l'interface est au repos,

$$\left\| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right\|_2 = 1,$$

et la tension est nulle.

Un vecteur unitaire tangent à  $\Gamma(t)$  est donné par  $\boldsymbol{\tau}(s, t)$  et s'écrit,

$$\boldsymbol{\tau}(s, t) = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} / \left\| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right\|_2. \quad (3.1.2)$$

Entre deux points lagrangiens  $\mathbf{X}(s - \Delta s, t)$  et  $\mathbf{X}(s + \Delta s, t)$  dont la distance de séparation dans l'état de repos est  $2\Delta s$ , la force élastique exercée par la membrane au point  $\mathbf{X}(s, t)$ , est donnée approximativement par

$$2\Delta s \mathbf{f}(s, t) \approx T(s + \Delta s, t) \boldsymbol{\tau}(s + \Delta s, t) - T(s - \Delta s, t) \boldsymbol{\tau}(s - \Delta s, t). \quad (3.1.3)$$

où  $\mathbf{f}$  représente la densité de force par rapport à la longueur d'arc dans l'état de repos. Dans la limite où  $\Delta s$  tend vers 0, nous obtenons,

$$\mathbf{f}(s, t) = \frac{\partial}{\partial s} (T(s, t) \boldsymbol{\tau}(s, t)). \quad (3.1.4)$$

### La force ressentie par le fluide

La densité de force exercée par l'interface immergée qui nous est donnée par l'équation (3.1.4), doit être transmise au fluide environnant. La force  $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t)$  ressentie par le fluide le long de l'interface qu'il contient est donnée par,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = \int_0^{L_0} \mathbf{f}(s, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) ds. \quad (3.1.5)$$

$L_0$  est la longueur de la membrane dans son état de repos, donc  $s \in [0, L_0]$ .  $\delta$  est la fonction delta en dimension deux. Elle permet de s'assurer que la portion de fluide qui ressent la présence de la membrane soit celle qui est située uniquement le long de l'interface de sorte que,  $\mathbf{F}(\mathbf{x}, t) = 0$  pour tous les points  $\mathbf{x}$  qui ne sont pas sur la membrane elle-même. C'est donc pourquoi cette force est dite singulière.

Dans un milieu continu, on a effectivement du fluide situé le long de l'interface. Dans la pratique, ce n'est pas le cas puisque le milieu continu est approximé par un milieu discret ; dans ce cas, il est rare que nous ayons des points de discrétisation dans le domaine du fluide qui coïncide avec l'interface immergée. Ainsi, la densité de force exercée par l'interface est distribuée sur une couche de points de discrétisation du domaine de calcul autour de l'interface. Pour cela, la fonction delta est remplacée par la fonction de distribution lisse  $W(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t), h^*)$  avec  $h^* > 0$  pour un certain maillage discret (voir Section 3.3).

### 3.1.2 Le déplacement de l'interface

À partir de l'équation de la quantité de mouvement, il est attendu que le fluide dans lequel est immergé le corps élastique soit en mouvement. Nécessairement, l'interface se déplace également. Par la condition de non glissement, l'interface se déplace avec la vitesse locale du fluide et nous pouvons écrire

$$\frac{\partial \mathbf{X}(s, t)}{\partial t} = \mathbf{u}(\mathbf{X}(s, t)), \quad (3.1.6)$$

qui représente une équation du déplacement de l'interface.  $\mathbf{u}(\mathbf{X}(s, t))$  est la vitesse du fluide évaluée en  $\mathbf{X}(s, t)$ ; elle est obtenue de manière similaire à l'équation (3.1.5) par la relation suivante :

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}(s, t)) = \int_{\Omega} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}(s, t)) d\mathbf{x}. \quad (3.1.7)$$

où  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  est la vitesse du fluide au point  $\mathbf{x}$  et au temps  $t$ .

En somme, nous pouvons dire que les équations (3.1.1)-(3.1.3) sont les équations de l'interface élastique qui nous permettent de calculer la densité de force sur l'interface. Les équations (3.1.4)-(3.1.7) sont les équations de connexion qui donnent l'interaction entre l'interface immergée et le fluide.

### 3.1.3 Représentation de l'interface et des forces

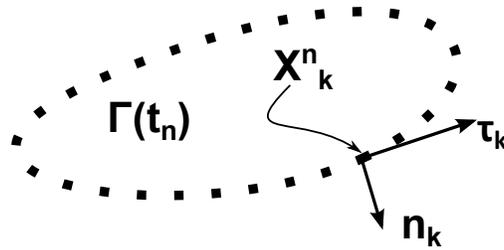


FIG. 3.2: Interface immergée : sa représentation discrète  $\Gamma(t_n)$

L'interface immergée est représentée, à tout instant  $t_n$ , par un ensemble de marqueurs lagrangiens  $\mathbf{X}_k^n = (X_k^n, Y_k^n)$  avec  $k = 0, 1, \dots, N_b$  comme le montre la figure 3.2. Ne travaillant qu'avec des interfaces fermées, nous avons  $(X_0^n, Y_0^n) = (X_{N_b}^n, Y_{N_b}^n)$ ; c'est-à-dire que  $\mathbf{X}(0, t) = \mathbf{X}(L_0, t)$ . Le  $k$ -ième marqueur

de l'interface a pour vecteur position  $(X(s_k, t_n), Y(s_k, t_n))$ , où

$$s_k = k\Delta s \quad \text{avec} \quad \Delta s = L_0/N_b. \quad (3.1.8)$$

Ainsi, les points de contrôle situés sur l'interface sont choisis de telle sorte que  $\Delta s$  soit la distance entre deux points successifs lorsque la membrane est dans son état de repos.

## 3.2 Forme discrète des équations de l'interface élastique

### 3.2.1 Utilisation des splines cubiques

Contrairement à Tu et al. [178] qui ont utilisé une approche des différences finies progressives pour discrétiser les équations (3.1.1)-(3.1.3) de l'interface élastique, nous avons utilisé les *splines cubiques* [27, 94, 169] pour le calcul des équations de l'interface. Étant donné  $(x_i, y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n + 1$ , des points d'interpolation, on appelle *spline cubique* associée à la famille  $(x_i, y_i)$  toute fonction polynomiale  $p$  de classe  $C^2$ , de degré au plus 3 sur chaque  $[x_{i-1}, x_i]$  et telle que  $p(x_i) = y_i$  pour tout  $i$ . L'interpolant  $p(x)$  qui est deux fois différentiable doit, en chaque noeud  $x_i$ , satisfaire les conditions suivantes :

- $p_i(x_i) = p_{i+1}(x_i) = y_i$ , c'est-à-dire que  $p_i$  et  $p_{i+1}$  ont la même ordonnée en  $x_i$ ,
- $p'_i(x_i) = p'_{i+1}(x_i)$ ,  $p_i$  et  $p_{i+1}$  ont la même tangente en  $x_i$ ,
- $p''_i(x_i) = p''_{i+1}(x_i)$ ,  $p_i$  et  $p_{i+1}$  ont la même courbure en  $x_i$ ,
- les contraintes appropriées en  $x_0$  et  $x_{n+1}$  qui consistent généralement à imposer les valeurs de la dérivée seconde à ces frontières.

L'application des splines cubiques au calcul des équations de l'interface élas-

tique consiste à interpoler, au temps  $t_n$ , une courbe lisse à partir des marqueurs lagrangiens et ainsi l'on se retrouve avec une courbe approximative  $\tilde{\Gamma}(t_n)$  qui peut être paramétrée par  $\tilde{\mathbf{X}}(s, t_n) = (\tilde{X}(s, t_n), \tilde{Y}(s, t_n))$  avec  $s \in [0, L_0]$ . Cette courbe approximative est obtenue en utilisant des polynômes de degré 3.

Avec la courbe approximative, on peut ensuite évaluer  $\frac{\partial \tilde{\mathbf{X}}}{\partial s}$  qui va permettre de calculer une approximation de la tension  $\tilde{T}(s, t_n)$  et du vecteur tangent  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}(s, t_n)$  qui vont permettre de trouver une approximation de la densité de force exercée par la membrane. Cette fonction est ensuite évaluée en chaque marqueur lagrangien pour obtenir les valeurs  $\mathbf{f}_k^n$ . L'avantage de cette approche est qu'elle facilite le calcul d'autres informations géométriques comme la courbure de la membrane dont nous n'avons pas fait usage dans notre travail.

### 3.3 Forme discrète des équations de connexion

Après avoir évalué, en chaque point de contrôle de l'interface immergée, la densité de force exercée  $\mathbf{f}_k^n$ , nous devons calculer la force singulière  $\mathbf{F}$ . Comme nous l'avons dit à la Section 3.1.1, la fonction delta est remplacée par une fonction de distribution lisse à support compact. Dans nos travaux, nous avons choisi la même fonction  $W$  que celle utilisée dans la méthode SPH décrite dans le chapitre précédent. Seulement, le rayon du support compact n'est pas, en général, le même que celui que nous avons avant. Ainsi, l'intégrale de l'équation (3.1.5) est approximé par une somme de la façon suivante,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}, t_n) \approx \sum_{k=1}^{N_b} \mathbf{f}^n(\mathbf{X}_k) W(\mathbf{x} - \mathbf{X}_k^n, h^*) \Delta s. \quad (3.3.1)$$

Donc, chaque particule fluide  $\mathbf{x}_i$  ressent, à cause de la membrane, une force donnée par,

$$\mathbf{F}_i^n \approx \sum_{k=1}^{N_b} \mathbf{f}_k^n W_{ik} \Delta s. \quad (3.3.2)$$

Avec la connaissance de la force ressentie par le fluide, on procède, à partir de l'équation de la quantité de mouvement, au calcul de la vitesse  $\mathbf{u}$  du fluide. Cette connaissance de la vitesse du fluide permet de calculer la vitesse de la membrane et ainsi de la déplacer. Pour cela, nous avons choisi un schéma semi-implicite.

### 3.4 Schéma d'évolution semi-implicite

Une approche totalement implicite [94], pour obtenir la position de marqueurs de l'interface immergée, exige pendant chaque pas de temps de faire des itérations en calculant toutes les équations de la méthode de projection (2.2.1)-(2.2.6) jusqu'à la convergence de la solution. Cette approche, comme l'ont admis Lee et Leveque [93], est compliquée à implémenter pour les écoulements de Navier-Stokes et de plus est coûteuse en temps de calcul. Nous avons adopté une approche beaucoup plus simple inspirée de celle de Lee et Leveque [93] dans laquelle les itérations sont faites uniquement pour obtenir la vitesse et la position des marqueurs lagrangiens après avoir calculé la vitesse  $\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{x})$  du fluide, c'est-à-dire de la vitesse  $\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{x}_i)$  de chaque particule fluide SPH. Les itérations débutent donc avec une estimation de la vitesse des points de contrôle qui est une approximation de l'équation (3.1.7) de la manière suivante,

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}_k^n, t_{n+1})^{[0]} \approx \sum_{j=1}^N \mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{x}_j) W(\mathbf{X}_k^n - \mathbf{x}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}, \quad (3.4.1)$$

qui équivaut à

$$\mathbf{u}^{n+1,[0]}(\mathbf{X}_k^n) = \sum_{j=1}^N \mathbf{u}_j^{n+1} W_{kj} \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.4.2)$$

où  $N$  et  $\mathbf{x}_j$  sont respectivement le nombre de particules fluides et la  $j$ -ième particule fluide présents dans le support compact de  $W$  centré en  $\mathbf{X}_k^n$ . Cette estimation de la vitesse des marqueurs nous permet ensuite de calculer une estimation de la position de ceux-ci au moyen d'une discrétisation d'Euler avant sur le temps de l'équation (3.1.6) qui nous permet d'avoir,

$$\frac{\mathbf{X}_k^{[0]} - \mathbf{X}_k^n}{\Delta t} = \mathbf{u}^{n+1,[0]}(\mathbf{X}_k^n), \quad (3.4.3)$$

ce qui nous donne,

$$\mathbf{X}_k^{[0]} = \mathbf{X}_k^n + \Delta t \mathbf{u}_k^{n+1,[0]}, \quad (3.4.4)$$

où  $\mathbf{u}_k^{n+1,[0]}$  est la vitesse du fluide au temps  $t_{n+1}$  évaluée en  $\mathbf{X}_k^n$  au temps  $t_n$ .

Nous posons  $I = 0$  et nous utilisons un méthode itérative pour créer une séquence de vecteurs  $\mathbf{X}_k^{[1]}, \mathbf{X}_k^{[2]}, \dots$  qui converge vers la racine  $\mathbf{X}$  de la fonction :

$$g(\mathbf{X}) = \mathbf{X} - \mathbf{X}_k^n - \frac{1}{2} \Delta t (\mathbf{u}^n(\mathbf{X}_k^n) + \mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{X})); \quad (3.4.5)$$

où

$$\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{X}) = \sum_{j=1}^N \mathbf{u}_j^{n+1} W(\mathbf{X} - \mathbf{x}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}. \quad (3.4.6)$$

Ces itérations sont arrêtées aussitôt que  $\|g(\mathbf{X}_k^I)\| \leq \epsilon$  pour une tolérance  $\epsilon$  et un entier  $I$  et nous fixons alors  $\mathbf{X}_k^{n+1} = \mathbf{X}_k^I$ .

Au lieu de calculer la vitesse de marqueurs lagrangiens comme à l'équation (3.4.1) ou (3.4.6), nous avons effectué les calculs en adoptant la forme d'interpolation SPH normalisée. La forme d'interpolation SPH normalisée pour une fonction  $f$  quelconque s'écrit [44, 103, 152]

$$f_i = \frac{\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} f_j W_{ij}}{\sum_{j=1}^N \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij}}. \quad (3.4.7)$$

Cette formulation a l'avantage qu'elle est exacte pour une fonction constante. Ainsi, les équations (3.4.2) et (3.4.6) deviennent respectivement,

$$\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{X}_k^n)^{[0]} = \frac{\sum_{j=1}^N \mathbf{u}_j^{n+1} W_{kj} \frac{m_j}{\rho_j}}{\sum_{j=1}^N W_{kj} \frac{m_j}{\rho_j}}, \quad (3.4.8)$$

et

$$\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{X}) = \frac{\sum_{j=1}^N \mathbf{u}_j^{n+1} W(\mathbf{X} - \mathbf{x}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}{\sum_{j=1}^N W(\mathbf{X} - \mathbf{x}_j, h) \frac{m_j}{\rho_j}}, \quad (3.4.9)$$

qui sont celles que nous utilisons dans nos calculs.

## 3.5 La description du problème

Il est question de spécifier la position et la forme initiale de la membrane et simuler son mouvement jusqu'à sa position d'équilibre. Initialement, la membrane a une forme elliptique avec le grand demi-axe et le petit demi-axe de longueurs  $a$  et  $b$  respectivement. L'ellipse est localisée au centre du domaine de calcul. Comme nous l'avons dit plus haut,  $L_0$  est la longueur de la membrane dans son état de repos et le cercle correspondant a un rayon  $r_0 = L_0/2\pi$ . Cette membrane gonflée a, à l'équilibre, une longueur d'équilibre  $L_e$  et un rayon  $r_e = L_e/2\pi$  qui dépend uniquement de la quantité de fluide enfermée. Ainsi, comme le montre la figure 3.3, on distingue trois configurations possibles de l'interface ; la configuration de repos, la configuration d'équilibre et la configuration quelconque.

### 3.5.1 La configuration de repos

Dans la configuration de repos, la membrane a une forme circulaire  $\Gamma_0$  dont l'équation de la position  $\mathbf{X}_0$  est,

$$\Gamma_0 := \begin{cases} X_0 = r_0 \cos\left(\frac{s}{r_0}\right), \\ Y_0 = r_0 \sin\left(\frac{s}{r_0}\right), \text{ où } s \in [0, L_0]. \end{cases} \quad (3.5.1)$$

Il est facile de vérifier que

$$\left\| \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial s} \right\|_2 = 1;$$

donc la tension dans la membrane est nulle de même que la densité de force exercée  $f$  par la membrane. Ainsi, dans la configuration de repos, le fluide est immobile et la pression est constante partout.

### 3.5.2 La configuration quelconque

La configuration quelconque résulte d'une perturbation de l'état d'équilibre de la membrane. L'état quelconque initial que nous avons choisi est une ellipse de demi-axes de longueurs  $a$  pour le grand et  $b$  pour le petit. Cette forme initiale  $\Gamma_i$  et donnée par l'équation,

$$\Gamma_i := \begin{cases} X_i = a \cos\left(\frac{s}{r_0}\right), \\ Y_i = b \sin\left(\frac{s}{r_0}\right), \text{ où } s \in [0, L_0]. \end{cases} \quad (3.5.2)$$

La tension dans la membrane n'étant pas uniforme (ou constante), les forces restauratrices qu'elle génère vont tendre à ramener la membrane vers un état stationnaire qui est circulaire. Pour une valeur fixe  $T_0$ , la membrane initialement elliptique relaxe graduellement vers la position d'équilibre lorsque la viscosité du fluide augmente. Cette convergence est monotone. Par contre, lorsque la viscosité  $\mu$  est petite, la convergence vers l'état stationnaire est oscillatoire. À tout moment, on démontre [93, 144] que le saut de la pression à travers la membrane est donné par :

$$[p] = \frac{\mathbf{f} \cdot \mathbf{n}}{\|\partial \mathbf{X} / \partial s\|_2}. \quad (3.5.3)$$

### 3.5.3 La configuration d'équilibre

Pour toute membrane fermée, l'état d'équilibre est un cercle de rayon  $r_e > r_0$ . La position de la membrane est donnée par,

$$\Gamma_e := \begin{cases} X_e = r_e \cos\left(\frac{s}{r_0}\right), \\ Y_e = r_e \sin\left(\frac{s}{r_0}\right), \text{ où } s \in [0, L_0]. \end{cases} \quad (3.5.4)$$

L'aire,  $A_i = \pi ab$ , de la forme initiale (ou quelconque) elliptique de la membrane doit rester la même lorsque celle-ci converge vers son état d'équilibre à cause de l'incompressibilité du fluide qu'elle contient. Ainsi, nous savons que le rayon de la membrane à l'état d'équilibre est  $r_e = \sqrt{ab}$ . Dans cet état d'équilibre, la tension dans la membrane est constante et, la densité de force dans la membrane est orientée uniquement dans la direction normale. La vitesse du fluide s'annule partout lorsque la membrane est rendue à l'état d'équilibre. La pression atteint une valeur constante à l'intérieur et à l'extérieur de la membrane avec un saut. De l'équation (3.5.3), on obtient que ce saut de pression est donné par

$$[p] = -\frac{T_0}{r_0} \left( \frac{r_e}{r_0} - 1 \right) \frac{\Delta s}{\Delta \tilde{s}}, \quad (3.5.5)$$

avec  $\Delta \tilde{s} \approx \|\mathbf{X}_e(s + \Delta s) - \mathbf{X}_e(s)\|_2$  et  $\Delta s = L_0/N_b$ .

Cette dernière expression correspond à,

$$[p] = -\frac{T_0}{r_e} \left( \frac{r_e}{r_0} - 1 \right), \quad (3.5.6)$$

car  $\Delta s = r_0 \Delta \theta$  et  $\Delta \tilde{s} = r_e \Delta \theta$  où  $\Delta \theta$  est l'angle entre les vecteurs  $\mathbf{X}_e(s + \Delta s)$  et  $\mathbf{X}_e(s)$ . Les trois configurations possibles de la membrane sont présentées à la

figure 3.3.

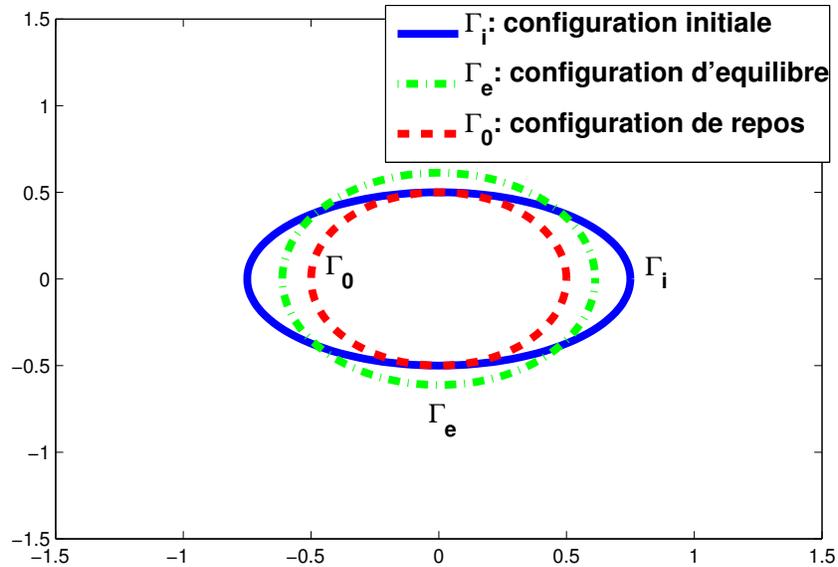


FIG. 3.3: Les configurations initiales, de repos et d'équilibre de la membrane élastique

## 3.6 Résultats numériques

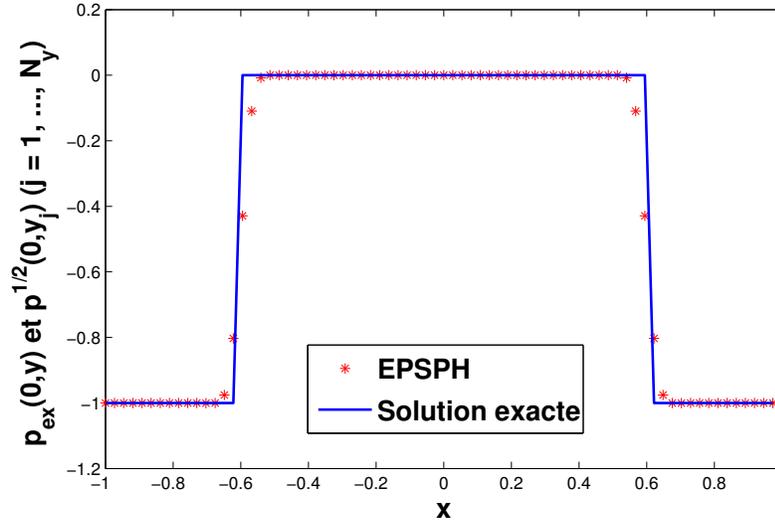
### 3.6.1 Problème de la membrane stationnaire immergée

Nous nous sommes intéressés au problème d'une membrane immergée sous tension dans son état stationnaire. Dans cet état, la membrane est supposée demeurer fixe tout au long des simulations. La vitesse du fluide doit être nulle partout. Et, le saut de pression, qui est sous forme d'escalier, doit demeurer inchangé. En général, les simulations numériques produisent des erreurs lorsqu'on les compare avec le comportement exact de la membrane dans son état stationnaire. Notre objectif est d'étudier le comportement de ces erreurs.

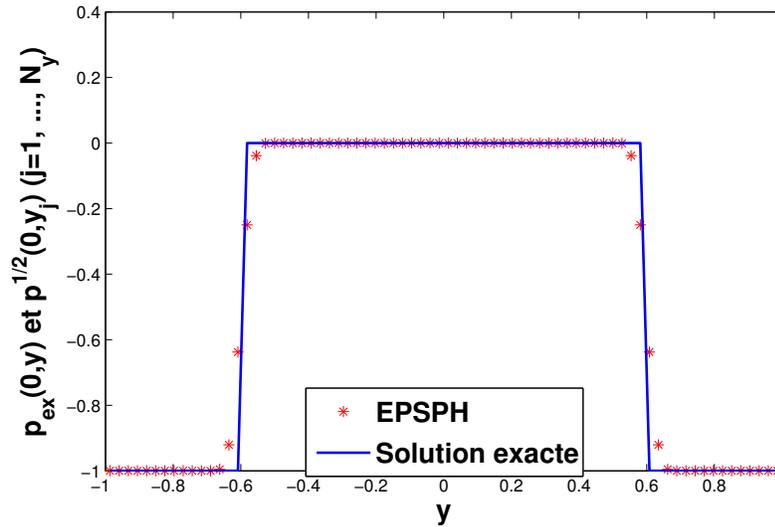
Pour ce faire, les rayons dans les états de repos et d'équilibre sont respecti-

vement  $r_0 = 0.5$ ,  $r_e = 0.6$ . Le domaine de calcul est le carré  $\Omega_C = [-1.5, 1.5] \times [-1.5, 1.5]$ . La membrane circulaire et tendue est placée de sorte que son centre soit en  $(0, 0)$ . Des conditions aux frontières de non glissement sont imposées en  $y = \pm 1.5$  et les conditions aux limites périodiques sont appliquées dans la direction  $x$ . Bien que les effets de bord modifient la forme circulaire de la membrane dans l'état d'équilibre de sorte que son rayon  $r_e$  ne reste pas constant et uniforme, dans nos expériences numériques, nous n'avons pas observé de variations significatives de la forme circulaire. Ayant choisi  $T_0 = 3$  et pour une forme circulaire de la membrane, nous avons  $f_\tau = 0$  et  $f_n = -1$  qui sont respectivement les composantes tangentielle et normale de la densité de force  $\mathbf{f}$  par unité de longueur. L'équation (3.5.6) prédit que le saut de pression  $[p]$  doit être égal à  $-1$ . Nous choisissons  $N_x$  et  $N_y$  comme étant respectivement le nombre de particules fluides suivant les directions  $x$  et  $y$  du domaine de calcul. Les figures 3.4 (A) et (B) montrent, respectivement, une coupe de la distribution stationnaire de la pression  $p^{1/2}$  qui est la valeur de  $p^{n+1/2}$  au temps  $t_0$  le long de  $y = 0$  et  $x = 0$  calculée avec la méthode EPSPH sur un maillage ayant  $N_x = N_y = 70$ ,  $N_b = 140$  et une vitesse initiale  $\mathbf{u}^0 = \mathbf{0}$ .  $N_b$  représente le nombre de marqueurs lagrangiens de la membrane. La valeur de la viscosité est  $\mu = 0.1$ . À cause de l'utilisation d'une fonction de lissage  $W$  à la place d'une fonction delta dans l'évaluation de la force élastique (3.1.5), la discontinuité de la pression à travers  $r = 0.6$  est atténuée. Comme on peut le voir sur la figure, les solutions approchée et exacte sont très similaires.

Nous commençons notre étude de la précision des méthodes LPSPH et EPSPH en examinant comment les erreurs dans la pression se développent en fonction du temps à partir de la vitesse initiale  $\mathbf{u}^0$  égale à  $\mathbf{0}$  si la membrane est maintenue fixe dans sa position d'équilibre (cercle de rayon  $r_e = 0.6$ ). Sur la figure 3.5 (A)-(F) nous montrons l'erreur absolue moyenne  $(p_{ex} - p^{n+1/2})_{dam}$  pour les deux méthodes, dans lesquelles  $p_{ex}$  représente la pression exacte. La diffé-



(A)



(B)

FIG. 3.4: Membrane Hookéenne en équilibre. Coupe de la distribution de la pression  $p^{1/2}$  calculée avec la méthode EPSPH le long de (A)  $y = 0$ , (B)  $x = 0$ , comparée avec les valeurs exactes.  $T_0 = 3$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 70$ ,  $N_b = 140$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ ,  $h^* = 1.4h$ .

rence absolue moyenne (dam) est définie de la manière suivante :

$$(p_{ex} - p^{n+1/2})_{\text{dam}} := \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x N_y} \left| p_{ex}(\mathbf{x}_i, (n + 1/2)\Delta t) - p_i^{n+1/2} \right|. \quad (3.6.1)$$

Les figures (A), (C) et (E) ont été obtenues avec 1600 particules ( $N_x = N_y = 40$ ) qui étaient initialement disposées sur un maillage régulier, alors que les résultats des figures de la colonne de droite ont été obtenus sur un maillage raffiné de 6400 particules (initialement  $N_x = N_y = 80$ ). Pour tous les calculs, la viscosité  $\mu$  a été prise égale à 0.25. On observe sur ces figures, comme attendu, que l'erreur diminue lorsqu'on raffine le maillage. Les figures 3.5 (A) et (B) montrent une croissance continue de l'erreur de la pression en fonction du temps lorsque la méthode LPSPH est utilisée sans réinitialisation des particules fluides. On peut observer que l'erreur croît soudainement à un certain moment dans le temps et cela est dû à une densité inadéquate des particules SPH dans le voisinage de la membrane. Une réinitialisation périodique des particules SPH (montrée sur les figures 3.5 (C) et (D)) réduit l'erreur de la pression presque à sa valeur initiale. Cette observation permet de conclure qu'après le premier pas de temps la plupart de la croissance de l'erreur dans les figures 3.5 (A) et (B) est attribuable au mouvement des particules. Ce mouvement a lieu parce que le saut de pression à travers la membrane n'est pas exactement équilibré par la composante normale de la force élastique créant ainsi un flux migratoire des particules loin de la membrane. Une autre preuve de la migration des particules SPH près de la surface de la membrane sera présentée dans nos calculs de la position de la membrane pour le problème dépendant du temps, à la Section 3.6.2. Contrairement aux résultats obtenus avec la méthode LPSPH, les résultats des simulations sur les deux maillages avec la méthode EPSPH, montrés sur les figures 3.5 (E) et (F), montrent que l'erreur de la pression se stabilise rapidement lorsque la pression

et la vitesse convergent vers leurs valeurs stationnaires respectives.

Nous pouvons observer des figures 3.5 (E) et (F) que l'erreur de la pression décroît en grandeur en fonction du raffinement du maillage. La méthode EPSPH va être utilisée pour étudier en détail la convergence de l'état stationnaire de la vitesse et de la pression. La pression et la vitesse calculées seront considérées comme ayant atteint leurs valeurs stationnaires respectives  $p^\infty$  et  $\mathbf{u}^\infty$  lorsque les différences dans la pression et la vitesse à des pas de temps successifs et en tous les points du maillage deviennent, dans un sens, suffisamment petites. La valeur emq de la différence de l'évaluation à deux pas de temps successifs de la pression en tous les points SPH est donnée par

$$(p^{n+1/2} - p^{n-1/2})_{emq} := \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \left( \sum_{i=1}^{N_x N_y} (p_i^{n+1/2} - p_i^{n-1/2})^2 \right)^{1/2}. \quad (3.6.2)$$

De même, la définition de la valeur emq de  $\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n$  est :

$$(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n)_{emq} := \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \left( \sum_{i=1}^{N_x N_y} \|\mathbf{u}_i^{n+1} - \mathbf{u}_i^n\|_2^2 \right)^{1/2}. \quad (3.6.3)$$

Le critère d'arrêt de nos calculs est que le maximum  $(p^{n+1/2} - p^{n-1/2})_{emq}$  et  $(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n)_{emq}$  doit être plus petit que  $\varepsilon \Delta t$  où  $\Delta t$  est le pas de temps et  $\varepsilon$  a été fixé à  $10^{-3}$ .

Sur les figures 3.6 (A)-(D), nous montrons les erreurs absolues moyennes  $(p_{ex} - p^\infty)_{dam}$  et  $(\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}^\infty)_{dam}$  représentées en fonction de la taille du maillage pour les membranes libres et fixes, où  $\mathbf{u}_{ex}$  est la vitesse exacte (dans ce cas égale à  $\mathbf{0}$  partout). La différence absolue moyenne de la vitesse stationnaire et de la vitesse exacte est donnée par

$$(\mathbf{u}_{ex} - \mathbf{u}^\infty)_{dam} := \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i=1}^{N_x N_y} \|\mathbf{u}_{ex}(\mathbf{x}_i, \infty) - \mathbf{u}_i^\infty\|_1. \quad (3.6.4)$$

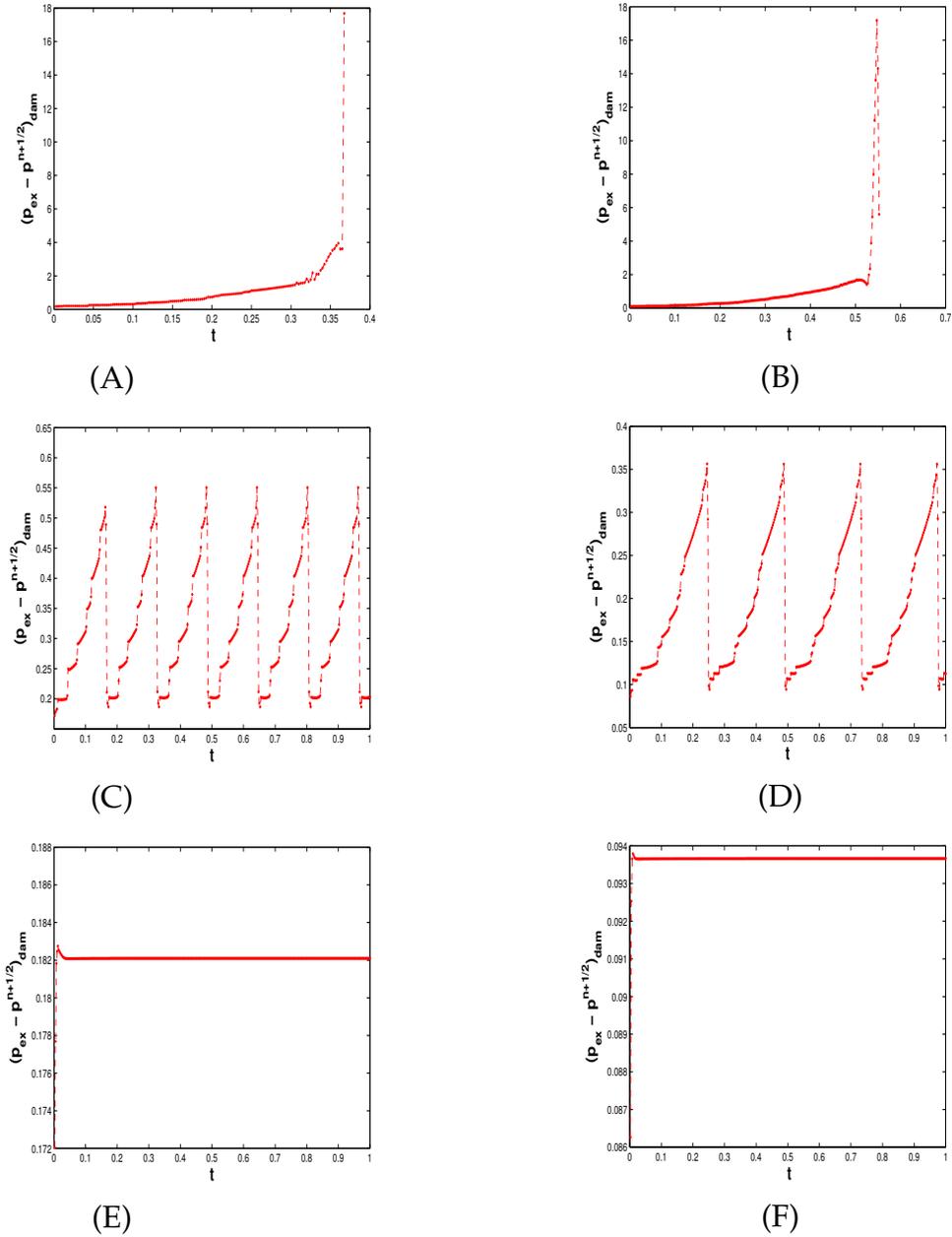


FIG. 3.5: Membrane Hookéenne en équilibre. Évolution de l'erreur absolue moyenne de la pression calculée en se servant de la méthode LPSPH sans réinitialisation des particules fluides ((A)-(B)), méthode LPSPH avec réinitialisation des particules fluides ((C)-(D)) et méthode EPSPH ((E)-(F)). Les résultats montrés sur les figures (A), (C) et (E) ont été calculés avec initialement  $N_x = N_y = 40$ , alors que ceux des figures (B), (D) et (F) ont été calculés avec initialement  $N_x = N_y = 80$ . Pour tous les calculs,  $T_0 = 3$ ,  $\mu = 0.25$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_b = 360$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $2h = 2.25(\Delta x + \Delta y)$ ,  $h^* = 0.5h$ .

Les résultats présentés sur les figures 3.6 (A)-(D) ont été calculés sur une séquence de maillage avec  $N_x = N_y = 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160$  et  $200$ . La longueur de lissage que nous avons choisie est  $h = 1.125(\Delta x + \Delta y)$  où  $\Delta x$  et  $\Delta y$  sont les espacements interparticules. Le rayon des fonctions delta lisse placées le long de la membrane a été fixé à  $2h^* = 1.125(\Delta x + \Delta y)$ . Nous avons maintenu un rapport constant entre le pas de temps et  $\Delta x$  fixant  $\Delta t = 0.1\Delta x$ . Le choix des viscosités distingue les figures 3.6 (A) et (C) des figures 3.6 (B) et (D) : dans les premières  $\mu$  est égal à  $0.25$  et dans les deuxièmes  $\mu = 1$ . Les ordres de convergence des calculs de la pression sur les figures 3.6 (A) et (B) sont basés sur les sept plus grandes valeurs de  $N_x$  pour la membrane libre et sur les six plus grandes valeurs de  $N_x$  pour la membrane fixe.

Les résultats pour la pression montrent que les erreurs pour le cas où la membrane est libre de se mouvoir sont significativement plus importantes que lorsque la membrane est fixe. Ceci s'explique, au moins partiellement, par le fait que dans le cas de la membrane fixe la tension dans la membrane est constante. Par contre, lorsque la membrane est libre de se mouvoir, l'aire contenue dans la membrane devient petit à cause de la perte de masse. Pour cette raison, la tension dans la membrane libre devient de plus en plus faible ce qui affecte donc la taille du saut de pression à travers celle-ci. Nous comparons, bien sûr, la pression calculée dans toutes nos simulations avec la pression pour une membrane circulaire fixe. Dans le cas d'une membrane mobile, une particule SPH peut être traversée par la position de la membrane calculée, ce qui entraînera une mauvaise évaluation de la pression en ce point. En comparant les figures 3.6 (A) et (B) nous notons que la différence dans les erreurs de la pression pour les membranes fixes et mobiles est plus petite sur la figure 3.6 (B) que sur la figure 3.6 (A) et que les valeurs des erreurs pour la membrane libre dans la figure 3.6 (B) sont plus petites que dans la figure 3.6 (A). Cela s'explique par le fait que nous avons une viscosité plus importante pour les résultats de la figure 3.6 (B) : notre

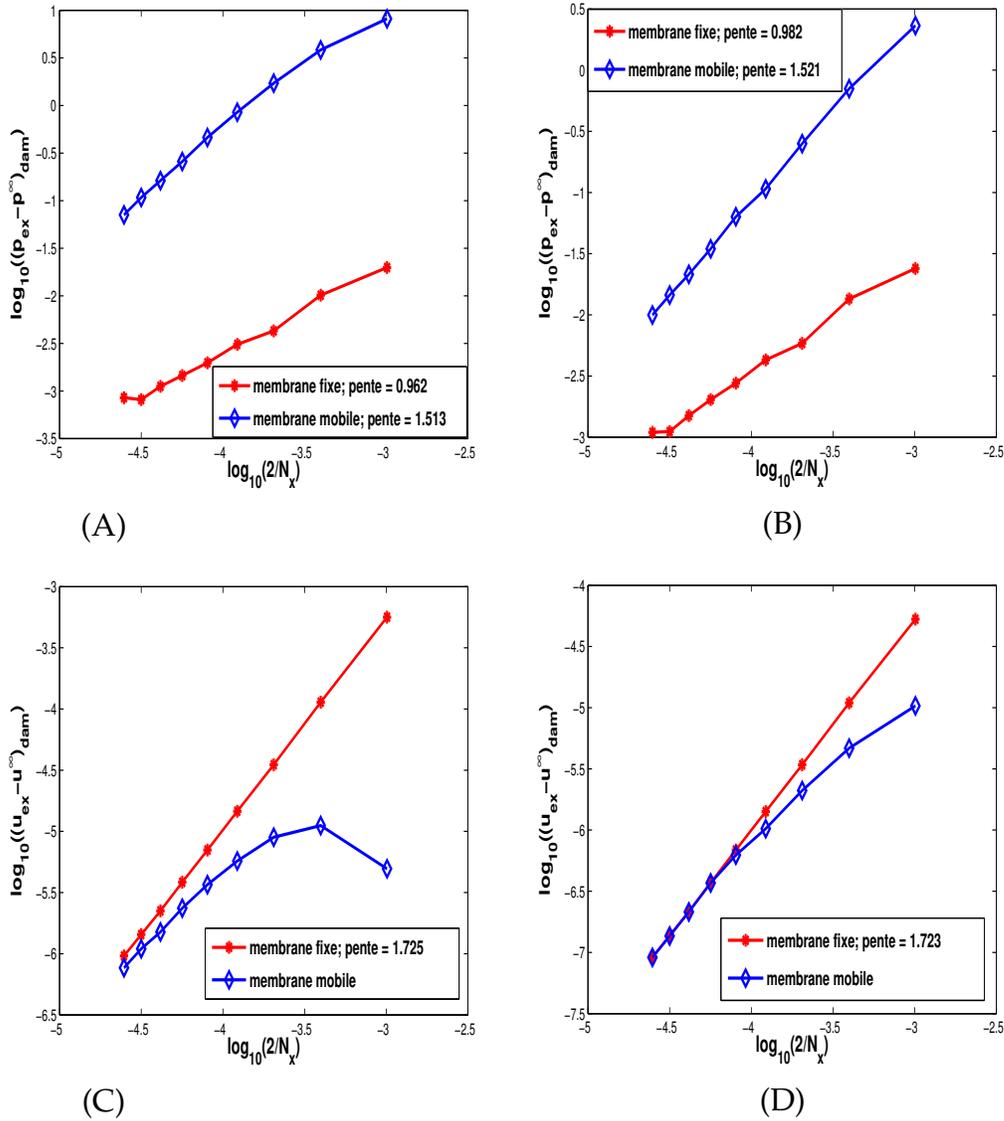


FIG. 3.6: Membrane Hookéenne en équilibre. Erreurs absolues moyennes (A)-(B) : la pression et (C)-(D) : la vitesse, calculée avec la méthode EPSPH avec  $N_x = N_y$  pour les membranes fixe et libre. Pour (A) et (C)  $\mu = 0.25$  et pour (B) et (D)  $\mu = 1$ . Dans tous les cas  $T_0 = 3$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_b = 360$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $2h = 2.25(\Delta x + \Delta y)$  et  $h^* = 0.5h$ .

méthode est plus précise et plus la viscosité du fluide est importante, moins la membrane se déforme lorsqu'elle est libre de se mouvoir. L'ordre de convergence de la pression pour les membranes libres de se mouvoir est proche de la valeur optimale (1.5 [56]) et pour le cas des membranes fixes, cet ordre est approximativement 1, peu importe la viscosité choisie. Cela est similaire aux méthodes IB et est comme nous pourrions nous y attendre [27, 54].

