

Modèles micro-macro pour les fluides

Nous abordons dans ce chapitre un autre genre de problème multiéchelle. Il s'agit de la modélisation des fluides polymériques. Ces fluides sont des solutions diluées de polymères (penser à de la colle à papier-peint,...) dont les propriétés mécaniques à l'échelle macroscopique dépendent crucialement de la microstructure du fluide à l'échelle microscopique. Pour de tels fluides, il est très difficile de faire une modélisation purement macroscopique, et il faut gérer une modélisation conjointe aux deux échelles. La simulation qui s'ensuit est dans l'esprit de celle du Chapitre 1, mais il s'agit cette fois de problèmes dépendant du temps (les problèmes stationnaires dans ce cadre n'ont guère de sens), et de fluides au lieu de solides.

4.1 Eléments de mécanique des fluides incompressibles

Nous commençons par quelques éléments de base sur la modélisation des fluides incompressibles en termes de mécanique des milieux continus, et sur leur simulation numérique. Cela nous permettra de souligner ensuite les différences avec les modélisations micro-macro que nous développerons.

Considérons un fluide visqueux de masse volumique ρ et de vitesse \mathbf{u} , soumis à une densité volumique de forces extérieures \mathbf{f} . Soit \mathbf{T} le tenseur des contraintes.

L'équation de conservation de la masse pour ce fluide s'écrit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (4.1)$$

Quant à la conservation de la quantité de mouvement, elle s'écrit

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \operatorname{div} \mathbf{T} = \rho \mathbf{f} \quad (4.2)$$

Pour un fluide visqueux, le tenseur des contraintes s'exprime comme

$$T = -p Id + \tau, \quad (4.3)$$

où p est la pression et τ le tenseur des contraintes visqueuses. Pour fermer ces équations, il nous faut une relation constitutive liant le tenseur des contraintes visqueuses τ et le champ de vitesse u , c'est-à-dire une relation

$$\tau = \tau(\mathbf{u}, \rho, \dots). \quad (4.4)$$

Remarque 4.1. Bien noter que cette relation est symbolique, dans la mesure où elle peut aussi faire figurer des dérivées en temps et en espace des quantités impliquées τ , \mathbf{u} , ρ , ...

Sous les hypothèses que τ est une fonction linéaire de u , que τ est invariant par changement de référentiel galiléen, et que le fluide a des propriétés physiques isotropes, on peut affirmer que la forme de la relation liant τ et u est nécessairement

$$\tau = \lambda (\operatorname{div} \mathbf{u}) Id + 2\mu d \quad (4.5)$$

où λ et μ sont deux coefficients réels (dits les *coefficients de Lamé*), en toute généralité fonctions de ρ et de la température, et où d est le tenseur des déformations linéarisé

$$d = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}). \quad (4.6)$$

Sous de telles hypothèses, on parle de *fluide newtonien*. La théorie cinétique des gaz permet de plus de montrer que $\lambda = -\frac{2}{3}\mu$, et il est courant de prendre ces coefficients constants.

L'ensemble des équations (4.1)-(4.2)-(4.3)-(4.5)-(4.6) permet alors de décrire le mouvement du fluide. Quand on prend en compte les phénomènes liés à la température, il faut adjoindre à ces équations une équation d'évolution de l'énergie et une équation d'état reliant la pression p , la masse volumique ρ et la température T . Ici, nous ferons abstraction de tels phénomènes. Les équations (4.1)-(4.2)-(4.3)-(4.5)-(4.6) suffisent alors, car la détermination de la pression se fera via l'hypothèse supplémentaire d'incompressibilité que nous détaillons maintenant.

Supposons alors de plus que le fluide est incompressible, i.e.

$$\operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (4.7)$$

et de masse volumique constante (on parle de fluide homogène)

$$\rho = \rho_0 = 1 \text{ (pour fixer les idées).}$$

La conservation du mouvement se réécrit alors

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = f, \quad (4.8)$$

équation qui, assortie de la condition $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$, forme ce que le lecteur reconnaît comme l'équation de Navier-Stokes des fluides newtoniens visqueux incompressibles homogènes.

Cependant, pour un fluide (visqueux incompressible et homogène) qui n'obéirait pas aux hypothèses simplificatrices menant à (4.5), il faudrait utiliser le système

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p - \operatorname{div} \tau_p = f \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

où le tenseur des contraintes visqueuses τ a été décomposé selon

$$\tau = \tau_n + \tau_p \quad (4.10)$$

avec τ_n sa partie newtonienne (c'est-à-dire s'exprimant par (4.5)) et τ_p (p comme polymère) qui figure la partie du tenseur des contraintes τ qui n'obéirait pas à la simple modélisation newtonienne, et qui pourrait faire l'objet d'une relation non standard du type (4.4). C'est un tel fluide que nous allons étudier désormais.

Pour un tel fluide, il existe des modélisations purement macroscopiques, c'est-à-dire des modélisations basées uniquement sur la mécanique des milieux continus (même si la *dérivation* de tels modélisations peut en fait faire intervenir des notions autres, il ne reste *in fine* qu'un modèle en termes de mécanique du continuum).

L'idée est d'écrire une équation sur l'évolution de la partie non newtonienne τ_p du tenseur des contraintes, et/ou sur la relation entre τ_p et les autres grandeurs caractérisant la dynamique du fluide comme $\nabla \mathbf{u}$ ou le tenseur des déformations d . Cette équation s'écrit par exemple

$$\frac{D\tau_p}{Dt} = F(\tau_p, \nabla \mathbf{u}), \quad (4.11)$$

où on a noté $\frac{D\tau}{Dt}$ la dérivée convective du tenseur τ , à savoir

$$\frac{D\tau}{Dt} = \frac{\partial \tau}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \tau.$$

Quand on choisit une relation du type (4.11) pour exprimer τ_p , on dit qu'on adopte un *modèle différentiel* pour le fluide non newtonien. Un exemple de relation (4.11) est l'équation (4.37) dite de Oldroyd B, évoquée à l'Exercice 4.8, ainsi qu'à la Remarque 4.5.

Une autre option consiste à choisir un modèle dit *modèle intégral*

$$\tau_p(t, x) = \int_{-\infty}^t m(t - t') S_{t'} dt', \quad (4.12)$$

où la quantité $S_{t'}$ désigne une quantité dépendant de ∇u , et où l'intégrale est prise le long d'une ligne de courant passant par x .

Que ce soit sur l'une ou l'autre des formes (4.11) et (4.12), on constate que le point crucial est que le tenseur des contraintes $\tau_p(t, x)$ ne dépend pas seulement de la déformation au point x et au temps t , comme dans une formule du type (4.5), mais dépend de l'*histoire* de la déformation en tous les points de la ligne de courant amenant à x pour les instants antérieurs t' . C'est particulièrement explicite sur la forme (4.12), mais ceci se lit aussi sur (4.11).

En pratique, le système global qu'on devra simuler est

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p - \operatorname{div} \tau_p = f, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \\ \frac{D\tau_p}{Dt} = F(\tau_p, \nabla \mathbf{u}), \end{array} \right. \quad (4.13)$$

Un tel système est appelé *problème à trois champs* : la vitesse u , la pression p , la contrainte τ_p . Il est donc significativement plus compliqué à résoudre que le "simple" problème newtonien (4.9) avec $\tau_p = 0$, où figurent seulement deux champs à déterminer, la vitesse et la pression (le tenseur des contraintes s'en déduit).

Sa simulation numérique peut s'avérer très lourde. Cependant, le principal souci avec ce type de systèmes est une difficulté essentielle liée à la modélisation : il faut établir une relation du type (4.11) ou (4.12) à partir de la connaissance (partielle souvent) des propriétés physiques du fluide. Pour de nombreux fluides, on ne sait pas trouver une bonne loi.

Il est donc utile de disposer d'une approche alternative, basée directement sur le niveau microscopique. Cette approche permettra d'aborder des cas où on ne connaît pas nécessairement bien le comportement macroscopique du fluide. Plus précisément, une telle approche permettra d'éviter de faire des hypothèses simplificatrices superflues dans le but de vouloir à tout prix obtenir une relation du type (4.11) ou (4.12). De telles hypothèses, appelées *hypothèses de clôture*, sont en effet particulièrement dangereuses dans les cas mal connus, car on ne sait pas bien mesurer leur impact sur la qualité de la simulation finale. Mieux vaut donc s'en affranchir, et décider de se concentrer sur l'échelle microscopique en faisant directement passer son information au niveau macroscopique, sans passer par le biais simplificateur d'une relation du type (4.11) ou (4.12)

Malheureusement, une telle approche a aussi un prix : la lourdeur des calculs, et c'est pourquoi dans les simulations numériques actuelles, on utilise alternativement les systèmes du type (4.13) ou les systèmes micro-macro que nous allons voir. D'un point de vue industriel, les systèmes (4.13) sont clairement plus employés (et d'ailleurs la littérature qui est consacrée à de tels modèles est énorme), mais les systèmes micro-macro ont sans doute plus

d'avenir. Une autre observation qui plaide pour investir dans l'approche micro-macro est qu'elle constitue aussi un moyen de tester et dériver des approximations (4.11) ou (4.12) sur des cas d'écoulements simples (mais pour des fluides ayant une physique complexe), approximations qui seront ensuite injectées dans des systèmes (4.13) avec lesquels on simulera le cas réel.

4.2 Modélisation micro-macro des fluides polymériques

La modélisation micro-macro consiste à utiliser une expression explicite du tenseur τ_p en chaque point et à chaque instant en fonction de la dynamique microscopique des microstructures qui composent le fluide. Dans le cas que nous allons considérer dans ce chapitre, le fluide est un fluide polymérique (en fait, nous le verrons, une solution infiniment diluée de polymères) et ces microstructures sont donc des chaînes polymériques. Mais bien d'autres cas de microstructures sont possibles : des cristaux liquides, des flocons dans la neige, des agrégats mésoscopiques dans de la boue, des granulats dans du béton, etc...

Avant d'aller plus loin dans la modélisation, il est utile, pour comprendre le contexte et saisir les objectifs et défis de la simulation numérique, de dire quelques mots des propriétés mécaniques générales des fluides polymériques.

Un *polymère* est, par définition, une molécule formée par la répétition d'un grand nombre de motifs chimiques, appelés *monomères*, liés entre eux de manière covalente (c'est-à-dire qu'ils partagent entre eux des électrons). S'il y a plusieurs motifs de base, on parle de *copolymères*. Les polymères sont à la base d'une foule de matériaux naturels (le caoutchouc naturel, le bois, le cuir,...) ou transformés (le caoutchouc vulcanisé, la laine, les carburants,...). Ils peuvent se classer par leur *degré de polymérisation*, c'est-à-dire le nombre N de monomères constituant le polymère : $N = 1$ à 4 pour les gaz, $N = 5$ à 15 pour les carburants, $N = 25$ pour les solides cassants comme la bougie, $N > 2000$ pour les films plastiques. Lorsque N croît, la température de fusion augmente et les propriétés polymériques s'affirment : elles commencent pour $N = 100$ et deviennent véritables pour $N = 1000$. Dans tous les cas, liquides ou solides, ce sont les longues chaînes qui donnent au matériau ses propriétés mécaniques spécifiques, franchement différentes des propriétés mécaniques d'un matériau constitué de molécules isolées. Ainsi, la longueur des chaînes empêche le matériau de s'ordonner parfaitement lors de la solidification, d'où une souplesse des matériaux solides polymériques à cause des zones restées désordonnées (penser à un pneu) ; de même, les longues chaînes confèrent aux polymères liquides une viscosité de 6 à 8 ordres de grandeur supérieure à d'autres liquides (penser à de l'huile de vidange).

Pour les polymères en solution liquide, on aura le cas des bons solvants dans lesquels les polymères se gonflent (une peinture dans un dissolvant), et

celui des mauvais solvants dans lesquels les polymères se recroquevillent (une peinture dans de l'eau).

Différents cas se présentent aussi du point de vue de la concentration de la solution. La solution peut être peu concentrée, et plus précisément, ce qui est le cas particulier que nous considérerons dans toute la suite, *infinitement diluée*, ce qui signifie que les chaînes polymériques qui “flottent” dans le solvant n’interagissent pas les unes avec les autres car elles sont loin les unes des autres. Ceci est clairement une restriction, une immense majorité des fluides polymériques “intéressants” étant ce qu’on appelle des *polymères fondus*, où la densité de polymères est beaucoup plus importante. Dans ce cas, la solution est suffisamment concentrée pour que les différentes chaînes s’interpénètrent. Les polymères fondus se comportent comme un plat de spaghetti entrelacés et la dynamique du fluide est alors franchement différente du cas que nous allons regarder ici. La modélisation d’une telle dynamique est basée sur le concept de *reptation* introduit par De Gennes : une chaîne polymérique rampe dans le tube formé par les chaînes qui l’entourent. Dans le cas des polymères concentrés, des modèles purement macroscopiques et des modèles micro-macro existent aussi. Il sont basés sur une physique un peu différente et certainement plus complexe, mais vont comporter des difficultés similaires pour la simulation numérique. Il est donc légitime de traiter dans ce cours introductif des solutions infiniment diluées.

Dans le cas des solutions concentrées, on peut alors éventuellement créer des liaisons (des *ponts*) entre les chaînes : on parle de *polymères réticulés*. Si le taux de réticulation est suffisant, il se forme alors un véritable réseau qui a une résistance mécanique et se comporte comme un solide. Le solvant exerce une pression sur le réseau, le maintenant en l’état, et réciproquement, le réseau emprisonne le solvant, l’empêchant de couler. Ainsi, un exemple de polymère modérément réticulé est l’élastomère du matériau caoutchouteux constitutif des pneus (le solvant est le polymère lui-même), et un exemple de polymère très réticulé est une résine, un plastique rigide. L’étude des matériaux caoutchouteux des pneus peut aussi être abordée par des méthodes micro-macro, à la fois dans l’esprit de celles décrites dans ce chapitre et se rapprochant aussi des méthodes du Chapitre 1.

Focalisons-nous maintenant sur la modélisation micromacro d’une solution polymérique infiniment diluée.

En chaque point macroscopique x du fluide, on regarde donc avec une “loupe” (voir Figure 4.1), pour tenter d’évaluer la contribution τ_p au tenseur des contraintes qu’apporte la présence de chaînes polymériques qui s’agitent dans le fluide.

Chimiquement, une chaîne polymérique est, on l’a dit, une longue chaîne, comme par exemple le polyéthylène $(CH_3) - (CH_2)_n - (CH_3)$. Pour nous, une chaîne polymérique est modélisée comme un objet de la Figure 4.2. On la voit donc comme un objet purement mécanique. On oublie ici les subtilités liées à sa structure électronique, à sa modélisation quantique, etc... toutes

subtilités qui ne peuvent raisonnablement pas être prises en compte dans la simulation macroscopique pour des raisons évidentes de coût calcul, et dont il n'est d'ailleurs pas évident qu'elles aient réellement un impact sur les phénomènes qu'on regarde dans ce chapitre.

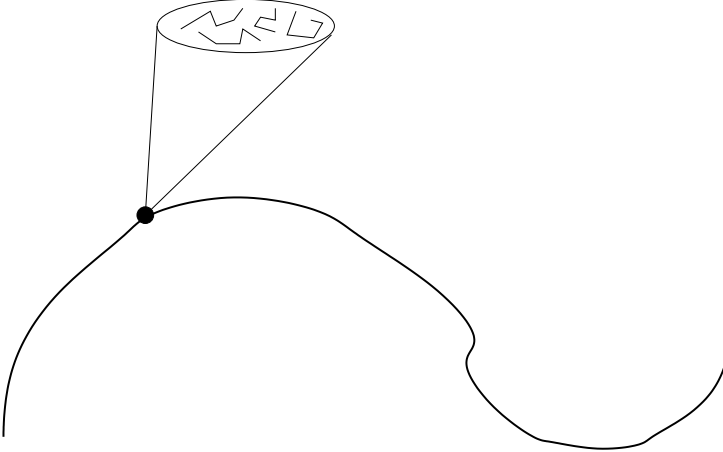


Fig. 4.1. En chaque point de la trajectoire d'une particule fluide se trouve une collection de chaînes polymériques

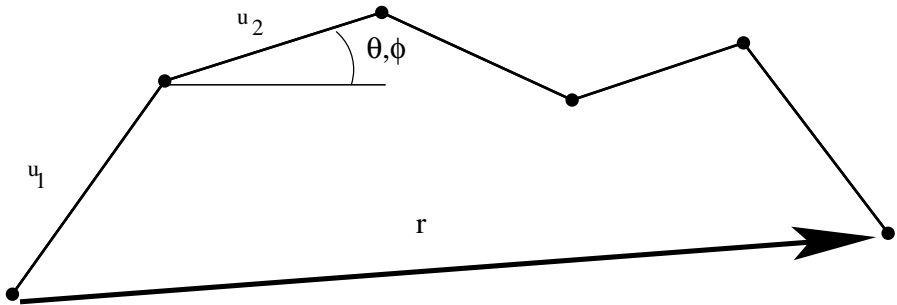


Fig. 4.2. Une chaîne polymérique : les u_j sont les vecteur de liaisons entre les différents “atomes”, chacun a un couple d'angles (θ_i, φ_i) , et fait une longueur a ; le vecteur bout-à-bout est \mathbf{r} .

La configuration d'une chaîne est donc donnée par une collection de positions des “atomes” qui la composent, ou alternativement par une collection de longueurs interatomiques et d'angles dans l'espace. Chaque “atome” est composé d'une vingtaine de monomères, et donc de plusieurs centaines d'atomes au sens chimique du terme.

Sous l'effet des forces mécaniques présentes dans le fluide, mais aussi sous l'effet de l'intense bombardement moléculaire auquel la chaîne est soumise de la part des molécules qui composent le solvant, la chaîne s'agite et se déforme. Les angles entre liaisons changent, les liaisons s'allongent, et dans des situations extrêmes, les chaînes peuvent même se casser.

La contribution au tenseur des contraintes $\tau_p(t, x)$ est la résultante de la réaction de chaque chaîne à ces sollicitations, sommée sur le nombre considérable de chaînes polymériques présentes au point macroscopique x .

Explicitons cela.

4.2.1 Le modèle de la chaîne libre

Il n'est pas raisonnable de vouloir traiter explicitement la dynamique de *chaque* chaîne et d'ensuite sommer sur toutes les chaînes. Il vaut mieux raisonner en termes de physique statistique, c'est-à-dire choisir un *représentant* de l'ensemble des chaînes, regarder son évolution, et effectuer une moyenne. Autrement dit, en chaque point x on introduit une *densité de probabilité* ψ qui est définie sur l'espace

$$(l_1, l_2, \dots, l_{N-1}, \theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_{N-1}, \varphi_{N-1})$$

des longueurs atomiques et angles de la chaîne type. Ainsi

$$\psi(l_1, l_2, \dots, l_{N-1}, \theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_{N-1}, \varphi_{N-1}) \quad (4.14)$$

sera la probabilité que la chaîne ait pour longueur interatomique entre ses atomes 1 et 2 la longueur l_1 , etc... Nous allons alors écrire une équation d'évolution sur cette probabilité ψ , équation qui tiendra compte de l'environnement de la chaîne. On exprimera alors la contribution au tenseur des contraintes comme la somme pondérée par ψ de la réponse de la chaîne dans chacune de ses configurations. Mettons en oeuvre cela sur un cas simple.

On suppose désormais que la chaîne est un assemblage linéaire de N boules (ses atomes) reliées entre elles par des tiges sans masse (les liaisons). Signalons tout de suite que les boules peuvent aussi bien représenter des "atomes" que des groupes d' "atomes" (lesquels sont des groupes de monomères), de sorte que le nombre N peut être considérablement plus faible que le nombre réel d'atomes (au sens chimique) composant la chaîne polymérique. On prendra plus loin $N = 2$ pour simuler des chaînes de plusieurs milliers d'atomes. Le modèle est bien sûr phénoménologique. L'assemblage ainsi constitué est supposé totalement libre, c'est à dire qu'il ne résiste pas aux rotations. La longueur des liaisons, elle, est supposée fixée définitivement à une valeur a , de sorte que $l_i = a$ pour tout i dans (4.14).

On introduit aussi le vecteur \mathbf{r} (noté exceptionnellement en gras dans toute la suite pour qu'on ne confonde pas vecteur et longueur) appelé *vecteur*

bout-à-bout (ou connecteur) et qui relie la première boule à la N -ième (voir Figure 4.2). Ce vecteur peut s'écrire comme la somme

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{N-1} a \mathbf{u}_i \quad (4.15)$$

où le vecteur \mathbf{u}_i est le vecteur unitaire définissant la direction de la i -ème liaison.

En toute généralité (on extrait pour un instant la chaîne polymérique du solvant où elle se trouve, et on la regarde à l'équilibre), la probabilité que la i -ème liaison figure avec le couple d'angles d'Euler (θ_i, φ_i) est

$$\psi_i(\theta_i, \varphi_i) = \frac{1}{4\pi} \sin \theta_i,$$

dans ce modèle simple. Il suffit pour le voir de réaliser qu'on a choisi au hasard un point sur la sphère unité avec la probabilité uniforme.

Comme chaque liaison est supposée orientée indépendamment de la précédente, la probabilité d'avoir la chaîne complète dans la configuration d'angles

$$(\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_{N-1}, \varphi_{N-1})$$

est le simple produit

$$\psi(\theta_1, \varphi_1, \dots, \theta_{N-1}, \varphi_{N-1}) = \left(\frac{1}{4\pi} \right)^{N-1} \prod_{i=1}^{N-1} \sin \theta_i. \quad (4.16)$$

Toute quantité B qui dépend de l'état de conformation de la chaîne pourra alors être calculée par la moyenne

$$\langle B \rangle = \int B(\theta^{N-1}, \varphi^{N-1}) \psi(\theta^{N-1}, \varphi^{N-1}) d\theta^{N-1} d\varphi^{N-1} \quad (4.17)$$

où on a noté $\theta^{N-1} = (\theta_1, \dots, \theta_{N-1})$, $\varphi^{N-1} = (\varphi_1, \dots, \varphi_{N-1})$.

L'exercice suivant illustre l'utilisation de cette formule pour une grandeur B particulière qui va jouer un rôle dans la suite.

Exercice 4.2. On veut évaluer la moyenne $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$ du carré du module du vecteur bout-à-bout \mathbf{r} . Utiliser la formule (4.17) pour montrer que

$$\langle \mathbf{r}^2 \rangle = (N-1)a^2 \quad (4.18)$$

où, on le rappelle, a est la longueur de liaison entre deux boules consécutives.

Dans le but de simplifier le modèle, on va alors se concentrer sur le vecteur bout-à-bout \mathbf{r} . La probabilité qu'il ait précisément la valeur \mathbf{r} est

$$P(\mathbf{r}) = \int \delta(\mathbf{r} - \sum_{i=1}^{N-1} a\mathbf{u}_i) \psi(\theta^{N-1}, \varphi^{N-1}) d\theta^{N-1} d\varphi^{N-1}, \quad (4.19)$$

où δ est la masse de Dirac et \mathbf{u}_i est le vecteur unitaire d'angles d'Euler (θ_i, φ_i) . En introduisant alors la valeur de ψ donnée par (4.16), on peut montrer par un calcul simple mais un peu fastidieux qu'une bonne approximation de P , pour N grand, est

$$P(\mathbf{r}) \stackrel{N \text{ grand}}{\approx} \left(\frac{3}{2\pi(N-1)a^2} \right)^{3/2} e^{-3\mathbf{r}^2/2(N-1)a^2}. \quad (4.20)$$

C'est l'approximation que nous adoptons désormais de sorte que la distribution du vecteur bout-à-bout est une loi gaussienne. L'exercice suivant permet de montrer qu'on n'a pas fait trop d'erreur par cette approximation.

Exercice 4.3. Calculer de nouveau la moyenne $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$, cette fois à l'aide de la probabilité (4.20). Comparer à (4.18).