Le calcul pour la vitesse est moins sensible à ce que la membrane se déplace ou pas : la solution exacte est zéro partout de sorte qu'il y a très peu de changements dans les valeurs calculées lorsque des points SPH sont traversés par une membrane mobile et les courbes d'erreurs coïncident presque parfaitement pour des maillages suffisamment raffinés. Puisque la méthode EPSPH est plus précise pour une plus grande viscosité, les erreurs sur la figure 3.6 (D) sont plus petites que celles de la figure 3.6 (C). Cependant, les ordres de convergence sont presque quadratiques, et sont donc optimaux pour les deux cas.

### 3.6.2 Problème de la membrane non stationnaire immergée

Les résultats de cette section sont présentés pour une membrane Hookéenne initialement étirée dont la forme est elliptique ayant pour grand demi-axe et petit demi-axe  $r_x(0) = 0.75$  et  $r_y(0) = 0.5$ , respectivement, où  $r_x(t)$  et  $r_y(t)$  sont les longueurs des demi-axes de l'ellipse dans les directions  $x$  et  $y$  au temps  $t$ . Dans un domaine infini, la forme de la membrane est supposée changer en fonction du temps pour finalement s'établir en un cercle de rayon  $r_e = \sqrt{r_x(0)r_y(0)} \approx 0.61237$ . Comme dans nos calculs de la section précédente, nous avons choisi un domaine de calcul carré  $\Omega_C = [-1.5, 1.5] \times [-1.5, 1.5]$  et le rayon de la membrane dans son état de repos a été fixé à  $r_0 = 0.5$ . Et comme précédemment, l'influence des frontières du domaine de calcul signifie que la forme d'équilibre finale ne sera pas exactement circulaire mais la différence a été trouvée très faible. Pour

tous les résultats présentés dans cette section, exceptés ceux du tableau 3.1 et de la figure 3.17, nous avons choisi  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$  et  $h^* = 1.4h$ .

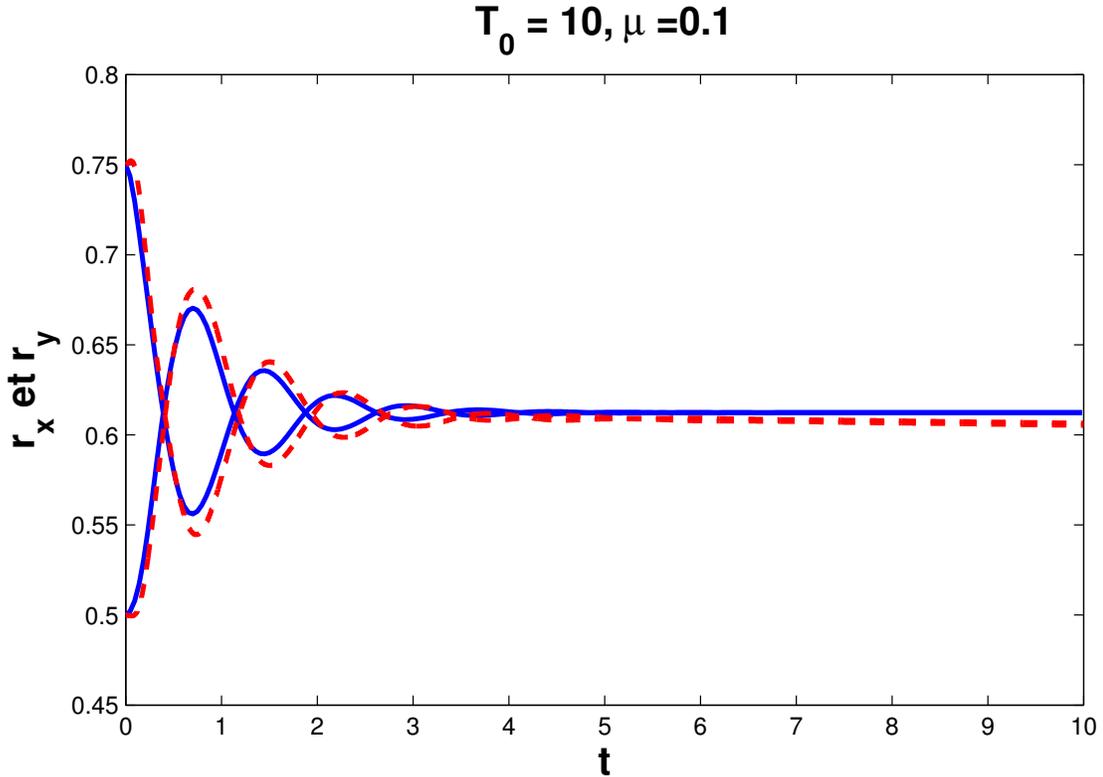


FIG. 3.7: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial  $r_x(t)$  et du petit demi-axe initial  $r_y(t)$ .  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . — : Tan et al. [169], - - : méthode EPSPH

Dans la figure 3.7, nous montrons la convergence de  $r_x(t)$  et  $r_y(t)$  lorsque la valeur de la tension dans la membrane à l'état d'équilibre  $T_0$  est fixée à 10 et la viscosité du fluide  $\mu$  aussi bien à l'intérieur qu'à l'extérieur de la membrane est fixée à 0.1. Les résultats de notre méthode EPSPH sont comparés avec ceux de Tan et al. [169], qui ont utilisé une méthode "immersed interface" de précision d'ordre deux pour étudier les oscillations d'une membrane immergée pour des choix variés de la viscosité du fluide à l'intérieur et à l'extérieur de la membrane. Les oscillations observées sur les deux graphiques sont dues au fait que la visco-

sité du fluide est insuffisante pour diffuser l'énergie élastique assez rapidement pour rendre la convergence vers l'état stationnaire monotone. Dans les deux ensembles de calcul de la figure 3.7, les équations du fluide ont été discrétisées avec un maillage de  $64 \times 64$ . Bien qu'il y ait un bon accord qualitatif entre nos prédictions numériques et ceux de Tan et al. [169], on peut observer que les amplitudes des oscillations dans nos résultats sont plus grands que les leurs. Nous observons également qu'il y a, dans notre cas, une perte progressive de la masse à partir de la valeur théorique  $\pi r_e^2$  avec le temps. Cela est malheureusement typique des méthodes IB [144, 178] et l'utilisation de la méthode SPH ne résoud pas le problème. Cependant, nous avons observé qu'en faisant varier le rayon  $h^*$  de la longueur de lissage pour les particules lagrangiennes de la membrane, on pouvait réduire considérablement la perte de masse. Sur les figures 3.8 (A) et (B), on peut observer que la perte de masse a diminué considérablement à mesure que nous avons augmenté  $h^*$ . Dans la figure 3.8 tous les paramètres sont identiques à ceux de la figure 3.7 à l'exception de  $h^*$  qui varie. Le choix de  $h^*$  a donc une influence importante sur la conservation de l'aire de la région enfermée par la membrane au cours des simulations. Cette flexibilité dans le choix de  $h^*$  pour l'obtention de meilleurs résultats des calculs est un avantage important de la méthode EPSPH sur la méthode IB. Par ailleurs, nous montrons dans la section suivante que l'erreur de l'aire du fluide contenu dans la membrane à tout moment converge vers zéro lorsqu'on raffine le maillage.

Sur les figures 3.9-3.12 nous montrons les champs de vitesse et de pression aux temps  $t = 0.2$ ,  $t = 0.5$ ,  $t = 1$  et  $t = 2.0$ . La comparaison avec la figure 9 équivalente de [169] montre une fois de plus un accord convaincant avec nos résultats. Cependant, comme cela serait attendu avec une méthode de type IB, la régularisation (3.3.1)-(3.3.2) des fonctions delta le long de l'interface de la membrane a pour conséquence d'atténuer les profils de la pression comparativement à ceux de [169].

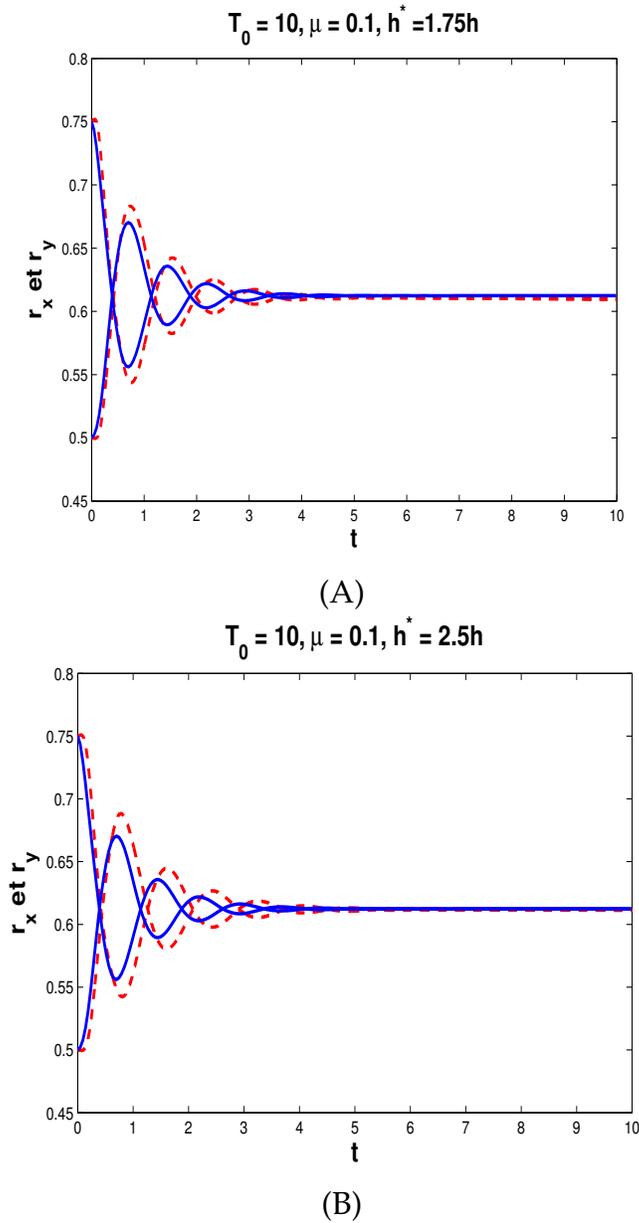


FIG. 3.8: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial  $r_x(t)$  et du petit demi-axe initial  $r_y(t)$ .  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ . — : Tan et al. [169], - - : méthode EPSPH. (A)  $h^* = 1.75h$  et (B)  $h^* = 2.5h$

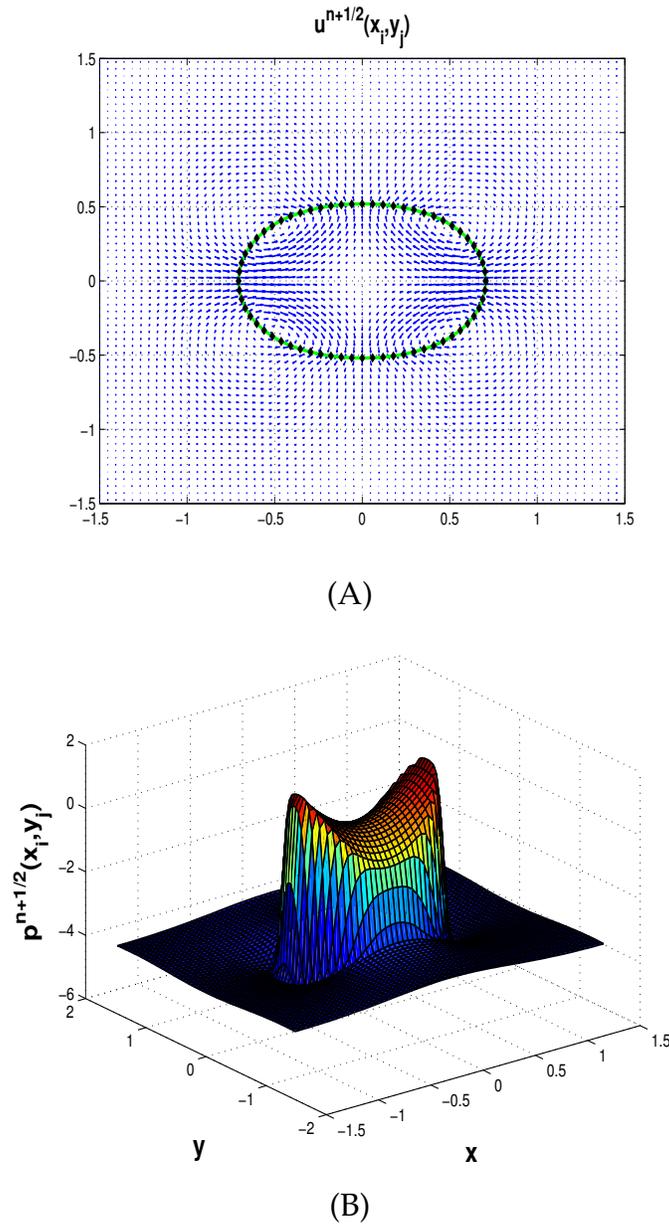
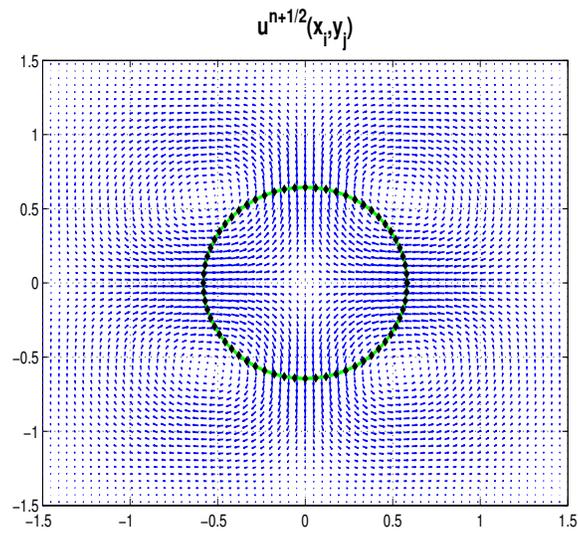
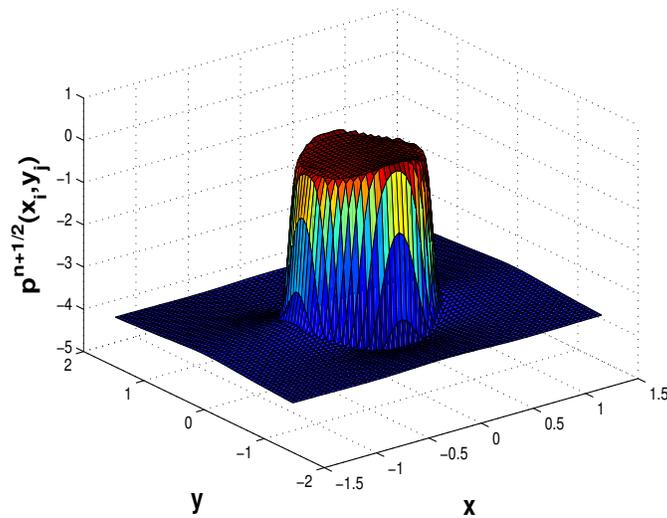


FIG. 3.9: Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $u(x, t)$  et (B) pression  $p(x, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 0.2$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

En supposant que tous les autres paramètres (physiques et numériques) sont fixes, nous avons observé qu'une diminution de la viscosité tend à conduire à des oscillations ayant une amplitude et une fréquence plus grandes pendant la simu-



(A)



(B)

FIG. 3.10: Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $u(x, t)$  et (B) pression  $p(x, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 0.5$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

lation ( $t \in [0, 10]$ ). Cela est mis en évidence sur les figures 3.13 et 3.14 où  $\mu = 0.05$  et  $\mu = 0.025$ , respectivement. Une valeur suffisamment grande de la viscosité, d'autre part, conduit à une convergence monotone vers la forme d'équilibre et

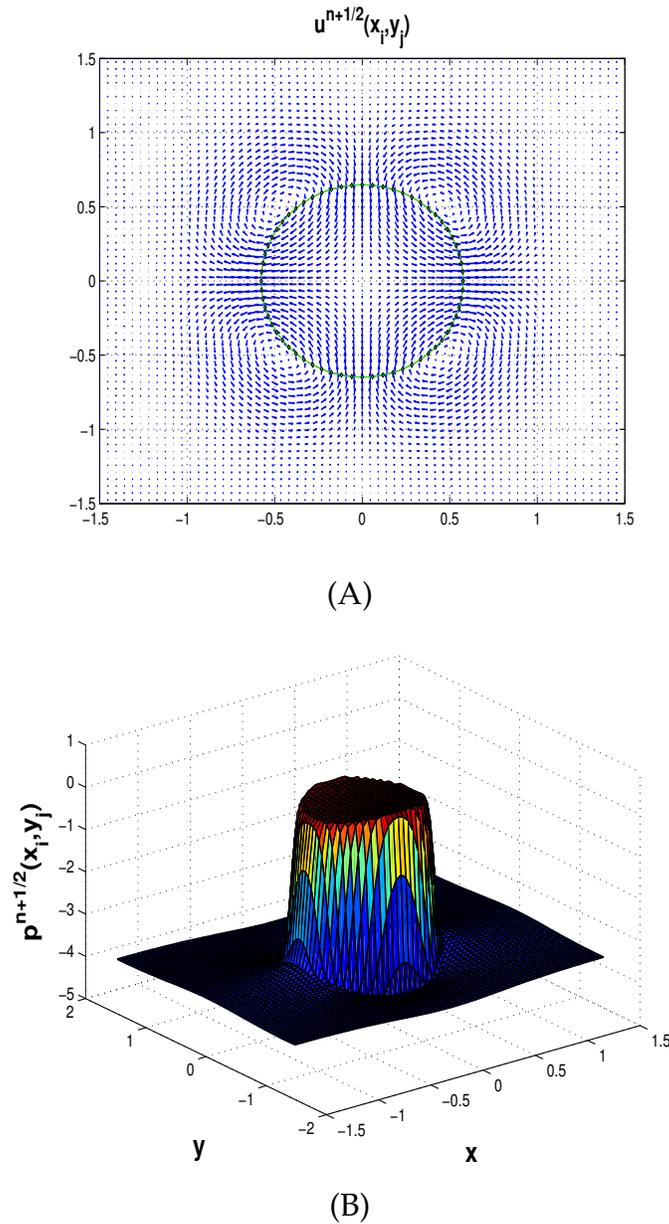
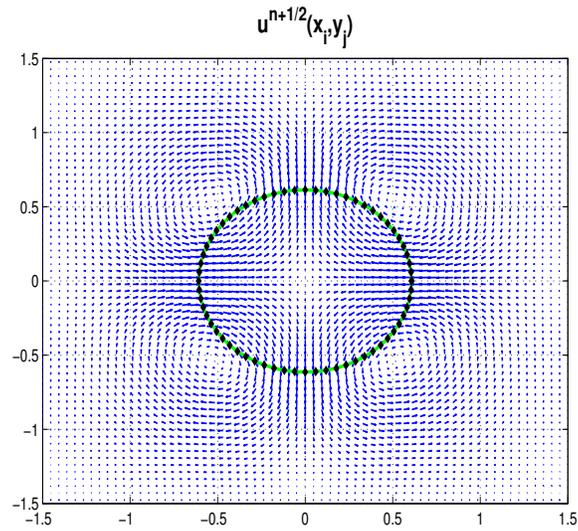


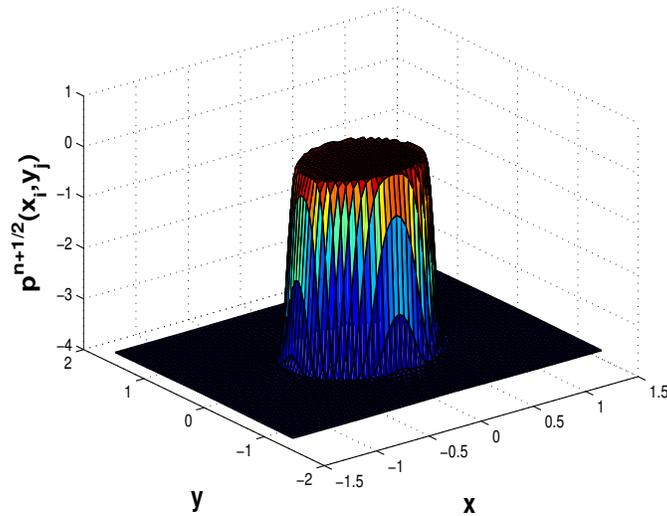
FIG. 3.11: Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $u(x, t)$  et (B) pression  $p(x, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

cela est observable à la figure 3.15 où  $\mu = 1$ .

Nous avons également essayé de calculer le problème de la membrane immergée non stationnaire avec la méthode LPSPH. Les figures 3.16 (A)-(D) la



(A)



(B)

FIG. 3.12: Oscillations d'une membrane Hookéenne. (A) Vitesse  $u(x, t)$  et (B) pression  $p(x, t)$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $t = 2$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

membrane et la distribution des particules SPH aux temps  $t = 0.200, 0.250, 0.275$  et  $0.285$ . Les simulations ont commencé avec la même configuration initiale que les calculs précédents avec la méthode EPSPH. La constante de raideur  $T_0$  de

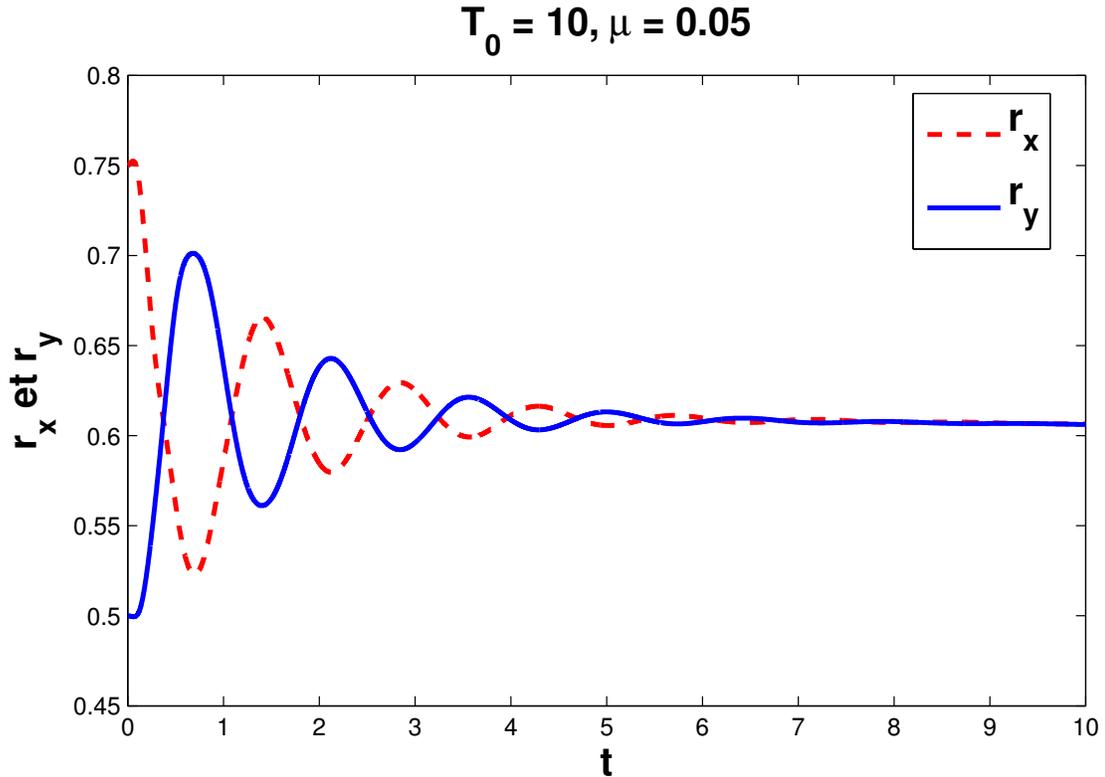


FIG. 3.13: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial et du petit demi-axe initial. - - :  $r_x(t)$ , — :  $r_y(t)$  calculés avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

la membrane et la viscosité sont respectivement égales à 10 et 0.1. Il apparaît clairement qu'au fil du temps l'effet combiné du mouvement de la membrane et le fort gradient de pression dans les environs de la membrane éloignent les particules SPH de la membrane, aussi bien les particules situées à l'intérieur de la membrane (montrées en rouge) que celles qui sont à l'extérieur (montrées en bleu). Cela conduit nécessairement à des erreurs puisque les intégrales sont effectuées dans la méthode SPH au moyen d'une règle de quadrature basée sur ces points. Nous avons observé que la membrane ne conserve pas sa forme elliptique comme on peut le voir sur la figure 3.16 (D), par exemple, et cela conduit ultimement à une divergence des calculs.

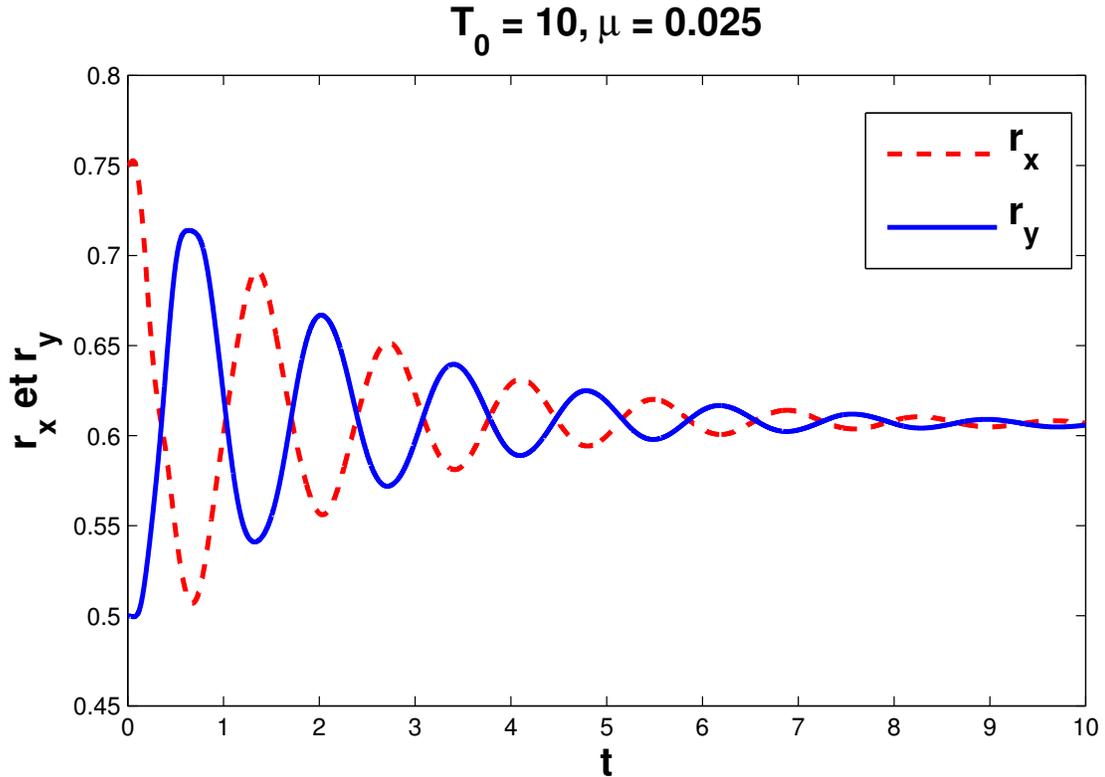


FIG. 3.14: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial et du petit demi-axe initial. - - :  $r_x(t)$ , — :  $r_y(t)$  calculés avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.025$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

Un certain nombre d'options peut être exploré pour corriger le problème rencontré avec l'utilisation de la méthode LPSPH pour l'étude de la dynamique d'une membrane immergée. L'une d'elles consisterait à utiliser un pas de temps  $\Delta t$  très faible tout en augmentant considérablement le nombre de particules fluides afin de ralentir l'accélération des particules loin des régions d'action des forces singulières. L'inconvénient de cette option est une envolée du coût des calculs sans la garantie d'un comportement stable des simulations sur le long terme. Une autre solution serait d'utiliser des rayons de lissage  $2h$  et  $2h^*$  variables [103, 108] à cause de la densité non homogène des particules fluides. Bien qu'elle puisse être implémentée, cette approche ne résoud pas le problème de

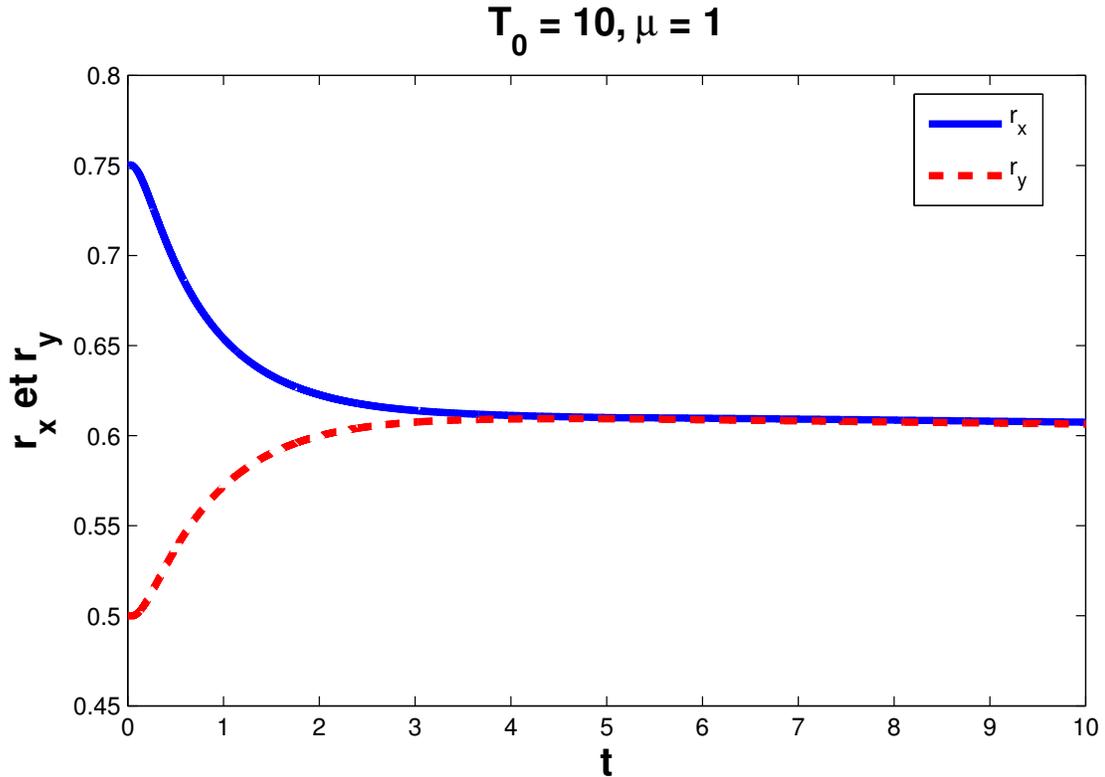


FIG. 3.15: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Évolution des longueurs du grand demi-axe initial et du petit demi-axe initial. - - :  $r_x(t)$ , — :  $r_y(t)$  calculés avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

la répulsion des particules qui aura toujours lieu. Elle ne peut pas être fiable, car les régions creuses vont davantage s'agrandir, ce qui ne peut pas être positif pour la précision des calculs. La méthode récente de Xu et al. [184] consiste à déplacer les particules SPH légèrement hors des lignes d'écoulement et utiliser les séries de Taylor pour calculer les caractéristiques hydrodynamiques aux nouvelles positions des particules. Il est peu probable que cette approche puisse résoudre le problème de carence de particules dans le cas présent parce que, le vide de particules observé n'a pas lieu entre des chaînes de particules. Ce vide a lieu à proximité immédiate de la membrane, essentiellement dû au fort gradient de pression créé par les erreurs numériques dans le calcul du saut de la pres-

sion. Une autre approche à la résolution de ce problème consiste à redistribuer les particules fluides lorsque le nombre de particules voisines d'au moins une particule fluide est en dessous d'un certain seuil. Ainsi, la formation des zones creuses, au cours des calculs, est arrêtée par la redistribution des particules. La dynamique de la membrane peut évoluer normalement. Lors de la redistribution des particules fluides, leur nombre reste le même que lors de l'initialisation du système ; ainsi aucune particule fluide n'est ajoutée, ni retranchée du domaine de calcul. Bien que cette solution de redistribution des particules soit efficace, elle ne corrige pas les erreurs qui se sont introduites dans le comportement de la membrane et des particules fluides avant que la réinitialisation n'ait lieu, à cause de leur mouvement non physique d'éloignement de la membrane même si cela se produisait pendant un court laps de temps. Par ailleurs, le processus de réinitialisation en lui-même affecte négativement la précision des calculs. Cela est dû au fait que lorsqu'on redistribue les particules fluides à la fin d'un pas de temps  $t^{n+1}$ , il faut évaluer en chaque nouvelle position (issue de la redistribution) des particules fluides, tous les paramètres du problème (exemple la vitesse, la pression, etc) à partir des informations des anciennes positions des particules. Cette évaluation des paramètres introduit des erreurs qui se répercutent dans la résolution du problème globale. Comme nous l'avons démontré lors de la résolution du problème stationnaire de la membrane à la Section 3.6.1, la réinitialisation des particules marche, mais, elle ne donne pas de meilleurs résultats que la méthode EPSPH.

### 3.6.3 Résultats de la convergence

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous allons étudier la convergence de notre méthode EPSPH pour une membrane régularisée mobile pour laquelle  $h^*$  est maintenu constant. Étudions dans un premier temps les erreurs commises en

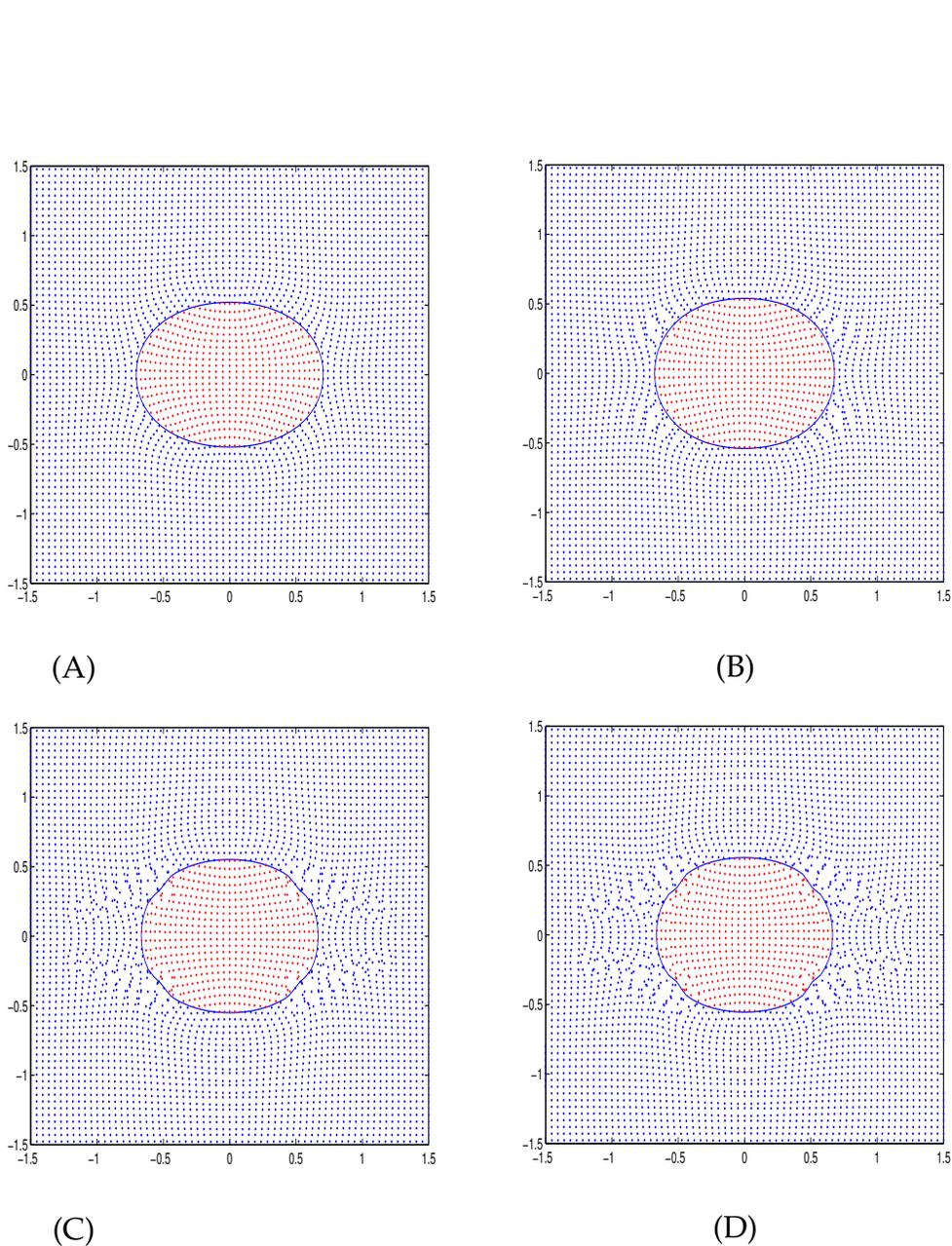


FIG. 3.16: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Distribution des particules fluide et Lagrangienne de la membrane calculée avec la méthode LPSPH aux temps (A)  $t = 0.200$ , (B)  $t = 0.250$ , (C)  $t = 0.275$  et (D)  $t = 0.285$ .  $T_0 = 10$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $\rho = 1$ ,  $N_x = N_y = 64$ ,  $N_b = 128$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$ .

calculant la pression et les composantes en  $x$  et en  $y$  de la vitesse à savoir  $u$  et  $v$  en fonction du raffinement du maillage pour le problème de la membrane libre de se mouvoir pendant un certain temps. Étant donné qu'une solution exacte n'est pas disponible, nous allons calculer les valeurs de ces variables en nous servant de trois différents maillages ( $N_x = N_y = 32, 64$  et  $128$ ) et les comparer avec les valeurs correspondantes obtenues sur un maillage plus raffiné avec  $N_x = N_y = 256$ . La longueur de lissage est maintenue dans un rapport fixe de 1.2 avec la distance de séparation inter-particule. Le rayon du support des fonctions delta régularisées pour la membrane est fixe et égal à 0.085. Appelons  $\psi_{N_x}^{n+p}$  une fonction  $\psi$  calculée sur un maillage SPH  $N_x \times N_x$  au temps  $(n+p)\Delta t$ . Ainsi, pour une précision d'ordre  $q$ , nous nous attendons à [94]

$$\frac{\left| \psi_{N_x}^{n+1/2} - \psi_{256}^{n+1/2} \right|_{\max, \Omega}}{\left| \psi_{2N_x}^{n+1/2} - \psi_{256}^{n+1/2} \right|_{\max, \Omega}} \approx \frac{C(1/N_x)^q - C(1/256)^q}{C(1/2N_x)^q - C(1/256)^q} \quad (3.6.5)$$

$$= \begin{cases} \frac{8^q - 1}{4^q - 1}, & \text{si } N_x = 32, \\ \frac{4^q - 1}{2^q - 1}, & \text{si } N_x = 64, \end{cases}$$

où  $C$  est une constante et nous définissons dans le contexte présent le maximum de la valeur absolue  $|\cdot|_{\max, \Omega_C}$  de toute fonction scalaire définie sur le domaine de calcul  $\Omega_C$  comme étant le maximum de sa valeur absolue aux positions de toutes les particules SPH. Le tableau 3.1 montre les résultats de nos calculs au temps  $t = 0.0635$  lorsque  $T_0 = 1$  et  $\mu = 0.05$ . L'ordre maximal de la convergence est approximativement 3 bien que cela ait été réduit à une convergence d'ordre 1 lorsque (3.6.5) est utilisé avec  $N_x = 64$ . Néanmoins, les ordres de convergence sont meilleurs que ceux qui sont présentés dans le tableau 2 de [94] pour la méthode IB, même si les erreurs elles-mêmes sont un peu plus élevées.

$N_x = N_y$	$ p_{N_x}^{n+1/2} - p_{256}^{n+1/2} _{\max, \Omega}$	q	$ u_{N_x}^{n+1} - u_{256}^{n+1} _{\max, \Omega}$	q	$ v_{N_x}^{n+1} - v_{256}^{n+1} _{\max, \Omega}$	q
32	$2.8390 \times 10^{-1}$	3.56	$5.7788 \times 10^{-1}$	3.35	$5.8963 \times 10^{-1}$	4.23
64	$2.3799 \times 10^{-2}$	0.77	$5.6064 \times 10^{-2}$	1.12	$3.1248 \times 10^{-2}$	1.25
128	$8.8049 \times 10^{-3}$		$1.7687 \times 10^{-2}$		$9.2301 \times 10^{-3}$	

TAB. 3.1: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Erreurs maximales absolues de  $p_{N_x}^{n+1/2}$ ,  $u_{N_x}^{n+1}$  et  $v_{N_x}^{n+1}$  à  $t = 0.0625$  calculées avec la méthode EPSPH.  $T_0 = 1$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\Delta t = \Delta x$ ,  $N_b = 512$ ,  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ ,  $2h^* = 0.085$ .