L'idée est alors de purement et simplement se débarrasser de la description des N boules liées par $N - 1$ liaisons et de ne regarder que le vecteur bout-à-bout \mathbf{r} pour définir la configuration de la chaîne polymérique (voir Figure 4.3). On parle alors de modèle d'*haltère*, puisqu'il ne subsiste de la chaîne que deux boules reliées par une tige.

4.2.2 Le modèle d'haltères

Il nous faut maintenant donner une raideur à la tige \mathbf{r} . Cette raideur traduira le fait que la chaîne polymérique a plus ou moins de configurations possibles selon que $|\mathbf{r}|$ est grand ou petit. En effet, par exemple pour $|\mathbf{r}| = (N - 1)a$, la chaîne est forcément complètement tendue (tous les angles sont nuls), et donc il n'y a qu'une seule configuration de la chaîne à N boules qui correspond à une elongation \mathbf{r} telle que $|\mathbf{r}| = (N - 1)a$. En revanche pour $|\mathbf{r}| < (N - 1)a$, plusieurs configurations bien différentes de la chaîne peuvent aboutir *in fine* au même vecteur \mathbf{r} . Evaluons cela.

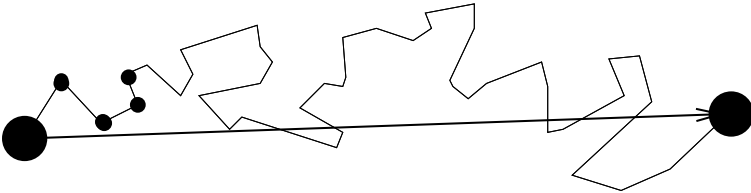


Fig. 4.3. Une chaîne polymérique réelle d'une trentaine d' "atomes" et sa modélisation phénoménologique sous forme d'haltère.

La mécanique statistique enseigne que pour un système dont la distribution est définie par la loi (4.20), l'énergie libre est donnée par

$$A(\mathbf{r}) = A^0 - kT \ln P(\mathbf{r})$$

où T désigne la température, A^0 une constante, et k la constante de Boltzmann. Quand la configuration \mathbf{r} de la chaîne est donc modifiée de $d\mathbf{r}$, l'énergie libre est modifiée de

$$\begin{aligned} dA &= -kT d \ln P(\mathbf{r}) \\ &= \frac{3kT}{(N-1)a^2} \mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

d'après la formule (4.20).

Mais d'autre part, pour une modification de ce type à température constante, la modification d'énergie libre est reliée à la tension F de la chaîne par

$$dA = F(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (4.22)$$

En comparant (4.21) et (4.22), on trouve donc l'expression de la valeur de la tension

$$F(\mathbf{r}) = \frac{3kT}{(N-1)a^2} \mathbf{r}. \quad (4.23)$$

La force de rappel est l'opposé de cette tension. Tout se passe donc comme si on avait à faire à deux boules reliées par un ressort \mathbf{r} de raideur $\mathcal{K} = \frac{3kT}{(N-1)a^2}$.

Il s'agit cependant de bien comprendre que la raideur de ce ressort n'est pas la conséquence de forces de rappel de nature interatomique qui rappelleraient un atome près d'un autre. C'est une raideur de nature *entropique*, due au fait qu'une chaîne allongée explore moins de configurations qu'une chaîne repliée, et donc que l'agitation tient à raccourcir une chaîne allongée, pour augmenter l'entropie du système.

Bref, quoi qu'il en soit, la chaîne polymérique de départ se résume à une haltère \mathbf{r} de raideur \mathcal{K} . Attachons nous maintenant à décrire la dynamique de cette haltère, puis à déterminer la façon dont elle contribue à τ_p .

4.2.3 Les équations

Notons désormais $\psi(t, x, \mathbf{r})$ la densité de probabilité de \mathbf{r} au point macroscopique x au temps t . Cela signifie donc qu'au point x et au temps t , la probabilité de trouver *une* chaîne polymérique représentative dans l'état d'haltère \mathbf{r} à $d\mathbf{r}$ près est $\psi(t, x, \mathbf{r})d\mathbf{r}$. L'évolution de ψ d'un instant à un autre au même point x doit tenir compte du fait que les chaînes polymériques présentes au point x sont aussi celles qui ont été amenées par le flot macroscopique à la vitesse u , donc la variation de ψ n'est pas donnée par $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ seulement, mais aussi par le transport $u \cdot \nabla \psi$.

La variation totale $\frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \psi$ de ψ est alors la résultante de plusieurs phénomènes :

- 1 - une force hydrodynamique : l'haltère est allongée (ou raccourcie) par un effet dû à une interaction avec le fluide ; chacun des deux bouts de l'haltère est freiné par le fluide avec une force proportionnelle à la vitesse (via un coefficient de friction ζ), mais comme cette vitesse diffère de $\nabla \mathbf{u} \mathbf{r}$ d'un bout à l'autre de l'haltère, il en résulte une force d'élongation ; cette force subie par l'haltère s'exprime donc en fonction de $\zeta \nabla \mathbf{u} \mathbf{r}$;
- 2- une force intrapolymérique : une autre partie des forces est due à la "force de rappel entropique" du "ressort" \mathbf{r} ;
- 3 - enfin, une force brownienne : la chaîne est bombardée par les molécules du solvant, ce qui modifie sa configuration, ici le vecteur \mathbf{r} .

Le bilan est formalisé par l'équation d'évolution de ψ qu'on appelle *équation de Fokker-Planck* :

$$\frac{\partial \psi(t, x, \mathbf{r})}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \psi(t, x, \mathbf{r}) = -\text{div}_{\mathbf{r}} \left(\left(\nabla_x \mathbf{u} \mathbf{r} - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} \mathbf{r} \right) \psi(t, x, \mathbf{r}) \right) + \frac{2k_B T}{\zeta} \Delta_{\mathbf{r}} \psi(t, x, \mathbf{r}), \quad (4.24)$$

où ζ est un coefficient de friction, T est la température, et k_B la constante de Boltzmann. Dans cette équation, on reconnaît au membre de droite, dans l'ordre, les trois termes de force qui s'appliquent sur la chaîne polymériques. Pour qu'il n'y ait pas d'ambiguïté, on a fait figurer en indice des opérateurs différentiels la variable par rapport à laquelle on dérivait. Au membre de gauche, le transport est un transport macroscopique (variable x). Au membre de droite, on gère l'évolution en la variable de configuration \mathbf{r} , donc les opérateurs divergence $\text{div}_{\mathbf{r}}$ et laplacien $\Delta_{\mathbf{r}}$ sont par rapport à cette variable. Par exemple, la force de rappel entropique fait passer d'un \mathbf{r} à un \mathbf{r} plus petit, mais n'a aucun rapport avec la variable de position "géographique" x de la chaîne au sein du fluide macroscopique.

Une fois ceci fait, il nous reste à exprimer le tenseur des contraintes. Physiquement, la contribution de la chaîne est la suivante. On sait que l'on trouve la valeur de la contrainte au sein d'un matériau en imaginant qu'on coupe ce matériau par un plan (de vecteur normal \mathbf{n}) et en évaluant la force de réaction agissant sur chacun des deux plans ainsi obtenus par séparation. Cette force vaut $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}$. En faisant varier \mathbf{n} , on identifie ainsi toutes les composantes du tenseur des contraintes $\boldsymbol{\tau}$. Faisons cette expérience mentale ici. En découpant le fluide, on tranche inévitablement bon nombre de chaînes polymériques, dont la réaction va contribuer (via τ_p) à la force de réaction globale des deux plans de fluide séparés. La réaction de chaque chaîne dépendra de son orientation \mathbf{r} . L'agrégation de la réponse de toutes les chaînes suivant leur position donnera la réponse totale (voir Figure 4.4). Un calcul montre que cette contribution est donnée par la *formule de Kramer*

$$\tau_p(t, x) = -n_p k T \text{Id} + n_p \int (\mathbf{r} \otimes F(\mathbf{r})) \psi(t, x, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4.25)$$

où n_p désigne le nombre total de polymères par unité de volume. On peut remarquer que le premier terme sera simplement une constante additive à la pression, et peut donc désormais être oublié. Seul compte le second terme. Le modèle global que nous avons donc obtenu est le suivant (avec un léger abus de notation, on y oublie le terme $-n_p k T \text{Id}$ dans τ_p , préférant l'inclure dans la pression p)

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p - \text{div} \tau_p = f, \\ \text{div} \mathbf{u} = 0 \\ \tau_p(t, x) = n_p \int (\mathbf{r} \otimes \mathcal{K} \mathbf{r}) \psi(t, x, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \frac{\partial \psi(t, x, \mathbf{r})}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \psi(t, x, \mathbf{r}) = -\text{div}_{\mathbf{r}} \left((\nabla_x \mathbf{u} \mathbf{r} - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} \mathbf{r}) \psi(t, x, \mathbf{r}) \right) \\ \quad + \frac{2k_B T}{\zeta} \Delta_{\mathbf{r}} \psi(t, x, \mathbf{r}). \end{array} \right. \quad (4.26)$$

Bien noter que l'équation de Fokker Planck à la troisième ligne est à résoudre en *chaque* point macroscopique x . La valeur du tenseur τ_p fait appel à ψ qui contient la mémoire des déformations subies. La nature multiéchelle du système est évidente.

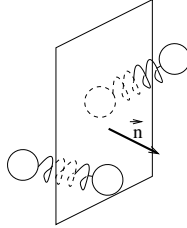


Fig. 4.4. Formule de Kramer : la contribution des chaînes polymériques au tenseur des contraintes s'obtient en sommant sur toutes les chaînes "coupées" par le plan considéré.

Arrêtons-nous un instant sur la forme du système (4.26). Au vu de (4.9) et (4.11), la modélisation purement macroscopique consiste en un système de la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \mathcal{F}(\tau_p, \mathbf{u}), \\ \frac{D\tau_p}{Dt} = \mathcal{G}(\tau_p, \mathbf{u}), \end{array} \right. \quad (4.27)$$

où D désigne la dérivée convective, où la première ligne figure symboliquement l'équation de conservation de la quantité de mouvement (Navier-Stokes)

et la seconde l'évolution du tenseur des contraintes (on oublie la variable pression pour alléger, elle ne joue pas de rôle dans l'aspect décrit ici). La modélisation micro-macro introduit, elle, une étape supplémentaire qui n'écrit pas d'évolution explicite du tenseur des contraintes τ_p , mais le calcule "point par point" en fonction d'une variable microscopique Σ (dans (4.26), la densité ψ dans l'espace de configuration des chaînes polymériques) dont on modélise l'évolution en temps,

$$\begin{cases} \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \mathcal{F}(\tau_p, \mathbf{u}), \\ \tau_p = \tau_p(\Sigma) \\ \frac{D\Sigma}{Dt} = \mathcal{G}_\mu(\Sigma, \mathbf{u}), \end{cases} \quad (4.28)$$

La forme (4.28) se généralise à tous les systèmes à microstructures (polymères fondus, boues, cristaux liquides, ...) : la variable Σ porte en elle toute la part de la modélisation microscopique, ou mésoscopique. De ce point de vue, notre propos va être tout à fait général.

Remarque 4.4. On se souviendra ici des problèmes de minimisation (1.21) au Chapitre 1 et (2.46) au Chapitre 2.

Le lecteur s'imagine sans peine que la simulation numérique de (4.26) n'est pas une affaire simple. Même dans ce modèle très simple d'haltères, il faut un schéma numérique de type éléments finis pour les équations macroscopiques couplé avec un schéma pour résoudre l'équation (de type parabolique) de Fokker Planck en chaque point (c'est-à-dire en chaque noeud de quadrature dans la formulation éléments finis). Nous n'allons donc le faire que dans un cas ultra simple, celui de l'écoulement de Couette qui est en fait un cas monodimensionnel. Ceci permettra au lecteur de toucher du doigt les difficultés posées par la discrétisation de (4.26), et lui montrera une stratégie très efficace pour simuler l'équation de Fokker-Planck, stratégie basée sur une méthode de nature stochastique.