Étant donné que la surface délimitée par la membrane doit être conservée, nous pouvons nous servir de l'aire interne de la membrane en un instant donné pour évaluer l'erreur associée à cette aire ainsi que l'ordre de convergence de la précision de la conservation de cette aire. Nous avons effectué de tels calculs avec la même membrane que dans l'expérience précédente aux temps  $t = 1$  et  $2$ . L'aire exacte délimitée par la membrane est  $0.75 \times 0.5 \times \pi = 0.375\pi$ . Les résultats sont montrés sur la figure 3.17. Ces graphes ont été produits à partir de calculs faits avec  $N_x = N_y = 40, 60, 80, 100$  et  $120$  tandis que le nombre de points matériels  $N_b$  sur la membrane a été choisis égale à  $360$  et le pas de temps  $\Delta t = 0.1\Delta x$ . Bien qu'une perte de masse ait lieu continuellement de l'intérieur vers l'extérieur, donnant lieu à de plus grandes erreurs au temps  $t = 2$  qu'au temps  $t = 1$ , nous observons une convergence d'ordre trois en fonction du raffinement à tout instant.

Pour tous les cas, avoir permis que  $h^*$  décroît à mesure que l'on raffine le maillage a toujours conduit à la convergence à la fois de la pression et de la vitesse, de même que l'aire contenue dans la région délimitée par la membrane, mais à des ordres plus petits que ceux que nous avons rapportés ici pour la membrane régularisée. Cependant, nous avons effectué pour un maillage fixe, le calcul de la convergence de l'erreur de l'aire de la membrane lorsque  $h^*$  varie. La figure 3.18 montre l'erreur du fluide contenu dans la membre en fonction de la longueur de lissage  $h^*$  pour les marqueurs de la membrane. Nous pouvons y observer que l'aire de la région enfermée dans la membrane est plus conservée lorsque la longueur de lissage est grande. De plus, pour  $h^*$  grand, l'erreur de la

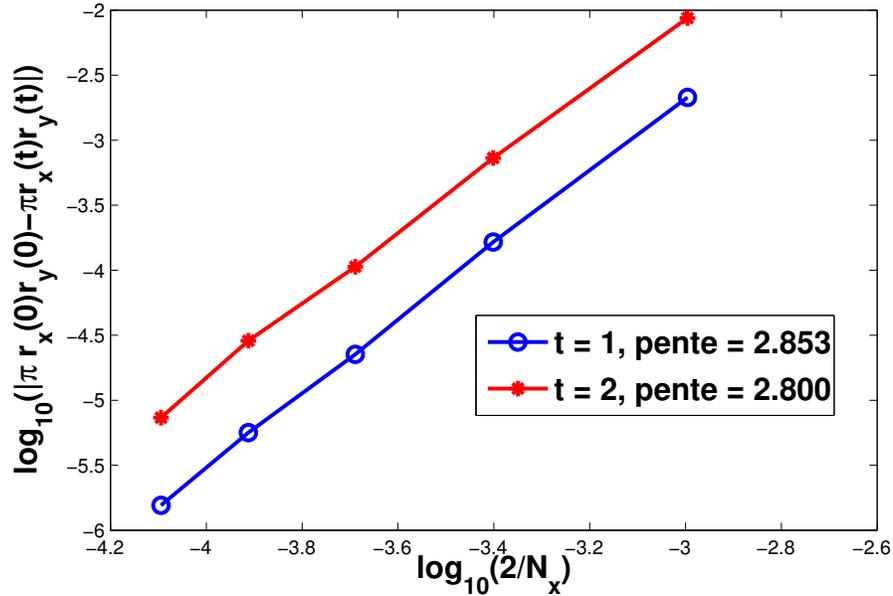


FIG. 3.17: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Conservation de l'aire du fluide contenu dans la membrane en fonction de  $N_x (= N_y)$  aux temps  $t = 1$  et  $2$ , calculée avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 1$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\rho = 1$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $N_b = 360$ ,  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ ,  $2h^* = 0.085$ .

conservation de l'aire reste plus ou moins constante comme on peut le constater aux temps  $t = 1$  et  $t = 2$ . Seulement, le fait d'augmenter  $h^*$  conduit également à un accroissement du coût des calculs. Ainsi, il faudrait faire un choix approprié de  $h^*$  qui limite la perte de masse tout en maintenant le coût des calculs assez raisonnable.

### 3.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons appliqué les deux variantes (LPSPH et EPSPH) de notre méthode SPH à la résolution d'un problème d'interface à savoir celui de la dynamique d'une membrane Hookéenne sous tension immergée dans un fluide visqueux et incompressible. La membrane exerce une succession de forces

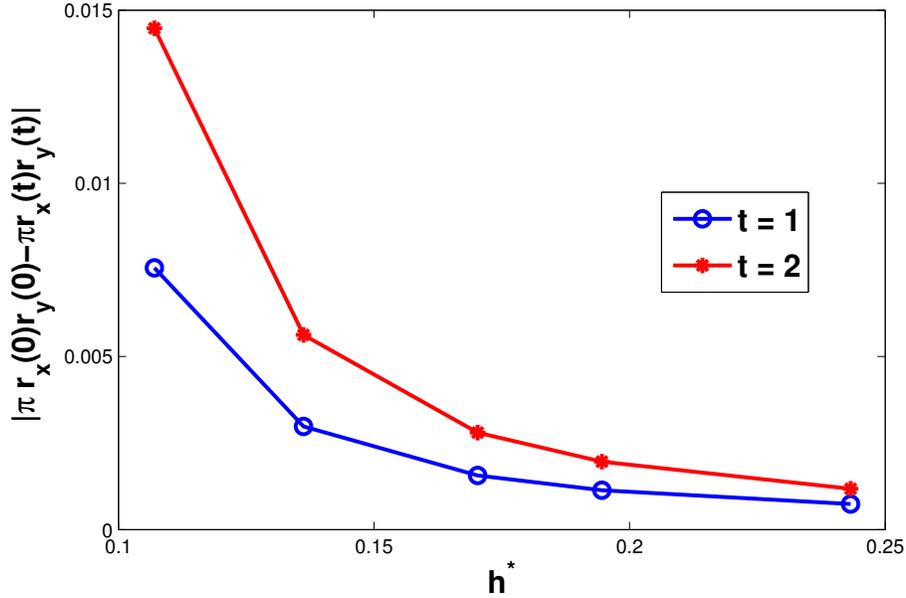


FIG. 3.18: Oscillations d'une membrane Hookéenne. Conservation de l'aire du fluide contenu dans la membrane en fonction de  $h^*$  aux temps  $t = 1$  et  $2$ , calculée avec la méthode EPSPH.  $r_x(0) = 0.75$ ,  $r_y(0) = 0.5$ ,  $T_0 = 1$ ,  $\mu = 0.05$ ,  $\rho = 1$ ,  $\Delta t = 0.1\Delta x$ ,  $N_x = 74$ ,  $N_y = 74$ ,  $N_b = 148$ ,  $2h = 1.2(\Delta x + \Delta y)$ .

singulières sur le fluide environnant. Les termes de forces singulières dans les équations de Navier-Stokes sont traités d'une manière semblable à celle de la méthode IB de Peskin [143] via le remplacement des fonctions delta par des fonctions noyaux lisses.

Nous avons montré qu'avec la méthode LPSPH, le problème particulier de carence de particules observé dans le cas d'une membrane à l'état d'équilibre fixe ou mobile (voir les figures 3.5 (A)-(D) et 3.16 (A)-(D), par exemple) ne peut être corrigé en utilisant un processus simple de reinitialisation des particules SPH. Puisque le problème est dû au fort gradient de pression créé à l'interface de la membrane et non pas à l'extensibilité de tension et la formation de chaînes de particules, la stratégie de réajustement de la position des particules de Xu et al. [184] a peu de chance de marcher également. Nous avons montré que l'utili-

sation des particules SPH fixes avec la méthode EPSPH est simple et efficace. Les résultats obtenus avec cette approche sont en très bon accord avec les solutions exactes et celles de Tan et al. [169]. L'utilisation des particules fixes a, comme nous l'avons vu, le grand avantage de donner des résultats plus précis que lorsque les particules SPH sont libres de se déplacer.

Dans le cas d'une membrane mobile immergée dans un fluide, nous avons mentionné à la Section 3.6.2 qu'un inconvénient potentiel à rendre fixe les particules SPH est qu'il est plus difficile d'attribuer des propriétés (densité, viscosité) différentes aux fluides à l'intérieur et à l'extérieur de la membrane. Cette préoccupation, lorsqu'elle se manifeste, peut être adressée en déterminant au début de chaque pas de temps les particules SPH qui sont à l'intérieur et à l'extérieur de la membrane. Cette recherche n'a pas besoin de se faire pour toutes les particules SPH. Un problème classique en géométrie computationnelle pour un polygone convexe ou en forme d'étoile ayant  $N_b$  sommets peut être résolu en un temps  $O(\log N_b)$  pour chaque particule une fois qu'une étape de prétraitement d'ordre  $O(N_b)$  a été effectuée [149].



# Chapitre 4

## Simulation des écoulements de suspension de chaînes de bille-haltère dans des géométries confinées avec des interactions hydrodynamiques

### 4.1 Introduction

Kirkwood et Riseman [82] semblent avoir été les premiers dans la littérature à aborder le sujet de la perturbation du champ de vitesse du milieu environnant causé par les éléments d'une macromolécule en solution. La liste de références détaillée par Jendrejack et al. [74] presque 52 ans plus tard illustre de manière convaincante les activités de recherche intense menées par un grand nombre de groupes de recherche qui a, dans les années qui ont suivi, cherché à incorporer les interactions hydrodynamiques (IHs) dans la modélisation physique réaliste des

écoulements des solutions de polymères. Pour les écoulements de Stokes stationnaires, il a été démontré depuis le temps de Oseen et Burgers que la perturbation de la vitesse  $\tilde{\mathbf{u}}$  en un point  $\mathbf{x}$  due à la suspension de masses ponctuelles ayant des vecteurs positions  $\mathbf{r}_\nu$  et exerçant des forces

$$\mathbf{f}_\nu \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_\nu), \quad \nu = 1, 2, \dots, N, \quad (4.1.1)$$

sur le fluide environnant est donné par

$$\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = \sum_{\nu=1}^N \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_\nu) \mathbf{f}_\nu. \quad (4.1.2)$$

Dans l'équation (4.1.2),  $\boldsymbol{\Omega}$  est un tenseur hydrodynamique (une fonction de Green) qui, dans un milieu de dimension non borné, par exemple, est le tenseur d'Oseen-Burgers. La forme exacte du tenseur hydrodynamique  $\boldsymbol{\Omega}$  pour l'écoulement de Stokes dû à une force singulière agissant près d'une frontière plane et stationnaire [17], entre deux plaques parallèles [99], dans un tuyau [100] ou dû à un réseau périodique de forces singulières, dans un écoulement confiné ou pas [146, 147] est également connue. En suivant une approche décrite dans un premier temps par Ermak et McCammon [39], puis par Fixman [48], la modélisation stochastique de longues macromolécules flexibles en solution au moyen de chaînes de bille-haltères (voir la figure 4.1) conduit à une équation de Langevin du mouvement pour les billes qui, dans l'équation d'équilibre, inclut la force de traînée subie par les billes pendant qu'elles se déplacent dans le solvant. Lorsque celle-ci est calculée pour l'écoulement de Stokes stationnaire en fonction de la vitesse des billes relative à celle du fluide, la vitesse totale du fluide peut être écrite comme la somme de la vitesse imposée (c'est-à-dire la vitesse qu'aurait le fluide en l'absence des billes) et une perturbation de type (4.1.2). Les forces  $\mathbf{f}_\nu$  exercées par les billes sur le fluide dans ce cas sont simplement les réactions à celles

exercées par le fluide sur elles. La même procédure est possible pour l'écoulement de Stokes non stationnaire pourvu que l'on suppose que la propagation des perturbations dans le solvant est infiniment rapide [139]. Le coefficient du terme de diffusion dans l'équation de Langevin qui modélise le bombardement des billes par le solvant environnant doit être choisi de sorte qu'un théorème de fluctuation-dissipation soit satisfait. Le résultat final est qu'un tenseur de diffusion  $D$  (une fonction tensorielle linéaire de  $\Omega$ ) apparaît dans le terme de traînée de l'équation de Langevin pour les billes et un tenseur  $B$  tel que  $BB^T = D$  dans le terme de diffusion.

L'approche décrite ci-dessus n'est cependant pas sans complication. Par exemple, les fonctions de Green exactes pour les écoulements confinés sont mathématiquement très compliquées. Par ailleurs, à moins d'introduire les interactions d'exclusion de volume dans l'équation du mouvement des billes, par exemple, aucune des formes exactes de  $\Omega$  ne doit être utilisée parce qu'en introduisant des forces de traînée dans la force d'équilibre pour les billes, on est en train de supposer que le rayon d'une bille (en 3D) ou d'un cylindre (en 2D) est non nul. Puisque la forme exacte des tenseurs hydrodynamiques est uniquement valide suffisamment loin des billes dans ce cas, le tenseur de diffusion  $D$  pourrait perdre son caractère semi-défini positif proche des billes [138]. Pour des écoulements non confinés, il est courant dans la littérature (voir, par exemple, [66, 67, 74, 75, 85]) de remplacer le tenseur de Oseen-Burgers par le tenseur de Rotne-Prager-Yamakawa [155, 185], qui est toujours défini positif, à moins que l'on ait une paire de billes  $r_i = r_j$  pour quelques  $i \neq j$ , dans ce cas il est semi-défini positif.

Malgré les défis mathématiques et numériques de l'utilisation des méthodes de dynamique Brownienne basées sur les fonctions de Green, le récent calcul numérique des écoulements de polymères confinés avec IH a connu des avancées importantes que nous allons présenter dans les lignes ci-dessous.

### 4.1.1 Progrès récents

La complexité mathématique du calcul des fonctions de Green pour des domaines ayant des frontières (pour ne pas mentionner leurs approximations régularisées pour les billes et les cylindres) a été une force de dissuasion à leur utilisation à grande échelle dans la modélisation des IHs dans les simulations de la dynamique Brownienne des polymères. Nous pouvons trouver quelques exceptions dans les travaux de Jendrejack et al. [76], Ma et Graham [113] et Hernández-Ortiz et al. [60]. Le calcul numérique de la fonction de Green due aux forces entre les plaques fut entrepris par Jendrejack et al. [76] en effectuant des calculs par les éléments finis, des éléments d'une correction  $\Omega^W$  à la fonction de Green d'espace libre (type Rotne-Prager-Yamakawa) qui prenait en compte la condition de non glissement sur les parois. Cependant, ceci a mené à un tenseur de diffusion non symétrique qui a incité les auteurs à remplacer  $\Omega^W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$  par la somme symétrique  $(\Omega^W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + (\Omega^W(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i))^T)/2$  afin de rétablir la symétrie à  $\mathbf{D}$ . L'utilisation de la méthode de Fixman [49] pour le calcul des fluctuations Browniennes a conduit à une méthode  $O(N^{2.25})$ .

En 2004, Mucha et al. [130] ont introduit une méthode  $O(N \log N)$  pour le calcul de l'IH pour sédimenter les particules sur une lame. Hernández-Ortiz et al. [60] ont généralisé la méthode de Mucha et al. et ont développé un algorithme qui a permis le calcul des interactions billes-billes avec un ordre  $O(N \log N)$ . Les termes Browniens dans les équations de Langevin pour la bille ont été calculés au moyen de la méthode de Fixman [49] et l'algorithme de Jendrejack et al. [74]. Les résultats étaient une méthode d'ordre  $O(N^{1.25} \log N)$  pour les IHs des systèmes de polymères confinés. Pourtant plus récemment, une méthode  $O(N)$  a été présentée par Hernández-Ortiz et al. [61] pour le calcul des IHs entre  $N$  points de particules dans une géométrie confinée. La méthode consiste à diviser la force de densité singulière en des contributions locale et globale. La vitesse due à la

contribution locale de la force de densité a été calculée dans un domaine non borné en utilisant des Stokeslets d'espace libre et lisse déterminés analytiquement alors que la vitesse globale a été obtenue par la résolution d'un écoulement de Stokes dans une géométrie bornée due à la force de distribution régulière. L'ordre  $O(N)$  de l'échelle du problème globale a été réalisé par une échelle optimale du nombre de points de maillage dans le calcul global et l'utilisation d'une bonne valeur d'essai pour le solveur itératif. Une discussion de certaines similarités entre la méthode de Hernández-Ortiz et al. [61] et la méthode que nous proposons ici sera présentée dans les conclusions.

Parmi les méthodes pour le calcul de l'IH, nous pouvons citer la méthode de lattice-Boltzmann dans laquelle les équations de Navier-Stokes sont approximées par des équations de Boltzmann au lieu d'être linéarisées comme dans le travail mentionné ci-dessus. La méthode de lattice Boltzmann a été utilisée pour la simulation des écoulements de solutions de polymères confinées dans [179, 180]. Dans [21, 80], des comparaisons ont été faites entre la méthode de lattice Boltzmann et les simulations Browniennes avec IH pour des écoulements confinés des modèles de polymères et d'ADN. Alors que la méthode de lattice Boltzmann a été jugée plus appropriée pour de longs polymères et des solutions d'ADN semi-diluées et concentrées, la méthode de la dynamique Brownienne de Chen et al. [21] était numériquement plus efficace pour des suspensions d'ADN diluées. On a montré dans [80] l'accord quantitatif entre les prédictions des distributions du centre masse en utilisant la méthode de lattice Boltzmann et des simulations de la dynamique Brownienne, contredisant ainsi les résultats d'une étude plus ancienne [86].

### 4.1.2 Description du modèle proposé et la méthode numérique

#### Les objectifs de ce travail

Notre intérêt au calcul, pour un nombre de Reynolds faible, des écoulements confinés de particules en suspension et des fluides polymériques avec une complète IH est à trois niveaux.

Premièrement, un calcul réaliste des écoulements à faible nombre de Reynolds dans des canaux et cylindres requiert que l'IH soit incluse non seulement entre deux particules ou entre les différents éléments d'une molécule, mais aussi entre les microstructures et les parois de délimitation du domaine. L'échec à incorporer l'IH intramoléculaire va signifier qu'il n'y a aucun mécanisme de migration dans un écoulement cisailé rectiligne et l'omission dans un modèle des effets de bord sur l'interaction hydrodynamique pourrait avoir comme résultat une migration à l'opposé de ce qui est observé expérimentalement (voir [113] et références qui s'y trouvent, par exemple). Par conséquent, notre modèle doit intégrer tous les effets d'IH.

Deuxièmement, et compte tenu de notre résumé ci-dessus d'une partie des difficultés à calculer avec précision les fonctions de Green pour des écoulements confinés dans un bon rapport coût-efficacité, nous cherchons une méthode alternative qui contourne complètement le besoin de le faire, tout en intégrant les IHs intramoléculaires et les interactions entre le polymère et les parois.

Enfin, du point de vue du calcul scientifique, nous cherchons, pour cette classe de problème, une méthode d'ordre  $O(N)$  où  $N$  est le nombre de billes dans la description grossière des particules ou des polymères.

#### Grandes lignes de ce chapitre

Le point de départ dans la méthode proposée est le système couplé des équations de Langevin pour le polymère et le solvant (CLEPS) [137, 139, 151] décri-

vant, dans le cas présent, la dynamique microscopique d'une solution de polymère en écoulement avec une représentation bille-ressort des macromolécules. Les équations pertinentes pour le mouvement des billes à travers le solvant et du solvant lui-même sont décrites aux Sections 4.2.1 et 4.2.2, respectivement, et généralisent les équations de [137, 139, 151] pour inclure l'inertie des billes. Les termes de diffusion dans les équations de Langevin (4.2.1) ou (4.2.4) pour les billes viennent du bombardement incessant de ces billes par les molécules du solvant, comme c'est la norme dans la littérature des fluides polymériques [16]. Dans l'appendice 4.A nous explorons avec quelques détails les fondements mathématiques pour l'équation de la bille (4.2.1) et expliquons comment le coefficient de frottement d'entrée est relié au coefficient de friction effectif, au moins pour le cas d'un seul cylindre qui se déplace progressivement et lentement le long de la ligne médiane du canal. L'équivalence qui existe entre les équations couplées de Oono et Freed [137] et l'équation stochastique pour la bille du formalisme traditionnel de Kirkwood [83] pour un écoulement tri-dimensionnel non borné a été démontrée par Öttinger et Rabin [139]. Pour une preuve plus générale de l'équivalence pour les écoulements quasi-stationnaires de Stokes, le lecteur est renvoyé vers l'article récent de Lozinski et Owens [110]. Les équations pour les billes sont couplées à celles du solvant à travers le champ de vitesse qui satisfait les équations du mouvement dans lesquelles des forces singulières (de réaction) exercées par les billes sur le fluide apparaissent dans l'équilibre des forces et l'habituel tenseur de contrainte Newtonien de Cauchy est complété avec un tenseur des extra contraintes soumis à des fluctuations d'origine thermique. Le calcul détaillé des statistiques de ces fluctuations peut être trouvé dans Landau et Lifshitz [89] et Fox et Uhlenbeck [51]. Nous y reviendrons à la Section 4.2.2 de ce chapitre.

La Section 4.3.1 décrit la méthode de la dynamique Brownienne que nous proposons pour la résolution numérique des équations de Langevin du mouvement des billes alors que la solution pour les équations hydrodynamiques

thermiquement fluctuantes est obtenue avec notre méthode SPH. Une méthode semi-implicite prédicteur-correcteur à deux étapes, semblable à certains égards à d'autres proposées par Hsieh et al. [67], Ladd et al. [87], Öttinger (équations (4.121)-(4.122) dans [138]), Somasi et al. [164] et Swope et al. [166] est utilisée pour faire avancer les vecteurs de segment pendant un pas de temps. Les mises à jour à la fois des longueurs des segments prédites et corrigées sont calculées en commençant par des équations cubiques pour leurs longueurs bout à bout, où on est assuré de trouver une racine positive inférieure à l'élongation maximale de chacun des segments. Puisque dans une chaîne de bille-ressort tous les segments sont couplés à leurs voisins, quelques itérations d'une méthode de Gauss-Seidel sont utilisées comme une alternative rentable à la résolution de toutes les longueurs de segment en un seul (potentiellement large système). Dans l'appendice 4.B, nous montrons que notre schéma prédicteur-correcteur calcule, dans l'arithmétique exacte, le coefficient de diffusion et l'énergie cinétique d'une force sans particules en équilibre et donne les mêmes résultats que ceux de la relation Stokes-Einstein et le principe d'équipartition de l'énergie, respectivement.

Les équations du mouvement pour la vitesse du solvant et les champs de vitesse sont résolues avec notre méthode SPH des particules fixes (EPSPH). Dans ce chapitre, notre méthode EPSPH est appliquée aux équations du type Navier-Stokes linéarisées (le régime où les forces d'IH sont de plus grande importance). Cela peut être facilement modifié pour des nombres de Reynolds élevés par l'ajout de l'approximation explicite de la dérivée convective de la vitesse au membre de droite de l'équation de la quantité de mouvement linéaire. La manière dont les forces sur les billes sont transmises au fluide est d'une importance cruciale pour le succès de notre schéma numérique. Nous adoptons une approche qui n'est pas sans rappeler la méthode de Stokeslets régularisés [28] dans laquelle les forces singulières (4.1.1) aux positions des billes  $r_v$  sont répar-

ties sur un petit disque (2D) ou une sphère (3D) en les remplaçant par

$$\mathbf{f}_\nu W(\mathbf{x} - \mathbf{r}_\nu, h^*), \quad \nu = 1, 2, \dots, N, \quad (4.1.3)$$

où  $W$  est un noyau ou une fonction de lissage qui “approxime” une fonction delta, et  $2h^*$  est le rayon de son support. Pour cette fonction, nous allons utiliser la même spline cubique qu’avant (voir l’équation (2.3.9)).

La méthode que nous présentons dans ce chapitre est, du moins en partie, une réponse au désir (exprimé par Español [41], par exemple) de voir les méthodes SPH appliquées à une classe de problèmes d’écoulement complexe intégrant des fluctuations hydrodynamiques. En effet, notre méthode SPH ressemble dans certains aspects au modèle de particules fluides proposé par Español [41], un cas particulier de ce qui est le modèle DPD décrit, par exemple par le même auteur dans [40, 42]. Notons que contrairement au modèle des particules fluides de Español, la méthode SPH ne conserve pas le moment angulaire. Cependant, comme le montrent Takeda et al. [168], l’erreur du moment angulaire total tend vers zéro dans la limite de l’annulation du rayon  $2h$  du support de la fonction de lissage  $W$ . Par conséquent, la violation de la conservation du moment angulaire dans les méthodes SPH ne pose pas de problème sérieux à condition que  $2h^*$  et, également, l’espacement inter particules soient suffisamment petits.

Remarquons ici que ce problème aurait pu être également résolu avec la méthode des différences et une approche portant certaines similitudes avec la méthode “stochastic immersed boundary” de Atzberger, Kramer et Peskin [7, 8, 84]. Cependant, une différence cruciale entre la méthode “stochastic immersed boundary” et la nôtre est que dans notre travail, les billes sont autorisées à glisser par rapport au fluide environnant de sorte qu’au lieu de contraindre les billes à se déplacer avec la vitesse locale du fluide, comme dans [7, 8, 84], une équation stochastique (voir la discussion de la Section 4.3.1 ci-dessus) doit être prescrite pour

le mouvement de la bille.

Les résultats des tests du schéma dynamique-SPH Brownien proposé sont décrits à la Section 4.4. À la Section 4.4.1, nous calculons un tenseur de mobilité pour les billes des haltères périodiques suivant  $x$ , d'abord positionnées à mi-chemin entre les parois du canal et ensuite proche d'une des parois du canal. Une mesure du caractère symétrique défini-positif du tenseur de mobilité est calculée dans les deux cas. Les ordres de convergence à la fois de la pression et de la vitesse sont testés à la Section 4.4.1 pour une réseau périodique suivant  $x$  de forces singulières dans un canal infini. Dans une région délimitée loin de la singularité dans le domaine de calcul, la convergence de la vitesse est d'ordre deux et celle de la pression est légèrement inférieure, mais en accord avec l'analyse de Guermond et al. [56].

Les calculs des écoulements dans un canal bi-dimensionnel d'un grand nombre (2500) d'haltères sont présentés à la Section 4.4.2 avec des nombres de Weissenberg de 20 et 30. Nous examinons la différence dans les distributions des centres de masse de ces deux cas à l'état final stationnaire. Effectuer les calculs avec une seule chaîne bille-ressort de 1000 billes avec les mêmes nombres de Weissenberg nous a permis de comparer (voir la Section 4.4.2) les taux de migration.

Le coût de l'algorithme pour la recherche des voisins dans le calcul des forces d'exclusion de volume des billes est d'ordre  $O(N^2)$ . Cependant, si nous omettons de calculer ces forces d'exclusion de volume, ou si nous le faisons au plus une fois toutes les  $N$  itérations, le temps CPU pour notre principal algorithme en fonction du nombre de billes est linéaire et est de l'ordre  $O(N)$  à condition qu'un ajustement du nombre de points du maillage SPH en fonction de  $N$  soit adopté. Bien que nous n'ayons pas fait de comparaison entre la méthode proposée dans ce chapitre avec les simulations de la dynamique Brownienne, nous nous attendons à ce que cette dernière soit plus efficace pour le calcul des so-

lutions de polymères diluées en raison du coût relativement élevé du solveur de Stokes non stationnaire dans notre méthode. Mais, par la suite, comme nous avons fait la remarque ci-dessus, le coût supplémentaire de l'ajout des billes dans le modèle de polymères évolue simplement de façon linéaire avec leur nombre, rendant notre méthode plus efficace pour de longues chaînes et/ou des solutions de polymères concentrées.

## 4.2 Modèle mathématique

### 4.2.1 Équations du mouvement pour des chaînes de bille-ressorts

Considérons que nous avons  $M$  chaînes en suspension dans un solvant Newtonien incompressible dans un domaine  $\mathcal{D} \subseteq \mathbb{R}^d$ . Chaque chaîne est constituée de  $N$  billes reliées par  $N-1$  ressorts et interagit avec d'autres chaînes uniquement à travers les forces hydrodynamiques et les forces d'exclusion de volume. Le  $k$ -ième ressort dans la  $j$ -ième chaîne est considéré comme étant sans masse et relie deux billes, chacune de masse  $m$  ayant des vecteurs positions  $\mathbf{r}_k^{(j)}$  et  $\mathbf{r}_{k+1}^{(j)}$ , comme le montre la figure 4.1. Nous définissons un vecteur segment  $\mathbf{q}_k^{(j)} := \mathbf{r}_{k+1}^{(j)} - \mathbf{r}_k^{(j)}$ . Notons  $\mathbf{u}$  la vitesse du solvant et la force résultante du ressort sur la  $k$ -ième bille de la  $j$ -ième chaîne par  $\mathbf{F}_k^{(j)}$ .  $\mathbf{G}_k^{(j)}$  représente la force d'exclusion de volume sur la  $k$ -ième bille de la  $j$ -ième chaîne. Nous pouvons écrire de manière formelle un ensemble d'équations différentielles stochastiques (EDSs) pour cette bille comme suit :

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)}}{dt^2} = \zeta \left( \mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t) - \frac{d\mathbf{r}_k^{(j)}}{dt} \right) + \mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{G}_k^{(j)} + \sqrt{2k_B T \zeta} \frac{d\mathbf{W}_k^{(j)}}{dt}. \quad (4.2.1)$$

Dans l'équation (4.2.1),  $\zeta$  est un coefficient de friction,  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température (absolue) et  $\mathbf{W}_k^{(j)}$  est un processus de Wiener  $d$ -dimensionnel. Notons que la vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t)$  du membre de droite de l'équation (4.2.1) prend également en compte toute la contribution de la bille à sa vitesse et dans l'appendice 4.A nous expliquons comment (4.2.1) a été obtenue et comment le coefficient de friction  $\zeta$  est défini.

Dans ce chapitre, pour simplifier les choses, nous supposons que les tensions dans tous les ressorts satisfont la même loi de force FENE du ressort et écrivons  $\mathbf{F}_k^{(j)}$  comme suit :

$$\mathbf{F}_k^{(j)} = \begin{cases} \frac{H\mathbf{q}_1^{(j)}}{(1-\|\mathbf{q}_1^{(j)}\|_2^2/q_{\max}^2)}, & k = 1, \\ \frac{H\mathbf{q}_k^{(j)}}{(1-\|\mathbf{q}_k^{(j)}\|_2^2/q_{\max}^2)} - \frac{H\mathbf{q}_{k-1}^{(j)}}{(1-\|\mathbf{q}_{k-1}^{(j)}\|_2^2/q_{\max}^2)}, & k = 2, 3, \dots, N-1, \\ -\frac{H\mathbf{q}_{N-1}^{(j)}}{(1-\|\mathbf{q}_{N-1}^{(j)}\|_2^2/q_{\max}^2)}, & k = N. \end{cases} \quad (4.2.2)$$

Dans (4.2.2),  $H$  est une constante du ressort et  $q_{\max}$  est la longueur maximale qu'un ressort peut atteindre. Introduisons une longueur caractéristique macroscopique  $L$  et une vitesse caractéristique  $V$ . Alors, les variables adimensionnées peuvent être définies comme suit :

$$\mathbf{q}_k^{(j)*} = \frac{\mathbf{q}_k^{(j)}}{\ell_0}, \quad \mathbf{r}_k^{(j)*} = \frac{\mathbf{r}_k^{(j)}}{\ell_0}, \quad t^* = \frac{t}{\lambda_H}, \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}\lambda_H}{\ell_0}, \quad \mathbf{W}_k^{(j)*} = \frac{\mathbf{W}_k^{(j)}}{\sqrt{\lambda_H}}, \quad (4.2.3)$$

où  $\ell_0 := \sqrt{\frac{k_B T}{H}}$  est la longueur caractéristique d'un ressort Hookéen et  $\lambda_H := \zeta/4H$  est le temps de relaxation de Maxwell pour un seul ressort Hookéen. L'équation (4.2.1) peut maintenant être réécrite sous une forme adimensionnée comme

$$m^* \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)*}}{dt^{*2}} = \mathbf{u}^*(\mathbf{r}_k^{(j)*}, t^*) - \frac{d\mathbf{r}_k^{(j)*}}{dt^*} + \frac{1}{4} \left( \mathbf{F}_k^{(j)*} + \mathbf{G}_k^{(j)*} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d\mathbf{W}_k^{(j)*}}{dt^*}, \quad (4.2.4)$$

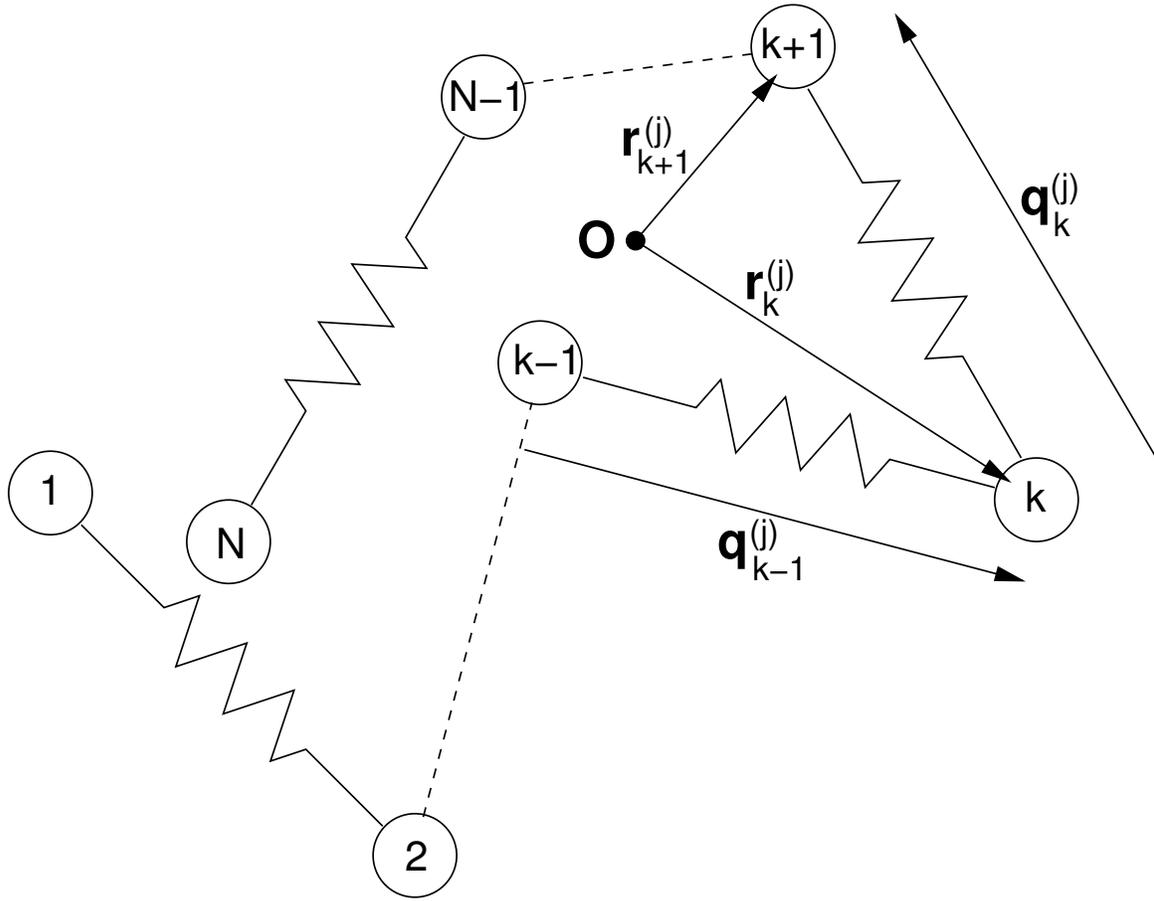


FIG. 4.1:  $j$ -ième chaîne bille-ressort avec  $N$  billes.  $\mathbf{q}_k^{(j)} := \mathbf{r}_{k+1}^{(j)} - \mathbf{r}_k^{(j)}$  représente le vecteur bout-à-bout du  $k$ -ième ressort.

où la force adimensionnée dans le ressort  $\mathbf{F}_k^{(j)*}$  est définie par

$$\mathbf{F}_k^{(j)*} = \begin{cases} \frac{\mathbf{q}_1^{(j)*}}{(1 - \|\mathbf{q}_1^{(j)*}\|_2^2/b)}, & k = 1, \\ \frac{\mathbf{q}_k^{(j)*}}{(1 - \|\mathbf{q}_k^{(j)*}\|_2^2/b)} - \frac{\mathbf{q}_{k-1}^{(j)*}}{(1 - \|\mathbf{q}_{k-1}^{(j)*}\|_2^2/b)}, & k = 2, 3, \dots, N-1, \\ -\frac{\mathbf{q}_{N-1}^{(j)*}}{(1 - \|\mathbf{q}_{N-1}^{(j)*}\|_2^2/b)}, & k = N. \end{cases} \quad (4.2.5)$$

et  $\sqrt{b}$  est la forme adimensionnée de  $q_{\max}$ . La force d'exclusion de volume adimensionnée est (voir, par exemple, [60, 138]) donnée par

$$\mathbf{G}_k^{(j)*} = 2\alpha A_b \sum_{\nu} (\mathbf{r}_k^{(j)} - \mathbf{r}_{k,\nu}^{(j)}) \exp(-\alpha \|\mathbf{r}_k^{(j)} - \mathbf{r}_{k,\nu}^{(j)}\|_2^2), \quad (4.2.6)$$

où  $\mathbf{r}_{k,\nu}^{(j)}$  est le vecteur position de la  $\nu$ -ième bille (pas nécessairement dans la même chaîne) se trouvant disons à une certaine distance prescrite  $R_k^{(j)}$  de la bille qui a pour vecteur position  $\mathbf{r}_k^{(j)}$ .  $\alpha$  et  $A_b$  sont des paramètres dont les valeurs seront données à la Section 4.4.2.

## 4.2.2 Équations du mouvement pour solvant

Dans les équations (4.2.1), les vecteurs position des billes doivent être couplés avec les équations du mouvement pour le solvant :

$$\begin{aligned} \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}} + \eta_N \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_i^2} + \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \left( \zeta \left( \frac{d\mathbf{r}_k^{(j)}}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \right) - \sqrt{2k_B T \zeta} \frac{d\mathbf{W}_k^{(j)}}{dt} \right) \\ & \times \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k^{(j)}) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.2.7)$$

$$\begin{aligned} = & -\frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}} + \eta_N \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_i^2} + \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \left( \mathbf{F}_k^{(j)}(t) + \mathbf{G}_k^{(j)}(t) - m \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)}}{dt^2} \right) \\ & \times \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k^{(j)}) + \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.2.9)$$

où  $\rho$  est la densité du solvant,  $\eta_N$  sa viscosité et  $p$  la pression du fluide. La force fluctuante  $\mathbf{f}$  dans (4.2.7) et (4.2.8) vient du besoin de satisfaire un théorème de fluctuation-dissipation; nous y revenons dans la suite de cette section. Notons que dans le membre de droite de l'équation (4.2.7), en plus de la force  $\mathbf{f}$ , de la pression habituelle et des termes visqueux, nous avons la somme des forces exercées par les billes sur le solvant environnant. Nous référant à (4.2.1), nous voyons que celles-ci sont simplement les réactions (a) aux forces de trainée exercées sur les billes dues au mouvement relatif entre les billes et le solvant et; (b) aux forces

Browniennes (thermiques) résultantes du bombardement d'une bille par les molécules du solvant. L'équation (4.2.8) vient directement des équations (4.2.1) et (4.2.7).

Dans ce chapitre, nous résolvons la forme linéarisée des équations de Navier-Stokes (4.2.7) - (4.2.9). Toutefois, notons que la dérivée partielle de la vitesse par rapport au temps dans l'équation (4.2.7) n'est pas négligée en raison de l'échelle de temps rapide associée aux fluctuations thermiques de  $\mathbf{u}$  (voir, par exemple, [7, 8, 84]). Définissons un vecteur de position adimensionné  $\mathbf{x}^*$  et une pression adimensionnée  $p^*$ , respectivement, par

$$\mathbf{x}^* = \frac{\mathbf{x}}{\ell_0}, \quad p^* = \frac{p\lambda_H}{\eta_N}, \quad (4.2.10)$$

alors les équations du mouvement (4.2.8)-(4.2.9) peuvent être réécrites sous forme adimensionnée comme

$$\begin{aligned} \text{Re} \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} = & -\frac{\partial p^*}{\partial \mathbf{x}^*} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{u}^*}{\partial x_i^{*2}} + \frac{Z}{4} \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \left( \mathbf{F}_k^{(j)*} + \mathbf{G}_k^{(j)*} - 4m^* \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)*}}{dt^{*2}} \right) \\ & \times \delta(\mathbf{x}^* - \mathbf{r}_k^{(j)*}) + \mathbf{f}^*, \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^*} \cdot \mathbf{u}^* = 0, \quad (4.2.12)$$

où, dans (4.2.11),  $\text{Re} (:= \rho \ell_0^2 / \eta_N \lambda_H)$  représente le nombre de Reynolds et  $Z (:= \zeta \ell_0^{2-d} / \eta_N)$  est un coefficient adimensionné de frottement "nu" d'entrée (ou un paramètre d'IH) qui détermine le degré de couplage entre l'équation de la particule (4.2.4) et les équations de Navier-Stokes (4.2.11)-(4.2.12). En deux dimensions et en considérant que les billes sont des cylindres (infiniment longues),  $Z$  représente un coefficient adimensionné de traînée et le choix des valeurs de  $Z$  pour les expériences numériques décrites dans la Section 4.4 est expliqué dans l'appendice 4.A.2.

En vue de faciliter la notation, nous laissons tomber les astérisques de toutes les variables adimensionnées :

$$\text{Re} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial \mathbf{x}} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial x_i^2} + \frac{Z}{4} \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \left( \mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{G}_k^{(j)} - 4m \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)}}{dt^2} \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k^{(j)}) + \mathbf{f}, \quad (4.2.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (4.2.14)$$

### Force fluctuante $\mathbf{f}$ .

La force adimensionnée  $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_d)$  dans (4.2.13) est un vecteur de valeurs aléatoires Gaussiennes avec une moyenne zéro et les corrélations

$$\langle f_i(\mathbf{x}, t) f_j(\mathbf{x}', t') \rangle = \frac{Z}{2} \sum_{k=1}^d \sum_{\ell=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x'_\ell} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') [\delta_{ij} \delta_{k\ell} + \delta_{i\ell} \delta_{jk}]. \quad (4.2.15)$$

$\mathbf{f}$  peut être écrite comme la divergence d'un tenseur de contrainte fluctuante symétrique et adimensionnée  $\tilde{\mathbf{S}}$ , dont les composantes  $\tilde{S}_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, d$ ) sont normalement distribuées et satisfont

$$\langle \tilde{S}_{ij} \rangle = 0, \quad (4.2.16)$$

$$\langle \tilde{S}_{ik}(\mathbf{x}, t) \tilde{S}_{j\ell}(\mathbf{x}', t') \rangle = \frac{Z}{2} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') [\delta_{ij} \delta_{k\ell} + \delta_{i\ell} \delta_{jk}]. \quad (4.2.17)$$

Dans le calcul des statistiques (4.2.15)-(4.2.17) pour  $\mathbf{f}$  et  $\tilde{S}_{ij}$ , nous avons suivi la dérivation présentée dans la Section III de Fox et Uhlenbeck [51] et le chapitre 17 de la première édition de l'ouvrage classique de Landau et Lifshitz [89].

## 4.3 Méthode numérique

### 4.3.1 Un schéma de prédicteur-correcteur

Notons par  $\mathbf{a}_k^{(j)}$  le membre de droite de (4.2.4) divisé par la masse  $m$  de la bille. Alors, les équations du mouvement de la bille (4.2.4) peuvent être écrites comme

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)}}{dt^2} = \mathbf{a}_k^{(j)}(t). \quad (4.3.1)$$

Notons par  $\Delta t$  le pas de temps. Le schéma prédicteur-correcteur que nous adoptons pour la résolution de (4.3.1) est semblable à la méthode de Heun (et a également une précision de second ordre) mais utilise un développement en série de Taylor de second ordre de  $\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  autour de  $t$  pour le prédicteur au lieu de la méthode d'Euler habituelle. La raison en est que cela nous permettra de conserver une certaine implicité quand nous allons réécrire les équations du mouvement en terme de vecteurs positions des centres de masses des chaînes et des vecteurs de segment  $\mathbf{q}_k^{(j)}$ . Une certaine implicité sera également conservée à l'étape de correction décrite ci-dessous. Plus précisément, à l'aide de  $\mathbf{v}_k^{(j)}(t)$  pour représenter  $(\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t/2) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t - \Delta t/2))/\Delta t$  l'algorithme proposé équivaut à celui-ci :

#### Prédicteur

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t) &= \Delta t \mathbf{v}_k^{(j)}(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \mathbf{a}_k^{(j)}(t), \\ &= \Delta t \mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2) + \Delta t^2 \mathbf{a}_k^{(j)}(t) + O(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Dans notre schéma, la tension dans le ressort  $\mathbf{F}_k^{(j)}$  qui apparaît dans le terme d'accélération du membre de droite de l'équation (4.3.2) est évaluée en se servant de la position prédite  $\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  de la bille au lieu de  $\mathbf{r}_k^{(j)}(t)$ .

Correcteur

$$\mathbf{v}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{v}_k^{(j)}(t) = \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{a}_k^{(j)}(t) + \tilde{\mathbf{a}}_k^{(j)}(t + \Delta t)), \quad (4.3.3)$$

$$\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t) = \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{v}_k^{(j)}(t) + \mathbf{v}_k^{(j)}(t + \Delta t)). \quad (4.3.4)$$

Dans (4.3.3) les différents termes de  $\tilde{\mathbf{a}}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  sont évalués aux positions prédites des billes  $\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  excepté pour la tension dans le ressort  $\mathbf{F}_k^{(j)}$  et la vitesse de la bille  $d\mathbf{r}_k^{(j)}/dt$ . Afin de conserver l'implicité, le premier est évalué à la position corrigée de la bille  $\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  et dans la moyenne

$$\frac{1}{2}(\mathbf{a}_k^{(j)}(t) + \tilde{\mathbf{a}}_k^{(j)}(t + \Delta t)), \quad (4.3.5)$$

qui apparaît dans le membre de droite de (4.3.3), la vitesse de la bille est évaluée au moyen d'une approximation de différence centrée

$$\frac{d\mathbf{r}_k^{(j)}}{dt}(t + \Delta t/2) = \frac{\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t)}{\Delta t} + O(\Delta t^2). \quad (4.3.6)$$

En outre, l'étape de la vitesse (4.3.3) n'est jamais prise comme elle est écrite. Elle est utilisée dans la méthode de trapèze (4.3.4) pour les positions de la bille afin d'obtenir

$$\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t) = \Delta t \mathbf{v}_k^{(j)}(t) + \frac{\Delta t^2}{4}(\mathbf{a}_k^{(j)}(t) + \tilde{\mathbf{a}}_k^{(j)}(t + \Delta t)) \quad (4.3.7)$$

$$= \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2) + \tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2)) + \frac{\Delta t^2}{4}(\mathbf{a}_k^{(j)}(t) + \tilde{\mathbf{a}}_k^{(j)}(t + \Delta t)) + O(\Delta t^3), \quad (4.3.8)$$

où  $\tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2)$  est défini par

$$\tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2) := \frac{\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t)}{\Delta t} = \mathbf{v}_k^{(j)}(t) + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{a}_k^{(j)}(t). \quad (4.3.9)$$

En résumé, le schéma de prédicteur-correcteur est donné par (4.3.2) et (4.3.8) après avoir négligés les termes d'ordre  $O(\Delta t^3)$ . Il est démontré que l'étape de correction (4.3.7) est presque identique au schéma de second ordre de Ladd et al. [87] qui est une modification de la méthode de Verlet (une fois que les étapes (2)-(4) de leur schéma de Verlet sont combinées pour donner, dans notre notation, la mise à jour  $\mathbf{r}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  à  $\mathbf{r}_k^{(j)}(t)$  explicitement) sauf que dans ce dernier article les termes d'accélération sont traités avec une évaluation du point médian de  $\mathbf{a}_k^{(j)}(t + \Delta t/2)$  dans le membre de droite. Dans l'appendice 4.B, nous montrons, à la suite de Berk Usta et al. [180] et Ladd et al. [87], que l'énergie cinétique des particules sans force en équilibre est prédite exactement par notre schéma prédicteur-correcteur, de même que le coefficient de diffusion des relations de Green-Kubo discrètes.

Nous écrivons maintenant notre schéma prédicteur-correcteur en fonction des vecteurs positions du centre de masse et des vecteurs de segment de chaque chaîne.

### Reformulation des équations (4.3.2) et (4.3.8)

**Prédicteur** Fixons  $j$  et prenons la moyenne des  $N$  équations obtenues de (4.3.2) en permettant que  $k$  s'étende de 1 à  $N$ . Multiplions ensuite tout le résultat par  $m/\Delta t$ ; nous obtenons l'équation stochastique suivante pour le centre de masse prédit  $\tilde{\mathbf{r}}_c^{(j)}$  de la  $j$ -ième chaîne :

$$\left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \tilde{\mathbf{r}}_c^{(j)}(t + \Delta t) = \left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \mathbf{r}_c^{(j)}(t) + \frac{\Delta t}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t)$$

$$+ \frac{\Delta t}{4N} \sum_{k=1}^N \mathbf{G}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t) + \frac{m}{N} \sum_{k=1}^N \mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2) + \Delta \mathbf{W}_c^{(j)}, \quad (4.3.10)$$

où nous avons introduit le processus stochastique

$$\mathbf{W}_c^{(j)} := \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k=1}^N \mathbf{W}_k^{(j)}, \quad (4.3.11)$$

et  $\Delta \mathbf{W}_c^{(j)} := \mathbf{W}_c^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{W}_c^{(j)}(t)$ . Ainsi, chaque élément de  $\Delta \mathbf{W}_c^{(j)}$  est une Gaussienne de moyenne zéro et de variance  $\Delta t/2N$ .

Posons maintenant  $\mathbf{q}_0^{(j)} = \mathbf{q}_N^{(j)} = \mathbf{0} \forall j$ . Puis, en prenant la différence de la  $(k + 1)$ -ième et la  $k$ -ième équation (4.3.2) et en multipliant le résultat par  $m/\Delta t$  nous pouvons écrire une équation pour le vecteur du segment prédit  $\tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}$  du  $k$ -ième haltère de la  $j$ -ième chaîne :

$$\begin{aligned} \left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}(t + \Delta t) &= \left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}(t) + \Delta t \left(\mathbf{u}(\mathbf{r}_{k+1}^{(j)}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t)\right) \\ &+ \frac{\Delta t}{4} \left\{ \left(\frac{1}{1 - \|\tilde{\mathbf{q}}_{k-1}^{(j)}\|_2^2/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k-1}^{(j)}(t + \Delta t) - 2 \left(\frac{1}{1 - \|\tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}\|_2^2/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}(t + \Delta t) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{1 - \|\tilde{\mathbf{q}}_{k+1}^{(j)}\|_2^2/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k+1}^{(j)}(t + \Delta t) \right\} \\ &+ \frac{\Delta t}{4} (\mathbf{G}_{k+1}^{(j)} - \mathbf{G}_k^{(j)}) + m(\mathbf{v}_{k+1}^{(j)}(t - \Delta t/2) - \mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2)) + \Delta \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}, \end{aligned} \quad k = 1, \dots, N - 1, \quad (4.3.12)$$

où

$$\mathbf{W}_{q,k}^{(j)} := \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{W}_{k+1}^{(j)} - \mathbf{W}_k^{(j)}), \quad (4.3.13)$$

et  $\Delta \mathbf{W}_{q,k}^{(j)} := \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}(t)$ . Chaque composante de  $\Delta \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}$  dans (4.3.12) est alors Gaussienne avec moyenne zéro et variance  $\Delta t$ .

Lorsque  $N > 2$  la méthode itérative de Gauss-Seidel peut être utilisée pour

faire avancer (4.3.12) d'un pas de temps pour obtenir le prédicteur  $\tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}$  du vecteur bout à bout du k-ième ressort de la j-ième chaîne. Notons avec une indice [n] l'évaluation d'un vecteur à la n-ième étape de Gauss-Seidel. Alors, nous résolvons

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t) &= \left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \mathbf{q}_k^{(j)}(t) + \Delta t \left(\mathbf{u}(\mathbf{r}_{k+1}^{(j)}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t)\right) \\
 + \frac{\Delta t}{4} \left\{ \left(\frac{1}{1 - \tilde{\mathbf{q}}_{k-1,[n+1]}^{(j)2}/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k-1,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t) - 2 \left(\frac{1}{1 - \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n+1]}^{(j)2}/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t) \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{1}{1 - \tilde{\mathbf{q}}_{k+1,[n]}^{(j)2}/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k+1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) \right\} \\
 + \frac{\Delta t}{4} (\mathbf{G}_{k+1}^{(j)}(t) - \mathbf{G}_k^{(j)}(t)) + m(\mathbf{v}_{k+1}^{(j)}(t - \Delta t/2) - \mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2)) + \Delta \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}, \\
 k = 1, \dots, N - 1, \tag{4.3.14}
 \end{aligned}$$

où, par exemple,  $\tilde{\mathbf{q}}_{k,[n]}^{(j)}$  représente la norme 2 de  $\tilde{\mathbf{q}}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t)$ .

Après réarrangement de (4.3.14) nous obtenons

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{m}{\Delta t} + 1 + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{1 - \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n+1]}^{(j)2}/b}\right)\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t) \\
 = \left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \mathbf{q}_k^{(j)}(t) + \Delta t \left(\mathbf{u}(\mathbf{r}_{k+1}^{(j)}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t)\right) \\
 + \frac{\Delta t}{4} \left\{ \left(\frac{1}{1 - \tilde{\mathbf{q}}_{k-1,[n+1]}^{(j)2}/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k-1,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t) + \left(\frac{1}{1 - \tilde{\mathbf{q}}_{k+1,[n]}^{(j)2}/b}\right) \tilde{\mathbf{q}}_{k+1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) \right\} \\
 + \frac{\Delta t}{4} (\mathbf{G}_{k+1}^{(j)}(t) - \mathbf{G}_k^{(j)}(t)) + m(\mathbf{v}_{k+1}^{(j)}(t - \Delta t/2) - \mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2)) + \Delta \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}, \\
 k = 1, \dots, N - 1. \tag{4.3.15}
 \end{aligned}$$

Désignons maintenant le membre de droite de (4.3.15) par  $\mathbf{a}_{k,[n+1]}^{(j)}$ . Alors, le calcul de la norme 2 des deux membres de (4.3.15) nous permet d'obtenir une équation

cubique

$$\left(\frac{m}{\Delta t} + 1\right) \tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)3} - \left\| \mathbf{a}_{k,[n+1]}^{(j)} \right\|_2 \tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)2} - b \left(1 + \frac{m}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2}\right) \tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)} + b \left\| \mathbf{a}_{k,[n+1]}^{(j)} \right\|_2 = 0, \quad (4.3.16)$$

pour  $\tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)}$ . Il s'ensuit directement du théorème des valeurs intermédiaires qu'il existe exactement une racine de cette équation cubique entre 0 et  $\sqrt{b}$  et c'est cette valeur que nous allons retenir pour  $\tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)}$  dans l'expression

$$\tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t) = \tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)} \frac{\mathbf{a}_{k,[n+1]}^{(j)}}{\left\| \mathbf{a}_{k,[n+1]}^{(j)} \right\|_2}, \quad (4.3.17)$$

pour  $\tilde{q}_{k,[n+1]}^{(j)}(t + \Delta t)$ . Bien que cette procédure puisse garantir que la longueur du ressort ne puisse jamais dépasser  $\sqrt{b}$ , quelle que soit la grandeur du pas de temps  $\Delta t$ , elle n'empêche pas les billes de traverser les parois d'un domaine borné  $\mathcal{D}$ . Afin de s'assurer que les chaînes restent à l'intérieur de  $\mathcal{D}$  nous permettons aux billes d'effectuer une collision élastique avec les parois solides. Ainsi, dans la  $j$ -ième chaîne, après avoir effectuée la  $n$ -ième étape itérative de Gauss-Seidel pour  $k = 1, 2, \dots, N - 1$  pour obtenir  $\tilde{q}_{1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t), \dots, \tilde{q}_{N-1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t)$ , la position prédite du vecteur position de la première bille  $\tilde{r}_{1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t)$  est déduite de la relation

$$\tilde{r}_{1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) = \tilde{r}_c^{(j)}(t + \Delta t) - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} (N - k) \tilde{q}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t), \quad (4.3.18)$$

et on vérifie si elle est dans  $\mathcal{D}$ . Si non, alors  $\tilde{r}_{1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t)$  est remplacée par sa symétrie par rapport à la frontière qu'elle a traversée. Chaque  $\tilde{r}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t)$  ( $k = 2, 3, \dots, N$ ) est calculé, en se servant de,

$$\tilde{r}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) = \tilde{r}_{k-1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) + \tilde{q}_{k-1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t), \quad (4.3.19)$$

à tour de rôle. Après que cela ait été fait, la vérification est faite sur chacun pour s'assurer qu'il est dans  $\mathcal{D}$ . Si ce n'est pas le cas, nous suivons la même méthode de réflexion sur la paroi. Après le calcul et la correction du vecteur position de chacune des billes, le vecteur segment prédit et ajusté  $\tilde{\mathbf{q}}_{k,[n]}^{(j)}$  est trouvé à partir de

$$\tilde{\mathbf{q}}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) = \tilde{\mathbf{r}}_{k+1,[n]}^{(j)}(t + \Delta t) - \tilde{\mathbf{r}}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t), \quad (4.3.20)$$

et le centre de masse prédit et ajusté de

$$\tilde{\mathbf{r}}_c^{(j)}(t + \Delta t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \tilde{\mathbf{r}}_{k,[n]}^{(j)}(t + \Delta t). \quad (4.3.21)$$

Les itérations de Gauss-Seidel continuent jusqu'à ce que

$$\sqrt{\sum_{k=1}^{N-1} \left\| \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n+1]}^{(j)} - \tilde{\mathbf{q}}_{k,[n]}^{(j)} \right\|_2^2} \leq \epsilon_1,$$

pour une tolérance  $\epsilon_1$  (fixée à  $10^{-4}$  dans les expériences numériques de la Section 4.4.2). Les valeurs prédites  $\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}$  ( $k = 1, 2, \dots, N$ ),  $\tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}$  ( $k = 1, 2, \dots, N - 1$ ) et  $\tilde{\mathbf{r}}_c^{(j)}$  sont fixées égales aux valeurs convergées des itérations de Gauss-Seidel. Enfin, nous calculons la vitesse prédite des billes  $\tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2)$  par

$$\tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2) = \frac{1}{\Delta t} (\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \mathbf{r}_k^{(j)}(t)). \quad (4.3.22)$$

**Correcteur** Une correction  $\mathbf{r}_c^{(j)}(t + \Delta t)$  à  $\tilde{\mathbf{r}}_c^{(j)}(t + \Delta t)$  peut être obtenue de (4.3.8) en résolvant

$$\left( \frac{2m}{\Delta t} + 1 \right) \mathbf{r}_c^{(j)}(t + \Delta t) = \left( \frac{2m}{\Delta t} + 1 \right) \mathbf{r}_c^{(j)}(t) + \frac{\Delta t}{2N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t) + \mathbf{u}(\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}, t + \Delta t))$$

$$+ \frac{\Delta t}{8N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{G}_k^{(j)}(t) + \tilde{\mathbf{G}}_k^{(j)}(t + \Delta t)) + \frac{m}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2) + \tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2)) + \Delta \mathbf{W}_c^{(j)}, \quad (4.3.23)$$

où  $\mathbf{u}(\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}, t + \Delta t)$ , la vitesse du solvant à la position prédite de la  $k$ -ième bille de la  $j$ -ième chaîne, est calculée à partir des équations (4.2.13)-(4.2.14). La méthode SPH utilisée pour la solution de  $\mathbf{u}$  est notre méthode EPSPH que nous avons décrite dans le chapitre précédent. Dans (4.3.23), les tildes sur les forces d'exclusion de volume indiquent leur évaluation aux positions prédites des billes.  $\tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  est corrigé en résolvant l'équation semi-implicite

$$\begin{aligned} \left(\frac{2m}{\Delta t} + 1\right) \mathbf{q}_k^{(j)}(t + \Delta t) &= \left(\frac{2m}{\Delta t} + 1\right) \mathbf{q}_k^{(j)}(t) + \frac{\Delta t}{8} (\mathbf{F}_{k+1}^{(j)}(t) - \mathbf{F}_k^{(j)}(t)) \\ &+ \frac{\Delta t}{8} \left\{ \left(\frac{1}{1 - \|\mathbf{q}_{k-1}^{(j)}\|_2^2/b}\right) \mathbf{q}_{k-1}^{(j)}(t + \Delta t) - 2 \left(\frac{1}{1 - \|\mathbf{q}_k^{(j)}\|_2^2/b}\right) \mathbf{q}_k^{(j)}(t + \Delta t) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{1 - \|\mathbf{q}_{k+1}^{(j)}\|_2^2/b}\right) \mathbf{q}_{k+1}^{(j)}(t + \Delta t) \right\} \\ &+ \frac{\Delta t}{8} (\mathbf{G}_{k+1}^{(j)}(t) - \mathbf{G}_k^{(j)}(t)) + \frac{\Delta t}{8} (\tilde{\mathbf{G}}_{k+1}^{(j)}(t + \Delta t) - \tilde{\mathbf{G}}_k^{(j)}(t + \Delta t)) \\ &+ \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u}(\mathbf{r}_{k+1}^{(j)}, t) + \mathbf{u}(\tilde{\mathbf{r}}_{k+1}^{(j)}, t + \Delta t)) - \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u}(\mathbf{r}_k^{(j)}, t) + \mathbf{u}(\tilde{\mathbf{r}}_k^{(j)}, t + \Delta t)) \\ &+ m(\mathbf{v}_{k+1}^{(j)}(t - \Delta t/2) + \tilde{\mathbf{v}}_{k+1}^{(j)}(t + \Delta t/2)) - m(\mathbf{v}_k^{(j)}(t - \Delta t/2) + \tilde{\mathbf{v}}_k^{(j)}(t + \Delta t/2)) \\ &\quad + \Delta \mathbf{W}_{q,k}^{(j)}, \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

en utilisant les itérations de Gauss-Seidel et les corrections des positions des billes, analogues à la méthode décrite ci-dessus pour la solution de (4.3.14). Une fois que nous avons résolu pour tous les  $\mathbf{q}_k^{(j)}(t + \Delta t)$  nous vérifions que

$$\sqrt{\frac{2}{NM}} \sqrt{\sum_j \sum_k \|\mathbf{q}_k^{(j)}(t + \Delta t) - \tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)}(t + \Delta t)\|^2} < \epsilon_2, \quad (4.3.25)$$

pour une certaine tolérance  $\epsilon_2$ . Si cette condition est vérifiée, nous avançons avec le prochain pas de temps. Si non, soit nous divisons  $\Delta t$  par 2 et répétons les étapes de prédiction et de correction (dans le cas des longues chaînes) ou nous posons  $\tilde{\mathbf{q}}_k^{(j)} = \mathbf{q}_k^{(j)}$  pour tous les  $j$  et  $k$  (dans le cas des haltères) et reprenons l'étape de correction.  $\epsilon_2$  est fixé à  $0.01\sqrt{b}$  dans les calculs de la Section 4.4.2.

### 4.3.2 Les équations de Navier-Stokes (4.2.13)-(4.2.14)

Afin de résoudre les équations de Navier-Stokes, nous allons nous servir de notre méthode EPSPH qui comme nous l'avons vu dans le chapitre 2 est une application de la méthode SPH à un schéma de projection. Ainsi, la force  $\mathbf{F}^n(\mathbf{x}, t)$ , présente dans l'équation (2.2.1) du schéma de projection que nous avons utilisé, représente ici la somme de la force fluctuante, les forces des billes sur le fluide et toutes les autres forces extérieures (incluant un gradient de pression imposé) au temps  $n\Delta t$ .

Dans le souci d'effectuer les calculs avec la forme adimensionnée des équations de Navier-Stokes (4.2.13)-(4.2.14), nous avons adimensionné les équations discrètes (2.6.2), (2.6.10) et (2.6.13) de notre méthode SPH présentées au chapitre 2. Puisque la viscosité, la densité et la masse de chaque particule fluide sont constantes tout au long des calculs dans notre travail, la forme discrète (2.6.2) de notre méthode SPH pour le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}_i^*$  en chaque particule SPH du solvant, se simplifie aisément pour donner la forme suivante :

$$\text{Re} \left( \frac{\mathbf{u}_i^* - \mathbf{u}_i^n}{\Delta t} \right) = \frac{\text{Meas}(\mathcal{D})}{N_p} \sum_{j \neq i} [(\mathbf{u}_i^* - \mathbf{u}_j^*) + (\mathbf{u}_i^n - \mathbf{u}_j^n)] \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} + \mathbf{g}_i^n, \quad (4.3.26)$$

où  $\text{Meas}(\mathcal{D}) = \sum_{j=1}^{N_p} m_j / \rho_j$  comme nous l'avons vu à la Section 2.3.3 et  $N_p$  est le nombre totale des particules fluides. Sous les mêmes hypothèses de viscosité, de masse volumique et de masse constante, la formulation SPH (2.6.10) de l'équa-

tion de Poisson (2.2.4) devient

$$\frac{2\Delta t}{\text{Re}} \sum_{j \neq i} (\varphi_i^{n+1} - \varphi_j^{n+1}) \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r} = \sum_{j \neq i} (\mathbf{u}_j^* + \mathbf{u}_i^*) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \quad (4.3.27)$$

Enfin, la forme discrète (2.6.13) de l'équation (2.2.6) de mise à jour de la vitesse du solvant devient :

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^* - \frac{\Delta t \text{Meas}(\mathcal{D})}{\text{Re} N_p} \sum_{j \neq i} (\varphi_i^{n+1} + \varphi_j^{n+1}) (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{r_{ij}} \frac{\partial W_{ij}}{\partial r}. \quad (4.3.28)$$

Nous parlons brièvement de comment nous discrétisons les forces dues aux billes et les fluctuations thermiques qui contribuent à  $\mathbf{F}_i^n$  présent dans l'équation (2.6.2) et qui représentent la somme de toutes les forces extérieures qui agissent sur la  $i$ -ième particule SPH de vecteur position  $\mathbf{x}_i$ .

### Force de réaction de la bille

La force totale exercée sur le fluide par toutes les billes en un point ayant pour vecteur position  $\mathbf{x}$  est donnée, selon l'équation (4.2.13), par

$$\frac{Z}{4} \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \left( \mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{G}_k^{(j)} - 4m \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)}}{dt^2} \right) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k^{(j)}). \quad (4.3.29)$$

Par conséquent, représentant la fonction delta dans (4.3.29) par une fonction noyau (fonction delta régularisée), la force agissante sur la  $i$ -ième particule fluide peut être discrétisée par

$$\frac{Z}{4} \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^N \left( \mathbf{F}_k^{(j)} + \mathbf{G}_k^{(j)} - 4m \frac{d^2 \mathbf{r}_k^{(j)}}{dt^2} \right) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{r}_k^{(j)}, h^*), \quad (4.3.30)$$

où  $W$  est la fonction spline cubique définie en (2.3.9) et  $2h^*$  est le rayon de son support.

### Force fluctuante

Afin de générer une distribution normale des composantes du tenseur  $\tilde{\mathbf{S}}$  qui ont une moyenne zéro et qui satisfont (4.2.17), nous donnons une approximation des corrélations des composantes  $(i, k)$  et  $(j, \ell)$  comme suit :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{S}_{ik}(\mathbf{x}, t) \tilde{S}_{j\ell}(\mathbf{x}', t') \rangle &= \frac{Z}{2} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') [\delta_{ij} \delta_{k\ell} + \delta_{i\ell} \delta_{jk}] \\ &\approx \frac{Z}{2\Delta t \Delta A} [\delta_{ij} \delta_{k\ell} + \delta_{i\ell} \delta_{jk}], \end{aligned} \quad (4.3.31)$$

où

$$\Delta A := \text{Meas}(\mathcal{D})/N_p, \quad (4.3.32)$$

est une surface ( $d = 2$ ) ou un volume ( $d = 3$ ) assigné à chaque particule SPH. Chaque composante  $\tilde{S}_{ij}$  de  $\tilde{\mathbf{S}}$  à chaque pas de temps et à l'emplacement de chaque particule fluide SPH est alors choisie aléatoirement des distributions normales  $\sqrt{Z/\Delta t \Delta A} N(0, 1)$ , lorsque  $i = j$  et  $\sqrt{Z/2\Delta t \Delta A} N(0, 1)$  lorsque  $i \neq j$ . Les composantes de la force fluctuante  $\mathbf{f} := \nabla \cdot \tilde{\mathbf{S}}$  peuvent ensuite être calculées à partir de celles de  $\tilde{\mathbf{S}}$  au moyen des différences finies centrées en se servant du maillage donné par les points SPH.

Il est important de noter que puisque c'est (4.3.30) et non (4.3.29) qui apparaît comme la force de réaction des billes sur le fluide dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement linéaire (4.2.13) qui est résolue numériquement, la force fluctuante appropriée doit avoir la forme régularisée :

$$\bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, t) := \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{f}(\mathbf{x}', t) W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', h^*) d\mathbf{x}'. \quad (4.3.33)$$

À la  $i$ -ième particule SPH  $\mathbf{x}_i$  elle est par conséquent calculée comme

$$\bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}_i, t) = \frac{\text{Meas}(\mathcal{D})}{N_p} \sum_j \mathbf{f}(\mathbf{x}_j, t) W(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j, h^*), \quad (4.3.34)$$

où la somme dans (4.3.34) est calculée sur toutes les particules SPH  $x_j$  situées à l'intérieur d'une distance  $2h^*$  de  $x_i$ .

## 4.4 Résultats numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats des calculs effectués dans un canal bi-dimensionnel

$$\{(x, y) : x \in (-\infty, \infty), y \in (-D, D)\}. \quad (4.4.1)$$

Les conditions aux frontières périodiques sur la vitesse sont imposées en  $x = 0$  et  $x = L$  pour un certain choix de  $L > 0$ . De même, la différence de la pression calculée d'une fonction linéaire de  $x$  imposée (gradient de pression axiale constant) est périodique en  $x$ . Des conditions aux frontières de Dirichlet sont prescrites sur les parois supérieure et inférieure du domaine périodique  $\mathcal{D}$  de sorte que, dans la notation de la Section 4.3.2,  $\partial\mathcal{D}^D = \{(x, \pm D) : x \in (0, L)\}$ . Ainsi,  $\text{Meas}(\mathcal{D})$ , comme cela apparaît dans (4.3.26)-(4.3.28) et (4.3.32) est égale à  $2DL$  dans toute cette section. Notons par  $N_x$  le nombre de particules SPH dans la direction  $x$  et  $N_y$  le nombre de particules dans la direction transversale du canal. Nous obtenons un nombre total  $N_p = N_x N_y$  de particules SPH et la position  $(x_i, y_j)$  de la  $(i, j)$ -ième particule SPH est égale à  $((i-1)\Delta x, -D + (j-1/2)\Delta y)$ , où les espaces inter-particules  $\Delta x$  et  $\Delta y$  sont donnés par  $L/N_x$  et  $2D/N_y$ , respectivement.

Le rayon  $2h$  du support de la fonction de lissage (2.3.9), utilisée dans la discrétisation SPH des opérateurs de vitesse et de pression, est choisi comme simple facteur (1.2) qui multiplie la somme  $(\Delta x + \Delta y)$ . Comme on le voit dans les tests de la section suivante ce choix pourrait ne pas donner des ordres de convergence optimaux. Il a été nécessaire, dans le souci de limiter le coût de calcul, de restreindre le rapport entre  $h$  et la distance inter-particules. Lorsque  $W$  est utilisée

pour représenter une fonction delta (dans les Sections 4.4.1-4.4.2), sa longueur de lissage  $h^*$  est fixe et égale à 1.3.

Signalons que dans les résultats numériques pour lesquels un gradient de pression  $\partial p/\partial x$  constant a été imposé (voir les résultats de la Section 4.4.2), cette partie de la pression est incluse dans le vecteur force  $\mathbf{F}$  qui apparaît dans le membre de droite de l'équation (2.2.1), par exemple. Dans la Section 4.4.2 nous faisons référence à un nombre de Weissenberg  $We$  et nous définissons cela comme le produit du temps de relaxation  $\lambda_H$  et le taux de cisaillement de l'écoulement de Poiseuille à une paroi en l'absence de polymère. En termes de nos quantités adimensionnées, il est facile de démontrer que cela conduit à la définition

$$We := -D \frac{\partial p}{\partial x}. \quad (4.4.2)$$

#### 4.4.1 Précision et ordre de convergence

Dans cette section, nous montrons que notre schéma de projection SPH (2.2.1) - (2.2.6) pour les équations de Navier-Stokes donne approximativement  $O(N_x^{-1.5})$  de convergence (avec  $N_x = N_y$ ) pour la pression, ce qui est conforme aux prédictions théoriques de Guermond et al. [56] pour les schémas de projection de ce type. La précision de notre méthode en fonction du raffinement du maillage est examinée au moyen d'un problème d'écoulement dû à une réseau périodique dans la direction  $x$ , des forces singulières localisées en des points, où  $\mathbf{F}$  est un vecteur multiple des fonctions delta régularisées.

### Distributions de force singulière stationnaire et périodique dans la direction des $x$ positifs

Un test exigeant des propriétés numériques de notre schéma SPH a lieu lorsque le terme de source  $\mathbf{F}$  dans le membre de droite de (2.2.1) est singulier.

**Tenseur de mobilité.** Nous considérons tout d'abord le problème qui consiste à déterminer le tenseur de mobilité  $4 \times 4$  d'une paire de points périodiques suivant  $x$  dans un canal bidimensionnel ayant les vecteurs positions  $\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  dans le domaine de calcul  $(0, L) \times (-D, D)$ . Nous recherchons un tenseur  $M(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  de sorte que, si les forces singulières (adimensionnées)  $\mathbf{f}_1$  et  $\mathbf{f}_2$  agissent en des points donnés dans le domaine de calcul, alors, en l'absence d'un écoulement imposé ou de toutes autres forces, on ait

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) \\ \mathbf{u}(\mathbf{r}_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{f}_1 \\ \mathbf{f}_2 \end{pmatrix}, \quad (4.4.3)$$

où  $\mathbf{u}_i$  représente la vitesse de la  $i$ -ième bille ( $i = 1, 2$ ) et chaque  $M_{ij}$  est un tenseur  $2 \times 2$ . La vitesse du fluide  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  dans (4.4.3) satisfait, dans le cas présent, aux équations de Stokes stationnaires

$$\mathbf{0} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + Z\mathbf{f}_1 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}}_{1,n}) + Z\mathbf{f}_2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}}_{2,n})$$

dans  $(-\infty, \infty) \times (-D, D)$ , (4.4.4)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.4.5)$$

où

$$\hat{\mathbf{r}}_{i,n} = \mathbf{r}_i + (nL, 0), \quad n \in \mathbb{Z}, i = 1, 2. \quad (4.4.6)$$

La solution  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  de (4.4.4)-(4.4.5) peut s'écrire de manière formelle en terme d'une fonction de Green  $\Omega$  comme suit :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = Z \sum_{i=1}^2 \Omega(\mathbf{x}, \mathbf{r}_i) \mathbf{f}_i, \quad (4.4.7)$$

de sorte que le tenseur de mobilité  $M$  dans (4.4.3) est donné par

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{2 \times 2} + Z\Omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) & Z\Omega(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ Z\Omega(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) & \delta_{2 \times 2} + Z\Omega(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2) \end{pmatrix}, \quad (4.4.8)$$

où  $\delta_{2 \times 2}$  est le tenseur identité  $2 \times 2$ . Sachant que l'opérateur de Stokes est auto-adjoint, on peut démontrer que  $\Omega$  et par conséquent  $M$  doivent être symétriques [146]. C'est-à-dire que,  $\Omega(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = \Omega(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)^\top$ , ( $i, j = 1, 2$ ). La solution exacte de l'écoulement de Stokes dû à un réseau périodique de forces singulières lorsque le fluide est confiné entre des plaques parallèles est, en principe, possible (voir Pozrikidis [146], p. 99). Cependant, cette tâche est extrêmement compliquée à cause de la difficulté à évaluer la fonction exacte de Green. Dans le cas présent, nous calculons un tenseur de mobilité régularisé en résolvant (4.4.4)-(4.4.5) au moyen de la méthode SPH que nous avons longuement présentée au chapitre 2 et sur laquelle nous sommes brièvement revenus à la Section 4.3.2 avec des choix judicieux des fonctions de sources singulières  $\mathbf{f}_i \delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}}_{i,0})$  ( $i = 1, 2$ ) remplacées par  $\mathbf{f}_i W(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}}_{i,0}, h^*)$ . Le rayon  $2h^*$  du support de la fonction delta régularisée  $W(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{r}}_{i,0}, h^*)$  est choisi comme un simple multiple de celui de la fonction de lissage (2.3.9) utilisée dans les calculs de l'interaction entre les particules SPH. Le choix des fonctions de source donnera les colonnes du tenseur de mobilité souhaitées en suivant une idée proposée par Jendrejack et al. [76, 77] : choisissant  $\mathbf{f}_1 = (1, 0)^\top$  et  $\mathbf{f}_2 = (0, 0)^\top$  et résolvant numériquement les équations de Navier-Stokes pour obtenir  $(\mathbf{u}^\top(\mathbf{r}_1), \mathbf{u}^\top(\mathbf{r}_2))^\top$  comme décrit ci-dessus donne la première colonne de  $M - \delta_{4 \times 4}$ . Le choix de  $\mathbf{f}_1 = (0, 1)^\top$  et  $\mathbf{f}_2 = (0, 0)^\top$  donne un champ de

vitesse qui est la deuxième colonne de  $M - \delta_{4 \times 4}$ , et ainsi de suite.

La méthode ci-dessus est appliquée sur un maillage de  $N_x = N_y = 100$  et avec un choix de pas de temps égal à  $2 \times 10^{-4}$ . La valeur choisie pour  $Z$  est 2.7024. Nous considérons que l'état stationnaire est atteint lorsque la norme 2 de la différence entre deux solutions successives de la vitesse évaluée aux vecteurs positions des billes chute en dessous de  $1 \times 10^{-12}$ . La longueur  $L$  du canal périodique a été fixée à 2 et la moitié de l'épaisseur  $D$  est égale à 1. Les deux sources de points ont été placées à une distance  $\sqrt{0.001}$  l'une de l'autre symétriquement au point central  $(1, 0)$  du canal. Le tenseur de mobilité calculé est :

$$M = \begin{pmatrix} 2.1807 \times 10^0 & -6.0000 \times 10^{-15} & 1.0937 \times 10^0 & -6.0000 \times 10^{-15} \\ -4.0000 \times 10^{-15} & 1.7071 \times 10^0 & -5.3000 \times 10^{-14} & 5.7446 \times 10^{-1} \\ 1.0937 \times 10^0 & -3.6000 \times 10^{-14} & 2.1807 \times 10^0 & -3.3000 \times 10^{-14} \\ -3.0000 \times 10^{-15} & 5.7446 \times 10^{-1} & -3.2000 \times 10^{-14} & 1.7071 \times 10^0 \end{pmatrix}, \quad (4.4.9)$$

qui est défini positif et presque parfaitement symétrique. La norme 2,  $\|M - U^T U\|_2$ , de la différence entre  $M$  et la décomposition de Cholesky de la matrice  $U + D + U^T$ , formée de la partie diagonale de  $D$  et de la partie triangulaire stricte  $U$  de  $M$ , est égale à  $2.2980 \times 10^{-14}$ . Rapprocher les points de source symétriquement arrangés entraîne uniquement une augmentation des valeurs dans  $M$  sans détruire la symétrie et le caractère défini positif du tenseur de mobilité. Lorsque les deux points de source sont placés à des positions qui ne sont pas symétriques par rapport aux parois, le tenseur de mobilité perd un peu de sa symétrie due à l'erreur dans le calcul de la fonction de Green pour cet écoulement périodique borné. Par exemple, pour des points placés à  $(1 \pm \sqrt{0.001}/2, -D + 0.005)$  (et donc très proches de la paroi inférieure) avec les mêmes autres paramètres inchangés

que pour le premier cas du test, le tenseur de mobilité calculé est

$$M = \begin{pmatrix} 1.0245 \times 10^0 & 8.0887 \times 10^{-6} & 1.6532 \times 10^{-2} & 1.7131 \times 10^{-3} \\ -6.0710 \times 10^{-7} & 1.0178 \times 10^0 & -1.5586 \times 10^{-3} & 9.1319 \times 10^{-3} \\ 1.6532 \times 10^{-2} & -1.7131 \times 10^{-3} & 1.0245 \times 10^0 & -8.0887 \times 10^{-6} \\ 1.5586 \times 10^{-3} & 9.1319 \times 10^{-3} & 6.0710 \times 10^{-7} & 1.0178 \times 10^0 \end{pmatrix}, \quad (4.4.10)$$

et  $\|M - U^T U\|_2$  monte à  $1.5502 \times 10^{-4}$ . Cependant, à cet égard, notre méthode semble ne pas donner des résultats pires que ceux de Jendrejack et al. [76, 77] qui ont dû rendre symétrique leur tenseur de diffusion calculé en remplaçant les entrées  $(i, j)$  (pour  $i \neq j$ ) avec la moyenne des  $(i, j)$ -ième et  $(j, i)$ -ième valeurs.

**Ordre de convergence** Considérons les erreurs moyennes quadratiques (emq) encourues lors de la résolution du problème de l'écoulement de Stokes non-stationnaire dans un canal infini de largeur  $2D$  :

$$\text{Re} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{f} \delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}_n), \quad \text{à l'intérieur de } (-\infty, \infty) \times (-D, D), \quad (4.4.11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (4.4.12)$$

dû à une chaîne infinie et périodique suivant  $x$  de forces singulières stationnaires bidimensionnelles  $\mathbf{f}$  situées en

$$\hat{\mathbf{x}}_n = (\hat{x}_n, \hat{y}_n), \quad \hat{x}_n = \hat{x}_0 + nL, \quad \hat{y}_n = \hat{y}_0, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.4.13)$$

où  $\hat{\mathbf{x}}_0 := (\hat{x}_0, \hat{y}_0)$  est un point fixé à l'intérieur de  $(0, L) \times (-D, D)$ .

Nous allons nous servir de la méthode SPH pour résoudre les équations (4.4.11)-(4.4.12), avec la fonction source singulière  $f\delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}_n)$  dans l'équation (4.4.11) qui est remplacée par  $fW(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}_n, h^*)$ . Comme avant, le rayon du support de la fonction delta régularisée  $W(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}_n, h^*)$  est choisi comme un multiple simple de celui de la fonction de lissage (2.3.9) utilisée dans les calculs de l'interaction entre les particules SPH.