Remarque 4.5. En fait, le modèle d'haltère à force de rappel linéaire (on parle de modèle *hookéen*) que nous avons décrit ici est équivalent à un modèle purement macroscopique de type (4.13), connu sous le nom de modèle d'Oldroyd B, identifié et employé bien avant l'émergence des modèles micro-macro que nous exposons ici (voir l'Exercice 4.8 sur ce point). Tel quel, le modèle (4.26) n'est donc jamais simulé dans la pratique. Il l'est seulement à titre pédagogique, et pour tester des méthodologies numériques. Pourquoi ? Parce que dès que le modèle d'haltères n'a plus une tension $F(\mathbf{r}) = K\mathbf{r}$, ou dès que le modèle de chaîne polymérique est plus sophistiqué, l'équivalence avec un modèle purement macroscopique n'est plus vraie. Pour une force $F(\mathbf{r})$ plus générale par exemple, les deux dernières lignes de (4.26) sont à changer en

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \psi(t, x, \mathbf{r})}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_x \psi(t, x, \mathbf{r}) = -\operatorname{div}_{\mathbf{r}} \left((\nabla_x \mathbf{u} \mathbf{r} - \frac{2}{\zeta} F(\mathbf{r})) \psi(t, x, \mathbf{r}) \right. \\ \qquad \qquad \qquad \left. + \frac{2k_B T}{\zeta} \Delta_{\mathbf{r}} \psi(t, x, \mathbf{r}), \right. \\ \qquad \qquad \qquad \tau_p(t, x) = n_p \int (\mathbf{r} \otimes F(\mathbf{r})) \psi(t, x, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{array} \right. \quad (4.29)$$

On entre alors dans un champ de modélisation nouveau, non couvert par les modèles macroscopiques. Avoir préparé le terrain sur le simple modèle d'haltères linéaires est alors de première utilité.

4.3 Simulation numérique de l'Écoulement de Couette

Nous nous intéressons ici à la simulation d'un écoulement simple de type "plan de Couette" (cf. Figure 4.5) : le fluide s'écoule entre deux plans parallèles. A l'instant initial ($t = 0$), le fluide est au repos. Le plan inférieur ($y = 0$) est alors mis en mouvement avec une vitesse $V(t)$ (qu'on supposera plus loin constante et égale à $V \equiv 1$ pour tout $t > 0$, pour simplifier), tandis que le plan supérieur ($y = L$) est maintenu fixe. On parle d'un flot de *start-up*.

Le fluide polymérique que nous considérons est visqueux, incompressible et homogène. Son tenseur des contraintes comporte une partie τ_p due à la contribution des chaînes polymériques. Les équations qui régissent son mouvement sont les équations (4.9) que nous reproduisons ici :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla \mathbf{p} - \operatorname{div} \tau_p = \mathbf{f} \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \end{array} \right. \quad (4.30)$$

Vu la géométrie particulière de l'écoulement de Couette, il est légitime de faire l'hypothèse que l'écoulement est *laminaire*, ce qui signifie qu'en chaque point de l'écoulement, la vitesse est purement colinéaire au vecteur \mathbf{e}_x , à savoir $\mathbf{u} = u_x(x, y, t) \mathbf{e}_x$. La contrainte d'incompressibilité impose alors qu'en fait la vitesse ne dépende pas de la variable x , d'où $\mathbf{u} = u_x(y, t) \mathbf{e}_x$. Désormais, nous omettons l'indice inférieur x dans u_x . La détermination de la vitesse

$$\mathbf{u} = u(y, t) \mathbf{e}_x \quad (4.31)$$

se réduit donc à la détermination du champ scalaire $u(y, t)$.

L'objet de l'exercice suivant est d'étudier le cas plus simple du fluide newtonien, i.e. $\tau_p \equiv 0$ dans les équations ci-dessus.

Exercice 4.6. Montrer que pour un fluide incompressible newtonien, moyennant une hypothèse sur la pression (qu'on justifiera), $u(y, t)$ vérifie

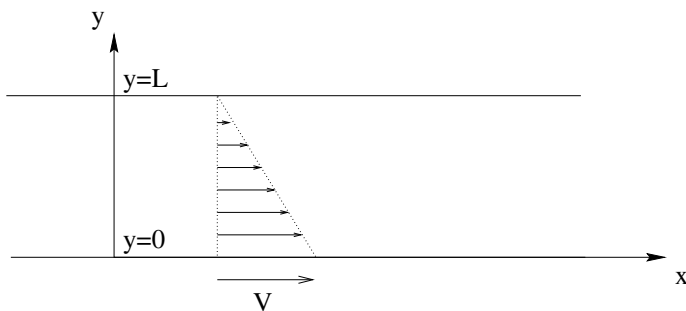


Fig. 4.5. Écoulement de type “plan de Couette” ; le profil des vitesses représenté ici correspond à l’écoulement stationnaire d’un fluide newtonien.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(y, t) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, t) \\ u(y, 0) = 0 \\ u(0, t) = V(t) \\ u(L, t) = 0 \end{cases} \quad (4.32)$$

Il faut bien comprendre le “miracle” qui permet de simplifier considérablement le problème dans le cas spécifique de l’écoulement de Couette. Le fait que $\mathbf{u} = u(y, t) \mathbf{e}_x$ entraîne deux simplifications. Premièrement, la propriété d’incompressibilité est automatiquement vérifiée, puisqu’elle est *inscrite* dans la forme de \mathbf{u} . Ceci nous évite d’avoir à gérer explicitement l’incompressibilité comme une contrainte, ce qui conduirait à de grosses difficultés techniques (penser à la résolution du problème de Stokes, qui est beaucoup plus compliquée que celle du problème de Laplace). Deuxièmement, le terme $(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$ (dit *de Navier*) disparaît pour des raisons algébriques, liées encore à la forme particulière de \mathbf{u} . La disparition de cette non linéarité, qui fait toute la difficulté théorique et pratique de l’équation de Navier-Stokes, est particulièrement heureuse.

4.3.1 Le modèle micro-macro

Nous considérons maintenant un fluide non newtonien dont, en toute généralité, l’évolution couplée micro-macro est décrite par le système suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p^* + \mu \Delta \mathbf{u} + \frac{1}{\rho_s} \operatorname{div} \tau_p, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \\ \tau_p(x, y, t) = n_p \mathcal{K} \int_{\mathbf{R}^d} (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) \psi(t, x, y, \mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x, y, \mathbf{r}) \\ + (\mathbf{u}(x, y, t) \cdot \nabla_x) \psi(t, x, y, \mathbf{r}) = -\operatorname{div}_{\mathbf{r}} \left((\nabla_x \mathbf{u}(x, y, t) \cdot \mathbf{r} - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} \mathbf{r}) \psi(t, x, \mathbf{r}) \right) \\ \quad + \frac{\sigma^2}{\zeta^2} \Delta_{\mathbf{r}} \psi(t, x, y, \mathbf{r}) \end{array} \right. \quad (4.33)$$

complémenté des mêmes conditions au bord et initiales :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(x, y, 0) = \mathbf{0} \\ \mathbf{u}(x, y = 0, t) = V(t) \mathbf{e}_x, \quad \forall t > 0 \\ \mathbf{u}(x, y = L, t) = \mathbf{0}, \quad \forall t > 0 \end{array} \right. \quad (4.34)$$

Il s'agit au niveau microscopique d'un modèle d'haltères linéaire : le vecteur bout-à-bout \mathbf{r} est un vecteur de dimension 2, la force de rappel est proportionnelle à l'élongation (cf. le coefficient $\frac{2\mathcal{K}}{\zeta}$).

Nous avons fait figurer dans ce système toutes les constantes physiques du problème (que nous avons souvent "oubliées" précédemment dans ce chapitre). Ainsi, n_p est la concentration volumique du polymère, i.e. le nombre de chaînes par unité de volume, μ est la viscosité du solvant, ρ_s est la densité du solvant, ζ est un coefficient de frottement visqueux. L'intensité σ de la diffusion dépend de la température du solvant : l'agitation thermique augmente avec la température. Enfin, \mathcal{K} est encore la constante de raideur du ressort entropique.

Au vu de la géométrie et de l'incompressibilité, nous avons fait l'hypothèse (4.31) sur la forme du champ de vitesse. L'objectif de l'exercice ci-dessous est de vérifier que ceci est compatible avec les équations (4.33), et de les simplifier alors, de sorte d'obtenir le système

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(y, t) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, t) + \frac{1}{\rho_s} \frac{\partial \tau}{\partial y}(y, t) \\ \tau(y, t) = n_p \mathcal{K} \int_{\mathbf{R}^2} P Q \psi(t, y, P, Q) dP dQ \\ \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, y, P, Q) = -\frac{\partial}{\partial P} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial y}(y, t) Q - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} P \right) \psi(t, y, P, Q) \right) \\ \quad + \frac{\partial}{\partial Q} \left(\frac{2\mathcal{K}}{\zeta} Q \psi(t, y, P, Q) \right) + \frac{\sigma^2}{\zeta^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) \psi(t, y, P, Q) \end{array} \right. \quad (4.35)$$

où P et Q désignent les composantes du vecteur bout-à-bout \mathbf{r} sur les axes x et y respectivement, et $\tau(y, t)$ est la composante xy du tenseur τ_p .

Exercice 4.7. Montrer qu'à cause de la géométrie particulière du problème considéré et de (4.31), le système (4.33) se réécrit sous la forme (4.35) en vérifiant que la pression p^* et les coefficients diagonaux du tenseur τ_p ne jouent pas de rôle dans la détermination du champ de vitesse, et qu'on peut à bon droit supposer l'indépendance en x de u , ψ et τ .

Exercice 4.8. L'objectif de cet exercice est de vérifier, sur le cas de l'écoulement de Couette (mais le résultat est vrai pour tout écoulement) que le modèle micro-macro d'halteres linéaires est en fait équivalent à un modèle purement macroscopique, comme nous l'avons signalé à la Remarque 4.5. On se concentre sur les deux dernières équations de (4.35), et on considère momentanément la vitesse u comme connue. Montrer que si l'on part, pour l'équation de Fokker-Planck, d'une fonction ψ_0 qui vérifie $\int_{\mathbf{R}^2} Q^2 \psi_0 = \frac{1}{n_p \mathcal{K}}$ et $\int_{\mathbf{R}^2} PQ \psi_0 = \tau_0$, et si l'on suppose $n_p = \frac{2\zeta}{\sigma^2}$ alors la fonction τ obtenue est exactement la solution de

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} + \lambda \tau = \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (4.36)$$

pour la donnée initiale τ_0 et un certain λ qu'on identifiera.

Montrer alors que l'équation (4.36) est la simplification dans la géométrie de Couette de l'équation d'Oldroyd B

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \sigma - \sigma^t \nabla \mathbf{u} - \nabla \mathbf{u} \sigma + \lambda \sigma = \lambda (\nabla \mathbf{u} + {}^t \nabla \mathbf{u}). \quad (4.37)$$

lorsque la vitesse $\mathbf{u} = u(y, t) \mathbf{e}_x$ et lorsque le tenseur des contraintes σ est supposé dépendre seulement des variables (y, t) . On reliera la fonction τ à un des termes du tenseur des contraintes σ .

La suite de cette section est consacrée à la description de la discrétisation du système (4.35). On s'intéresse d'abord à la partie macroscopique des équations, c'est-à-dire à la détermination de \mathbf{u} par la première équation de (4.35) quand on considère la contrainte τ connue. Puis, on examinera deux méthodes différentes pour simuler la partie microscopique (lignes suivantes de (4.35)). Bien sûr, ce découpage est purement pédagogique, car dans la simulation réelle, les deux parties sont couplées (voir la fin de la sous-section 4.3.4).