Afin d'adapter l'analyse de l'erreur de la Section 4 de Tornberg et Engquist [174] au contexte présent, nous écrivons la solution exacte de la vitesse  $\mathbf{u}$  pour les équations (4.4.11)-(4.4.12) évaluées à la  $i$ -ième particule SPH  $\mathbf{x}_i$  au temps  $t = n\Delta t$  de manière formelle comme suit :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_i, n\Delta t) = \frac{1}{4\pi} \mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \hat{\mathbf{x}}_0, n\Delta t) \mathbf{f} = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{D}} \mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}, n\Delta t) f\delta(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{x}}_0) d\mathbf{y}. \quad (4.4.14)$$

La solution numérique  $\mathbf{u}_i^n$  au même point et au même instant dans le temps est

$$\mathbf{u}_i^n = \frac{1}{4\pi} \frac{\text{Meas}(\mathcal{D})}{N_p} \sum_j \mathbf{G}_{ij}^n fW(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_j, h^*), \quad (4.4.15)$$

où,  $\mathbf{G}$  est la fonction de Green exacte et non stationnaire et  $\mathbf{G}_{ij}^n$  est la fonction de Green discrète pour le problème régularisé. Le calcul de toute norme  $\|\cdot\|$  de la différence entre (4.4.14) et (4.4.15) conduit à

$$\begin{aligned} & \|\mathbf{u}(\mathbf{x}_i, n\Delta t) - \mathbf{u}_i^n\| \\ &= \frac{1}{4\pi} \left\| \int_{\mathcal{D}} \mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}, n\Delta t) f\delta(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{x}}_0) d\mathbf{y} - \frac{\text{Meas}(\mathcal{D})}{N_p} \sum_j \mathbf{G}_{ij}^n fW(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_j, h^*) \right\|, \end{aligned} \quad (4.4.16)$$

$$\begin{aligned} & \leq \frac{1}{4\pi} \left\| \int_{\mathcal{D}} \mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}, n\Delta t) f\delta(\mathbf{y} - \hat{\mathbf{x}}_0) d\mathbf{y} - \frac{\text{Meas}(\mathcal{D})}{N_p} \sum_j \mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, n\Delta t) fW(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_j, h^*) \right\| \\ & \quad + \frac{1}{4\pi} \frac{\text{Meas}(\mathcal{D})}{N_p} \left\| \sum_j [\mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, n\Delta t) - \text{bm}G_{ij}^n] fW(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}_j, h^*) \right\|. \end{aligned} \quad (4.4.17)$$

Supposons que nous choisissons une discrétisation telle que  $N_x = N_y$ . Puisque  $W$ , la fonction delta discrète, satisfait aux deux conditions de moment discrets (voir (2.3.3) et (2.3.4)), nous nous attendons à ce que la première norme dans le membre de droite de l'inégalité dans (4.4.17) soit  $O(N_x^{-2})$  lorsque cela est évalué sur des points SPH suffisamment éloignés de la singularité. De plus, puisque nous utilisons un schéma numérique SPH de second ordre, nous nous attendons à ce que

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j, n\Delta t) - \mathbf{G}_{ij}^n\| \leq C_1 N_x^{-2},$$

pour une constante  $C_1$  lorsque l'évaluation est faite loin de  $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$ . De (4.4.17) nous concluons que

$$\|\mathbf{u}(\mathbf{x}_i, n\Delta t) - \mathbf{u}_i^n\| \leq C_2 N_x^{-2}, \quad (4.4.18)$$

pour une constante  $C_2$  lorsque  $\mathbf{x}_i$  est délimité suffisamment loin de la singularité. Une analyse analogue suit pour l'erreur de la pression, une différence importante étant que nous pourrions ne pas avoir des approximations de second ordre pleines pour la pression (voir, par exemple, l'analyse de l'erreur de Guermond et al. [56]).

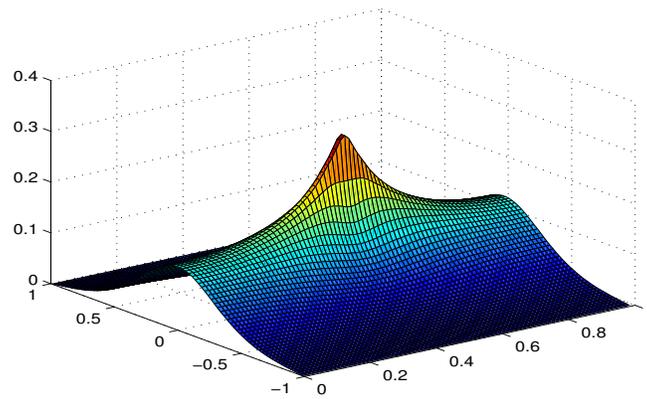
N'ayant pas de solution exacte pour le problème (4.4.11)-(4.4.12) nous mesurons l'ordre de convergence de notre méthode numérique en calculant les normes des différences des solutions numériques consécutivement raffinées sur des maillages SPH avec  $4^0 N_x^2, 4^1 N_x^2, 4^2 N_x^2, \dots$  particules SPH à un moment donné fixe dans le temps. Pour une approche similaire à l'étude de la convergence numérique d'une méthode des différences finies pour une équation parabolique avec un terme de source singulière, on peut voir, par exemple, la Section 4.2 de Tornberg et Engquist [174]. Nous choisissons  $N_x = 10$  comme maillage initial et nous calculons les solutions sur des maillages qui ont  $20^2, 40^2, 80^2$  et  $160^2$  particules SPH. Le nombre de Reynolds  $Re$  est fixé à  $1 \times 10^{-2}$  et le pas de temps  $\Delta t$  est choisi égal à  $0.5Re\Delta x^2/8$  [129] pour des raisons de stabilité.  $D$  et  $L$  sont égaux à

1 et par souci de simplicité la force singulière  $\mathbf{f}$  est choisie égale à  $(1, 0)$ , localisée dans notre domaine de calcul en  $\hat{x}_0 = (0.5, 0)$ .

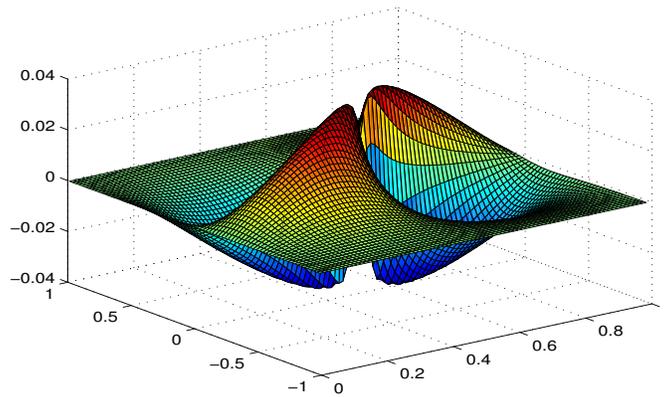
Les figures 4.2 (A), (B) et (C) montrent, respectivement, les graphiques au temps  $t = 0.001$  des composantes en  $x$  et  $y$  de la vitesse et la pression calculées, solutions du problème régularisé (4.4.11)-(4.4.12) lorsque  $N_x = N_y = 80$ . La croissance illimitée près du point  $\hat{x}_0$  à la fois de la vitesse et de la pression domine sur les ordres de convergence, sur l'ensemble du domaine d'écoulement  $\mathcal{D}$  et au moins à un ordre inférieur à ceux prédits par la borne (4.4.18) (obtenu pour le cas où on considère un domaine excluant un disque suffisamment large centré en  $\hat{x}_0$ ). En effet, la figure 4.3 (A) montre au mieux, une convergence linéaire pour la vitesse  $u$ . Le même calcul de l'erreur de la pression sur tout le domaine de calcul conduit à  $O(1)$ . Cependant, l'évaluation des erreurs moyennes quadratiques (emq) de la vitesse et de la pression (voir les équations (3.6.2) et (3.6.3)) sur une région délimitée par  $\mathcal{D}$  moins un disque  $\Omega$  de rayon  $2h^* = 0.468$  qui définit le support compact de la fonction delta régularisée  $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n, h^*)$  lorsque  $N_x = N_y = 10$ , nous permet de retrouver la convergence quadratique de la vitesse et une convergence  $O(N_x^{-1.5})$  de la pression, comme le montre la figure 4.3 (B). Le résultat de la répétition de l'exercice avec la soustraction d'un disque dont la largeur est le dixième de celui du cas ci-dessus, a été, comme on s'y attendait, une réduction des ordres de convergence de la vitesse et de la pression.

#### 4.4.2 Résultats pour $We > 0$

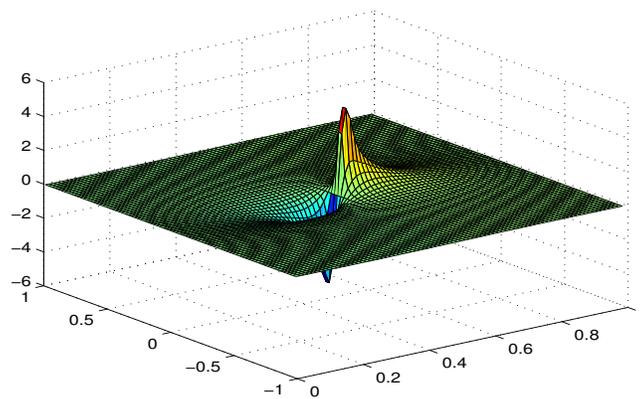
Dans cette dernière section des résultats numériques, nous considérons l'application de la solution de l'algorithme décrit à la Section 4.3 pour des haltères et une longue chaîne bille-ressort dans un fluide soumis à un gradient de pression dans un canal. Tous les calculs font intervenir des interactions hydrodynamiques bille-bille et bille-paroi. À l'exception des calculs du temps CPU dans la Section



(A)

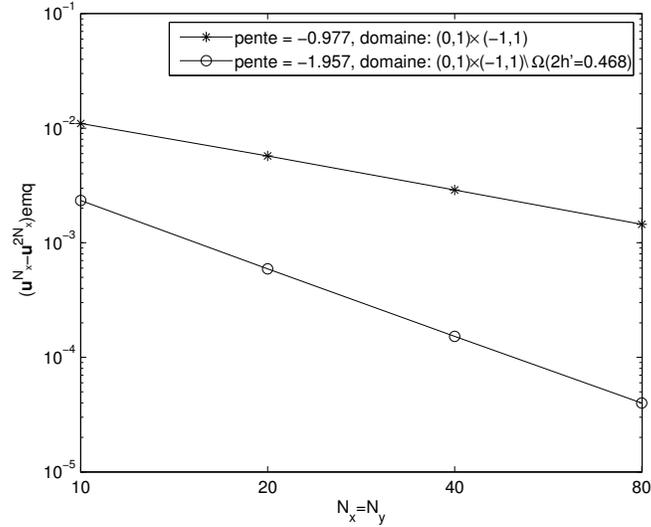


(B)

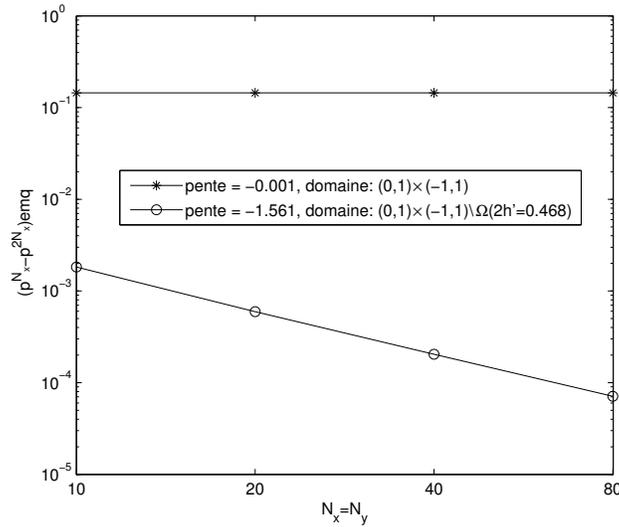


(C)

FIG. 4.2: Graphiques des solutions de (4.4.11)-(4.4.12).  $Re = 1 \times 10^{-2}$ ,  $N_x = N_y = 80$ ,  $t = 1 \times 10^{-3}$ . (a)  $u(x, y, t)$ , (b)  $v(x, y, t)$ , (c)  $p(x, y, t)$ .



(A)



(B)

FIG. 4.3: Graphes log-log des emqs des solutions de (4.4.11)-(4.4.12) calculées sur tout  $(0, 1) \times (-1, 1)$  (courbes supérieures de (A) et (B)) et sur  $(0, 1) \times (-1, 1)$  moins un disque  $\Omega$  de rayon  $2h^* = 0.468$  centré en  $(0.5, 0)$  (courbes inférieures de (A) et (B)). (A) Emq de la vitesse (B) Emq de la pression.

4.4.2, les forces d'exclusion de volume (4.2.6) ont été ajoutées dans les calculs avec les valeurs des paramètres  $R_k^{(j)}$ ,  $\alpha$  et  $A_b$  étant 1, 0.5 et 0.01, respectivement (cf. [60]). L'utilisation de notre algorithme pour générer d'autres résultats pour les suspensions de chaînes de bille-ressort interagissant hydrodynamiquement serait facile mais n'a pas été fait ici. Nous inspirant des travaux de Hernández-Ortiz et al. [60] et d'autres, nous avons donné à  $b$ , le carré de l'étirement maximal adimensionné, la valeur 594 et fixé la largeur adimensionnée de canal à 60 unités adimensionnées. La longueur du domaine de calcul périodique est égale à 10. Tous les calculs ont été effectués sur un maillage SPH fixe de  $60 \times 100$  puisque, au moins dans le cas de l'écoulement des haltères à  $We = 30$  (le seul cas où vérification a été faite), en effet très peu de différence dans la mesure de la migration des haltères après 4000 temps de relaxation d'haltères pouvait être observée lorsque nous avons doublé le nombre de particules SPH dans chaque direction spatiale. Le nombre de Reynolds qui est choisi pour tous les calculs de cette section est  $2 \times 10^{-4}$  et, comme décrit dans l'appendice 4.A, cela nous a conduit à fixer  $Z = 2.6726$  sur la base des données de la traînée du cylindre de Ben Richou et al. [154]. La masse adimensionnée de la bille  $m$  est égale ici à  $1 \times 10^{-8}$ . Les nombres de Weissenberg pour les écoulements traités ont été calculés à partir de l'équation (4.4.2).

**Haltères :**  $N = 2, M = 2500$

Les simulations d'une suspension de 2500 haltères (par cellule périodique) à  $We = 20$  et  $30$  ont été effectuées pendant 4000 pas de temps adimensionné  $1 \times 10^{-3}$ . La durée de l'expérience est donc égale à 4 fois le temps de relaxation d'haltères. Le pas de temps est suffisamment petit pour s'assurer que pour l'un quelconque des nombres de Weissenberg, une tolérance (4.3.25) de  $0.01\sqrt{b}$  est atteinte avec quelques étapes de correction (voir Section 4.3.1) par pas de temps. Pour les deux ensembles de calculs, le centre de masse des haltères a été ini-

tialement choisi le long de  $x = 0$  et uniformément réparti sur  $[-D, D]$  et une répartition initiale des haltères est montrée sur la figure 4.4.

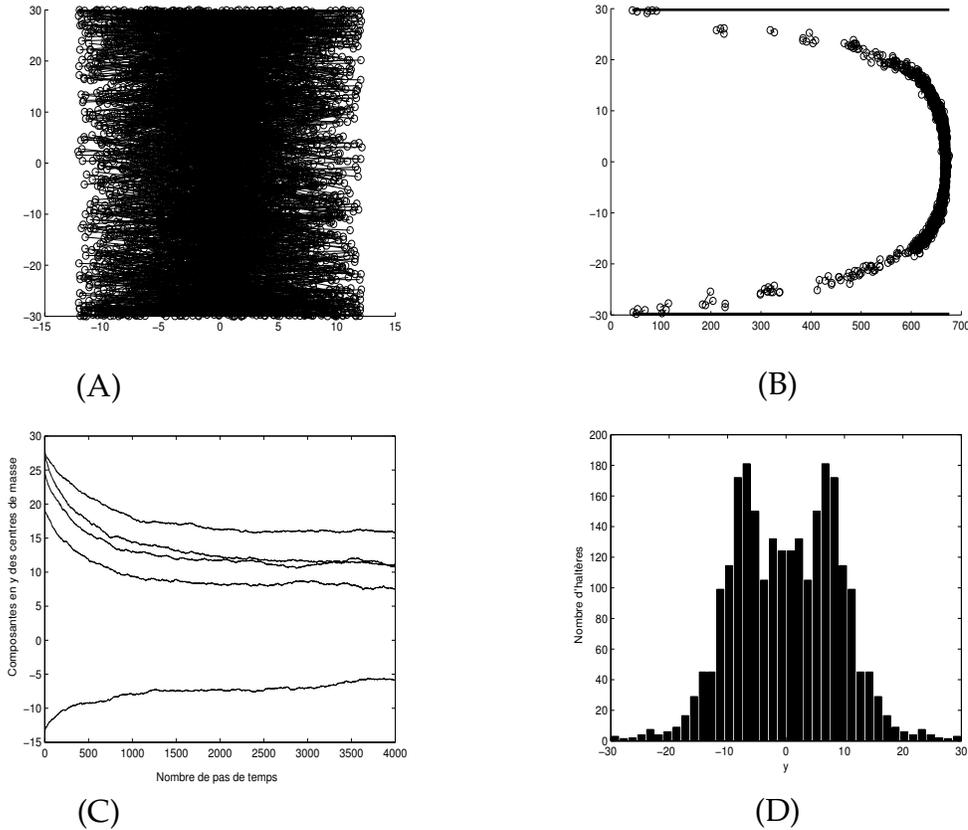


FIG. 4.4: Écoulement de Poiseuille dans le plan de 2500 haltères avec  $We = 20$ . (A) Configurations initiales typiques (distribution uniforme). (B) Haltères après 4000 pas de temps. (C) Trajectoires des centres de masse de 5 haltères arbitrairement choisis pendant 4000 pas de temps. (D) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères après 4000 pas de temps.  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $D = 30$ ,  $L = 10$ ,  $N_x = 60$ ,  $N_y = 100$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ .

Les figures 4.4 (A)-(D) montrent quelques uns de nos résultats pour  $We = 20$ . À la fin de la course, la figure 4.4 (B) montre que les haltères ont été transportés le long du canal et la plupart a migré vers le centre en raison des interactions hydrodynamiques avec les parois. Dans les deux figures 4.4 (A) et 4.4 (B) c'est la coupe d'une période des haltères qui est montrée. La force d'exclusion de vo-

lume (4.2.6) empêche le chevauchement des billes et est partiellement responsable de l'étalement continu dans la distribution quasi-centré à l'état stationnaire. La durée de l'expérience semble suffisante pour avoir permis à tous les haltères de migrer totalement comme nous pouvons le voir sur les trajectoires de cinq haltères choisis arbitrairement sur la figure 4.4 (C). Cependant, il est important de remarquer que le taux de migration dépend *fortement* du choix du paramètre d'interaction  $Z$ . Nous attribuons la relative migration rapide comparée à celle observée et prédite par Ma et Graham [113] au choix de  $Z$  et possiblement aussi à des différences importantes entre nos simulations et les leurs. En particulier, nos simulations sont planaires (entièrement 2D) et les interactions hydrodynamiques ont lieu entre les billes, alors que les calculs de l'écoulement de Poiseuille plan de Ma et Graham montrés sur leur figure 10, par exemple, ont été obtenus avec des solutions d'haltères infiniment dilués, une diffusivité constante et une approximation "réflexion-unique" (single-reflexion) [71] pour prendre en compte les effets de bords. On observe qu'il y a un creux au centre de la repartition finale des centres de masse des haltères présentée à la figure 4.4 (D). Cela est également observé dans les calculs du problème de Poiseuille plan de Hernández-Ortiz et al. [60] (voir leur figure 8, par exemple) et est expliqué par eux [60, 61] et par Ma et Graham [113] comme étant attribuable à la migration hors du centre du canal en raison de la dépendance sur la conformation de la diffusivité dans cet écoulement non uniforme. Cependant, il faut ajouter que les creux peuvent survenir dans les densités de centre de masse (comme dans notre travail et celui cité ci-dessus) et ne sont pas présents pour les densités des monomères. (Voir, par exemple, les figures 5 et 6 de Pablo et al. [140]).

Pour  $We = 30$ , les figures 4.5 (A)-(B) indiquent que l'apparence qualitative des haltères à la fin de la course est semblable à celle avec un nombre de Weissenberg plus petit avec la différence évidente que les haltères sont entraînés plus en avant dans le même temps. Tout comme sur les figures 4.4 (A) et (B), c'est

la coupe d'une période des haltères qui est montrée. Les résultats montrés à la figure 4.5 (C) nous amènent à croire qu'après 4000 pas de temps, les haltères ont presque arrêté leurs migrations et la distribution à l'état stationnaire est montrée à la figure 4.5 (D). Une comparaison entre les figures 4.4 (D) et 4.5 (D) montre que les distributions sont très semblables.

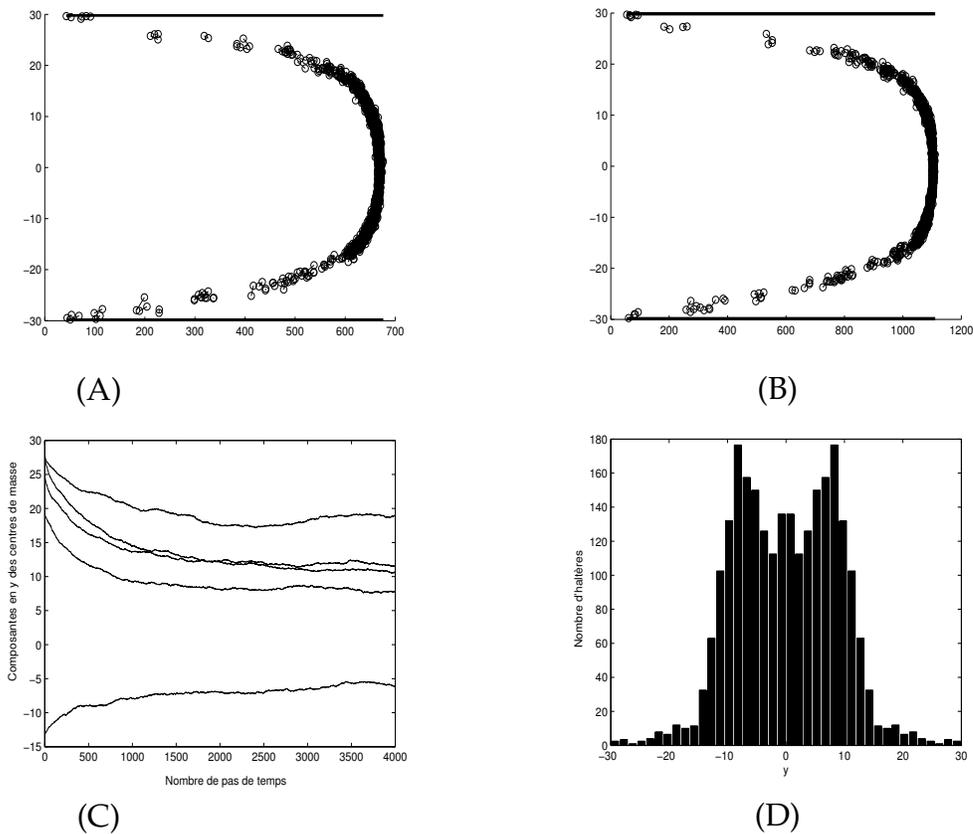


FIG. 4.5: Écoulement de Poiseuille dans le plan de 2500 haltères avec  $We = 20$  et  $We = 30$ . (A)  $We = 20$ , haltères après 4000 pas de temps. (B)  $We = 30$ , haltères après 4000 pas de temps. (C)  $We = 30$ . Trajectoires des centres de masse de 5 haltères arbitrairement choisis pendant 4000 pas de temps. (D)  $We = 30$ . Distribution symétrisée des centres de masse des haltères après 4000 pas de temps.  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $D = 30$ ,  $L = 10$ ,  $N_x = 60$ ,  $N_y = 100$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ .

### Chaîne de bille-ressort

Les calculs du flux avec une seule chaîne constituée de 1000 billes, par cellule de calcul, ont été effectués avec des nombres de Weissenberg de 20 et 30. La configuration initiale a été déterminée en plaçant la première bille dans une position arbitraire à l'intérieur de  $[0, L] \times [-D, D]$ . Par la suite, on donne aux billes successives des positions arbitraires au sein d'une distance maximale de  $\sqrt{b}$  à partir de la position de la bille précédente dans la chaîne. Une configuration typique initiale est montrée à la figure 4.6 (A). La figure 4.6 (B) montre la chaîne à la fin d'un calcul numérique de 40,000 pas de temps de taille adimensionnée  $5 \times 10^{-4}$  pour le cas où  $We = 20$ . La figure 4.6 (C) est la figure correspondante lorsque le nombre de Weissenberg est augmenté à 30. Une comparaison de ces figures montre, comme attendu, que la molécule a été transportée plus loin dans le canal par un gradient de pression plus grand. Dans la figure 4.6 (D), nous représentons les trajectoires du centre de masse de la molécule lorsque  $We = 20$  et 30. Le plus grand gradient de pression pour  $We = 30$  comparé à  $We = 20$  semble entraîner une migration latérale plus rapide. Cependant, il est clair de cette figure que la migration de la chaîne loin des parois dans les deux cas a lieu sur une échelle de temps plus lente qu'avec les haltères (le temps total adimensionné pour ces expériences est 5 fois plus grand que ceux de la Section 4.4.2). Nous ne pouvons toujours pas dire que la migration est achevée. Puisque nous avons la même interaction hydrodynamique complète et des forces d'exclusion de volume aussi bien dans les calculs avec les haltères qu'avec la chaîne, la lente migration peut être attribuée aux contraintes de configuration sur la plus grande molécule : le mouvement d'un maillon de la chaîne est limité d'une manière qui n'est pas expérimentée par un seul haltère. Le plus long temps de relaxation de Rouse  $\lambda_R$  pour une chaîne de bille-ressort de  $N$  ( $\gg 1$ ) billes est [16],

$$\lambda_R \sim \frac{2}{\pi} \lambda_H N^2, \quad (4.4.19)$$

de sorte que dans le cas présent la durée de nos expériences avec les chaînes de bille-ressort est seulement une petite fraction ( $\pi \times 10^{-5}$ ) de  $\lambda_R$ .

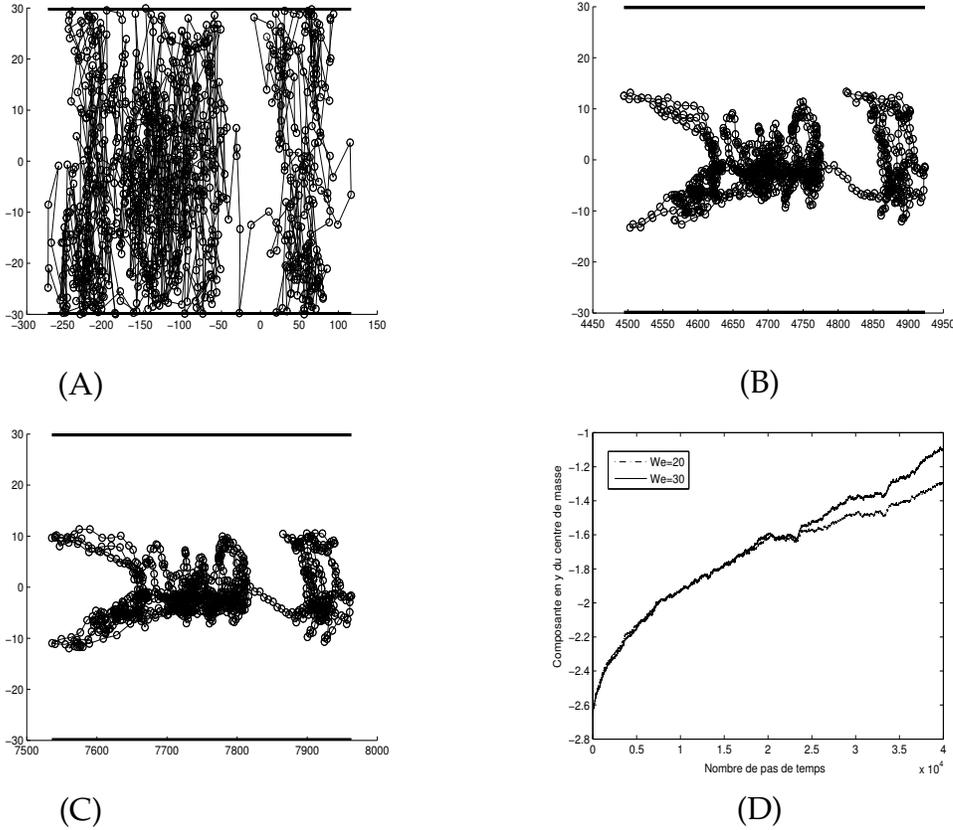


FIG. 4.6: Écoulement de Poiseuille dans le plan avec une chaîne bille-ressort ayant 1000 billes à  $We = 20$  et  $We = 30$ . (A) Configuration initiale typique de la chaîne. (B) Chaîne après 40000 pas de temps,  $We = 20$ . (C) Chaîne après 40000 pas de temps,  $We = 30$ . (D) Trajectoires du centre de masse de la chaîne pendant 40000 pas de temps,  $We = 20$  et  $We = 30$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $D = 30$ ,  $L = 10$ ,  $N_x = 60$ ,  $N_y = 100$ ,  $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ .

**Coût du calcul pour la simulation de la chaîne complète.** Dans l'introduction, nous avons établi comme un des principaux objectifs du présent travail le déve-

loppement d'un algorithme efficace en terme de coût pour les calculs à grande échelle de la dynamique des polymères. L'ajout de billes supplémentaires dans les simulations numériques au moyen du schéma présenté à la Section 4.3 exige simplement que des termes supplémentaires soient ajoutés à la double somme du membre de droite de (4.2.13) qui représente la force exercée par les billes sur le solvant environnant, de sorte qu'en l'absence des effets de volume d'exclusion, le coût de calcul est celui requis pour le solveur SPH des équations de Navier-Stokes (qui dépend, par conséquent, de la taille du maillage SPH utilisé) plus un multiple constant du nombre de billes dans la chaîne. La figure 4.7 (A), par exemple, montre le temps CPU par itération en fonction du nombre de billes  $N$  pour la simulation de la chaîne complète sur un ordinateur de bureau de RAM 6GB et un processeur opérant à 3.2GHz. La force d'exclusion de volume  $G_k^{(j)}$  dans (4.2.11) a été mise égale à zéro  $\forall j, k$  et le maillage SPH était constitué de  $20 \times 160$  points. Les temps ont été calculés comme la moyenne sur dix itérations bien que la première itération dans le code, pendant laquelle, par exemple, nous avons calculé les coefficients des matrices des systèmes (2.2.1)-(2.2.4) pour la vitesse intermédiaire et  $\varphi$ , n'était pas une itération incluse dans ce calcul. Le graphique des données obtenues peut être traversé par une fonction linéaire  $0.0024N + 5.7372$ . Le changement du maillage SPH en augmentant ou en diminuant  $N_x$  et  $N_y$  va simplement déplacer le graphe vers le haut ou vers le bas sans toutefois modifier sa pente.

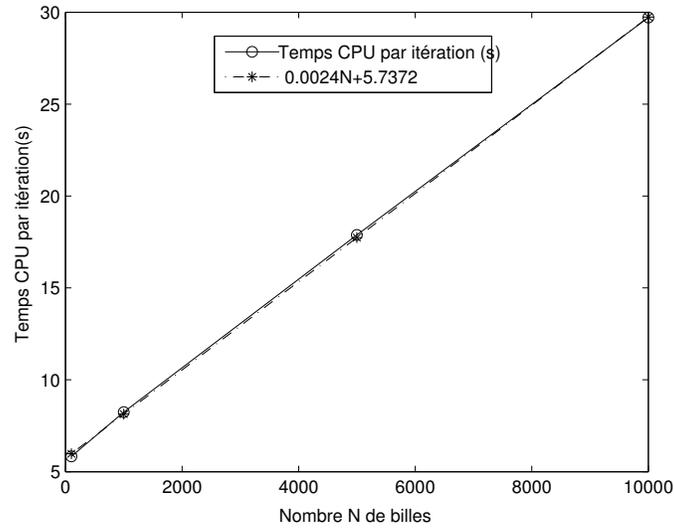
Dans [61] Hernández-Ortiz et al. ont présenté des résultats des calculs de la chaîne de bille-ressort impliquant une séparation des forces de point dues aux billes en des contributions locale et globale. Pour la contribution globale à ces variables, les équations de Stokes ont été résolues en utilisant une méthode itérative préconditionnée avec une "bonne" estimation initiale sur un maillage constitué d'un nombre optimal de  $N^{1/3}$  points. Le résultat pour la mise à l'échelle optimale pour la taille du maillage en termes du nombre de billes était la solution

d'un algorithme d'ordre  $O(N)$ .

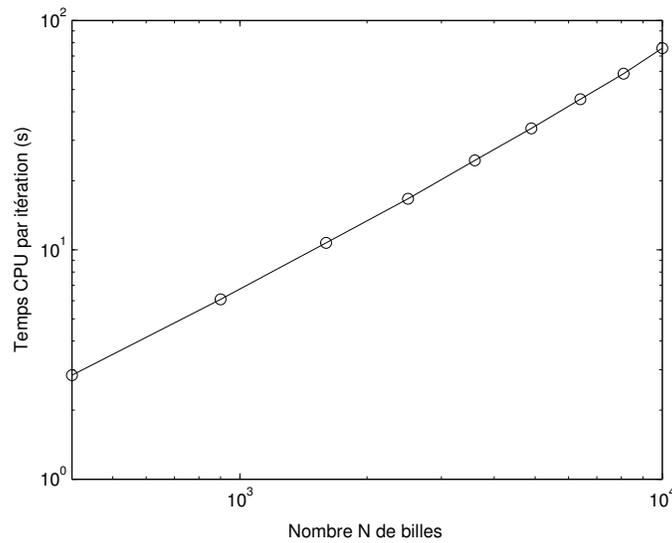
Dans notre méthode, comme nous avons fait mention avant, nous avons utilisé une méthode de gradient conjugué préconditionné pour la solution des systèmes symétriques définis positifs (4.3.26)-(4.3.27). Le coût de l'utilisation d'un gradient conjugué préconditionné dans le cas d'une matrice creuse  $m \times m$  de coefficients peut être aussi petit que  $O(m)$  par itération du gradient conjugué [175]. Dans le cas présent, les matrices des coefficients pour les systèmes linéaires à résoudre, tant pour la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}^*$  (voir l'équation (4.3.26)) ou pour la variable  $\varphi$  (voir l'équation (4.3.27)), sont d'ordre  $N_x N_y$ . Nous utilisons un préconditionneur efficace basé sur la décomposition incomplète de Cholesky de la taille des matrices. Ainsi, le choix de  $N_x = N_y$  proportionnel à  $\sqrt{N}$  devrait veiller à ce que la solution de l'algorithme pour la simulation de la dynamique de la chaîne soit  $O(N)$ . Dans la figure 4.7 (B), un graphe log-log de la moyenne du temps CPU en fonction du nombre des billes est présenté. Le tracé d'une courbe par la méthode des moindres carrés à ce graphe donne une pente de 1.019 et confirme que notre algorithme est  $O(N)$  dans ce cas. Le calcul des forces d'exclusion de volume (4.2.6) est une opération  $O(N^2)$ . Cependant, en supposant que les voisins les plus proches d'une bille ne changent pas rapidement avec le temps, notre algorithme peut être maintenu approximativement à  $O(N)$  même avec l'introduction de ces forces en calculant  $G_k^{(j)}$  dans (4.2.6) avec seulement des mises à jour occasionnelles de la liste des voisins d'une bille.

## 4.5 Conclusion

L'équivalence des équations de CLEPS avec celles de l'approche plus traditionnelle de Kirkwood-Riseman (DEP) dans la limite où la masse de la bille est nulle est portée à l'attention du lecteur dans [139], au moins dans le cas d'un domaine non-borné. Une preuve de l'équivalence dans des écoulements tridimen-



(A)



(B)

FIG. 4.7: Temps CPU moyen par itération en fonction du nombre de billes sur un ordinateur de bureau de 3.2GHz pour une simulation complète de chaînes de bille-ressort. (A) Maillage SPH fixe.  $N_x = 20$ ,  $N_y = 160$ . (B) graphe log-log avec  $N_x = N_y = \sqrt{N}$ .

sionnels plus générale peut être trouvée dans [110]. Cependant, en dépit de cette équivalence, il y a des avantages à résoudre les CLEPS au moyen de la méthode numérique présentée à la Section 4.3 par rapport aux approches traditionnelles. Celles-ci ont montré qu'elles contournaient complètement les calculs potentiellement coûteux des fonctions de Green dans des géométries confinées et, plus important encore, la décomposition en la forme  $BB^T$  du tenseur de diffusion résultant. L'utilisation des points de quadratures SPH fixes et équidistants sur un maillage cartésien et une méthode de projection de second ordre a conduit à une convergence de second ordre de la vitesse loin des billes.

Il y existe quelques similitudes entre la méthode décrite dans ce chapitre et d'autres dans la littérature.

Tout d'abord, la ressemblance de notre modèle numérique avec le modèle des particules fluides de Español [41] a déjà été mentionnée dans l'introduction.

Deuxièmement, à certains égards, notre méthode est similaire à la méthode de la frontière immergée stochastique ("stochastic immersed boundary method") de Atzberger et al. [7, 8, 84], particulièrement à l'égard de la manière dont les billes transmettent leurs forces (de réaction) sur le fluide environnant et dans le fait que nous incluons les termes de force thermiquement fluctuante dans les équations de Stokes non-stationnaires, identiques à ceux des équations de Navier-Stokes de Landau-Lifshitz. Cependant, une différence essentielle entre la méthode de la frontière immergée stochastique et la nôtre est que, dans la première, le non glissement entre les billes et le fluide signifie que les vecteurs positions de la bille sont mis à jour en utilisant uniquement la vitesse locale du fluide, alors que dans notre méthode le glissement est autorisé entre les billes et le fluide (donnant lieu à la trainée) et une équation stochastique doit être résolue pour les vecteurs positions de la bille.

Troisièmement, notre méthode ressemble à la méthode de la géométrie générale Ewald d'ordre  $O(N)$  de Hernández-Ortiz et al. [61], décrite avec certains

détails en introduction. Il y a des différences évidentes qui incluent, par exemple, les méthodes numériques utilisées dans [61] et dans cette thèse, mais une autre différence frappante entre leur approche et la notre, sur laquelle nous souhaitons insister ici, réside dans la formulation des équations régissant à résoudre. Dans la méthode CLEPS un problème de Stokes non-stationnaire (4.2.13)-(4.2.14) ayant le terme de force fluctuante  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)$  est résolu pour la vitesse totale  $\mathbf{u}$  et la pression  $p$ . Ici,  $\mathbf{u}$  est la somme de la vitesse imposée  $\mathbf{u}_0$ , la vitesse  $\tilde{\mathbf{u}}$  due aux forces exercées par les billes sur le fluide et une vitesse fluctuante  $\mathbf{u}_f$  due à l'introduction de  $\mathbf{f}$  dans la force résultante. Le terme de diffusion dans l'équation stochastique du mouvement pour les billes vient alors de la somme de termes de diffusion usuels en l'absence de l'interaction hydrodynamique (cas de libre-trainée) et  $\mathbf{u}_f$ . Cependant, Hernández-Ortiz et al. [61] résolvent les équations de Stokes sans force fluctuante. L'absence d'une force fluctuante signifie que toute la dérivée matérielle est annulée des équations de Navier-Stokes, et pas seulement la partie convective de cette dérivée. La vitesse partielle  $\tilde{\mathbf{u}}$  qui résulte de la résolution du problème de Stokes stationnaire alimente ensuite l'équation stochastique pour la bille. Cependant, il existe toujours un terme de diffusion proportionnel à  $BdW$  qui doit être évalué, bien que cela puisse se faire sans construction de la matrice, en utilisant la méthode Chebyshev d'approximation polynomiale de Fixman [49]. Alors, un avantage de notre approche est que l'évaluation du terme de diffusion dans l'équation de Langevin pour la bille est facile, étant simplement celui du cas de la libre-trainée. Étant donné que, typiquement, les nombres de Reynolds sont faibles ( $\ll 1$ ), cela nous oblige à prendre de petits pas de temps dans la discrétisation des équations de Stokes (et donc, aussi, dans l'équation de Langevin pour la bille). Cependant, c'est un inconvénient de notre méthode que subissent d'autres méthodes comme celle de lattice-Boltzmann.

Quatrièmement, l'adoption des idées courantes dans la littérature relative à l'utilisation des méthodes de Lattice-Boltzmann pour la simulation des solutions

de polymères nous permet de conserver toute la vitesse du solvant évaluée à la position de la bille dans l'équation du mouvement de la bille (4.2.1). L'obtention dans l'appendice 4.A de la relation entre un coefficient de trainée nue (ou entrée) et le coefficient de trainée effectif est semblable aux développements effectués dans, par exemple, [2, 35, 131, 180].

Nous avons vu que le coût de notre méthode est  $O(N)$  pour les calculs de la dynamique des chaînes de bille-ressort ayant  $N$  billes, pourvu que les forces d'exclusion de volume ne soient pas incluses (ou, uniquement mis à jour de manière occasionnelle lorsque cela est raisonnable) et le nombre des points de maillage SPH est ajusté de manière appropriée comme une fonction de  $N$ . Des commentaires semblables peuvent être faits à l'endroit de la méthode de Hernández-Ortiz et al. [61].