4.3.2 La discrétisation du problème macroscopique

Dans un premier temps, nous considérons le champ de contraintes $\tau(y, t)$ connu, et nous nous focalisons sur la détermination de la vitesse. Cette détermination va se faire par une discrétisation en éléments finis (cf. Annexe A pour des rappels de base). Tout commence par la formulation variationnelle de l'équation de la première ligne de (4.35) :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(y, t) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, t) + \frac{1}{\rho_s} \frac{\partial \tau}{\partial y}(y, t)$$

La question est

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher } u : [0, T] \longrightarrow H^1(0, L) \text{ tel que} \\ \frac{\partial u}{\partial t}(y, t) = \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, t) + \frac{1}{\rho_s} \frac{\partial \tau}{\partial y}(y, t) \\ u(y, 0) = 0 \\ u(0, t) = V(t) \\ u(L, t) = 0 \end{array} \right. \quad (4.38)$$

Nous en faisons la formulation variationnelle suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher } u : [0, T] \longrightarrow H_{V(t)}^1(0, L) \text{ tel que} \\ \forall v \in H_0^1(0, L), \quad \frac{d}{dt}(u(t), v)_{L^2} = -\mu(\partial_y u(t), \partial_y v)_{L^2} - \frac{1}{\rho_s}(\tau(t), \partial_y v)_{L^2} \\ u(y, 0) = 0 \end{array} \right. \quad (4.39)$$

où on a utilisé la notation

$$H_{V(t)}^1(0, L) = \{v \in H^1(0, L), \quad v(0) = V(t), \quad v(L) = 0\}.$$

Exercice 4.9. Vérifier qu'une solution de (4.39) est solution de (4.38).

Passons à la discrétisation. Comme annoncé et dans un but de simplification, on choisit désormais $L = 1$ et la condition au bord

$$V(t) = \begin{cases} 0 & \text{si } t \leq 0 \\ 1 & \text{si } t > 0 \end{cases} \quad (4.40)$$

Il est alors naturel d'effectuer une discrétisation par éléments finis de la variable d'espace y , qui sera suivie d'une discrétisation par différences finies de la variable temps t . En d'autres termes, on procède comme suit.

On réalise un maillage du segment $[0, 1]$ par N intervalles de longueur identique $h = \Delta y = \frac{1}{N}$. On discrétise la contrainte τ par éléments finis $P0$ et la vitesse u par éléments finis $P1$. Plus précisément, on introduit pour $0 \leq i \leq N$,

$$\varphi_i(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } y = \frac{i}{N} \\ \text{affine} & \text{sur } [\frac{i-1}{N}, \frac{i}{N}] \text{ et } [\frac{i}{N}, \frac{i+1}{N}] \\ 0 & \text{si } y \in [0, \frac{i-1}{N}] \cup [\frac{i+1}{N}, 1] \end{cases} \quad (4.41)$$

(avec les adaptations évidentes pour les cas $i = 0$ et $i = N$) et, pour $1 \leq i \leq N$,

$$\chi_i(y) = \begin{cases} 1 & \text{si } y \in [\frac{i-1}{N}, \frac{i}{N}[\\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (4.42)$$

Les familles $(\varphi_i)_{i=0,\dots,N}$, $(\varphi_i)_{i=1,\dots,N-1}$, $(\chi_i)_{i=1,\dots,N}$ réalisent asymptotiquement (quand $N \rightarrow +\infty$) une base des espaces $H^1([0, 1])$, $H_0^1([0, 1])$, $L^2([0, 1])$, respectivement. On construit alors une approximation de τ et u par la décomposition

$$\tau^h(y, t) = \sum_{i=1}^N (\tau^h)_i(t) \chi_i(y), \quad (4.43)$$

$$u^h(y, t) = \sum_{i=0}^N (u^h)_i(t) \varphi_i(y).$$

En raison de la condition au bord, on voit que l'on a nécessairement $(u^h)_0(t) = 0$ pour tout $t \geq 0$, $(u^h)_N(t) = 1$ pour tout $t > 0$ (et $(u^h)_N(0) = 0$). Les inconnues sur la vitesse sont donc seulement les $(u^h)_j$, $j = 1, \dots, N-1$ et on reconstruit pour $t > 0$ la vitesse u^h par

$$u^h(y, t) = \sum_{i=1}^{N-1} (u^h)_i(t) \varphi_i(y) + \varphi_N(y),$$

$$u^h(y, 0) = 0. \quad (4.44)$$

Remarque 4.10. Les conditions aux bords ne sont pas toujours éliminées aussi simplement que dans la situation présente, où il a suffi d'enlever deux inconnues $(u^h)_0$ et $(u^h)_N$. Cependant, la prise en compte de ces conditions aux bords reste souvent une difficulté d'ordre secondaire.

A ce stade, on a donc approché le problème (4.39) par le problème

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher les } (u^h)_j : [0, T] \rightarrow \mathbb{R} \text{ pour } j = 1, \dots, N-1 \\ \text{tels que } u^h(y, t) \text{ donné par (4.44) vérifie} \\ \forall i = 1, \dots, N-1, \frac{d}{dt}(u^h, \varphi_i)_{L^2} = -\mu(\partial_y u^h, \partial_y \varphi_i)_{L^2} - \frac{1}{\rho_s}(\tau^h(y, t), \partial_y \varphi_i)_{L^2} \end{array} \right. \quad (4.45)$$

Ce système est en fait un système d'équations différentielles ordinaires sur les inconnues $(u^h)_j$, qui sont des fonctions du temps t seulement.

On réalise maintenant une discrétisation par différences finies. Plus précisément, on emploie pour le terme visqueux un *schéma d'Euler implicite* (voir au Chapitre 5 une analyse précise de ce schéma), qui consiste à approcher une équation $\frac{d}{dt} w = f(t, w(t))$ par le schéma

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = f(t^{n+1}, w^{n+1})$$

et pour le terme de contrainte un *schéma d'Euler explicite* (voir aussi au Chapitre 5 une analyse précise de ce schéma), qui consiste à approcher une équation $\frac{d}{dt} w = f(t, w(t))$ par le schéma

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = f(t^n, w^n)$$

Ici, cela revient à approcher la valeur des fonctions $(u^h)_j(t)$ aux instants $t^n = n\Delta t$ par les $(u^h)_j^n$ vérifiant

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Chercher les } (u^h)_j^n \text{ pour } j = 1, \dots, N-1 \text{ et pour } n \geq 0 \\ \text{tels que } (u^h)_j^0 \equiv 0 \text{ et } \forall i = 1, \dots, N-1, \\ \left(\frac{\sum_{j=1}^{N-1} (u^h)_j^{n+1} \varphi_j(y) - \sum_{j=1}^{N-1} (u^h)_j^n \varphi_j(y)}{\Delta t}, \varphi_i \right)_{L^2} \\ = -\mu \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(\sum_{j=1}^{N-1} (u^h)_j^{n+1} \varphi_j(y) + \varphi_N(y) \right), \partial_y \varphi_i \right)_{L^2} - \frac{1}{\rho_s} ((\tau^h)^n, \partial_y \varphi_i)_{L^2} \end{array} \right. \quad (4.46)$$

où $(\tau^h)^n$ désigne bien sûr l'approximation par différences finies en temps de τ^h au temps t^n .

Cet énoncé est la formulation mathématique de l'équation

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - \mu \frac{\partial^2}{\partial y^2} u^{n+1} = \frac{1}{\rho_s} \frac{\partial \tau^n}{\partial y}, \quad (4.47)$$

où on a employé des notations plus compactes évidentes. Sur cette forme (dite *semi-discrétisée en temps*), on peut comprendre que le travail de discrétisation en temps qu'on a effectué revient à ramener le problème d'évolution à une suite de problème stationnaires. En effet, (4.47) s'écrit aussi

$$\left(\frac{1}{\Delta t} - \mu \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u^{n+1} = f^n,$$

et est donc formellement analogue à une équation de type Stokes (correspondant à la détermination d'un état stationnaire du fluide)

$$(1 - \Delta) u + \nabla p = f,$$

où l'inconnue est u^{n+1} .

Une fois traduit en termes du vecteur colonne

$$U^n = \begin{pmatrix} (u^h)_1^n \\ \vdots \\ (u^h)_{N-1}^n \end{pmatrix}. \quad (4.48)$$

le système (4.46) s'écrit sous forme du système algébrique

$$M \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = -\mu A U^{n+1} - \frac{1}{\rho_s} G S^n + B^n, \quad (4.49)$$

Dans ce système algébrique, le terme de contrainte (dernier terme de (4.46)) apparaît sous la forme du produit matrice \times vecteur GS^n où S^n est le vecteur colonne des $(\tau^h)_j^n$, $j = 1, \dots, N$ et G la matrice de taille $N - 1 \times N$

$$G = \left[\int_0^1 \partial_y \varphi_i \chi_j \right]. \quad (4.50)$$

Les autres matrices et vecteurs apparaissant dans (4.49) sont faciles à déterminer.

Exercice 4.11. Identifier les matrices M et A en termes des fonctions χ_i et φ_i , ainsi que le vecteur colonne B^n .

Pour résoudre (4.49) et déterminer U^{n+1} pour chaque n , il nous faut maintenant expliquer comment mettre à jour S^n en S^{n+1} , i.e. évaluer $(\tau^h)_j^{n+1}$ pour chaque j , ce qui correspond au niveau continu à évaluer le tenseur des contraintes en un point macroscopique en fonction du niveau microscopique. Nous allons faire ceci par deux méthodes différentes.

4.3.3 La discrétisation du problème microscopique : Méthode 1

Nous nous intéressons maintenant à la discrétisation de la deuxième équation d'évolution de (4.35), à savoir

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, y, P, Q) = & -\frac{\partial}{\partial P} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial y}(y, t) Q - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} P \right) \psi(t, y, P, Q) \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial Q} \left(\frac{2\mathcal{K}}{\zeta} Q \psi(t, y, P, Q) \right) + \frac{\sigma^2}{\zeta^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) \psi(t, y, P, Q). \end{aligned} \quad (4.51)$$

Il faut bien comprendre que dans cette équation la variable y est un *paramètre*, au sens où il y a (au niveau continu) autant d'équations que de points y et que les opérateurs différentiels ne portent pas sur cette variable d'espace physique mais sur les variables d'espace (P, Q) qui sont l'espace de configuration pour l'haltère.

Plus précisément, au niveau discret, il y a, dans notre cas, N équations de la forme (4.51), chacune d'entre elles étant associée à un intervalle $[\frac{i-1}{N}, \frac{i}{N}]$ (et donc à une fonction de base χ_i , $i = 1, \dots, N$), et fournissant ensuite la valeur de $(\tau^h)_i^n$ au pas de temps courant.

Commençons par remarquer que l'équation (4.51) est de la forme

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) = f(t, P, Q) \frac{\partial \psi}{\partial P} + g(t, P, Q) \frac{\partial \psi}{\partial Q} + a \left(\frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) \psi(t, P, Q). \quad (4.52)$$

Dans (4.52), on a noté a le coefficient constant (positif) devant le Laplacien et on a omis un terme “constant” en ψ (qui ne pose pas de difficulté, changer mentalement ψ en $e^t \psi$), ainsi que la dépendance des fonctions f , g , ψ par rapport au paramètre y . Il s’agit donc formellement d’une *équation d’advection-diffusion* dans le plan (P, Q) . L’advection correspond au terme de dérivée première et la diffusion au Laplacien en les variables P et Q .

Nous discrétisons cette équation par un schéma aux différences finies (on pourrait faire aussi une discrétisation par éléments finis). Nous imposons donc à la fonction ψ d’être nulle pour $|P|$ ou $|Q|$ plus grand qu’une grande constante M (en pratique, il faut quantifier ce M) et nous discrétisons l’équation avec donnée au bord nulle sur le carré $[-M, M]^2$. Pour cela, une des techniques possibles est la technique de *séparation d’opérateurs* (ou *splitting*). Cette technique sera étudiée en plus grand détail dans le Chapitre 5. Elle peut ici être appliquée à deux niveaux. A un premier niveau, on décompose l’équation (4.52) en deux équations, l’une d’advection

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) = f(t, P, Q) \frac{\partial \psi}{\partial P} + g(t, P, Q) \frac{\partial \psi}{\partial Q}. \quad (4.53)$$

et l’autre de diffusion

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) = a \left(\frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) \psi(t, P, Q). \quad (4.54)$$

On fera évoluer sur chaque pas de temps Δt la fonction ψ successivement par un schéma aux différences finies pour (4.53) et un schéma aux différences finies pour (4.54) (pour les détails, le lecteur pourra anticiper sur le Chapitre 5, Section 5.4). A un deuxième niveau, pour discrétiser chacune des équations (4.53) et (4.54), qui sont posées sur le plan (P, Q) , on peut utiliser la technique de décomposition d’opérateurs pour avancer successivement dans la direction P et dans la direction Q (on parle de *méthode des directions alternées*). Par exemple, pour l’équation d’advection (4.53), on peut résoudre successivement

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) = f(t, P, Q) \frac{\partial \psi}{\partial P}. \quad (4.55)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) = g(t, P, Q) \frac{\partial \psi}{\partial Q}. \quad (4.56)$$

Bien sûr, aux deux niveaux, d’autres techniques sont possibles. Par exemple, au deuxième niveau, on peut discrétiser par différences finies directement l’équation de diffusion (4.54) en deux dimensions (P, Q) . La raison pour laquelle nous insistons ici sur la technique de décomposition est la suivante. Il ne faut pas perdre de vue que nous décrivons ici un cas simplissime, où le polymère est modélisé dans un espace de configuration à 2 dimensions (le plan (P, Q)). Lorsque l’espace de configuration devient plus grand (disons 4), il n’est plus possible d’attaquer directement la résolution par différences finies,

la technique de séparation va s'imposer. En fait, très vite, l'attaque directe de (4.51) par une méthode de différences finies (ou, le constat serait le même, par une méthode d'éléments finis) devient impossible. D'où la nécessité d'une approche alternative, qui sera expliquée dans la sous-section suivante.