Les généralisations tridimensionnelles de notre méthode sont faciles et seront abordées dans le chapitre suivant.

## 4.A Dérivation de l'équation pour une bille (4.2.1).

Dans cette annexe, nous cherchons à alléger la notation en numérotant les billes présentes dans une suspension de chaînes de bille-ressort de 1 à  $N$ . Cela dit, le produit  $MN$  dans la Section 4.2 est remplacé avec  $N$ . De plus, nous laissons tomber les exposants "(j)" sur toutes les variables de sorte que, par exemple,  $\mathbf{F}_k^{(j)}$  avec  $k$  allant de 1 à  $N$  et  $j$  allant de 1 à  $M$  devient  $\mathbf{F}_k$  avec  $k = 1, 2, \dots, N$ .

Dans la description mathématique des écoulements tridimensionnels des solutions de macromolécules flexibles, la pratique courante est de modéliser les polymères avec des chaînes de bille-ressort. L'équation du mouvement pour la  $k$ -ième bille (masse ponctuelle) dans une chaîne peut alors être écrite comme

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} = \zeta \left( \mathbf{u}'(\mathbf{r}_k, t) - \frac{d\mathbf{r}_k}{dt} \right) + \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k + \sqrt{2k_B T \zeta} \frac{d\mathbf{W}_k}{dt}, \quad (4.A.1)$$

ou, après réarrangement des termes, comme

$$\frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = \mathbf{u}'(\mathbf{r}_k, t) + \frac{1}{\zeta} \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2\mathbf{r}_k}{dt^2} \right) + \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta}} \frac{d\mathbf{W}_k}{dt}. \quad (4.A.2)$$

Dans (4.A.1)-(4.A.2)  $\mathbf{u}'(\mathbf{r}_k, t)$  est la vitesse du solvant évaluée en  $\mathbf{r}_k$  au temps  $t$  moins l'auto-contribution singulière de la  $k$ -ième bille elle-même. Cette auto-contribution singulière, au cas où le milieu est infini, est l'évaluation en  $\mathbf{x} = \mathbf{r}_k$  de

$$\Omega^{\text{OB}}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k) \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2\mathbf{r}_k}{dt^2} \right), \quad (4.A.3)$$

où  $\Omega^{\text{OB}}$  représente le tenseur de Oseen-Burgers. Cette auto-contribution singulière de la vitesse de la particule est supprimée parce que la bille ne doit pas "ressentir" la vitesse singulière qu'elle génère en sa position à elle [55, 148] et, bien sûr, si l'on devait retenir le terme singulier, cela signifierait que la vitesse de la bille serait infinie. Les termes soulignés dans le membre de droite de (4.A.2) peuvent être vus comme l'ajout d'une forme régularisée qui compense en partie le terme singulier qui a été enlevé. Cela peut être calculé, par exemple, en faisant la moyenne de la vitesse d'auto-contribution singulière (4.A.3) sur la surface d'une sphère que nous notons  $S_a$  de rayon  $a$  et de centre  $\mathbf{r}_k$ . C'est-à-dire,

$$\frac{1}{\zeta} \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2\mathbf{r}_k}{dt^2} \right) = \frac{1}{4\pi a^2} \iint_{S_a} \Omega^{\text{OB}}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k) dS \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2\mathbf{r}_k}{dt^2} \right), \quad (4.A.4)$$

conduisant au coefficient de Stokes habituel  $\zeta = 6\pi\eta_N a$  (pour un étendu infini).

Dans le présent travail, il n'y a pas d'auto-contribution singulière de la vitesse du solvant à la position de la bille. Ceci c'est, parce que, comme nous l'avons expliqué à la Section 4.3.2, la fonction delta dans le membre de droite de (4.2.8) est remplacée par la fonction noyau  $W$  ayant un support compact de rayon  $2h^*$  et est définie en (2.3.9). Cependant, à mesure que  $h^* \rightarrow 0$ ,  $W$  tend vers une fonction delta, la vitesse du solvant en la position d'une bille peut devenir très (et

non physiquement) grande. Nous enlevons donc, de la vitesse du solvant en  $\mathbf{r}_k$ , cette contribution potentiellement grande et nous la remplaçons avec une quantité moyennée. La  $(i, j)$ -ième composante de la fonction de Green sans borne en dimension deux  $\Omega^{2D}$  est définie (voir, par exemple, la Section 2.6 de [146]) par

$$\Omega_{ij}^{2D}(\mathbf{z}) = \frac{1}{4\pi\eta_N} \left( -\delta_{ij} \log z + \frac{z_i z_j}{z^2} \right), \quad (4.A.5)$$

où  $\mathbf{z}$  est un vecteur arbitraire bidimensionnel,  $z$  représente sa norme 2,  $z_i$  et  $z_j$  les  $i$ -ième et  $j$ -ième composantes de  $\mathbf{z}$ . L'évaluation en un point ayant pour vecteur position  $\mathbf{y}$  de la contribution sans borne  $\mathbf{u}_s(\cdot, \mathbf{r}_k, t)$  à la vitesse du solvant par la  $k$ -ième bille est donc calculée de

$$\mathbf{u}_s(\mathbf{y}, \mathbf{r}_k, t) = \left( \iint_{D_{2h^*}} \Omega^{2D}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathcal{W}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k, h^*) d\mathbf{x} \right) \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} \right), \quad (4.A.6)$$

où  $D_{2h^*}$  représente le disque de rayon  $2h^*$  centré en  $\mathbf{r}_k$ . En faisant la soustraction de l'auto-contribution  $\mathbf{u}_s(\mathbf{r}_k, t)$  de la vitesse du solvant  $\mathbf{u}(\mathbf{r}_k, t)$  et en ajoutant cela à la moyenne de  $\Omega^{2D}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k)$  calculée sur le cercle  $\partial D_a$  rayon  $a$  et centré en  $\mathbf{r}_k$ , nous obtenons ainsi l'équation pour la bille

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = & \mathbf{u}(\mathbf{r}_k, t) - \left( \iint_{D_{2h^*}} \Omega^{2D}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k) \mathcal{W}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k, h^*) d\mathbf{x} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2\pi a} \int_{\partial D_a} \Omega^{2D}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k) ds \right) \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} \right) + \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta}} \frac{d\mathbf{W}_k}{dt}, \end{aligned} \quad (4.A.7)$$

pour un choix approprié de  $\zeta$ .

Dans (4.A.7) la somme des tenseurs multipliant

$$\left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} \right),$$

est un multiple constant du tenseur identité  $\delta$ . Nous pouvons voir cela par un

calcul explicite du premier tenseur :

$$\iint_{D_{2h^*}} \Omega^{2D}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k) W(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k, h^*) d\mathbf{x} = \frac{1}{4\pi\eta_N} \left( -\log 2h^* + \frac{107}{60} - \frac{1}{7} \log 2 \right) \delta, \quad (4.A.8)$$

et du second tenseur :

$$\frac{1}{2\pi a} \int_{\partial D_a} \Omega^{2D}(\mathbf{x} - \mathbf{r}_k) ds = \frac{1}{2\pi} \int_{\theta=0}^{2\pi} \Omega^{2D}(a \cos \theta, a \sin \theta) d\theta = \frac{1}{4\pi\eta_N} \left( -\log a + \frac{1}{2} \right) \delta, \quad (4.A.9)$$

de sorte que  $1/\zeta$  peut être défini comme le coefficient de  $\delta$  quand on soustrait le membre de droite de (4.A.8) du membre de droite de (4.A.9).

En conclusion, nous pouvons écrire le membre de droite de (4.A.7) de la forme

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_k, t) + \frac{1}{\zeta} \left( \mathbf{F}_k + \mathbf{G}_k - m \frac{d^2 \mathbf{r}_k}{dt^2} \right) + \sqrt{\frac{2k_B T}{\zeta}} \frac{d\mathbf{W}_k}{dt}. \quad (4.A.10)$$

$\zeta$  est appelé le coefficient “nu” ou d’entrée de friction et est positif pourvu que  $h^*$  soit suffisamment grand comparé à  $a$ .

#### 4.A.1 Vitesse d’un petit cylindre se déplaçant lentement dans un domaine semi-infini à deux dimensions

Pour vérifier que c’est une procédure correcte, nous considérons le mouvement d’une particule isolée, qui a un vecteur position  $\mathbf{r} = (x, y)$  à un certain moment  $t$ , se déplaçant lentement (et sans accélération) dans une étendue bidimensionnelle d’un fluide occupant la moitié supérieure du plan  $\{(x, y) : y > 0\}$  avec la présence d’une paroi solide en  $y = 0$ . Une force  $\mathbf{F}$  agit sur la particule. Fixons,  $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}$ ,  $\mathbf{F}_k = \mathbf{F}$  et  $\mathbf{G}_k = \mathbf{W}_k = \mathbf{0}$  dans l’équation (4.A.10). Dans la limite où  $h^* \rightarrow 0$ , l’équation (4.A.7) prédit la vitesse d’une particule

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{u}_W(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{2\pi} \int_{\theta=0}^{2\pi} \Omega^{2D}(a \cos \theta, a \sin \theta) d\theta \mathbf{F},$$

$$= \mathbf{u}_W(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{4\pi\eta_N} \left( -\log a + \frac{1}{2} \right) \mathbf{F}, \quad (4.A.11)$$

où  $\mathbf{u}_W$  est la vitesse de correction de la paroi due à la présence de la paroi en  $y = 0$ . En adoptant partiellement la notation de Pozrikidis [146] cette vitesse est donnée par

$$\mathbf{u}_W(\mathbf{r}) = (-\Omega^{2D}(\hat{\mathbf{X}}) + 2y^2\mathbf{G}^D(\hat{\mathbf{X}}) - 2y\mathbf{G}^{SD}(\hat{\mathbf{X}}))\mathbf{F}, \quad (4.A.12)$$

où  $\hat{\mathbf{X}} = (0, 2y)$ . Le tenseur  $\mathbf{G}^D$  contient des dipôles potentiels et est donné par

$$\mathbf{G}_{ij}^D(\mathbf{x}) = \pm \frac{1}{4\pi\eta_N} \left( \frac{\delta_{ij}}{\|\mathbf{x}\|_2^2} - 2 \frac{x_i x_j}{\|\mathbf{x}\|_2^4} \right), \quad (4.A.13)$$

où  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$  est un vecteur générique. Le tenseur  $\mathbf{G}^{SD}$  de (4.A.11) contient des doublets "Stokeslet" et peut être écrit

$$\mathbf{G}_{ij}^{SD}(\mathbf{x}) = x_2 \mathbf{G}_{ij}^D(\mathbf{x}) \pm \frac{1}{4\pi\eta_N} \left( \frac{\delta_{j2} x_i - \delta_{i2} x_j}{\|\mathbf{x}\|_2^2} \right), \quad (4.A.14)$$

où le choix du signe dans les définitions (4.A.13)-(4.A.14) est positif pour  $j = 1$  et négatif pour  $j = 2$ .

### Mouvement parallèle à une paroi plane.

Dans le cas d'une force  $\mathbf{F} = (F_1, 0)$  (parallèle à la paroi), les équations (4.A.11) et (4.A.12) conduisent à une vitesse de la particule

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{4\pi\eta_N} \log \left( \frac{2y}{a} \right) (F_1, 0), \quad (4.A.15)$$

qui est la même que le résultat obtenu par Takaisi [167] (en se servant des équations de Oseen) d'un cylindre de rayon  $a$  se déplaçant parallèlement à une paroi et se trouvant à une distance de la paroi telle que  $y \geq a$ . Ce même résultat a été

obtenu 20 ans plus tard par Katz et al. [79] en se servant de la théorie des corps minces à faible nombre de Reynolds pour un cylindre de longueur  $\ell$  et le cas où  $a \ll y \ll \ell$ .

### Mouvement perpendiculaire à une paroi plane.

Lorsque  $\mathbf{F} = (0, F_2)$  (et par conséquent est dans une direction normale à la paroi), les équations (4.A.11) et (4.A.12) nous permettent de calculer la vitesse stationnaire dans ce cas comme

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{4\pi\eta_N} \log\left(\frac{2y}{a} - 1\right) (0, F_2), \quad (4.A.16)$$

qui est identique au résultat de Katz et al. [79], encore dans la limite d'un cylindre de longueur  $\ell \gg y \gg a$ .

### 4.A.2 Relation entre les coefficients de friction d'entrée et effectif (temps-long)

S'inspirant des idées de la méthode de lattice-Boltzmann dans la littérature (voir, par exemple [2, 35, 131, 180]), nous considérons le problème bidimensionnel d'une particule ayant un vecteur position  $\mathbf{r}(t) = (x(t), 0)$  qui se déplace avec une vitesse terminale et à mi-chemin entre les parois du canal  $y = \pm D$  sous l'influence d'une force constante  $\mathbf{F} = (F, 0)$ , en l'absence de toutes forces fluctuantes. Dans ce contexte, nous définissons le coefficient de friction effectif ou de temps long que nous notons  $\zeta_{\text{eff}}$  de sorte que les équations de la bille avant adimensionnement (cf. équation (4.2.1)) soient

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\zeta} \mathbf{F}, \quad (4.A.17)$$

$$= \frac{1}{\zeta_{\text{eff}}} \mathbf{F}, \quad (4.A.18)$$

où, comme avant,  $\zeta$  est le coefficient de friction “nu” ou d’entrée. Cela signifie, qu’en utilisant les changements de variables (4.2.3) et (4.2.10) et immédiatement par la suite laissant tomber les astérisques des grandeurs adimensionnées, nous obtenons les équations adimensionnées suivantes de la bille

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{4}\mathbf{F}, \quad (4.A.19)$$

$$= \frac{Z}{4Z_{\text{eff}}}\mathbf{F}, \quad (4.A.20)$$

dans lesquelles nous avons introduit le coefficient de friction effectif adimensionné  $Z_{\text{eff}} := \zeta_{\text{eff}}/\eta_N$  et, comme nous l’avons défini à la Section 4.2.2,  $Z := \zeta/\eta_N$  est le coefficient de friction nu adimensionné. Pour cette expérience, la vitesse du solvant  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  déterminée numériquement peut être écrite comme

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) &= \frac{Z}{4} \left( \iint_{D_{2h^*}} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \mathcal{W}(\mathbf{x} - \mathbf{r}, h^*) d\mathbf{x} \right) \mathbf{F}, \\ &= \frac{Z}{4} \Omega_{11}^{\text{SPH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \mathbf{F}, \end{aligned} \quad (4.A.21)$$

(parce que  $\mathbf{F} = (F, 0)$ ) où  $\Omega_{11}^{\text{SPH}}$  est la (1, 1)-ième composante de la fonction de Green régularisée

$$\Omega^{\text{SPH}} := \iint_{D_{2h^*}} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \mathcal{W}(\mathbf{x} - \mathbf{r}, h^*) d\mathbf{x},$$

et  $\boldsymbol{\Omega}$  est utilisé ici pour représenter la fonction de Green pour le problème de Stokes avec une seule force ponctuelle dans un domaine périodique  $[0, L) \times [-D, D]$ .

De (4.A.19)-(4.A.20) et (4.A.21), nous obtenons (cf. équations (20) de [2], (17) de [180] ou (291) de [35])

$$\frac{1}{Z_{\text{eff}}} = \frac{1}{Z} + \Omega_{11}^{\text{SPH}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}), \quad (4.A.22)$$

de telle sorte que, puisque  $\Omega_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) > 0$ , les interactions hydrodynamiques ont tendance à accroître la mobilité d'une particule ( $Z_{\text{eff}} < Z$ ). Nous référant aux résultats du coefficient de trainée, soit de Faxén [45] ou de Takaisi [167] pour le problème d'un petit cylindre qui se déplace uniformément et lentement le long de l'axe d'un canal, nous pouvons écrire

$$Z_{\text{eff}} \approx \frac{4\pi}{(-\ln(k_{\text{eff}}) - 0.9156)}, \quad (4.A.23)$$

où  $k_{\text{eff}}$  est le rapport entre le diamètre du cylindre et la distance de séparation des parois du canal. Ainsi, en calculant la vitesse stationnaire  $\mathbf{u}$  du solvant en une position  $\mathbf{r} = (x(t), 0)$  de la particule à mesure que  $L \rightarrow \infty$  pour une force donnée  $\mathbf{F} = (F, 0)$  et le coefficient nu  $Z$ , les équations (4.A.21), (4.A.22) et (4.A.23) nous permettent non seulement de calculer (en nous servant d'un certain choix de paramètres numériques) le coefficient de trainée effectif pour la géométrie, mais aussi de déterminer la taille du cylindre qui aura la même vitesse terminale en laboratoire. Comme l'ont souligné Ahlrichs and Dünweg [2],  $Z$  détermine simplement le degré de couplage entre les équations du fluide et celles de la particule et n'a pas de signification physique réelle. Nous sommes donc libres de choisir  $Z$  comme nous le voulons, et puisque de (4.A.22) de petites valeurs de  $Z$  doivent correspondre à de petites valeurs de  $Z_{\text{eff}}$ , les valeurs de  $Z$  pour les résultats du tenseur de mobilité présentés dans la Section 4.4.1 et les résultats pour  $We > 0$  présentés dans la Section 4.4.2 ont été calculées à partir des plus petites valeurs que nous pouvions calculer par extrapolation et interpolation à partir des données du calcul récent du coefficient de trainée (effectif) de Ben Richou et al. [154]. Dans la Section 4.4.1, le nombre de Reynolds fût choisi égal à  $1 \times 10^{-2}$ , permettant d'avoir  $Z = 2.7024$  alors que dans la Section 4.4.2 le nombre de Reynolds fût choisi égal à  $2 \times 10^{-4}$ , conduisant à  $Z = 2.6726$ .

Dans le tableau 4.1, nous présentons les résultats de nos calculs SPH pour

L	$\mathbf{u}(x(t), 0) = (u_L(x(t), 0), 0)$	$Z_{\text{eff}} = \frac{ZF}{F+4u}$
2	$(1.1822, -2.7 \times 10^{-14})$	1.2384
4	$(9.2647 \times 10^{-1}, -3.2 \times 10^{-14})$	1.4028
8	$(7.9872 \times 10^{-1} - 1.7 \times 10^{-14})$	1.5024
$\infty$	$(6.7115 \times 10^{-1}, 0)$	1.6171

TAB. 4.1: Vitesse stationnaire au point  $(x(t), 0)$  dans un canal calculée à partir de (4.2.13)-(4.2.14).  $D = 1$ ,  $L = 2, 4, 8$ .  $u_\infty$  est calculé à partir de l'équation (4.A.24).  $Z_{\text{eff}}$  est calculé en se servant de (4.A.21)-(4.A.22).

la vitesse convergée du solvant à la position de la particule dans des canaux de largeur 2 et de longueur 2, 4 et 8 lorsque  $F = 4$ . Dans tous les cas, la taille du maillage est maintenue constante ( $\Delta x = \Delta y = 0.02$ ),  $h^*$  fixe et égale à 0.0312, et le pas de temps choisi est  $2 \times 10^{-4}$ . La convergence est considérée comme atteinte aussitôt que la norme 2 de la différence des valeurs de la vitesse calculée à des pas de temps successifs est plus petite que  $1 \times 10^{-12}$ . De l'inspection des données numériques dans la première colonne du tableau 4.1, nous conjecturons que la relation entre la composante en  $x$  (disons,  $u_L$ ) de la vitesse convergée à la position de la bille pour une valeur donnée de  $L$  et la valeur correspondante lorsque  $L \rightarrow \infty$  est de la forme

$$u_L = u_\infty + \beta/L^\gamma, \quad (4.A.24)$$

pour des constantes  $\beta$  et  $\gamma$  à déterminer. De la relation (4.A.24) et des données numériques, nous obtenons

$$\gamma = \log \left( \frac{u_4 - u_2}{u_8 - u_4} \right) / \log(2) \approx 1.001, \quad (4.A.25)$$

et cela conduit à  $\beta \approx 1.0227$ . Sur la figure 4.8, nous présentons les données de  $u_L$  lorsque  $L = 2, 4$  et  $8$  de même que la courbe qui passe par ces données (4.A.24). Laisant  $L \rightarrow \infty$  dans (4.A.24), nous calculons la vitesse terminale adi-

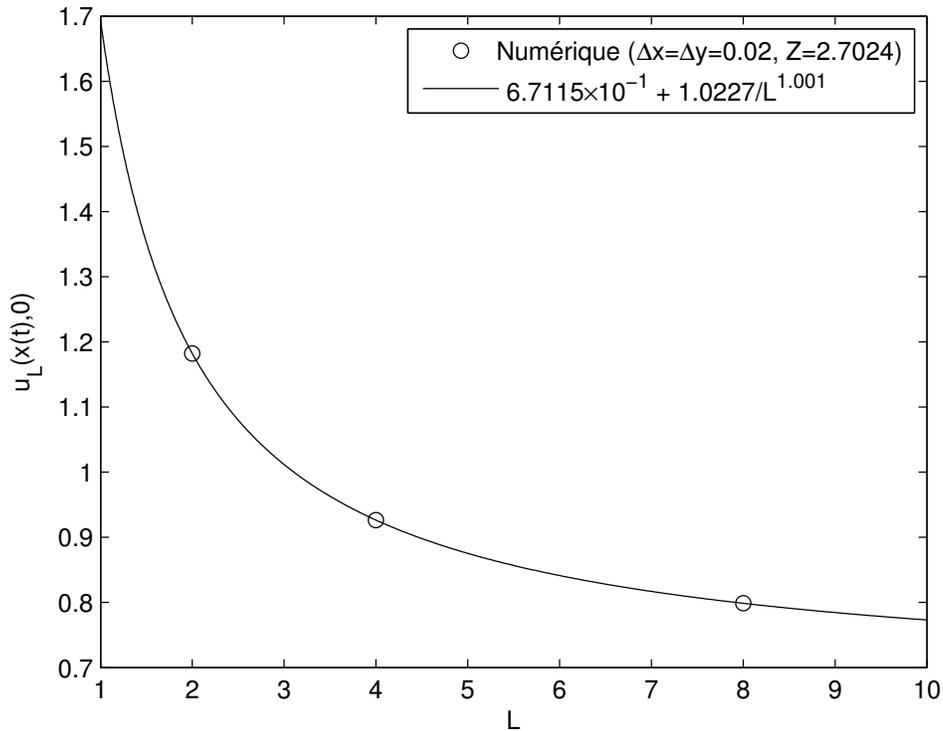


FIG. 4.8:  $\circ$  : vitesse stationnaire  $u_L(x(t), 0)$  calculée de (4.2.13)-(4.2.14) dans un canal. La courbe continue est le graphe de  $u_L$  à partir de (4.A.24).  $D = 1$ ,  $L = 2, 4, 8$ .

mensionnée, d'une particule qui se déplace lentement le long de la ligne médiane d'un canal infiniment long de demi-largeur égal à 1, que nous trouvons égale à  $6.7115 \times 10^{-1}$  de telle sorte que de (4.A.22) nous obtenons  $Z_{\text{eff}} = 1.6171$ . Le résultat de Takaisi (4.A.23) nous permet d'égaliser notre module de vitesse terminale calculé  $u_{\infty} = 6.7115 \times 10^{-1}$  avec celui d'un cylindre de rayon adimensionné  $a = 1.6884 \times 10^{-4}$ . Dans le cas des calculs avec  $Z = 2.6726$ , la linéarité de l'équation (4.A.21) doit conduire à  $u_{\infty} = 2.6726 \times 6.7115 \times 10^{-1} / 2.7024 = 6.6375 \times 10^{-1}$  et ainsi à un coefficient de trainée effectif  $Z_{\text{eff}} = 1.6064$  et à un rayon de cylindre effectif adimensionné égal à  $1.603 \times 10^{-4}$  dans la même géométrie. Cependant, notons que pour un canal d'une largeur donnée et pour une valeur fixe de  $h^*$ ,

le changement d'un des paramètres numériques  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  ou  $h$  conduirait à des valeurs différentes du coefficient de trainée effectif calculé et que, pour les résultats convergents nous aurons besoin de prendre  $\Delta x \rightarrow 0$ ,  $\Delta y \rightarrow 0$ ,  $h \rightarrow 0$  et  $(\Delta x + \Delta y)/h \rightarrow 0$ .

## 4.B EDS discrète pour une seule particule en équilibre

Dans cette annexe, nous montrons, d'après Berk Usta et al. [180] et Ladd et al. [87], que le coefficient de diffusion et l'énergie cinétique des particules ayant des forces libres en équilibre sont à la fois exactement prédits par le schéma prédicteur-correcteur (4.3.2) et (4.3.8). Pour ce faire, nous nous bornerons à l'EDS unidimensionnelle adimensionnée (cf. (4.2.4))

$$m \frac{dv}{dt} = -v + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{dW}{dt}, \quad (4.B.1)$$

où  $m$  est la masse de la particule,  $v$  sa vitesse et  $W$  est un processus de Wiener. L'élimination des positions  $r(t)$  et  $r(t + \Delta t)$  de la particule entre (4.3.2) et (4.3.8) conduit, dans le cas de (4.B.1), à l'équation discrète

$$v(t + \Delta t) - v(t) = -\frac{\Delta t}{2m}(v(t) + v(t + \Delta t)) + \frac{1}{\sqrt{2}m} \Delta W(t). \quad (4.B.2)$$

Ainsi, introduisant  $\omega := \Delta t/m$ , l'équation (4.B.2) signifie que

$$v(t + \Delta t) = \left( \frac{1 - \frac{\omega}{2}}{1 + \frac{\omega}{2}} \right) v(t) + \frac{1}{\sqrt{2}m (1 + \frac{\omega}{2})} \Delta W(t), \quad (4.B.3)$$

et, en général, pour tout  $n \in \mathbb{Z}^+$ , que

$$v(t + n\Delta t) = \left( \frac{1 - \frac{\omega}{2}}{1 + \frac{\omega}{2}} \right)^n v(t) + \frac{1}{\sqrt{2}m \left(1 + \frac{\omega}{2}\right)} \sum_{k=0}^{n-1} \Delta W(t + k\Delta t) \left( \frac{1 - \frac{\omega}{2}}{1 + \frac{\omega}{2}} \right)^{n-1-k}. \quad (4.B.4)$$

En reconnaissant que

$$\left| \frac{1 - \frac{\omega}{2}}{1 + \frac{\omega}{2}} \right| < 1 \quad \forall \omega \in \mathbb{R}^+, \quad (4.B.5)$$

et en utilisant le fait que les incréments  $\Delta W$  sont Gaussiennes avec moyenne nulle et variance

$$\langle \Delta W(t') \Delta W(t'') \rangle = \Delta t \delta_{t't''},$$

nous pouvons facilement montrer de (4.B.4) que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} m \langle v(t + n\Delta t)^2 \rangle = \frac{1}{8}. \quad (4.B.6)$$

La conversion à nouveau aux variables dimensionnelles permet de conclure que l'énergie cinétique vaut  $\frac{1}{2} k_B T$ , ce qui est en accord avec le principe de l'équipartition de l'énergie.

Le coefficient de diffusion adimensionné  $D$  prédit par notre schéma peut être obtenu de la relation de Green-Kubo (voir (A6) de [180], par exemple)

$$D = \frac{\Delta t}{2} \langle v(0)v(0) \rangle + \Delta t \sum_{n=1}^{\infty} \langle v(n\Delta t)v(0) \rangle. \quad (4.B.7)$$

Se servir de (4.B.4) lorsque  $t = 0$ , conduit à  $D = 1/4$  ou à un coefficient de diffusion dimensionné de  $k_B T/\zeta$ , comme indiqué dans la relation de Stokes-Einstein.



# Chapitre 5

## Simulation en dimension trois

### 5.1 Introduction

Nous nous sommes, jusqu'ici limités, à la résolution des problèmes dans le plan. Nous voulons maintenant porter notre intérêt aux calculs en dimension trois. Les calculs en dimension trois font apparaître des détails de comportement ou des résultats qui ne sont pas observables avec les calculs effectués en une ou deux dimensions. Les références [23, 30, 47, 186] sont quelques exemples de l'utilisation de la méthode SPH pour la résolution des problèmes tridimensionnels. La méthode SPH a l'avantage majeur de pouvoir facilement être utilisée pour les calculs en dimension trois. La raison principale est que les équations discrètes SPH (les équations (2.6.11) à (2.6.14) et (2.6.22), par exemple) sont valables pour les calculs en dimension un, deux ou trois. Elles ne nécessitent aucune modification, ce qui n'est pas nécessairement le cas avec d'autres méthodes numériques ; comme en particulier celle des différences finies qui exigent une réécriture des équations chaque fois que l'on doit passer d'une dimension de calcul à une autre.

Pour tous les calculs effectués dans ce chapitre, nous nous servons uniquement de la méthode EPSPH. Ainsi, pour résoudre les équations de Navier-Stokes

(2.1.14)-(2.1.17) en dimension trois, nous nous servons de la forme discrète des équations de projection (2.2.1) - (2.2.6). Le calcul de la vitesse intermédiaire  $\mathbf{u}^*$  en dimension trois est effectué au moyen de l'équation discrète (2.6.22). Le calcul de la fonction scalaire  $\varphi^{n+1}$  dans le schéma de projection est effectué au moyen de l'équation discrète (2.6.11). Pour le calcul de la vitesse du fluide  $\mathbf{u}^{n+1}$  à la fin de chaque pas de temps en chaque particule fluide SPH, nous utilisons l'équation discrète (2.6.13). Et selon le besoin, la pression  $p^{n+1/2}$  va être calculée avec la relation (2.6.14).

Dans ce chapitre, nous résolvons dans un premier temps le problème de Poiseuille entre deux plaques infinies en dimension trois et dans un canal rectangulaire. Par la suite, nous effectuons l'application tridimensionnelle de la solution de l'algorithme décrite à la section 4.3 pour des haltères immergés dans un fluide soumis à un gradient de pression dans un canal tridimensionnel entre deux plaques infinies.

## 5.2 Écoulement de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies et dans un canal rectangulaire

### 5.2.1 Solutions analytiques

#### Écoulement de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies

La première application tridimensionnelle de notre méthode EPSPH est la résolution du problème de l'écoulement cisailé simple de Poiseuille entre deux plaques infinies et parallèles. Ainsi, nous calculons la vitesse  $\mathbf{u}$  d'un fluide ayant une viscosité constante dans un canal tridimensionnel  $\Omega = \{(x, y, z) : x \in (-\infty, \infty), y \in (-\infty, \infty), z \in (0, H)\}$  d'épaisseur  $H$ . Des conditions

de non glissement sont imposées aux frontières solides en  $z = 0$  et en  $z = H$ . Le fluide initialement au repos est mis en mouvement par une force  $\mathbf{F} = (F, 0, 0)$  avec  $F > 0$  (voir l'équation (2.1.14)).

La force  $\mathbf{F}$  qui met en mouvement le fluide est orientée uniquement dans la direction  $x$ . Ainsi, en utilisant le même raisonnement qu'à la section 2.7.1, nous obtenons la solution analytique adimensionnée suivante

$$u_{ex,x}(x, y, z, t) = -4y(y - 1) - \frac{32}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n + 1)^3} \sin((2n + 1)\pi y) \exp\left(-\frac{(2n + 1)^2 \pi^2}{Re} t\right), \quad (5.2.1)$$

$$u_{ex,y}(x, y, z, t) = 0, \quad (5.2.2)$$

$$u_{ex,z}(x, y, z, t) = 0, \quad (5.2.3)$$

où

$$Re := \frac{\rho H u_{max}}{\mu},$$

est comme nous l'avons déjà vu le nombre de Reynolds.

### Écoulement de Poiseuille tridimensionnel à l'état stationnaire dans un canal rectangulaire

Considérons l'écoulement permanent et laminaire d'un fluide incompressible de viscosité  $\mu$  dans un canal de section rectangulaire dont les côtés sont de longueur  $a$  dans la direction  $y$  et  $b$  dans la direction  $z$ . La direction de l'écoulement est prise selon  $x$ . Le fluide initialement au repos est mis en mouvement par une force  $\mathbf{F} = (F, 0, 0)$  avec  $F = -\frac{\partial P}{\partial x} > 0$ . Ainsi, la résolution des équations de Navier-Stokes (2.1.14) pour ce problème de Poiseuille stationnaire dans un canal

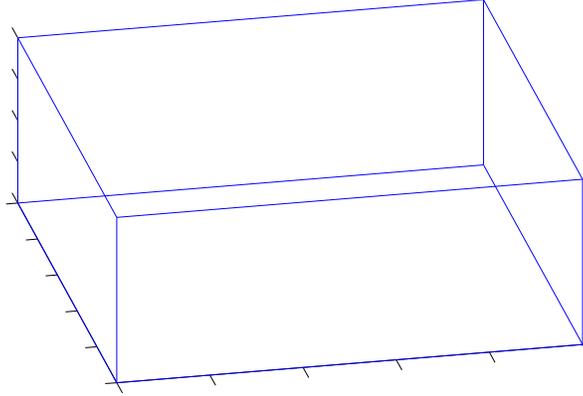


FIG. 5.1: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long.

stationnaire conduit au résultat suivant [160],

$$u_x(x, y, z) = \frac{F}{2\mu} \left( y^2 - \left( \frac{a}{2} \right)^2 \right) + \frac{4Fa^2}{\pi^3\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^3} \frac{\cosh \left( (2n+1) \frac{\pi z}{a} \right)}{\cosh \left( (2n+1) \frac{\pi b}{2a} \right)} \cos \left( (2n+1) \frac{\pi y}{a} \right), \quad (5.2.4)$$

$$u_y(x, y, z) = 0, \quad (5.2.5)$$

$$u_z(x, y, z) = 0. \quad (5.2.6)$$

De cette dernière, nous pouvons obtenir la vitesse stationnaire adimensionnée suivante,

$$\hat{u}_x(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = \frac{\hat{F}}{2} \left( \hat{y}^2 - \left( \frac{\hat{a}}{2} \right)^2 \right) + \frac{4\hat{F}\hat{a}^2}{\pi^3} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^3} \frac{\cosh \left( (2n+1) \frac{\pi \hat{z}}{\hat{a}} \right)}{\cosh \left( (2n+1) \frac{\pi \hat{b}}{2\hat{a}} \right)} \cos \left( (2n+1) \frac{\pi \hat{y}}{\hat{a}} \right), \quad (5.2.7)$$

$$u_y(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = 0, \quad (5.2.8)$$

$$u_z(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = 0. \quad (5.2.9)$$

où

$$\hat{F} = \frac{L_0 \lambda_H F}{\mu}, \quad \hat{u}_x = \frac{\lambda_H}{L_0} u_x, \quad \hat{x} = \frac{x}{L_0}, \quad \hat{y} = \frac{y}{L_0}, \quad \hat{z} = \frac{z}{L_0},$$

$L_0$  et  $\lambda_H$  étant respectivement la longueur caractéristique et le temps caractéristique.

## 5.2.2 Résolutions numériques

**Pour l'écoulement de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies :**

Pour nos simulations, le domaine de calcul est tridimensionnel et parallépipédique rectangle :

$$\Omega_V = \{(x, y, z) : a \leq x \leq b, c \leq y \leq d, e \leq z \leq f, \}, \quad (5.2.10)$$

avec des conditions de non glissement et de non pénétration  $\mathbf{u}_b = \mathbf{0}$  sur les parois supérieure et inférieure  $z = e$  et  $z = f$ . Les conditions aux frontières périodique sont utilisées en  $x = a, x = b, y = c$  et  $y = d$ . Les particules SPH qui se trouvent à une extrémité libre du domaine de calcul interagissent avec celles qui se trouvent à l'extrémité opposée. Initialement, un total de  $N_x N_y N_z$  particules est placé sur une grille tridimensionnelle régulière dont les nœuds ont pour coordonnées  $(x_i, y_j, z_k)$  ( $i = 1, \dots, N_x, j = 1, \dots, N_y, k = 1, \dots, N_z$ ) où

$$x_i = a + (i - 1)\Delta x, \quad y_j = c + (j - 1)\Delta y, \quad z_k = e + (k - 1/2)\Delta z, \quad (5.2.11)$$

et les distances entre les particules dans les trois directions de coordonnées sont données par  $\Delta x = (b - a)/N_x, \Delta y = (d - c)/N_y$  et  $\Delta z = (f - e)/N_z$ . Nous

effectuons les calculs uniquement avec la méthode EPSPH dans laquelle les particules SPH conservent leurs positions initiales tout au long des calculs. Pour les calculs, nous choisissons les paramètres physiques suivants :  $\mu = 0.001 \text{kg m}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $H = 0.001 \text{m}$ ,  $\rho = 1000 \text{kg m}^{-3}$  et la valeur maximale de la vitesse dans la direction de l'écoulement est  $u_{\max} = 1.25 \times 10^{-5} \text{ms}^{-1}$ . Ce choix de paramètres conduit à un nombre de Reynolds,  $Re = \rho u_{\max} H / \mu = 0.0125$ . Ce choix de paramètres est le même que ceux de la section 2.7.2. Après avoir adimensionné toutes les variables comme nous l'avons expliqué dans la section 2.7.1, le problème est résolu dans le domaine de calcul  $\Omega_V = [0, 1/4] \times [0, 1/4] \times [0, 1]$ .

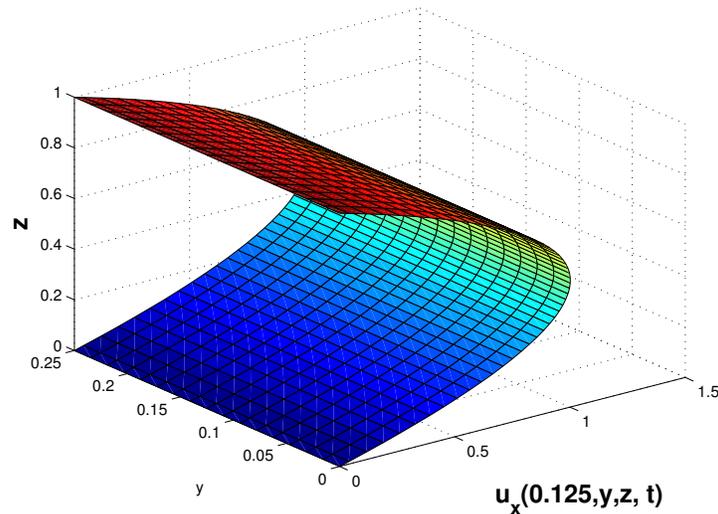


FIG. 5.2: Problème de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies. Solution numérique de la méthode EPSPH de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement au temps adimensionné  $t = 0.0125$ .  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $N_x = N_y = 16$ ,  $N_z = 64$ ,  $h = 2.001 \Delta z$ ,  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

La figure 5.2 montre au temps  $t = 0.0125$  le profil de la vitesse du fluide qui est comme on s'y attendait un parabolôide cylindrique. Et la figure 5.3 montre la coupe en  $y = 0.125$  de la comparaison qualitative aux temps adimensionnels allant de  $2.5 \times 10^{-5}$  à  $1.25 \times 10^{-2}$ , du profil des vitesses entre les résultats numériques et la solution analytique du problème de Poiseuille dans le canal tri-

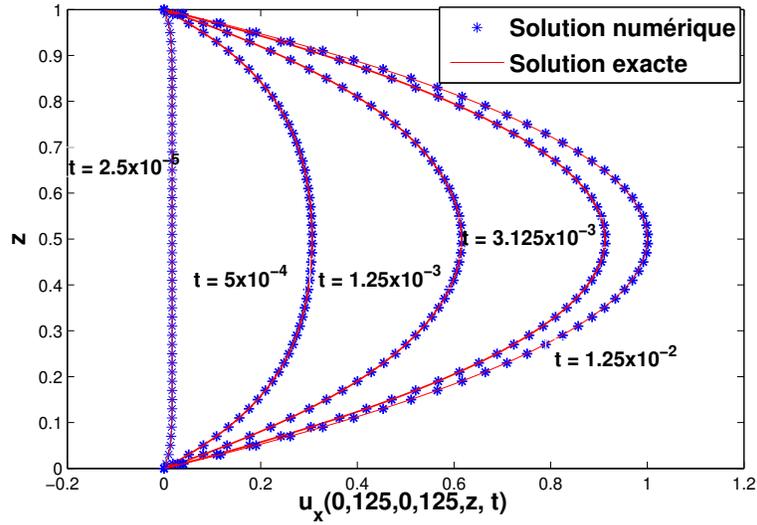


FIG. 5.3: Problème de Poiseuille tridimensionnel entre deux plaques infinies. Comparaison entre la solution exacte (5.2.1) et la solution numérique de la méthode EPSPH de la composante de la vitesse dans la direction de l'écoulement.  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ ,  $N_x = 24, N_y = 16, N_z = 50, h = 2.001\Delta z, \Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ .

dimensionnel infini. La solution exacte pour  $u_x$  est donnée par l'équation (5.2.1) et la solution numérique a été calculée en se servant du schéma EPSPH. Tous les résultats montrés ont été obtenus avec  $N_x \times N_y \times N_z = 24 \times 16 \times 50$  particules SPH avec une longueur de lissage de  $h = 2.001\Delta z$  et un pas de temps fixe de  $\Delta t = 1.25 \times 10^{-6}$ . On y voit un très bon accord entre les solutions numériques et analytiques.