Revenons pour le moment à notre simple cas de la dimension 2. Nous avons donc ramené le problème de la simulation de (4.51) par différences finies à une succession d'équations d'advection ou de diffusion monodimensionnelles. Il existe beaucoup de techniques pour réaliser les discrétisations par différences finies de ces équations. Le lecteur se reportera à la bibliographie. On donne seulement ici un exercice sur une discrétisation de l'équation de diffusion, puis on s'intéresse à une spécificité liée à notre modélisation.

Exercice 4.12. On suppose que la solution $\psi(t, P)$ de l'équation de diffusion

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P) = a \frac{\partial^2}{\partial P^2} \psi(t, P)$$

(avec donnée initiale ψ_0 et donnée au bord nulle) est de classe C^4 . Montrer la convergence du *schéma implicite*

$$\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} - a \frac{\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}}{(\Delta P)^2} = 0.$$

Les deux exercices suivants étudient comment une propriété particulièrement importante dans notre cas est ou non assurée par les schémas numériques employés. Cette propriété est la propriété de *positivité* de ψ . En effet, par rapport à une situation générique où on résout une équation du type advection-diffusion, la particularité de notre problème réside en ce que, par construction, ψ est une densité de probabilité (cf. (4.14)), ce qui signifie que, pour tout temps, $\psi \geq 0$ partout et $\int \psi = 1$. La discrétisée de ψ doit donc conserver les deux mêmes propriétés au cours du temps dans la simulation numérique. C'est à la première exigence que nous nous intéressons. La seconde, qui est une exigence *globale* (contrairement à la première qui est *locale*) est en fait beaucoup plus dure à assurer de façon rigoureuse, et on procède souvent par une renormalisation pour l'assurer.

Exercice 4.13. Le *schéma de Lax-Wendroff* pour l'équation d'advection linéaire

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + c \frac{\partial \psi}{\partial P} = 0$$

s'écrit

$$\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^n}{\Delta t} + c \frac{\psi_{j+1}^n - \psi_{j-1}^n}{2\Delta P} - c^2 \frac{\Delta t}{2} \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{(\Delta P)^2} = 0, \quad (4.57)$$

où ΔP et Δt désignent respectivement les pas d'espace et de temps de la discrétisation par différences finies, et ψ_j^n la valeur au noeud $P_j = j \Delta P$ au

temps $t_n = n \Delta t$. On introduit le coefficient $\mu = c \frac{\Delta t}{\Delta P}$, dit *nombre de Courant*. Montrer que le schéma de Lax-Wendroff possède la propriété suivante, dite *principe du maximum discret*,

$$a \leq \psi_j^0 \leq b, \forall j \quad \text{implique} \quad a \leq \psi_j^n \leq b, \forall n \geq 0, \forall j, \quad (4.58)$$

(pour deux constantes arbitraires a et b) seulement quand $\mu = -1, 0$, ou 1 . Expliquer pourquoi il est naturel d'exiger le principe du maximum discret pour un schéma ayant pour objectif de simuler l'équation d'advection linéaire.

Exercice 4.14. On s'intéresse à la discrétisation de l'équation de diffusion

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(t, P, Q) = a \frac{\partial^2}{\partial P^2} \psi(t, P, Q).$$

Montrer que le schéma de Richardson

$$\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^{n-1}}{2\Delta t} - a \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{(\Delta P)^2} = 0, \quad (4.59)$$

ne préserve pas le principe du maximum, alors que le schéma de Dufort-Frankel

$$\frac{\psi_j^{n+1} - \psi_j^{n-1}}{2\Delta t} - a \frac{\psi_{j+1}^n - \psi_j^{n+1} - \psi_j^{n-1} + \psi_{j-1}^n}{(\Delta P)^2} = 0 \quad (4.60)$$

le préserve si $\frac{a\Delta t}{(\Delta P)^2} \leq \frac{1}{2}$.

Remarque 4.15. L'enseignement des exercices ci-dessus *n'est pas* que nous ne devons pas ici employer un schéma comme par exemple celui de Lax-Wendroff, mais plutôt qu'il faudra être vigilant sur la positivité de ψ si on l'emploie.

4.3.4 La discrétisation du problème microscopique : Méthode 2

Comme nous l'avons laissé entendre ci-dessus, les techniques de discrétisation par différences finies et éléments finis sont très vite mises en échec sur une équation du type (4.51) quand la dimension ambiante (ici 2) devient égale à 4, 5 ou plus. Elles deviennent inaccessibles au delà de la dimension 6 (certaines recherches en cours visent à tempérer ce constat). Sur notre cas simple bidimensionnel, nous développons maintenant une méthode de discrétisation qui est, elle, "insensible" à l'accroissement de la dimension : sa mise en oeuvre est quasiment indépendante de la dimension, et son coût en termes de temps calcul est linéaire par rapport à la dimension. En une phrase, disons que cette méthode consiste à évaluer $\tau(y, t)$, non pas via la résolution de l'équation de Fokker-Planck, mais en simulant le système d'équations différentielles stochastiques associées. Pour décrire cette nouvelle méthode, nous devons donc faire de brefs rappels de théorie des probabilités. Le lecteur savant sur de tels

sujets, ou seulement intéressé par le côté formel et prêt à *faire confiance* peut aisément omettre les lignes qui suivent et se reporter directement à la sous section 4.3.4. Comme d'habitude dans ce cours, on insiste sur le fait que la sous section 4.3.4 ne se substitue pas à un authentique cours de Probabilités.

Notions rapides de théorie des probabilités

Soit Ω un ensemble (figurant l'espace du hasard), et \mathcal{A} un sous-ensemble de l'ensemble $\mathcal{P}(\Omega)$ des parties de Ω . On dit que \mathcal{A} (qui figure alors l'information disponible) est une *tribu* si \mathcal{A} est stable par intersection et réunion dénombrables, par passage au complémentaire et si elle contient les éléments \emptyset et Ω . Sur un ensemble Ω muni d'une tribu \mathcal{A} , on peut définir une *probabilité* \mathbf{P} , c'est-à-dire une mesure positive de masse totale 1 définie sur \mathcal{A} . Rappelons qu'une mesure (positive) sur Ω est une fonction de Ω dans $\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$

telle que $\mathbf{P}(\emptyset) = 0$ et $\mathbf{P}(\cup_{i=1}^{+\infty} A_i) = \sum_{i=1}^{+\infty} \mathbf{P}(A_i)$ pour toute famille dénombrable

d'éléments A_i de \mathcal{A} disjoints deux à deux. On dit qu'une propriété est vérifiée presque sûrement si l'ensemble des $\omega \in \Omega$ pour lesquels elle n'est pas vérifiée est de mesure nulle pour \mathbf{P} . Le triplet $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbf{P})$ s'appelle un *espace de probabilité*.

On peut alors définir la notion de *variable aléatoire* (à valeurs réelles) : on appelle ainsi une application X de Ω dans \mathbb{R} mesurable par rapport à la tribu \mathcal{A} , c'est-à-dire que pour tout borélien B de \mathbb{R} , l'ensemble $\{\omega \in \Omega / X(\omega) \in B\}$ appartient à \mathcal{A} . Pour chaque $\omega \in \Omega$, $X(\omega)$ est une *réalisation* de la variable aléatoire X . La *loi* de X est la mesure $\mathbf{P} \circ X^{-1}$ définie par

$$\mathbb{E}(f(X)) = \int f(x) d(\mathbf{P} \circ X^{-1})(x),$$

pour toute f bornée.

L'*espérance* de la variable aléatoire X (d'abord construite pour les variables aléatoires positives, puis étendue aux variables aléatoires de signe quelconque pourvu que l'espérance de leur valeur absolue existe) est définie par

$$\mathbb{E}(X) = \int_{\Omega} X(\omega) d\mathbf{P}(\omega)$$

On dit alors que la variable aléatoire X admet (par rapport à la mesure de Lebesgue) une *densité*, $p(x)$ (fonction positive intégrable, d'intégrale sur \mathbb{R} égale à 1), si pour toute fonction bornée mesurable f , on a

$$\mathbb{E}(f(X)) = \int_{\mathbb{R}} f(x) p(x) dx.$$

La *loi* de X s'écrit donc $p(x) dx$. Une des densités les plus célèbres est la densité gaussienne

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}}$$

de moyenne m et de variance σ^2 . On dit alors que la variable aléatoire X est gaussienne. L'espérance vaut $\mathbb{E}(X) = m$ et la *variance* est $\text{Var}(X) = \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2) = \mathbb{E}(X^2) - (\mathbb{E}(X))^2 = \sigma^2$.

En pratique, l'espérance de la variable aléatoire X peut être approchée (on parle de *méthode de Monte-Carlo*) en moyennant les valeurs de X , trouvées par un tirage au sort suivant la loi de X . La fondation de cette pratique est la *Loi forte des grands nombres* : si $(X_i, i \geq 1)$ est une suite de variables aléatoires indépendantes, toutes de même loi que la variable aléatoire X , et si $\mathbb{E}(|X|) < \infty$, alors pour presque tout ω ,

$$\mathbb{E}(X) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega)}{n}.$$

Le *Théorème de la limite centrale* précise la qualité de cette convergence en stipulant que, sous les mêmes conditions et la condition supplémentaire $\mathbb{E}(X^2) < \infty$, la variable aléatoire définie par

$$\frac{\sqrt{n}}{\sigma} \left(\frac{X_1(\omega) + \dots + X_n(\omega)}{n} - \mathbb{E}(X) \right)$$

(où σ désigne la variance de X) converge en loi vers une variable aléatoire G , la loi de G étant la loi gaussienne centrée réduite $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$. Rappelons qu'une suite de variables aléatoires Y_n converge en loi vers G si $\mathbb{E}(f(Y_n))$ tend vers $\mathbb{E}(f(G))$ pour toute fonction f continue bornée. Ce résultat explique évidemment le rôle crucial joué par la loi gaussienne en théorie des probabilités.

Introduisons maintenant une dépendance en temps des objets ci-dessus.

Un *processus stochastique* (à temps continu et à valeurs réelles) est une famille $(X_t)_{t \geq 0}$ de variables aléatoires indicées par le temps, définies sur un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{A}, \mathbf{P})$.

Une *filtration* $(\mathcal{F}_t, t \geq 0)$ est une suite croissante, indicée par le temps, de sous tribus de la tribu \mathcal{A} . Un processus stochastique X_t est dit *\mathcal{F}_t -adapté* si, pour chaque t , X_t est une variable aléatoire mesurable par rapport à \mathcal{F}_t . À l'inverse, un processus stochastique X_t étant fixé, la *filtration naturelle* associée à X_t est la filtration \mathcal{F}_t formée, pour chaque $t \geq 0$, de la plus petite tribu rendant les applications $\omega \rightarrow X_s(\omega)$ mesurables pour $0 \leq s \leq t$.