**Pour l'écoulement de Poiseuille tridimensionnel dans un canal rectangulaire :**

Le domaine de calcul tridimensionnel et parallépipédique rectangle que nous avons utilisé est le suivant :

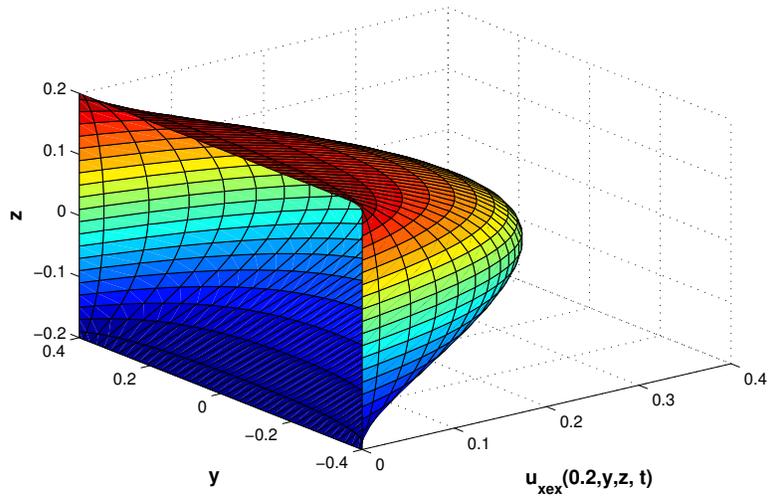
$$\Omega_V = \{(x, y, z) : a \leq x \leq b, c \leq y \leq d, e \leq z \leq f, \}. \quad (5.2.12)$$

Aux frontières du domaine, le fluide adhère à la paroi ; ainsi,  $\mathbf{u}_b = \mathbf{0}$  sur les quatre parois du domaine de calcul  $y = c$ ,  $y = d$ ,  $z = e$  et  $f$ . En  $x = a$  et  $x = b$ , nous avons fait le choix d'appliquer des conditions aux limites périodiques avec pour conséquence que les particules SPH qui se trouvent à une extrémité libre du domaine de calcul interagissent avec celles qui se trouvent à l'extrémité opposée. Nous avons placé un total de  $N_x N_y N_z$  particules sur une grille tridimensionnelle régulière dont les nœuds ont pour coordonnées  $(x_i, y_j, z_k)$  ( $i = 1, \dots, N_x$ ,  $j = 1, \dots, N_y$ ,  $k = 1, \dots, N_z$ ) où

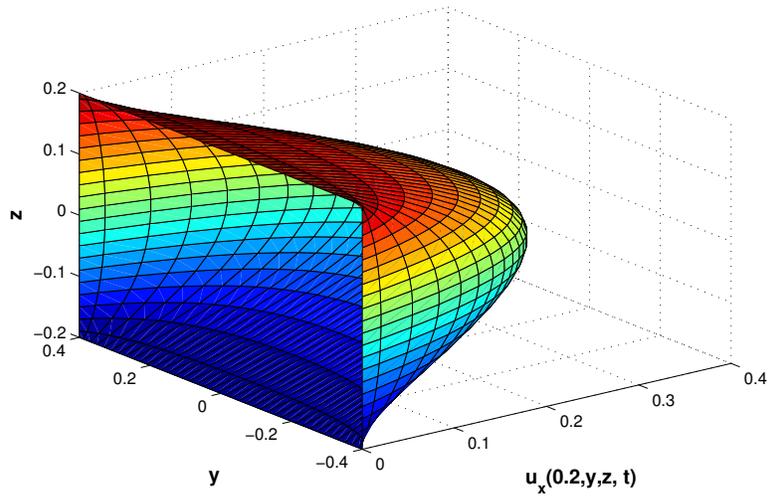
$$x_i = a + (i - 1)\Delta x, \quad y_j = c + (j - 1/2)\Delta y, \quad z_k = e + (k - 1/2)\Delta z. \quad (5.2.13)$$

Dans les trois directions de coordonnées, les distances entre les particules sont données par  $\Delta x = (b - a)/N_x$ ,  $\Delta y = (d - c)/N_y$  et  $\Delta z = (f - e)/N_z$ . Les calculs ont été effectués avec la méthode EPSPH. En suivant le même raisonnement qu'à la section 2.7.1 pour adimensionner les variables, le problème est résolu dans le domaine de calcul  $\Omega_V = [0, 0.4] \times [-0.4, 0.4] \times [-0.2, 0.2]$ . Nous avons fixé  $\hat{F}$  dans l'équation (5.2.8) à 16,  $Re = 0.0125$  et  $\Delta t = 1.5 \times 10^{-6}$  pour tous les calculs.

Les figures 5.4(a)-5.4(b) montrent le profil de la composante  $x$  de la vitesse à l'état stationnaire respectivement pour la solution exacte et pour la solution numérique au temps adimensionné  $t = 0.0125$ . Ces résultats ont été obtenus avec  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.02$ ,  $h = 1.15(\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$  et  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-6}$ . Le profil de la vitesse du fluide qui est comme on s'y attendait un paraboloïde. Nous pouvons observer qualitativement que les deux résultats sont très semblables. La figure 5.5 montre la norme-2 de l'erreur de la vitesse du fluide en fonction du temps comparée à la solution stationnaire exacte pour trois maillages différents. On y observe qu'au début des calculs, comme on s'y attend, que l'erreur est très grande parce que l'écoulement est loin de l'état stationnaire. À mesure que l'écoulement évolue vers l'état stationnaire, l'erreur diminue jusqu'à atteindre



(a)



(b)

FIG. 5.4: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. (a) Solution stationnaire exacte. (b) Solution stationnaire approchée au temps adimensionné  $t = 0.0125$ .  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.02$ ,  $h = 1.15(\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-6}$ ,  $Re = 1.25 \times 10^{-2}$ .

une valeur stationnaire qui indique que la solution stationnaire approchée est atteinte. Pour les trois maillages choisis à savoir,  $\Delta x = 0.050, \Delta y = 0.067, \Delta z = 0.033$  d'une part, ensuite  $\Delta x = 0.025, \Delta y = 0.04, \Delta z = 0.025$  et enfin  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.02$ , nous pouvons observer que l'erreur à l'état stationnaire diminue avec le raffinement du maillage.

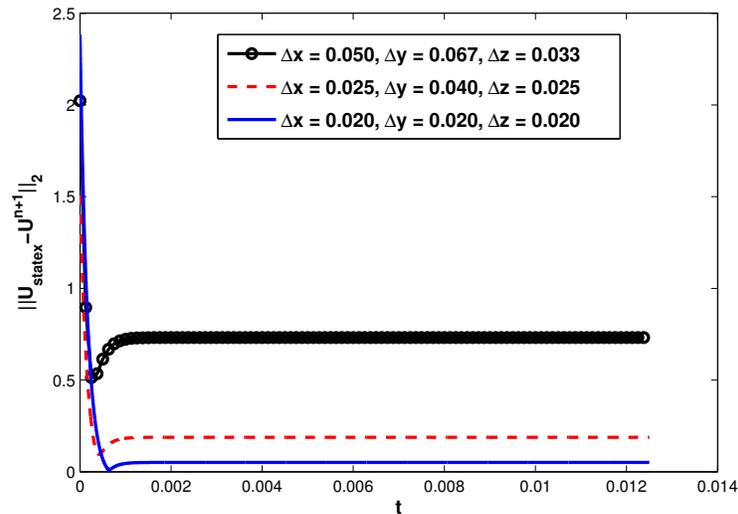


FIG. 5.5: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. Graphe de l'erreur de la vitesse pour deux maillages différents.  $h = 1.15(\Delta x + \Delta y + \Delta z)/3, \Delta t = 1.0 \times 10^{-6}, Re = 1.25 \times 10^{-2}$ .  $\circ$ — :  $\Delta x = 0.050, \Delta y = 0.067, \Delta z = 0.033$ , - - :  $\Delta x = 0.025, \Delta y = 0.040, \Delta z = 0.025$ , — :  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.020$ .

### 5.3 Dynamique de polymères en suspension confinés dans un canal tridimensionnel entre deux plaques infinies

Dans cette section, nous considérons l'application de la solution de l'algorithme décrite à la section 4.3 pour des haltères et des chaînes de bille-ressort

dans un fluide soumis à un gradient de pression dans un canal tridimensionnel infini borné par deux plaques. Tous les calculs font intervenir des interactions hydrodynamiques bille-bille et bille-paroi comme ce fût le cas à la section 4.4.2.

Les forces d'exclusion de volume (4.2.6) sont ajoutées dans les calculs avec les valeurs des paramètres  $R_k^{(j)}$ ,  $\alpha$  et  $A_b$  étant 0.625, 0.5 et 0.01, respectivement. Nous inspirant des travaux de Hernández-Ortiz et al. [59], nous avons donné à  $b$ , le carré de l'étirement maximal adimensionné, la valeur 12 et fixé la hauteur adimensionnée de canal à 10 unités adimensionnées. La longueur du domaine de calcul périodique est fixée à 3 et la largeur est fixée à 4. Les calculs sont effectués sur trois maillages SPH fixes différents afin d'étudier les effets du maillage sur le taux de migration des haltères. Le nombre de Reynolds qui est choisi pour tous les calculs de cette section est  $2 \times 10^{-4}$  et, nous avons fixé  $Z = 8.352$  [59] ce qui correspond, comme nous le montrons dans l'annexe de ce chapitre, à  $Z_{eff} = 3.4322$ . La masse adimensionnée de la bille  $m$  est égale ici à  $1 \times 10^{-8}$ . Les nombres de Weissenberg pour les écoulements traités sont calculés à partir de l'équation (4.4.2).

**Haltères :**  $N = 2, M = 1500$

Les simulations d'une suspension de 1500 haltères (par cellule périodique) à  $We = 20$  et  $40$  sont effectuées avec un pas de temps adimensionné  $1 \times 10^{-4}$  jusqu'à ce que nous observons la convergence des résultats. Notre choix du pas de temps est suffisamment petit pour s'assurer que les nombres de Weissenberg que nous avons choisis, une tolérance (4.3.25) de  $0.01 \sqrt{b}$  soit atteinte après quelques étapes de correction (voir la section 4.3.1) par pas de temps. Pour tous les calculs, le centre de masse des haltères est initialement choisi le long de  $x = 0$  et uniformément réparti sur  $[-D, D] \times [-H, H]$ ; et une répartition initiale des haltères est montrée sur la figure 5.3.

Les figures 5.7(a)-5.7(d) montrent certains de nos résultats avec  $We = 20$  (fig.

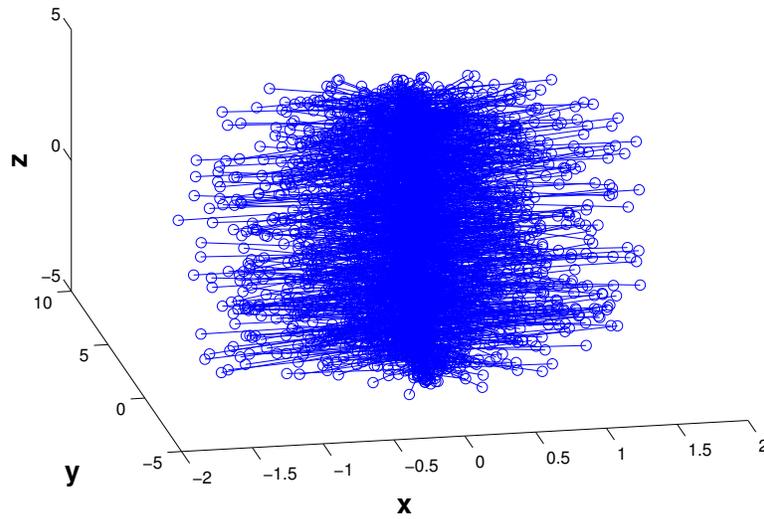


FIG. 5.6: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. Configuration typique initiale des haltères (distribution uniforme).  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $N_x = 8$ ,  $N_y = 10$ ,  $N_z = 25$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ .

5.7(a) et fig. 5.7(b)) et  $We = 40$  (fig. 5.7(c) et fig. 5.7(d)). Ces résultats ont été obtenus avec un maillage défini de sorte que l'élément de volume pour chaque particule de fluide soit  $\Delta V = 0.125$ . La figure 5.8(a)-5.8(d) montre d'autres résultats avec  $We = 20$  (fig.5.8(a) et fig.5.8(b)) et  $We = 40$  (fig.5.8(c) et fig.5.8(d)). Les résultats de cette dernière figure, ont été obtenus avec un maillage défini de sorte que l'élément de volume pour chaque particule de fluide soit  $\Delta V = 0.06$ . La durée de l'expérience dans tous les cas de figure semble indiquer que les haltères ont quasi pleinement migré comme le montre les trajectoires de 10 haltères aléatoirement choisis sur les figures fig. 5.7(a), fig. 5.7(c), fig. 5.8(a) et fig. 5.8(c). La distribution des centres de masse des haltères présentée sur les figures 5.7(b) et 5.7(d) montre comme on s'y attend, une migration des haltères vers le centre de l'écoulement à cause des interactions hydrodynamiques bille-paroi. Par contre, on observe également sur ces figures, une forte migration des haltères du centre de l'écoulement vers les parois du domaine de calcul. L'effet combiné de ces deux migrations en-

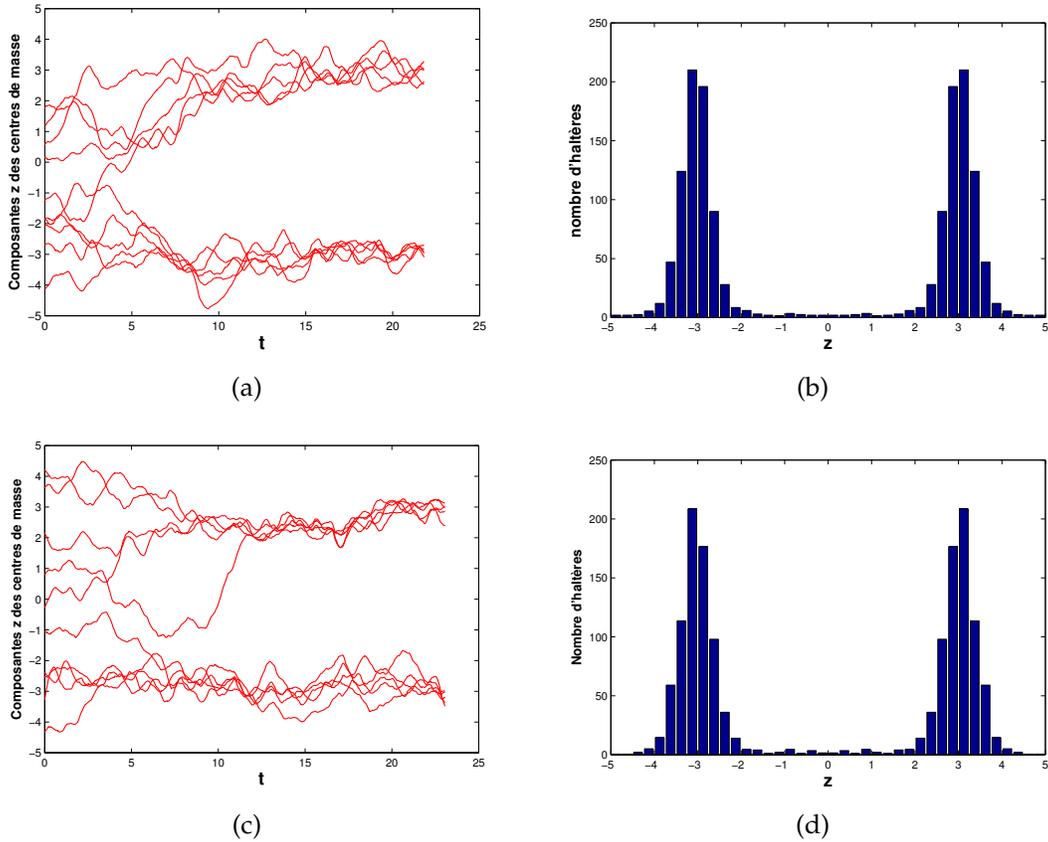


FIG. 5.7: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. (a) et (c) Trajectoire de 10 haltères choisis de manière aléatoire. (b) et (d) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères. (a)-(b) :  $We = 20$ . (c)-(d) :  $We = 40$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $N_x = 6$ ,  $N_y = 8$ ,  $N_z = 20$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ .

traîne la formation de deux pics très prononcés quelque part entre le centre de l'écoulement et les parois. Cette forte migration du centre de l'écoulement vers la paroi est essentiellement due à l'effet Segre-Silberberg [13, 33, 46, 156, 157] qui stipule que des particules en suspension uniformément dispersées dans un écoulement migrent du centre de l'écoulement vers la paroi pour s'établir dans une région d'équilibre proche de la paroi. Cet effet est provoqué par une force inertielle de poussé induite par le cisaillement dans l'écoulement de Poiseuille [46]. Nous remarquons qu'il n'y a pas une différence remarquable entre les résultats obtenus avec un nombre de Weissenberg  $We = 20$  (figs.5.7(a)-5.7(b)) et ceux qui ont été obtenus avec  $We = 40$  (figs.5.7(c)-5.7(d)). Une observation attentive montre néanmoins que les haltères ont plus migré vers le centre lorsque  $We = 40$  car on observe presque pas du tout d'haltères dans une région proche de la paroi comparé à lorsque  $We = 20$ . Cela peut s'expliquer par le fait qu'avec un nombre de Weissenberg plus grand, le taux de cisaillement dans l'écoulement augmente ce qui tend globalement à accroître la tension dans les haltères. L'accroissement de la tension dans les haltères a pour effet d'intensifier l'effet hydrodynamique bille-paroi qui éloigne davantage les haltères des parois.

L'interaction hydrodynamique bille-paroi et l'effet Segre-Bilberberg ne sont pas les seuls responsables de la distribution finale des haltères dans le canal au cours de l'écoulement. En effet, un troisième élément influence fortement le comportement des haltères au cours de l'écoulement. Cet élément est l'effet de diffusion qui est entretenu par la force fluctuante  $f$  du membre de droite de l'équation 4.2.13 pour le solvant. Cette force de nature thermique et de comportement aléatoire à tendance à rendre uniforme la distribution des haltères dans le canal tout au long de l'écoulement. Puisque  $f$  est inversement proportionnelle à la racine carrée de  $\Delta V$  qui représente l'élément de volume à attribuer à chaque particule fluide (voir les équations (4.3.31) et (4.3.32)), alors, l'ordre de grandeur de  $f$  est faible lorsque le maillage utilisé pour les calculs est assez grossier c'est-à-dire

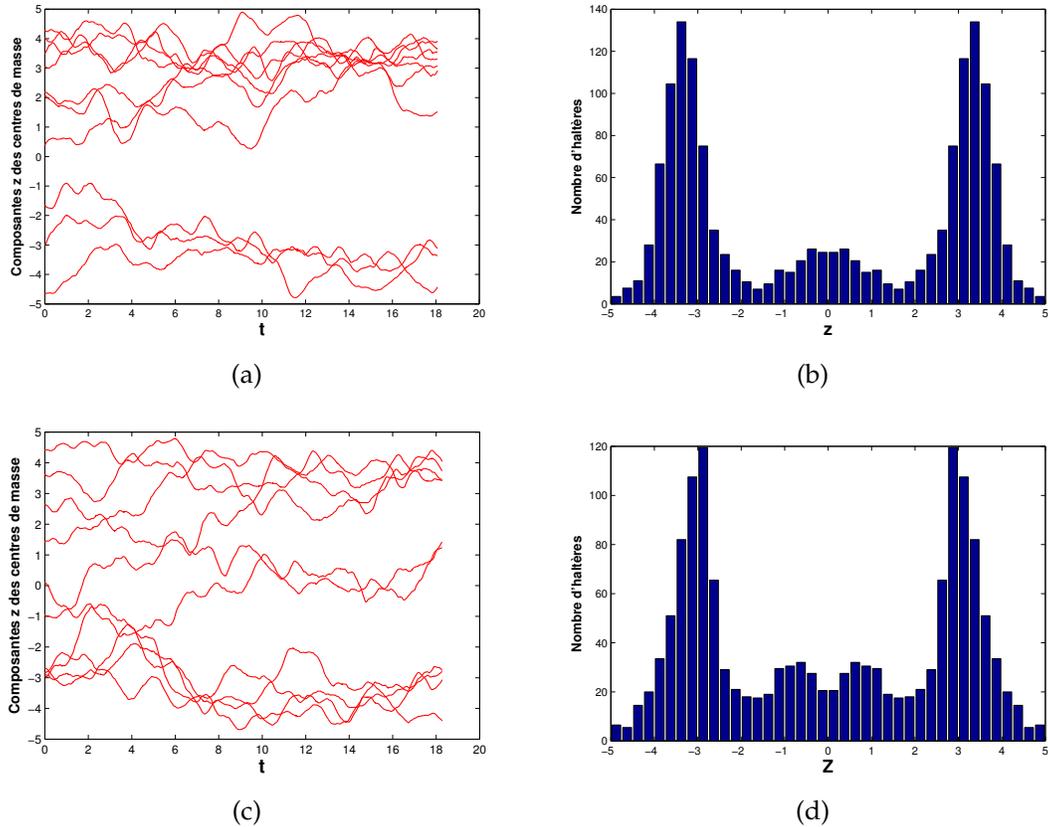


FIG. 5.8: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. (a) et (c) Trajectoire de 10 haltères choisis de manière aléatoire. (b) et (d) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères. (a)-(b) :  $We = 20$ . (c)-(d) :  $We = 40$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $N_x = 8$ ,  $N_y = 10$ ,  $N_z = 25$ ,  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ .

lorsque  $\Delta V$  est grand. Dans cette condition où l'effet de diffusion est faible à cause de l'ordre grandeur de la force fluctuante qui est petite, l'effet de l'interaction hydrodynamique bille-paroi et l'effet Segre-Silberberg dominant largement sur le comportement des haltères dans le canal au cours de l'écoulement. C'est pour cela qu'on observe une bipolarisation très prononcée des haltères comme sur les figures 5.7(b) - 5.7(d). À mesure que l'on raffine le maillage c'est-à-dire que  $\Delta V$  devient petit, l'ordre de grandeur de  $f$  augmente. Dans ce cas, l'effet de diffusion devient plus important ce qui a comme conséquence la réduction considérable de la taille des pics dans la distribution des haltères à l'état stationnaire comme le montre les figures 5.8(b) - 5.8(d). Cette réduction de la taille des pics s'accompagne d'une tendance à vouloir rendre uniforme la distribution des haltères dans le canal. Plus on raffine le maillage, plus l'effet de diffusion prend le dessus sur les effets combinés d'interaction hydrodynamique bille-paroi et Segre-Silberberg. Dans une situation sévère de domination de l'effet de diffusion, on observe une distribution quasi uniforme des haltères dans le canal tout au long des calculs avec presque pas ou très peu de migration comme le montre les figures 5.9(a) et 5.9(b) où  $\Delta V = 0.01$  en comparaison avec les figures 5.9(c) et 5.9(d) où  $\Delta V = 0.125$ . Sur ces dernières figures, on peut observer la migration des haltères et la formation des pics pendant le même temps de calcul dans les deux ensembles de figure. Signalons ici que ces observations qui résultent de nos calculs ont été déjà établies par les travaux de Fedosov et al. [46]. Les effets dynamique de l'écoulement dans leurs travaux ont été essentiellement interprétés avec le nombre de Péclet ( $Pe$ ) qu'ils ont défini comme étant inversement proportionnel au coefficient de diffusion ( $D$ ) du centre de masse des polymères mesuré à l'équilibre (voir leur équation (14) de [46]). Leurs résultats présentés sur les figures 13 – 15 de [46] montrent, lorsque le nombre de Péclet est faible, c'est-à-dire que le coefficient de diffusion est grand, que la distribution des haltères à travers le canal est quasi-uniforme sans formation de pics avec une légère migration des

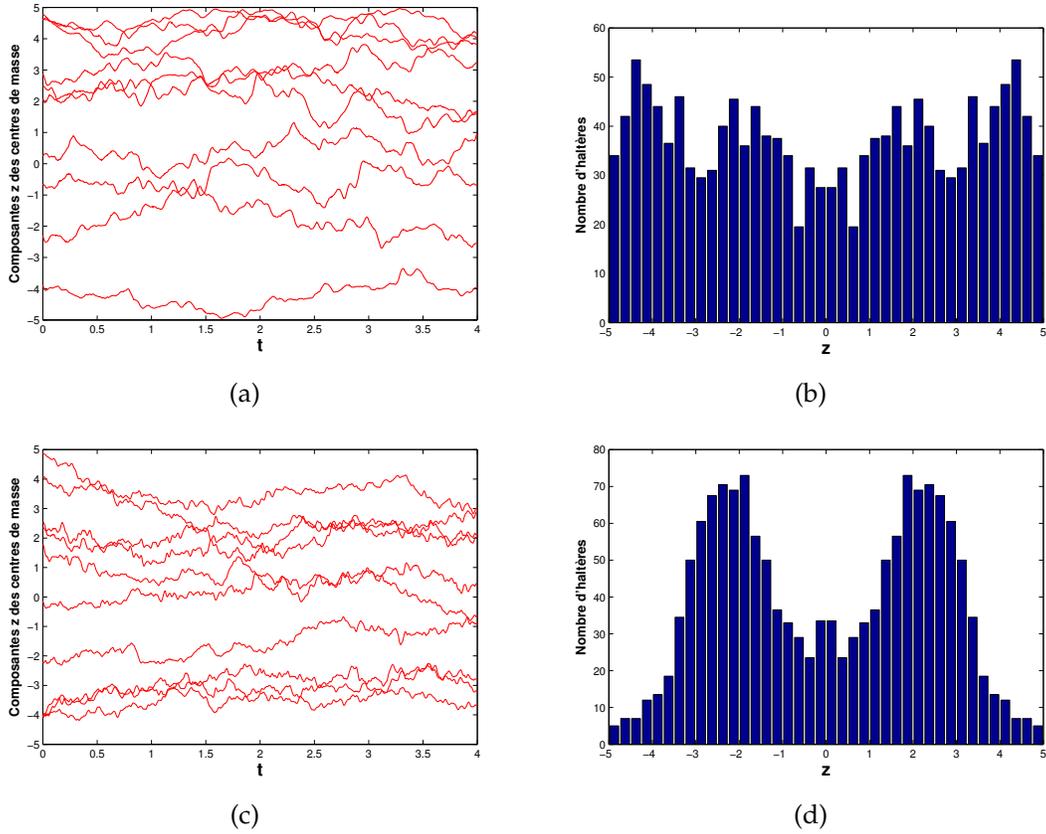
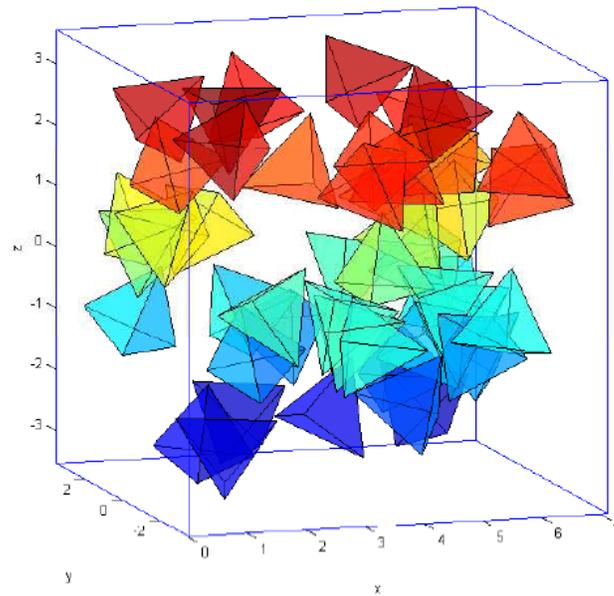


FIG. 5.9: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille de 1500 haltères entre deux plaques infinies. (a) et (c) Trajectoire de 10 haltères choisis de manière aléatoire. (b) et (d) Distribution symétrisée des centres de masse des haltères. (a)-(b) :  $\Delta V = 0.01$ . (c)-(d) :  $\Delta V = 0.125$ .  $Re = 2 \times 10^{-4}$ ,  $H = 10$ ,  $L = 3$ ,  $D = 4$ ,  $We = 20$   $\Delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ .

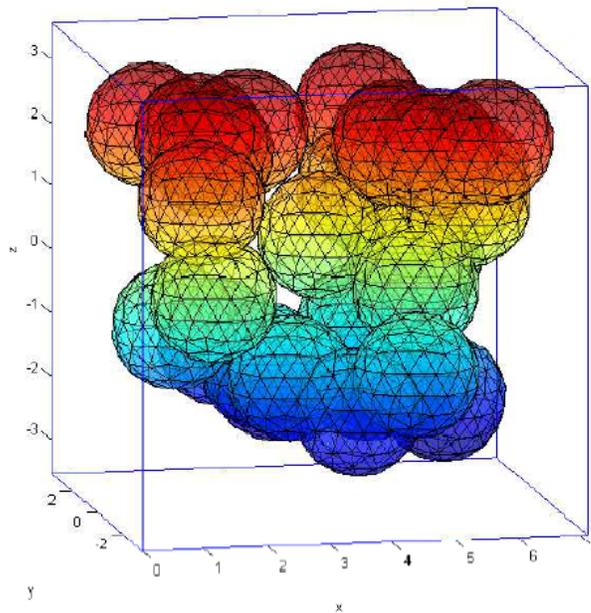
particules de la paroi. À mesure que le nombre de Péclet augmente, c'est-à-dire dans ce cas que l'effet de diffusion devient de plus en plus faible, ils ont observé comme nous l'avons fait, la formation des pics qui deviennent très prononcés à mesure que  $Pe$  augmente davantage.

### 5.3.1 Travaux effectués avec le canal rectangulaire

Notre canal rectangulaire numérique a été utilisé par Morgane Henry [58] dans ses travaux de maîtrise pour simuler la dynamique des tétraèdres et des sphères soumis à un gradient de pression (voir les exemples sur les figures 5.10(a) - 5.10(b)). Les tétraèdres et les sphères sont des modèles grossiers de globules rouges. Afin de parvenir à réaliser ses objectifs, en plus d'utiliser notre modèle SPH, Morgane Henry s'est servie de la méthode des éléments finis proposée par Charrier et al. [20] pour décrire les forces exercées par les membranes sur le fluide environnant. Afin de représenter les globules rouges, les membranes ont été modélisées avec un modèle introduit par Skalak et al. [163] et une correction de volume proposée par Pranay et al. [148] a été adoptée pour maintenir constant le volume délimité par la membrane au cours du temps. Ce modèle a été appliqué dans un premier temps à la résolution de la dynamique des tétraèdres. Les tétraèdres ont ensuite été remplacés par des sphères pour modéliser les membranes. Notre contribution à ce travail de Morgane Henry [58] a été de lui fournir un code qui résout le problème de Poiseuille dans un canal rectangulaire avec notre modèle SPH. Le code a été conçu de sorte qu'il soit possible d'ajouter la contribution des forces extérieures qui agissent sur le fluide dans le canal et aussi de fournir la vitesse du fluide évaluée en toute particule en suspension dans le canal. Morgane Henry a donc travaillé à construire les forces extérieures appropriées issues des caractéristiques des membranes représentées soit par des tétraèdres, soit par des sphères.



(a)



(b)

FIG. 5.10: Écoulement tridimensionnel de Poiseuille dans un canal rectangulaire infiniment long. (a) Position initiale des tétraèdres dans le canal pour un hématoците  $Ht = 0.6$  (selon [58]). (b) Position initiale des sphères dans le canal pour un hématoците  $Ht = 0.4$  (selon [58]).

## 5.4 Conclusion

Dans ce chapitre de la thèse, nous avons entamé la résolution des problèmes en dimension trois avec notre modèle SPH.

Nous avons dans un premier temps résolu le problème de l'écoulement de Poiseuille entre deux plaques infinies et dans un canal rectangulaire infiniment long. Nos calculs ont donné des résultats qui sont en très bon accord avec la solution exacte.

Nous avons ensuite simulé la dynamique Brownienne des haltères immergés dans un fluide soumis à un gradient de pression entre deux plaques infinies. Nous avons observé une migration des haltères vers le centre de l'écoulement et une migration du centre de l'écoulement vers les parois ce qui donne lieu à la formation des pics dans une région comprise entre le centre de l'écoulement et les parois. La migration vers le centre de l'écoulement est due à l'interaction hydrodynamique bille-paroi alors que la migration vers les parois est comme nous l'avons attribuable à l'effet Segre-Silberbeg. Les pics dans la distribution des haltères sont d'autant important que l'effet de diffusion est faible. En effet, lorsque l'effet de diffusion est faible, la bipolarisation dans la distribution des haltères est très prononcée. À mesure que l'effet de diffusion devient important lorsqu'on raffine le maillage du domaine de calcul, la hauteur des pics devient faible et les haltères deviennent uniformément distribués. Nous avons remarqué que ces observations ont également été faites par Fedosov et al. [46] dans leurs travaux.

Enfin, notre canal rectangulaire infiniment long a été utilisé par Morgane Henry [58] dans le cadre de ses travaux de maîtrise pour simuler des modèles grossiers de globules rouges sous forme de tétraèdres et de sphères. Notre contribution à ce travail a été d'aider Morgane à bien comprendre la méthode SPH et à lui fournir un code utilisable pour simuler la dynamique des tétraèdres et des

sphères.

## 5.A Relation entre les coefficients de friction d'entrée et effectif (temps-long)

Nous résolvons un problème de même nature que celui que nous avons présenté dans l'appendice 4.A.2 du chapitre 4 à savoir, le problème de dimension trois d'une particule ayant un vecteur position  $\mathbf{r}(t) = (x(t), l/2, 0)$  qui se déplace avec une vitesse terminale et à mi-chemin entre les parois du canal  $z = \pm D$  sous l'influence d'une force constante  $\mathbf{F} = (F, 0, 0)$ , en l'absence de toutes forces fluctuantes.  $l$  représente la largeur de la cellule périodique. Les équations (4.A.19)-(4.A.20) à résoudre restent inchangées. La solution (4.A.21) reste la même ainsi que la condition (4.A.22). Ainsi, en calculant la vitesse stationnaire  $u$  du solvant en une position  $\mathbf{r} = (x(t), l/2, 0)$  de la particule à mesure que la longueur du canal  $L \rightarrow \infty$  pour une force donnée  $\mathbf{F} = (F, 0, 0)$  et le coefficient  $Z$ , les équations (4.A.21), (4.A.22) nous permettent de calculer (en nous servant d'un certain choix de paramètres numériques) le coefficient de trainée effectif pour la géométrie considérée.

Dans le tableau 5.1, nous présentons les résultats de nos calculs SPH pour la vitesse convergée du solvant à la position de la particule dans des canaux de hauteur 2, de largeur 2 et de longueur 2, 4 et 8 lorsque  $F = 4$ . Dans tous les cas, la taille du maillage est maintenue constante ( $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.125$ ),  $h'$  fixe et égale à 0.1547, et le pas de temps choisi est  $5 \times 10^{-5}$ . La convergence est considérée comme atteinte aussitôt que la norme-2 de la différence des valeurs de la vitesse calculée à des pas de temps successifs est plus petite que  $1 \times 10^{-14}$ . De l'inspection des données numériques dans la première colonne du tableau 4.1, nous conjecturons toujours que la relation entre la composante en  $x$  (disons,

L	$\mathbf{u}(x(t), l/2, 0) = (u_L(x(t), l/2, 0), 0)$	$Z_{\text{eff}} = \frac{ZF}{F+4u}$
2	$(1.8037, -4.9 \times 10^{-15}, -2.5 \times 10^{-15})$	2.9789
4	$(1.6143, 4.2 \times 10^{-16}, -7.8 \times 10^{-17})$	3.1948
8	$(1.5217, 6.8 \times 10^{-16}, 9.8 \times 10^{-17})$	3.3119
$\infty$	$(1.4334, 0, 0)$	3.4322

TAB. 5.1: Vitesse stationnaire au point  $(x(t), l/2, 0)$  dans un canal calculée à partir de (4.2.13)-(4.2.14).  $D = 1, l = 2, L = 2, 4, 8$ .  $u_\infty$  est calculé à partir de l'équation (5.A.1).  $Z_{\text{eff}}$  est calculée en se servant de (4.A.21)-(4.A.22).

$u_L$ ) de la vitesse convergée à la position de la bille pour une valeur donnée de  $L$  et la valeur correspondante lorsque  $L \rightarrow \infty$  est de la forme

$$u_L = u_\infty + \beta/L^\gamma, \quad (5.A.1)$$

pour des constantes  $\beta$  et  $\gamma$  à déterminer. De la relation (5.A.1) et des données numériques, nous obtenons

$$\gamma = \log \left( \frac{u_4 - u_2}{u_8 - u_4} \right) / \log(2) \approx 1.0338, \quad (5.A.2)$$

et cela conduit à  $\beta \approx 0.7582$ . Sur la figure 5.11, nous présentons les données de  $u_L$  lorsque  $L = 2, 4$  et  $8$  de même que la courbe qui passe par ces données (5.A.1). Laisant  $L \rightarrow \infty$  dans (5.A.1), nous calculons la vitesse terminale adimensionnée, d'une particule qui se déplace lentement le long de la ligne médiane d'un canal infiniment long de demi-hauteur égal à 1, que nous trouvons égale à 1.4334 de telle sorte que de (4.A.22) nous obtenons  $Z_{\text{eff}} = 3.4322$ .

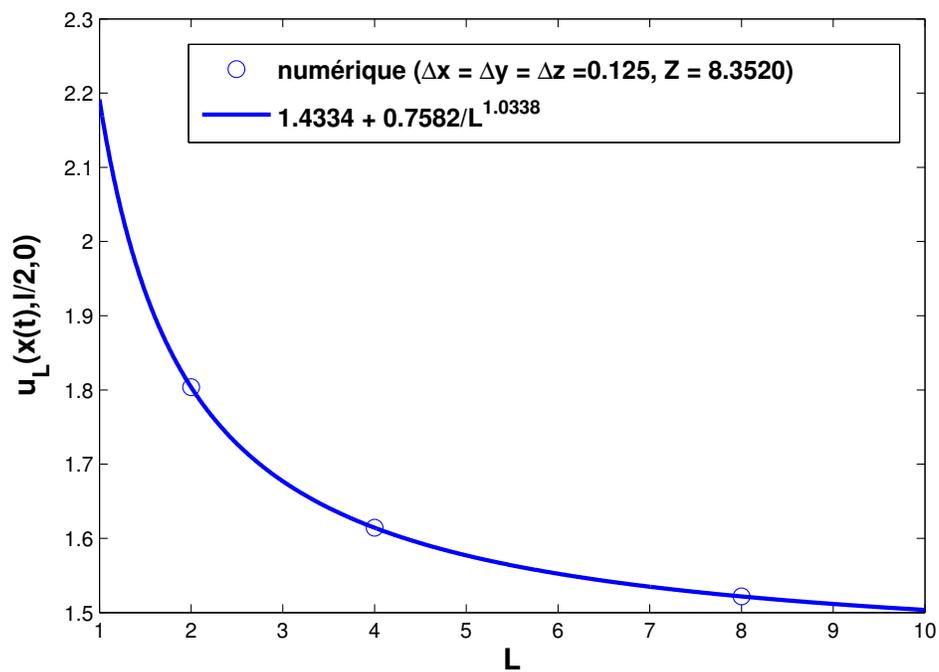


FIG. 5.11:  $\circ$  : vitesse stationnaire  $u_L(x(t), l/2, 0)$  calculée de (4.2.13)-(4.2.14) dans un canal. La courbe continue est le graphe de  $u_L$  à partir de (5.A.1).  $D = 1$ ,  $l = 2$ ,  $L = 2, 4, 8$ .



# Chapitre 6

## Conclusion Générale

### 6.1 Conclusion

La méthode SPH traditionnelle présente certaines difficultés lors de la résolution des problèmes en dynamique des fluides. Parmi ces difficultés, nous pouvons citer, pour rappel, l'approximation de compressibilité des fluides incompressibles et le problème d'instabilité d'extension qui entraîne un regroupement non physique (formation des grumeaux) des particules SPH. Ces difficultés conduisent à des erreurs de précision, et dans certains cas, à l'explosion des calculs. Dans le souci d'apporter une contribution à la résolution de ces difficultés inhérentes à la méthode SPH traditionnelle, nous avons, dans le cadre de cette thèse, proposé une nouvelle méthode SPH pour la simulation des écoulements de fluides incompressibles. Dans cette méthode, nous avons discrétisé les équations de Navier-Stokes dans le temps au moyen d'un schéma de projection sans pression, initialement proposé par Kim et Moin [81]. En plus de l'application de la condition d'incompressibilité sur la vitesse du fluide, nous avons démontré une caractéristique de la méthode de projection, à savoir que le calcul de la dérivée normale de la pression sur la frontière est cohérent avec l'équation linéaire

de la quantité de mouvement discrétisée par rapport au temps. Cette cohérence contraste avec d'autres schémas de projection SPH [32, 92] dans lesquels des conditions aux frontières de Neumann homogènes pour la pression ont été imposées. Par notre approche, nous avons complètement évité les couches limites numériques qui pourraient apparaître lorsque d'autres schémas de projection sont utilisés. Nous avons discrétisé les équations de projection avec la méthode SPH. Nous avons présenté de manière détaillée toutes les formes discrètes que nous avons obtenues. Nous avons établi deux variantes de notre méthode SPH, l'une, lagrangienne, appelée Lagrangian Projection Smoothed Particle Hydrodynamics (LPSPH) et l'autre, eulerienne, appelée Eulerian Projection Smoothed Particle Hydrodynamics (EPSPH).

Nous avons ensuite appliqué notre méthode SPH à la résolution du problème de l'écoulement de Poiseuille entre deux plaques infinies bi-dimensionnelles. Nous avons observé que nos calculs ont donné des résultats beaucoup plus précis que ceux de Bierbrauer et al. [15]. D'autre part, l'évidence numérique a été présentée pour montrer que les deux variantes de notre méthode SPH comportent une erreur de troncature de  $O(\Delta t^2, h^2, (\Delta x/h)^4)$ .

Nous avons observé qu'en maintenant fixes les particules SPH, cela conduit indéniablement à une perte de la flexibilité associée aux méthodes sans maillage et une limitation est placée sur les classes de problèmes qui pourraient être résolus. Un aspect positif est, comme nous l'avons vu, un gain considérable du temps de calcul avec l'utilisation des particules SPH fixes lorsque le problème qui est en train d'être résolu le permet. Un des aspects attrayants de la méthode EPSPH que nous avons souligné est que les problèmes peuvent être aisément résolus sur des domaines de calcul ayant des géométries compliquées puisque rien dans la méthode n'oblige les particules SPH fixes à être rangées d'une certaine façon précise ; cela demeure un des avantages majeurs de celle-ci sur les méthodes numériques avec maillage.