On peut maintenant définir la notion de mouvement brownien. Un processus (à valeurs réelles) X_t est un *mouvement brownien* si c'est un processus à *trajectoires presque sûrement continues* (i.e. en dehors d'un ensemble de probabilité nulle, les fonctions $s \rightarrow X_s(\omega)$ sont continues), à *accroissements indépendants* (si $s \leq t$, la variable aléatoire $X_t - X_s$ est indépendante de la tribu "naturelle" \mathcal{F}_s , i.e. pour tout $A \in \mathcal{F}_s$, et toute fonction f bornée

mesurable $\mathbb{E}(1_A f(X_t - X_s)) = \mathbb{E}(f(X_t - X_s))\mathbf{P}(A)$, et à *accroissements stationnaires* (si $s \leq t$, la loi de $X_t - X_s$ est identique à celle de $X_{t-s} - X_0$). En fait ces trois propriétés impliquent conjointement (ce n'est pas immédiat) que la variable aléatoire $X_t - X_0$ suit nécessairement une loi gaussienne de moyenne rt (pour un certain r) et de variance $\sigma^2 t$ (pour un certain σ). Il n'est pas évident qu'un mouvement brownien existe, mais c'est vrai.

La dernière étape des éléments de théorie des probabilités que nous donnerons ici concerne les *équations différentielles stochastiques*, et cette étape n'est en fait pas un rappel, car le niveau de ces notions dépasse largement le cadre de ce cours, et d'un cours de deuxième cycle de probabilités.

Considérons un ensemble $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$ (Ω_1 sera l'espace du hasard pour la donnée initiale, Ω_2 l'espace du hasard pour les trajectoires browniennes dans le temps), muni d'une probabilité \mathbf{P} (produit de deux probabilités sur Ω_1 et Ω_2). Considérons aussi une tribu \mathcal{F} , une filtration \mathcal{F}_t et un mouvement brownien \mathcal{F}_t -adapté, noté B_t . Soit $\sigma > 0$ une constante fixée, appelée *dispersion*. Soit $f(t, x)$ une fonction régulière, souvent appelée *drift* (ou *dérive* en français). Le cadre mathématique naturel est f mesurable par rapport à t , et lipschitzienne et à croissance au plus linéaire (i.e. $|f(t, x)| \leq C(1 + |x|)$ pour tout t, x) par rapport à x , la constante de Lipschitz et la constante C étant uniforme en $t \in [0, T]$. On introduit alors l'*équation différentielle stochastique*

$$dX_t = f(t, X_t) dt + \sigma dB_t, \quad (4.61)$$

avec comme condition initiale la variable aléatoire $X_0(\omega_1)$, définie sur Ω_1 . Cette écriture (4.61) est formelle. Elle a le sens mathématique suivant : on dit que X_t est solution de (4.61) si

$$X_t(\omega_1, \omega_2) = X_0(\omega_1) + \int_0^t f(s, X_s(\omega_1, \omega_2)) ds + \sigma B_t(\omega_2), \quad (4.62)$$

presque sûrement, l'intégrale s'entendant au sens habituel de Lebesgue.

Nous sommes alors (enfin !) en mesure d'énoncer la propriété capitale pour notre méthode de résolution.

Sous de bonnes hypothèses, si X_t est solution de l'équation différentielle stochastique (4.61) alors la densité de X_t , notée $p(t, x)$, est solution de l'équation de Fokker Planck

$$\frac{\partial p}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial}{\partial x}(f(t, x)p(t, x)) - \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}(t, x) = 0. \quad (4.63)$$

Bien sûr, pour que ceci ait lieu, il faut que les données initiales des deux équations se correspondent, à savoir que $p(t = 0, x)$ soit fixée à la valeur p_0 densité de la variable aléatoire X_0 donnée initiale pour l'équation différentielle stochastique.

Nous allons utiliser ce changement de point de vue pour bâtir notre deuxième méthode de discrétisation. La seule petite nuance par rapport au

cadre développé ci-dessus est que nous allons travailler en dimension 2 au lieu de 1.

Remarque 4.16. S'il est juste (sous les bonnes conditions évoquées ci-dessus, lesquelles reviennent *grosso modo* à supposer que la solution de l'équation de Fokker-Planck est unique) que tout processus X_t solution de l'équation différentielle stochastique a sa densité qui vérifie l'équation de Fokker-Planck, la réciproque est fautive, en toute généralité : tout processus qui a pour densité p n'est pas forcément solution de l'équation différentielle stochastique. Ainsi, un contreexemple est fourni par l'Exercice 4.19. En fait, ceci se comprend en gardant à l'esprit qu'il y a *plus d'information* dans le processus que dans sa densité, puisqu'on peut avec lui calculer plus que de simples espérances $\mathbb{E}(\varphi(X_t))$ (comme par exemple $\mathbb{E}(\psi(X_t, X_s))$). Il est donc "normal" qu'à une densité correspondent beaucoup de processus. Si la densité est une solution d'une équation de Fokker-Planck, il peut y avoir beaucoup de processus l'ayant pour densité et n'entretenant aucun rapport avec l'équation différentielle stochastique sous-jacente.

Remarque 4.17. Dans le cas qui nous intéresse, nous sommes seulement intéressés par les espérances figurant dans la définition du tenseur des contraintes. Elles sont les seules quantités pertinentes du point de vue de la modélisation. Il y a donc toutes les raisons, au vu de la Remarque qui précède, de se concentrer sur le point de vue Fokker-Planck et il peut alors paraître paradoxal de faire appel à l'approche équation différentielle stochastique qui privilégie un processus particulier ayant cette densité, à savoir la solution de l'équation différentielle stochastique. Seuls des aspects d'efficacité numérique justifient en fait un tel changement de point de vue.

Remarque 4.18. Nous n'avons volontairement rien dit de l'existence et de l'unicité de la solution X_t de l'équation différentielle stochastique. Il existe bien sûr tout un cadre théorique qui formalise des théorèmes d'existence et d'unicité pour de telles équations. En fait, pour l'unicité, la bonne notion est le plus souvent du point de vue pratique la notion d'*unicité en loi* (aussi appelée *unicité faible*), qui est vraie quand toutes les solutions X_t donnent la même densité p et donc les mêmes espérances calculées. Peu importe en fait le processus particulier X_t .

En fait, il est utile de signaler que la présentation que nous venons de faire d'une équation différentielle stochastique est une présentation simplifiée. Consacrons quelques lignes à une présentation plus générale. Notre motivation est que pour d'autres modèles de polymères, comme ceux formés d'un assemblage de barres *rigides* et non de ressorts, l'objet mathématique obtenu lors de la modélisation est bien une équation différentielle stochastique mais pas une de la forme simple (4.61).

A l'aide d'un mouvement brownien standard (de moyenne nulle ($r = 0$) et de variance t ($\sigma = 1$)), noté B_t , on peut construire la notion d'*intégrale*

d'Itô. Cette intégrale est construite à la manière de l'intégrale de Riemann, en la définissant d'abord pour les fonctions en escalier puis en approchant une fonction plus générale par une suite de fonctions en escaliers. Pour un découpage $\{s_0 = 0, \dots, s_j, \dots, s_n = t\}$ de $[0, t]$ et un processus

$$Y_s(\omega) = \sum_{j=1}^n \tilde{Y}_{j-1}(\omega) 1_{]s_{j-1}, s_j]}(s)$$

bâti avec des variables aléatoires \tilde{Y}_j (telles que $\mathbb{E}(|\tilde{Y}_j|) < +\infty$), on pose

$$\int_0^t Y_s dB_s = \sum_{j=1}^n \tilde{Y}_{j-1} (B_{s_j} - B_{s_{j-1}}).$$

Puis, par un procédé dit d'approximation, cela permet de définir un nouveau processus stochastique, dit intégrale d'Itô du processus $(Y_t)_{0 \leq t \leq T}$

$$\int_0^t Y_s dB_s,$$

dès que $\int_0^T Y_t(\omega)^2 dt < +\infty$, pour presque tout ω (cette condition est par exemple remplie dès que Y_t est un processus continu). Dans le cas simple où $Y_t \equiv 1$, on retrouve bien sûr

$$\int_0^t dB_s = B_t.$$

Reprenons alors l'ensemble $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$ introduit ci-dessus, une tribu \mathcal{F} , une filtration \mathcal{F}_t et un mouvement brownien \mathcal{F}_t -adapté, noté B_t . Considérons de nouveau un drift régulier f , mais aussi une dispersion qui est maintenant une fonction σ régulière (ayant typiquement les mêmes propriétés mathématiques que celles mentionnées ci-dessus pour f). On introduit alors l'équation différentielle stochastique

$$dX_t = f(t, X_t) dt + \sigma(t, X_t) dB_t, \quad (4.64)$$

avec comme condition initiale la variable aléatoire $X_0(\omega_1)$, définie sur Ω_1 . Comme ci-dessus, il s'agit d'une écriture formelle. On dit que X_t est solution de (4.64) si

$$X_t(\omega_1, \omega_2) = X_0(\omega_1) + \int_0^t f(s, X_s(\omega_1, \omega_2)) ds + \left(\int_0^t \sigma(s, X_s) dB_s \right) (\omega_1, \omega_2), \quad (4.65)$$

presque sûrement, la première intégrale s'entendant au sens habituel de Lebesgue, et la seconde au sens d'Itô. Les équations différentielles stochastiques comme (4.65) font aujourd'hui l'objet d'une importante littérature et apparaissent dans de nombreux champs de la modélisation (l'un des plus célèbres étant la finance mathématique).

Exercice 4.19. On considère l'équation différentielle stochastique

$$dX_t = -\frac{1}{2} X_t dt + dW_t, \quad (4.66)$$

pour la donnée initiale X_0 , de loi la gaussienne centrée réduite. Montrer que sa solution est donnée par

$$X_t = e^{-t/2} X_0 + \int_0^t e^{(s-t)/2} dW_s,$$

et vérifier que la loi de X_t est la gaussienne centrée réduite. Montrer aussi que l'équation de Fokker-Planck associée à (4.66) est

$$\frac{\partial p(t, x)}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (x p(t, x)) - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(t, x) = 0, \quad (4.67)$$

avec la donnée initiale $p(0, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$. Vérifier alors que le processus constant gaussien centré réduit $Y_t = G$ a sa densité qui vérifie (4.67) alors que bien sûr lui-même ne vérifie pas l'équation différentielle stochastique (4.66). Conclure.

Application à une méthode alternative de discrétisation

On choisit d'évaluer $\tau(y, t)$, non pas via la résolution de l'équation de Fokker-Planck

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, y, P, Q) = & -\frac{\partial}{\partial P} \left(\left(\frac{\partial u}{\partial y}(y, t) Q - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} P \right) \psi(t, y, P, Q) \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial Q} \left(\frac{2\mathcal{K}}{\zeta} Q \psi(t, y, P, Q) \right) + \frac{\sigma^2}{\zeta^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial P^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q^2} \right) \psi(t, y, P, Q), \end{aligned} \quad (4.68)$$

mais en simulant le système d'équations différentielles stochastiques associé, qui s'écrit

$$\begin{cases} dP(y, t) = \left(\frac{\partial u}{\partial y}(y, t) Q(t) - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta} P(y, t) \right) dt + \frac{\sqrt{2}\sigma}{\zeta} dV_t \\ dQ(t) = -\frac{2\mathcal{K}}{\zeta} Q(t) dt + \frac{\sqrt{2}\sigma}{\zeta} dW_t \end{cases} \quad (4.69)$$

où V_t et W_t sont deux mouvements browniens monodimensionnels indépendants.

On peut alors montrer (cf. la section ci-dessus) que la densité $\psi(P, Q, t)$ de la variable aléatoire $(P(t), Q(t))$ est solution de (4.68). On rappelle, d'après le

paragraphe précédent, que, par définition, à chaque instant t , et pour chaque y fixé,

$$\mathbb{E}(f(P(t), Q(t))) = \int f(P, Q) \psi(P, Q, t) dP dQ$$

pour toute fonction f mesurable bornée. On admettra que ceci entraîne aussi, dans les conditions où nous sommes, en choisissant $f(a, b) = ab$, que le tenseur des contraintes s'écrit, pour tout instant t , des deux façons suivantes

$$\tau(y, t) = n_p \mathcal{K} \int_{\mathbf{R}^2} P Q \psi(t, y, P, Q) dP dQ = n_p \mathcal{K} \mathbb{E}(P(y, t) Q(t)). \quad (4.70)$$

C'est bien sûr de la seconde façon que nous choisissons maintenant de le calculer.