Nous avons appliqué les deux variantes (LPSPH et EPSPH) de notre méthode SPH à la résolution d'un problème d'interface, à savoir celui de la dynamique d'une membrane Hookéenne sous tension immergée dans un fluide visqueux et incompressible. La membrane exerce une succession de forces singulières sur le fluide environnant. Les termes de force singulière dans les équations de Navier-Stokes ont été traités d'une manière semblable à celle de la méthode IB de Peskin [143] via le remplacement des fonctions delta par des fonctions noyaux lisses. Nous avons montré que l'utilisation des particules SPH fixes avec la méthode EPSPH est simple et efficace. Les résultats obtenus avec cette approche sont en très bon accord avec les solutions exactes et celles de Tan et al. [169]. L'utilisation des particules fixes a, comme nous l'avons vu, le grand avantage de donner des résultats plus précis que lorsque les particules SPH sont libres de se déplacer.

Nous nous sommes également servis de notre méthode SPH pour la simulation d'un écoulement confiné de solutions de polymères non dilués avec une interaction hydrodynamique totale et des forces d'exclusion de volume. Pour y parvenir, nous nous sommes servis d'un système couplé d'équations de Langevin pour les polymères et le solvant qui décrit la dynamique microscopique des polymères. Les macromolécules ont été représentées par des chaînes de bille-ressort. Afin d'éviter comme cela se fait très souvent dans la littérature le calcul des fonctions de Green pour la résolution de notre système couplé d'équations de Langevin, nous avons résolu les équations stochastiques pour les billes par une méthode semi-implicite prédicteur-correcteur à deux étapes afin d'avancer les vecteurs des segments des molécules pendant un pas de temps. Les équations de Navier-Stokes pour la vitesse du solvant et le champ de pression ont été résolues avec notre méthode EPSPH. À la section 4.4.1, nous avons calculé un tenseur de mobilité pour les billes des haltères périodiques suivant  $x$ , d'abord positionnées à mi-chemin entre les parois du canal et ensuite proches d'une des parois du canal. Une mesure du caractère symétrique défini-positif du tenseur

de mobilité a été calculée dans les deux cas. Les ordres de convergence à la fois de la pression et de la vitesse ont été testés à la section 4.4.1 pour une cellule périodique suivant  $x$  de forces singulières dans un canal infini. Dans une région délimitée loin de la singularité dans le domaine de calcul, nous avons observé que la convergence de la vitesse est d'ordre deux et celle de la pression est légèrement inférieure, mais en accord avec l'analyse de Guermond et al. [56]. Les calculs des écoulements dans un canal bi-dimensionnel d'un grand nombre (2500) d'haltères ont été présentés à la section 4.4.2 avec des nombres de Weissenberg de 20 et 30. Nous avons examiné la différence dans les distributions des centres de masse de ces deux cas à l'état final stationnaire. Effectuer les calculs avec une seule chaîne de bille-ressort constituée de 1000 billes avec les mêmes nombres de Weissenberg nous a permis de comparer (voir la section 4.4.2) les taux de migration. Nous avons observé que le coût de notre méthode est  $O(N)$  pour les calculs de la dynamique des chaînes de bille-ressort ayant  $N$  billes, pourvu que les forces d'exclusion de volume ne soient pas incluses (ou, uniquement mises à jour de manière occasionnelle lorsque cela est raisonnable) et que le nombre des points du maillage SPH soit ajusté de manière appropriée en fonction de  $N$ .

Enfin, nous nous sommes intéressés à une extension en dimension trois des calculs avec notre méthode SPH. Pour cela, nous avons effectué la résolution du problème de Poiseuille dans un canal tridimensionnel  $\Omega = \{(x, y, z) : x \in (-\infty, \infty), y \in (-\infty, \infty), z \in (0, H)\}$  d'épaisseur  $H$ . Nous avons obtenu des résultats qui sont en bon accord avec la solution exacte à tout moment lors de l'écoulement. Par la suite, nous nous sommes attardés sur la simulation d'un écoulement confiné de solutions de polymères non dilués avec une interaction hydrodynamique totale et des forces d'exclusion de volume dans ce canal infini tridimensionnel. Il est apparu que trois effets sont responsables de la répartition des haltères dans le canal au cours de l'écoulement. L'interaction hydrodynamique bille-paroi est responsable de la migration des haltères vers le centre

de l'écoulement. L'effet Segre-Silberberg est responsable de la migration des haltères vers la paroi du domaine de calcul. Et l'effet de diffusion lié aux fluctuations thermiques du solvant tend à rendre uniforme la distribution des haltères dans le canal. Lorsque l'effet de diffusion est faible, l'interaction hydrodynamique bille-paroi et l'effet Segre-Silberberg sont importants et sont responsables de la présence d'un grand nombre d'haltères dans une zone comprise entre la paroi et le centre de l'écoulement. On observe dans ce cas des pics très prononcés dans la distribution des centres de masse des haltères et une quasi-absence des haltères dans le centre de l'écoulement. À mesure que l'effet de diffusion devient important, la taille des pics diminue et les haltères tendent à être uniformément répartis dans le canal. Nous avons également résolu le problème de Poiseuille dans une conduite rectangulaire. Nous avons obtenu des résultats à l'état stationnaire qui sont en bon accord avec la solution exacte stationnaire de ce problème. Notre canal rectangulaire numérique a été utilisé par Morgane Henry [58] pour simuler la dynamique des membranes immergées dans un fluide soumis à un gradient de pression. Son modèle a été testé avec les membranes modélisées par des tétraèdres et des sphères.

## 6.2 Recherche future

Le travail présenté dans cette thèse a permis de poser les bases de plusieurs activités de recherche qui peuvent être menées afin de faire bénéficier la communauté scientifique des résultats éventuels qui peuvent en résulter. Nous présentons quelques pistes de recherche qui peuvent être explorées afin de faire avancer le travail que nous avons présenté ici.

Dans le souci de s'attaquer à un problème de société dû à plusieurs maladies d'origine sanguine et cardiovasculaire, il est souhaitable de modifier la loi constitutive de la membrane Hookéenne que nous avons étudiée dans le chapitre

2 afin qu'elle puisse représenter de manière plus réaliste le globule rouge du sang pour en étudier son comportement. En effet, parce que les globules rouges sont présents dans le sang en très grande proportion (environ 98 pour cent), comparativement aux autres cellules (globules blancs et plaquettes), les propriétés mécanique, du sang sont essentiellement déterminées par la conformation et le comportement des érythrocytes lorsque le sang est soumis à différents taux de cisaillement. Un tel travail permettrait d'étudier attentivement la dynamique des globules rouges dans les petits vaisseaux sanguins (capillaires), car le comportement individuel des globules rouges dans les petits vaisseaux sanguins a une grande influence sur toute la dynamique cardiovasculaire du corps humain.

Par ailleurs, le travail amorcé dans le chapitre 5 avec les calculs en dimension trois, peut être davantage étendu. Les polymères dont nous avons présenté les résultats de l'étude dynamique sont uniquement des haltères. Nous sommes présentement en train de travailler sur la dynamique des chaînes non-diluées de bille-ressort dans un solvant soumis à un gradient de pression dans un canal tridimensionnel infini. Nous espérons pouvoir présenter sous peu, les résultats de ce travail à la communauté scientifique. Il serait également intéressant d'appliquer notre modèle à l'étude du comportement des polymères dans un conduit rectangulaire infiniment long, de comparer les résultats non seulement avec ceux que nous avons obtenus avec les polymères confinés entre deux plaques infiniment étendues, mais aussi avec ceux qui existent dans la littérature.

D'autre part, il serait important d'appliquer notre modèle SPH à la résolution du problème d'Hagen-Poiseuille simple dans un canal cylindrique tridimensionnel. Ce canal cylindrique numérique pourrait ensuite servir à étudier la dynamique des particules de diverses natures (globules rouges, molécules, etc) en suspension. De plus, notre modèle SPH peut également être appliqué à d'autres branches de la physique comme la mécanique des solides.

Rendu au terme du travail présenté dans cette thèse, nous croyons avoir ap-

porté une modeste contribution à la tâche pleine de voies à explorer de la simulation de la dynamique des fluides incompressibles qui interagissent avec des corps immergés.



# Bibliographie

- [1] D. J. Acheson. *Elementary Fluid Dynamics*. Oxford University Press, Oxford, 2005.
- [2] P. Ahlrichs and B. Dünweg. Simulation of a single polymer chain in solution by combining lattice Boltzmann and molecular dynamics. *J. Chem. Phys.*, 111 :8225–8239, 1999.
- [3] J. Anderson, G. Degrez, J. Degroote, E. Dick, R. Grundmann, and J. Vierendeels. *Computational Fluid Dynamics : An Introduction*. Springer, Berlin, 2009.
- [4] A. W. Appel. An efficient program for many-body simulation. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 6 :85–103, 1985.
- [5] R. Ata and A. Soulaïmani. A stabilized SPH method for inviscid shallow water flows. *Int. J. Numer. Meth. Fl.*, 47 :139–159, 2005.
- [6] B. Ataie-Ashtiani, G. Shobeyri, and L. Farhadi. Modified incompressible SPH method for simulating free surface problems. *Fluid Dyn. Res.*, 40 :637–661, 2008.
- [7] P. J. Atzberger. A note on the correspondence of an immersed boundary method incorporating thermal fluctuations with Stokesian-Brownian dynamics. *Physica D*, 226 :144–150, 2007.

- [8] P. J. Atzberger, P. R. Kramer, and C. S. Peskin. A stochastic immersed boundary method for fluid-structure dynamics at microscopic length scales. *J. Comput. Phys.*, 224 :1255–1292, 2007.
- [9] J. E. Barnes. A modified tree code : Don't laugh ; it runs. *J. Comput. Phys.*, 87 :161–170, 1990.
- [10] J. E. Barnes and P. Hut. A hierachical  $O(N\log N)$  force-calculation algorithm. *Nature*, 324 :446–449, 1986.
- [11] G. K. Batchelor. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1967.
- [12] T. Belytschko, Y. Krongauz, D. Organ, M. Fleming, and P. Krysl. Meshless methods : an overview and recents developments. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 139 :4681–4696, 1996.
- [13] A. A. Bhagat, S. S. Kuntaegowdanahalli, and I. Papautsky. Inertial microfluidics for continuous particle filtration and extraction. *Microfluid Nano-fluid*, 7 :217–226, 2009.
- [14] F. Bierbrauer. Private communication. 2011.
- [15] F. Bierbrauer, P. C. Bollada, and T. N. Phillips. A consistent reflected image particle approach to the treatment of boundary conditions in smoothed particle hydrodynamics. *Comput. Meth. Appl. Mech.*, 198 :3400–3410, 2009.
- [16] R. B. Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong, and O. Hassager. *Dynamics of Polymeric Liquids. Volume 2. Kinetic Theory (Second Edition)*. John Wiley & Sons, New York, 1987.
- [17] J. R. Blake. A note on the image system for a Stokeslet in a no-slip boundary. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 70 :303–310, 1971.

- [18] D. L. Brown, R. Cortez, and M. L. Minion. Accurate projection methods for incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 168 :464–499, 2001.
- [19] A. K. Chaniotis, D. Poulikakos, and P. Koumoutsakos. Remeshed smoothed particle hydrodynamics for the simulation of viscous and heat conducting flows. *J. Comput. Phys.*, 182 :67–90, 2002.
- [20] J. M. Charrier, S. Shrivastava, and R. Wu. Free and constrained inflation of elastic membranes in relation to thermoforming - non-axisymmetric problems. *J. Strain Anal. Eng.*, 22 :115–125, 1987.
- [21] Y. L. Chen, H. Ma, M. D. Graham, and J. J. de Pablo. Modeling DNA in confinement : A comparison between the Brownian dynamics and lattice Boltzmann method. *Macromolecules*, 40 :5978–5984, 2007.
- [22] A. J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comput.*, 22 :745–762, 1968.
- [23] P. W. Cleary and J. Ha. Three-dimensional smoothed particle hydrodynamics simulation of high pressure die casting of light metal components. *J. Light Met.*, 2 :169–183, 2002.
- [24] P. W. Cleary, M. Prakash, J. Ha, N. Stokes, and C. Scott. Smooth particle hydrodynamics : status and future potential. *Prog. Comput. Fluid Dyn.*, 7 :70–90, 2007.
- [25] A. Colagrossi and M. Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 191 :448–475, 2003.
- [26] F. Colin, R. Egli, and F. Y. Lin. Computing a null divergence velocity field using smoothed particle hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, 217 :580–692, 2006.

- [27] M. Conti. *Une nouvelle implémentation de la méthode IIM pour les équations de Navier-Stokes avec la présence d'une force singulière*. Mémoire de Maîtrise, Université de Montréal, Montréal, Canada, 2008.
- [28] R. Cortez. The method of regularized Stokeslets. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23 :1204–1225, 2001.
- [29] R. Cortez, N. Cowen, R. Dillon, and L. J. Fauci. Simulation of swimming organisms : Coupling internal mechanics with external fluid dynamics. *Comput. Sci. Eng.*, 6 :38–45, 2004.
- [30] A. J. C. Crespo, M. Gómez-Gesteira, and R. A. Dalrymple. 3D SPH Simulation of large waves mitigation with a dike. *J. Hydraul. Res.*, 55 :631–642, 2007.
- [31] A. J. C. Crespo, M. Gómez-Gesteira, and R. A. Dalrymple. Boundary conditions generated by dynamic particles in SPH methods. *CMC-Comput. Mater. Con.*, 5 :173–184, 2007.
- [32] S. J. Cummins and M. Rudman. An SPH projection method. *J. Comput. Phys.*, 152 :584–607, 1999.
- [33] S. Danioko and M. Laradji. Tumbling, stretching and cross-stream migration of polymers in rectilinear shear flow from dissipative particle simulations. *Physica A*, 391 :3379–3391, 2012.
- [34] R. Das and P. W. Cleary. Effect of rock shapes on brittle fracture using smoothed particle hydrodynamics. *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 53 :47–60, 2010.
- [35] B. Dünweg and A. J. C. Ladd. Lattice Boltzmann simulations of soft matter systems. *Adv. Polym. Sci.*, 221 :89–166, 2009.

- [36] C. D. Eggleton and A. S. Popel. Large deformation of red blood cell ghosts in a simple shear flow. *Phys. Fluids*, 10 :1834–1845, 1998.
- [37] M. Ellero and N. A. Adams. SPH simulations of flow around a periodic array of cylinders confined in a channel. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 86 :1027–1040, 2011.
- [38] M. Ellero, M. Kröger, and S. Hess. Viscoelastic flows studied by smoothed particle hydrodynamics. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 105 :35–51, 2002.
- [39] D. L. Ermak and J. A. McCammon. Brownian dynamics with hydrodynamic interactions. *J. Chem. Phys.*, 69 :1352–1360, 1978.
- [40] P. Espanol. Hydrodynamics from dissipative particle dynamics. *Phys. Rev. E*, 52 :1734–1742, 1995.
- [41] P. Espanol. Fluid particle model. *Phys. Rev. E*, 57 :2930–2948, 1998.
- [42] P. Espanol and P. Warren. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics. *Europhys. Lett.*, 30 :191–196, 1995.
- [43] J. Fang and R. G. Owens. Numerical simulations of pulsatile blood flow using a new constitutive model. *Biorheology*, 43 :637–660, 2006.
- [44] J. Fang, R. G. Owens, L. Tacher, and A. Parriaux. A numerical study of the SPH method for simulating transient viscoelastic free surface flows. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 139 :68–84, 2006.
- [45] H. Faxén. Forces exerted on a rigid cylinder in a viscous fluid between two parallel fixed planes. *Proc. Roy. Swed. Acad. Eng. Sc.*, 187 :1–13, 1946.
- [46] D. A. Fedosov, G. E. Karniadakis, and B. Caswell. Dissipative particle dynamics simulation of depletion layer and polymer migration in micro- and

- nanochannels for dilute polymer solutions. *J. Chem. Phys.*, 128 :144903–1–144903–14, 2008.
- [47] A. Ferrari, M. Dumbser, E. F. Toro, and A. Armanini. A new 3D parallel SPH scheme for free surface flows. *Comput. Fluids*, 38 :1203–1217, 2009.
- [48] M. Fixman. Simulation of polymer dynamics. 1. General theory. *J. Comput. Phys.*, 69 :1527–1537, 1978.
- [49] M. Fixman. Construction of Langevin forces in the simulation of hydrodynamic interaction. *Macromolecules*, 19 :1204–1207, 1986.
- [50] A. L. Fogelson. A mathematical model and numerical methods for studying platelet adhesion and aggregation during blood clotting. *J. Comput. Phys.*, 56 :111–134, 1984.
- [51] R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck. Contributions to non-equilibrium thermodynamics. I. Theory of hydrodynamical fluctuations. *Phys. Fluids*, 13 :1893–1902, 1970.
- [52] D. A. Fulk and D. W. Quinn. An analysis of 1-D smoothed particle hydrodynamics kernels. *J. Comput. Phys.*, 126 :165–180, 1996.
- [53] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 181 :375–380, 1977.
- [54] Z.-X. Gong, C.-J. Lu, and H.-X. Huang. Accuracy analysis of immersed boundary method using method of manufactured solutions. *Appl. Math. Mech.*, 31 :1197–1208, 2010.
- [55] M. D. Graham. Fluid dynamics of dissolved polymer molecules in confined geometries. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 43 :273–298, 2011.

- [56] J. L. Guermond, P. Mineev, and J. Shen. An overview of projection methods for incompressible flows. *Comput. Meth. Appl. Mech.*, 195 :6011–6045, 2006.
- [57] Y. D. Ha and S. Cho. Efficient design sensitivity analysis of incompressible fluids using SPH projection method. *Struct. Multidisc. Optim.*, 40 :307–318, 2010.
- [58] M. Henry. *Simulation numérique d'un écoulement fluide avec des membranes immergées*. Mémoire de Maîtrise, Université de Haute-Alsace, Mulhouse et Colmar, France, 2012.
- [59] J. P. Hernández-Ortiz, H. Ma, J. P. Pablo, and M. D. Graham. Concentration distributions during flow of confined flowing polymer solutions at finite concentration : slit and grooved channel. *Korea-Aust. Rheol. J.*, 20 :143–152, 2008.
- [60] J. P. Hernández-Ortiz, J. P. Pablo, and M. D. Graham. NlogN method for hydrodynamic interactions of confined polymer systems : Brownian dynamics. *J. Chem. Phys.*, 125 :164906–1–164906–15, 2006.
- [61] J. P. Hernández-Ortiz, J. P. Pablo, and M. D. Graham. Fast computation of many-particle hydrodynamic and electrostatic interactions in a confined geometry. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :140602–1–140602–4, 2007.
- [62] L. Hernquist and N. Katz. Treeshph : A unification of SPH with the hierarchical tree method. *Astrophys. J. Suppl. S.*, 70 :419–446, 1989.
- [63] M. Hopkins and L. J. Fauci. A computational model of the collective fluid dynamics of mobile microorganisms. *J. Fluid Mech.*, 455 :149–174, 2002.
- [64] S. M. Hosseini and J. J. Feng. A particle-based model for the transport of erythrocytes in capillaries. *Chem. Eng. Sci.*, 64 :4488–4497, 2009.

- [65] S. M. Hosseini and J. J. Feng. Pressure boundary conditions for computing incompressible flows with SPH. *J. Comput. Phys.*, 230 :7473–7487, 2011.
- [66] C.-C. Hsieh and R. G. Larson. Modeling hydrodynamic interaction in Brownian dynamics : Simulations of extensional and shear flows of dilute solutions of high molecular weight polystyrene. *J. Rheol.*, 40 :995–1021, 2004.
- [67] C.-C. Hsieh, L. Li, and R. G. Larson. Modeling hydrodynamic interaction in Brownian dynamics : simulations of extensional flows of dilute solutions of DNA and polystyrene. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 113 :4488–4497, 2003.
- [68] X. Y. Hu and N. A. Adams. A multi-phase SPH method for macroscopic and mesoscopic flows. *J. Comput. Phys.*, 213 :844–861, 2006.
- [69] X. Y. Hu and N. A. Adams. An incompressible multi-phase SPH method. *J. Comput. Phys.*, 227 :264–278, 2007.
- [70] X. Y. Hu and N. A. Adams. A constant-density approach for incompressible multi-phase SPH. *J. Comput. Phys.*, 228 :2082–2091, 2009.
- [71] S. D. Hudson. Wall migration and shear-induced diffusion of fluid droplets in emulsions. *Phys. Fluids*, 15 :1106–1113, 2003.
- [72] T. Hughes and J. Marsden. *A Short Course in Fluid Mechanics*. Publish or Perish Inc., Berkeley, 1976.
- [73] S. R. Idelsohn and E. Onate. To mesh or not to mesh. That is the question... *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195 :4681–4696, 2006.
- [74] R. M. Jendrejack, M. D. Graham, and J. J. de Pablo. Hydrodynamic interactions in long chain polymers : Application of the chebyshev polynomial

- approximation in stochastic simulations. *J. Chem. Phys.*, 113 :2894–2900, 2000.
- [75] R. M. Jendrejack, J. J. De Pablo, and M. D. Graham. Stochastic simulations of DNA in flow : Dynamics and the effects of hydrodynamic interactions. *J. Chem. Phys.*, 116 :7752–7759, 2002.
- [76] R. M. Jendrejack, D. C. Schwartz, J. J. de Pablo, and M. D. Graham. Shear-induced migration in flowing polymer solutions : Simulation of long-chain DNA in microchannels. *J. Chem. Phys.*, 120 :2513–2529, 2004.
- [77] R. M. Jendrejack, D. C. Schwartz, M. D. Graham, and J. J. de Pablo. Effect of confinement on DNA dynamics in microfluidic devices. *J. Chem. Phys.*, 119 :1165–1173, 2003.
- [78] C. E. Rhoades Jr. A fast algorithm for calculating particles interactions in smoothed particle hydrodynamic simulations. *Comput. Phys. Commun.*, 70 :478–482, 1992.
- [79] D. F. Katz, J. R. Blake, and S. L. Paveri-Fontana. On the movement of slender bodies near plane boundaries at low Reynolds number. *J. Fluid Mech.*, 72 :529–540, 1975.
- [80] R. Kekre, J. E. Butler, and A. J. C. Ladd. Comparison of lattice-Boltzmann and Brownian-dynamics simulations of polymer migration in confined flows. *Phys. Rev. E*, 82 :011802–1–011802–7, 2010.
- [81] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 59 :308–323, 1985.
- [82] J. G. Kirkwood. The general theory of irreversible processes in solutions of macromolecules. *J. Chem. Phys.*, 16 :565–573, 1948.

- [83] J. G. Kirkwood and J. Riseman. The intrinsic viscosities and diffusion constants of flexible macromolecules in solution. *J. Polym. Sci.*, 12 :1–14, 1954.
- [84] P. R. Kramer, C. S. Peskin, and P. J. Atzberger. On the foundations of the stochastic immersed boundary method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 197 :2232–2249, 2008.
- [85] M. Kröger, A. Alba-Pérez, and H. C. Öttinger. Variance reduced Brownian simulation of a bead-spring chain under steady shear flow considering hydrodynamic interaction effects. *J. Chem. Phys.*, 113 :4767–4773, 2000.
- [86] A. J. C. Ladd. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann-equation. 1. Theoretical foundation. *J. Fluid Mech.*, 271 :285–309, 1994.
- [87] A. J. C. Ladd, R. Kekre, and J. E. Butler. Comparison of the static and dynamic properties of a semiflexible polymer using lattice Boltzmann and Brownian-dynamics simulations. *Phys. Rev. E*, 80 :036704–1–036704–10, 2009.
- [88] O. A. Ladyzhenskaya. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*. Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1969.
- [89] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon Press, London, 1959.
- [90] P. D. Lax. The flowering of applied mathematics in America. Reprinted from *a century of mathematics, part ii*, 455–466, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1989. *J-Siam-Review*, 31 :533–541, 1989.

- [91] A. T. Layton. An efficient numerical method for the two-fluid Stokes equations with moving immersed boundary. *Comput. Meth. Appl. Mech.*, 197 :2147–2155, 2008.
- [92] E.S. Lee, C. Moulinec, R. Xu, D. Violeau, D. Laurence, and P. Stansby. Comparisons of weakly compressible and truly incompressible algorithms for the SPH mesh free particle method. *J. Comput. Phys.*, 227 :8417–8436, 2008.
- [93] L. Lee and R. J. Leveque. An immersed interface method for incompressible Navier-Stokes equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25 :832–856, 2003.
- [94] R. J. Leveque and Z. Li. Immersed interface methods for Stokes flow with elastic boundaries or surface tension. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25(3) :709–735, 1997.
- [95] S. Li and W. K. Liu. Meshfree and particle methods and their applications. *App. Mech. Rev.*, 55 :1–34, 2002.
- [96] Z. Li and K. Ito. *The Immersed Interface Method : Numerical Solutions of PDEs Involving Interfaces and Irregular Domains*. SIAM Frontiers in Applied Mathematics, Philadelphia, 2006.
- [97] Z. Li and M.-C. Lai. The immersed interface method for the Navier-Stokes equations with singular forces. *J. Comput. Phys.*, 171 :822–842, 2001.
- [98] S. J. Lind, R. Xu, P. K. Stansby, and B. D. Rogers. Incompressible smoothed particle hydrodynamics for free-surface flows : A generalized diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves. *J. Comput. Phys.*, 231 :1499–1523, 2012.
- [99] N. Liron and S. Mochon. Stokes flow for a Stokeslet between two parallel plates. *J. Engineering Math.*, 10 :287–303, 1976.

- [100] N. Liron and R. Shahar. Stokes flow due to a Stokeslet in a pipe. *J. Fluid Mech.*, 86 :727–744, 1978.
- [101] G. R. Liu. *Meshfree Methods : Moving Beyond The Finite Element*. CRC Press, Boca Raton, 2002.
- [102] G. R. Liu and Y. T. Gu. *An introduction to meshfree methods and their programming*. Springer, Dordrecht, 2005.
- [103] G. R. Liu and M. B. Liu. *Smoothed Particle Hydrodynamics. A Meshfree Particle Method*. World Scientific, Singapore, 2003.
- [104] G. R. Liu and S. S. Quek. *The finite element method : a practical course*. Butterworth Herinemann, Oxford, 2003.
- [105] G. R. Liu and Z. H. Tu. An adaptive procedure based on background cells for meshless methods. *Comput. Method Appl. M.*, 191 :1923–1943, 2002.
- [106] M. B. Liu and G. R. Liu. Smoothed particle hydrodynamics (SPH) : an overview and recent developments. *Arch. Comput. Method. Eng.*, 17 :25–76, 2010.
- [107] M. B. Liu, G. R. Liu, and K. Y. Lam. Constructing smoothing functions in smoothed particle hydrodynamics with applications. *J. Comput. Appl. Math.*, 155 :263–284, 2003.
- [108] M. B. Liu, G. R. Liu, K. Y. Lam, and Z. Zong. Smoothed particle hydrodynamics for numerical simulation of underwater explosion. *Comput. Mech.*, 30 :106–118, 2003.
- [109] E. Y. M. Lo and S. Shao. Simulation of near-shore solitary wave mechanics by an incompressible SPH method. *Appl. Ocean Res.*, 24 :275–286, 2002.

- [110] A. Lozinski and R. G. Owens. Some remarks on the equivalence of Kirkwood's diffusion equation and the coupled fluctuating polymer and solvent kinetic equations of Oono and Freed. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 166 :1297–1303, 2011.
- [111] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. J.*, 88 :1013–1024, 1977.
- [112] G. W. Ma, X. J. Wang, and Q. M. Li. Modeling strain rate effect of heterogeneous materials using SPH method. *Rock Mech. Rock Eng.*, 43 :763–776, 2010.
- [113] H. Ma and M. D. Graham. Theory of shear-induced migration in dilute polymer solutions near solid boundaries. *Phys. Fluids*, 17 :083103–1–083103–13, 2005.
- [114] J. Makino. Comparison of two different tree algorithms. *J. Comput. Phys.*, 88 :393–408, 1990.
- [115] J. Makino. Vectorization of a treecode. *J. Comput. Phys.*, 87 :148–160, 1990.
- [116] J. S. Meisner, D. M. McQueen, Y. Ishida, H. O. Vetter, U. Bortolotti, J. A. Strom, R. W. M. Frater, C. S. Peskin, and E. L. Yellin. Effects of timing of atrial systole on LV filling and mitral valve closure : Computer and dog studies. *Amer. J. Physiol.*, 249 :H604 – H619, 1985.
- [117] L. A. Miller and C. S. Peskin. When vortices stick : an aerodynamic transition in tiny insects. *J. Exp. Biol.*, 207 :3073–3088, 2004.
- [118] L. A. Miller and C. S. Peskin. A computational fluid dynamics of 'clap and fling' in small insects. *J. Exp. Biol.*, 208 :195–212, 2005.

## Bibliographie

---

- [119] J. J. Monaghan. Particle methods for hydrodynamics. *Comput. Phys. Rep.*, 3 :71–124, 1985.
- [120] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annu. Rev. Astron. Astr.*, 30 :543–574, 1992.
- [121] J. J. Monaghan. Simulating free surface flows with SPH. *J. Comput. Phys.*, 110 :399–406, 1994.
- [122] J. J. Monaghan. SPH without a tensile instability. *J. Comput. Phys.*, 159 :290–311, 2000.
- [123] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Rep. Prog. Phys.*, 68 :1703–1759, 2005.
- [124] J. J. Monaghan and A. Kocharyan. SPH simulation of multi-phase flow. *Comput. Phys. Commun.*, 87 :225–235, 1995.
- [125] J. J. Monaghan and A. Kos. Solitary waves on a Cretan beach. *J. Waterw. Port. C.-ASCE*, 125(3) :145–154, 1999.
- [126] J. J. Monaghan, A. Kos, and N. Issa. Fluid motion generated by impact. *J. Waterw. Port. C.-ASCE*, 6 :250–259, 2003.
- [127] J. J. Monaghan, A. Kos, and N. Issa. Smoothed particle hydrodynamics. *J. Waterw. Port. C.-ASCE*, 129 :250–259, 2003.
- [128] A. Moore. *Efficient memory-based for robot control*. PhD thesis, Computer Laboratory, University of Cambridge, Cambridge, 1990.
- [129] J. P. Morris, P. J. Fox, and Yi Zhu. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *Rep. Prog. Phys.*, 68 :1703–1759, 2005.

- [130] P. J. Mucha, S.-Y. Tee, D. A. Weitz, B. I. Shraiman, and M. P. Brenner. A model for velocity fluctuations in sedimentation. *J. Fluid Mech.*, 501 :71–104, 2004.
- [131] R. W. Nash. *Efficient lattice Boltzmann simulations of self-propelled particles with singular forces*. PhD thesis, University of Edinburgh, Edinburgh, 2010.
- [132] R. Nestor, M. Basa, and N. Quinlan. Moving boundary problems in the finite volume particle method. pages 109–114, Lausanne, Switzerland, 2008. Proceedings of the ERCOFTAC SIG SPHERIC IIIrd International Workshop.
- [133] V.P. Nguyena, T. Rabczuk, S. Bordas, and M. Duflot. Meshless methods : A review and computer implementation aspects. *Math. Comput. Simul.*, 79 :763–813, 2008.
- [134] R. K. Noutcheuwa and R. G. Owens. A mixed Brownian dynamics - SPH method for the simulation of flows of suspensions of bead-spring chains in confined geometries with hydrodynamic interaction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 166 :1327–1346, 2011.
- [135] G. Oger, M. Doring, B. Alessandrini, and P. Ferrant. An improved SPH method : Towards higher order convergence. *J. Comput. Phys.*, 225 :1472–1492, 2007.
- [136] M. S. Olufsen, C. S. Peskin, W. Y. Kim, E. M. Pedersen, A. Nadim, and J. Larsen. Numerical and experimental validation of blood flow in arteries with structured-tree outflow conditions. *Ann. Biomed. Eng.*, 28 :1281–1299, 2000.
- [137] Y. Oono and K. F. Freed. Conformation space renormalization of poly-

- mers. II. Single chain dynamics based on chain diffusion equation model. *J. Comput. Phys.*, 75 :1009–1015, 1981.
- [138] H. C. Ottinger. *Stochastic Processes in Polymeric Fluids. Tools and Examples for Developing Simulation Algorithms*. Springer-Verlag, 1996.
- [139] H. C. Ottinger and Y. Rabin. Diffusion equation versus coupled langevin equations approach to hydrodynamics of dilute polymer solutions. *J. Rheol.*, 33 :725–743, 1989.
- [140] J. J. De Pablo, H. C. Öttinger, and Y. Rabin. Hydrodynamic changes of the depletion layer of dilute polymer solutions near a wall. *AIChE J.*, 38 :273–283, 1992.
- [141] C. S. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *J. Comput. Phys.*, 25 :220–252, 1977.
- [142] C. S. Peskin. The fluid dynamics of heart valves : Experimental, theoretical, and computational methods. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 14 :235–259, 1982.
- [143] C. S. Peskin. The immersed boundary method. *Acta Numerica*, 11 :479–517, 2002.
- [144] C. S. Peskin and B. F. Printz. Improved volume conservation in the computation of flows in the immersed elastic boundaries. *J. Comput. Phys.*, 105 :33–46, 1993.
- [145] T. N. Phillips and R. G. Owens. *Computational Rheology*. Imperial College Press, London, 2002.
- [146] C. Pozrikidis. *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow*. Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, New York, 1992.

- [147] C. Pozrikidis. Computation of periodic Green's functions of Stokes flow. *J. Eng. Math.*, 30 :79–96, 1996.
- [148] P. Pranay, S. A. Anekal, J. P. Hernandez-Ortiz, and M. D. Graham. Pair collisions of fluid-filled elastic capsules in shear flow : Effects of membrane properties and polymer additives. *Phys. Fluids*, 22 :123103–1–123103–17, 2010.
- [149] F. P. Preparata and M. I. Shamos. *Computational Geometry : An Introduction*. Springer-Verlag, New York, 1985.
- [150] N. J. Quinlan, M. Basa, and M. Lastiwka. Truncation error in mesh-free methods. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 66 :2064–2085, 2006.
- [151] Y. Rabin. Macroscopic hydrodynamics of dilute polymer solutions. *Europhys. Lett.*, 7 :25–29, 1988.
- [152] P. W. Randles and L. D. Libersky. Smoothed particle hydrodynamics some recent improvements and applications. *Comput. Meth. Appl. Mech.*, 138 :375–408, 1996.
- [153] F. A. Rasio. Particle methods in astrophysical fluid dynamics. *Prog. Theor. Phys. Supp.*, 138 :609–621, 2000.
- [154] A. B. Richou, A. Ambari, and J. K. Naciri. Drag force on a circular cylinder midway between two parallel plates at very low Reynolds numbers - part 1 : Poiseuille flow (numerical). *Chem. Engrg. Sci.*, 59 :3215–3222, 2004.
- [155] J. Rotne and S. Prager. Variational treatment of hydrodynamic interaction in polymers. *J. Chem. Phys.*, 50 :4831–4837, 1969.
- [156] G. Segre and A. Silberberg. Radial particle displacements in Poiseuille flow of suspensions. *Nature*, 189 :209–210, 1961.

- [157] G. Segre and A. Silberberg. Behavior of macroscopic rigid spheres in Poiseuille flow. *J. Fluid Mech*, 14 :136–157, 1962.
- [158] M. S. Shadloo, A. Zainali, S. H. Sadek, and Mehmet Yildiz. Improved incompressible smoothed particle hydrodynamics method for simulating flow around bluff bodies. *Comput. Meth. Appl. Mech.*, 200 :1008–1020, 2011.
- [159] S. Shao and E. Y. M. Lo. Incompressible SPH method for simulating Newtonian and non-Newtonian flows with a free surface. *Adv. Water Resour.*, 26 :787–800, 2003.
- [160] E. J. Shaughnessy, I. M. Katz, and J. P. Schaffer. *Introduction To Fluid Mechanics*. Oxford University Press, Oxford, 2005.
- [161] W. Shyy and R. Mittal. Solution methods for the incompressible Navier-Stokes equations. In Richard W. Johnson, editor, *The Handbook of Fluid Dynamics*, pages 1–33. CRC Press LLC, Boca Raton, 1998.
- [162] L. Di G. Sigalotti, J. Klapp, E. Sira, Y. Melean, and A. Hasmy. SPH simulations of time-dependent Poiseuille flow at low Reynolds numbers. *J. Comput. Phys.*, 191 :622–638, 2003.
- [163] R. Skalak, A. Tozeren, R. P. Zarda, and S. Chien. Strain energy function of red blood-cell membranes. *Biophys. J.*, 13 :245–264, 1973.
- [164] M. Somasi, B. Khomami, N. J. Woo, J. S. Hur, and E. S. G. Shaqfeh. Brownian dynamics simulations of bead-rod and bead-spring chains : numerical algorithms and coarse-graining issues. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 108 :227–255, 2002.
- [165] B. N. Steel, J. Wan, J. P. Ku, T. J. R. Hughes, and C. A. Taylor. In vivo validation of one-dimensional finite element method for predicting blood

- flow in cardiovascular bypass grafts. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 50 :649–656, 2003.
- [166] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, and 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. *J. Chem. Phys.*, 76 :637–649, 1983.
- [167] Y. Takaisi. The forces on a circular cylinder moving with low speeds in a semi-infinite viscous liquid bounded by a plane wall. *J. Physical Soc. Japan*, 10 :1407–415, 1955.
- [168] H. Takeda, S. M. Miyama, and M. Sekiya. Numerical simulation of viscous flow by smoothed particle hydrodynamics. *Prog. Theor. Phys.*, 92 :939–960, 1994.
- [169] Z. Tan, D.V. Le, Z. Li, K. M. Lim, and B. C. Khoo. An immersed interface method for solving incompressible viscous flows with piecewise constant viscosity across a moving elastic membrane. *J. Comput. Phys.*, 227 :9955–9983, 2008.
- [170] N. Tanaka and T. Takano. Microscopic-scale simulation of blood flow using SPH method. *Int. J. Comput. Meth.*, 2 :558–568, 2005.
- [171] C. A. Taylor and M. T. Draney. Experimental and computational methods in cardiovascular fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 36 :197–231, 2004.
- [172] C. A. Taylor, T. J. R. Hughes, and C. K. Zarius. Finite element of blood flow in arteries. *Comput. Method Appl. M.*, 158 :155–196, 1998.

- [173] L. J. P. Timmermans, P. D. Mineev, and F. N. van de Vosse. An approximate projection scheme for incompressible flow using spectral elements. *Int. J. Numer. Meth. Fl.*, 22 :673–688, 1996.
- [174] A.-K. Tornberg and B. Engquist. Numerical approximations of singular source terms in differential equations. *J. Comput. Phys.*, 200 :462–488, 2004.
- [175] L. N. Trefethen and D. Bau III. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, Philadelphia, 1997.
- [176] K. Tsubota, S. Wada, and T. Yamaguchi. Particle method for computer simulation of red blood cell motion in blood flow. *Comput. Meth. Prog. Bio.*, 83 :139–146, 2006.
- [177] K. Tsubota, S. Wada, and T. Yamaguchi. Simulation study on effects of hematocrit on blood flow properties using particle method. *J. Biomech. Sci. Eng.*, 1 :159–170, 2006.
- [178] C. Tu and C. Peskin. Stability and instability in the computation of flows with moving immersed boundaries : A comparison of three methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, 13 :1361–1376, 1992.
- [179] O. B. Usta, J. E. Butler, and A. J. C. Ladd. Flow-induced migration of polymers in dilute solution. *Phys. Fluids*, 18 :031703–1–031703–4, 2006.
- [180] O. B. Usta, A. J. C. Ladd, and J. E. Butler. Lattice-Boltzmann simulations of the dynamics of polymer solutions in periodic and confined geometries. *J. Chem. Phys.*, 122 :094902–1–094902–11, 2005.
- [181] S. Viau, P. Bastien, and S-H. Cha. An implicit method for radiative transfert with diffusion approximation in smooth particle hydrodynamics. *The Astrophysical Journal*, 639 :559–570, 2006.

- [182] G. Viccione, V. Bovolin, and E. P. Caratelli. A fast neighbour-search algorithm for free surface flow simulations using sph. In *ECCOMAS Thematic Conference on Computational Methods in Structural*, pages 13–16, Rethymno, Crete, Greece, 2007.
- [183] N. T. Wang and A. L. Fogelson. Computational methods or continuum models of platelet aggregation. *J. Comput. Phys.*, 151 :649–675, 1999.
- [184] R. Xu, P. Stansby, and D. Laurence. Accuracy and stability in incompressible SPH (ISPH) based on the projection method and a new approach. *J. Comput. Phys.*, 228 :6703–6725, 2009.
- [185] H. Yamakawa. Transport properties of polymer chains in dilute solution : hydrodynamic interaction. *J. Comput. Phys.*, 53 :436–443, 1970.
- [186] M. Zhang. Simulation of surface tension in 2D and 3D with smoothed particle hydrodynamics method. *J. Comput. Phys.*, 229 :7238–7259, 2010.
- [187] J. Zheng, M. M. Soe, C. Zhang, and T. Hsu. Numerical wave flume with improved smoothed particle hydrodynamics. *J. Hydrodyn.*, 22 :773–781, 2010.
- [188] L. Zhu and C. S. Peskin. Simulation of a flexible flapping filament in a flowing soap film by the immersed boundary method. *J. Comput. Phys.*, 179 :452–468, 2002.
- [189] O. C. Zienkiewicz and R. L. Taylor. *The Finite Element Method*. Butterworth Herinemann, Oxford, 2000.