Remarque 4.20. Cette seconde vision des choses, qui revient aux processus stochastiques plutôt qu'à leur loi, est en fait dans notre cas un juste retour aux sources. Nous revenons à la simulation d'une haltère générique, dont le vecteur bout-à-bout a pour coordonnées (P_t, Q_t) un couple de processus stochastiques dont l'évolution est régie par une équation différentielle stochastique. Le tenseur des contraintes s'évalue alors par une espérance, c'est-à-dire dans la discrétisation par une moyenne sur les configurations des différents polymères en un point de l'espace. Cette vision est tout-à-fait naturelle dans notre contexte.

On complète le système (4.69) de conditions initiales homogènes en y , et on note que Q ne dépend pas de la variable d'espace y . On utilise un schéma d'Euler explicite pour intégrer les deux EDS. On obtient ainsi un système discret de la forme

$$\begin{cases} P_i^{n+1} = \Delta t \frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{\Delta y} Q^n + \left(1 - \frac{2\mathcal{K} \Delta t}{\zeta}\right) P_i^n + \frac{\sqrt{2\Delta t} \sigma}{\zeta} V_i^n \\ Q^{n+1} = \left(1 - \frac{2\mathcal{K} \Delta t}{\zeta}\right) Q^n + \frac{\sqrt{2\Delta t} \sigma}{\zeta} W^n \end{cases} \quad (4.71)$$

pour $1 \leq i \leq N$, où V_i^n et W^n représentent des variables gaussiennes centrées réduites indépendantes. Ainsi, $\sqrt{\Delta t} V_i^n$ est une approximation discrète de la variable aléatoire accroissement $V_{t^n + \Delta t} - V_{t^n}$ dans la maille $[\frac{i-1}{N}, \frac{i}{N}]$. On évalue alors

$$\tau_i^{n+1} = n_p \mathcal{K} \mathbb{E}(P_i^{n+1} Q^{n+1}) \quad (4.72)$$

Pour évaluer la contrainte $(\tau^h)_i$, on engendre en pratique J réalisations des variables aléatoires P_i^n et Q^n :

$$\begin{aligned} P_{i,j}^{n+1} &= \Delta t \frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{\Delta y} Q_j^n + \left(1 - \frac{2\mathcal{K} \Delta t}{\zeta}\right) P_{i,j}^n + \frac{\sqrt{2\Delta t} \sigma}{\zeta} V_{i,j}^n \\ Q_j^{n+1} &= \left(1 - \frac{2\mathcal{K} \Delta t}{\zeta}\right) Q_j^n + \frac{\sqrt{2\Delta t} \sigma}{\zeta} W_j^n \end{aligned} \quad (4.73)$$

pour $1 \leq j \leq J$ (où les variables $V_{i,j}^n$ et W_j^n sont des gaussiennes centrées réduites indépendantes), et on obtient $(\tau^h)_i^{n+1}$ en calculant l'espérance empirique (cf. la loi forte des grands nombres) :

$$(\tau^h)_i^{n+1} = \frac{n_p \mathcal{K}}{J} \sum_{j=1}^J P_{i,j}^{n+1} Q_j^{n+1} \quad (4.74)$$

Il reste enfin à préciser les conditions initiales sur P et Q . Le fluide étant au repos à l'instant initial, on prend naturellement $(\tau^h)_i^0 = 0$ pour tout i , et pour cela on choisit pour P_i^0 et Q^0 des gaussiennes centrées indépendantes.

A ce stade, on sait donc simuler complètement le système (4.35) sous la forme (4.49)-(4.73)-(4.74).

Une remarque très importante s'impose alors : comme la contrainte $(\tau^h)_i^{n+1}$ discrète s'exprime par une moyenne empirique (4.74), elle est donc *aussi une variable aléatoire*, alors que tant qu'on n'a pas discrétisé au niveau Monte-Carlo, elle est encore une variable déterministe (l'espérance (4.72) est une variable *déterministe*). Il s'ensuit que, dans cette deuxième méthode basée sur une technique stochastique, et contrairement à la première méthode purement déterministe, la vitesse macroscopique du fluide, qui dépend de $(\tau^h)_i^{n+1}$ via l'équation macroscopique (4.46), est aussi une variable aléatoire !

Ceci a la conséquence inattendue suivante : pour calculer avec cette seconde méthode une vitesse du fluide, ou un champ de contrainte, il faudra moyenner le résultat sur plusieurs expériences numériques.

Même moyennée, une telle simulation rencontre les habituelles difficultés des simulations de type Monte-Carlo, comme la présence de bruit. Nous terminons donc cette section par des notions plus avancées sur ce type de simulation, que le lecteur peu attiré par ces aspects peut aisément omettre, sans préjudice pour la suite du cours.

Si on dispose de J réalisations indépendantes $(X_i)_{1 \leq i \leq J}$ d'une variable aléatoire X dont on cherche à calculer l'espérance, on a par le théorème de la limite centrale

$$\mathbf{P} \left(\frac{1}{J} \sum_{i=1}^J X_i \in \left[\mathbb{E}(X) - 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{J}}, \mathbb{E}(X) + 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{J}} \right] \right) \approx 0.95$$

où $\sigma^2 = \text{Var}(X) = \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2)$ désigne la variance de X .

Exercice 4.21. Montrer le résultat suivant, qui donne également une estimation de l'erreur d'approximation, mais cette fois en norme L^2 :

$$\mathbb{E} \left(\left(\frac{1}{J} \sum_{i=1}^J X_i - \mathbb{E}(X) \right)^2 \right) \leq \frac{\sigma^2}{J}.$$

On voit donc qu'à nombre de réalisations fixé, plus la variance est petite, meilleure est l'approximation.

Pour réduire la variance et améliorer ainsi la convergence, on peut mettre en oeuvre des méthodes dites de *réduction de variance*. En voici deux exemples.

La première méthode consiste à corrélérer en espace les trajectoires des P_i . L'idée est de diminuer le bruit dû aux variations du brownien en espace dans le calcul du tenseur des contraintes. Concrètement, cette méthode consiste à prendre comme condition initiale sur les P_i : $P_{i,j}^0 = P_j^0$, P_j^0 désignant des gaussiennes centrées *ne dépendant pas de i* et à remplacer (4.73) par

$$P_{i,j}^{n+1} = \Delta t \frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{\Delta y} Q_j^n + \left(1 - \frac{2\mathcal{K} \Delta t}{\zeta}\right) P_{i,j}^n + \frac{\sqrt{2\Delta t}\sigma}{\zeta} V_j^n. \quad (4.75)$$

Noter que V_j^n a remplacé $V_{i,j}^n$.

La seconde méthode (de portée plus générale) consiste à utiliser des variables de contrôle. Il s'agit de ne pas calculer directement $\mathbb{E}(PQ)$, mais séparément chacun des deux termes de la somme

$$\mathbb{E}(PQ) = \mathbb{E}(\tilde{P}\tilde{Q}) + \mathbb{E}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q})$$

où \tilde{P} et \tilde{Q} sont deux processus aléatoires (définis par des EDS) tels que

- $\mathbb{E}(\tilde{P}\tilde{Q})$ soit facile à calculer "analytiquement" (tout au moins sans simulation stochastique)
- $\tilde{P}\tilde{Q}$ soit proche de PQ de telle sorte que $\text{Var}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q}) \ll \text{Var}(PQ)$.

Les deux choix extrêmes sont les suivants :

- $\tilde{P} = \tilde{Q} = 0$ auquel cas $\mathbb{E}(\tilde{P}\tilde{Q})$ est très facile à calculer mais on n'a rien gagné en variance ;
- $\tilde{P} = P$ et $\tilde{Q} = Q$ auquel cas $\text{Var}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q}) = 0$ mais $\mathbb{E}(\tilde{P}\tilde{Q})$ n'est alors pas plus facile à calculer que $\mathbb{E}(PQ)$!

Il s'agit donc de trouver un compromis entre deux exigences incompatibles. Dans le cas qui nous intéresse, on peut définir \tilde{P} et \tilde{Q} par les EDS vérifiées par P et Q respectivement *en l'absence de cisaillement*. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} d\tilde{P}(t) &= -\frac{2\mathcal{K}}{\zeta} \tilde{P}(t)dt + \frac{\sqrt{2}\sigma}{\zeta} dV_t \\ d\tilde{Q}(t) &= -\frac{2\mathcal{K}}{\zeta} \tilde{Q}(t)dt + \frac{\sqrt{2}\sigma}{\zeta} dW_t. \end{aligned}$$

On observe qu'alors \tilde{Q} et Q vérifient la même EDS et que \tilde{P} ne dépend plus de y . Par ailleurs, on a évidemment $\mathbb{E}(\tilde{P}\tilde{Q}) = 0$ car \tilde{P} et \tilde{Q} sont indépendants, et chacun d'espérance nulle (c'est un simple calcul sur l'EDS ci-dessus). Pour simuler $\mathbb{E}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q})$ on utilise le schéma d'Euler explicite. On pose donc, pour chaque n , $\tilde{Q}_j^n = Q_j^n$ et

$$\tilde{P}_{i,j}^{n+1} = \left(1 - \frac{2\mathcal{K}}{\zeta}\right) \tilde{P}_{i,j}^n + \frac{\sqrt{2\Delta t}\sigma}{\zeta} V_{i,j}^n. \quad (4.76)$$

Exercice 4.22. Pour obtenir effectivement une réduction de variance, il est nécessaire d'utiliser pour simuler \tilde{P} les mêmes $V_{i,j}^n$ que ceux utilisés pour simuler P . Pour quelle raison ?

Pour calculer $(\tau^h)_i^{n+1}$ on utilise donc finalement, en lieu et place de (4.74),

$$\begin{aligned} (\tau^h)_i^{n+1} &= n_p \mathcal{K} \mathbb{E}(PQ) \\ &= n_p \mathcal{K} (\mathbb{E}(\tilde{P}\tilde{Q}) + \mathbb{E}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q})) \\ &= n_p \mathcal{K} (0 + \mathbb{E}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q})) \\ &\approx \frac{n_p \mathcal{K}}{J} \sum_{j=1}^J (P_{i,j}^{n+1} Q_j^{n+1} - \tilde{P}_{i,j}^{n+1} \tilde{Q}_j^{n+1}) \\ &\approx \frac{n_p \mathcal{K}}{J} \sum_{j=1}^J ((P_{i,j}^{n+1} - \tilde{P}_{i,j}^{n+1}) Q_j^{n+1}) \end{aligned} \quad (4.77)$$

Avant de passer à un résultat numérique, il est utile de d'abord synthétiser la démarche en indiquant ce que représente globalement la simulation numérique. A chaque instant t^n , connaissant $((u^h)^n, (\tau^h)^n)$, on avance en temps d'un pas de longueur Δt de la manière suivante :

- (1) connaissant les $(\tau^h)_i^n$ pour tous les intervalles indicés par i , on insère ces valeurs dans la discrétisation éléments finis en espace (y) et différences finies en temps (4.49) de l'équation macroscopique fluide ; on en déduit les nouvelles valeurs de la vitesse U_i^{n+1} ($1 \leq i \leq N-1$).
- (2) en chaque intervalle de longueur Δy ,
 - (2.1) on simule une collection de J réalisations des processus de Wiener $V_{i,j}^n$ et W_j^n ($1 \leq j \leq J$) (en fait les seconds sont indépendants de l'intervalle, mais c'est une singularité due à la simplicité du cas que nous avons choisi) ; si on adopte une méthode de réduction de variance par variables de contrôle, on met à jour la variable $\tilde{P}_{i,j}$ par (4.76) ;
 - (2.2) en utilisant les valeurs de U_i^{n+1} ($1 \leq i \leq N-1$), on réalise l'avancée d'un pas de temps des schémas aux différences finies (4.73) discrétisant les équations différentielles stochastiques (4.69), d'où les valeurs de $P_{i,j}^{n+1}$ et Q_j^{n+1} ;
 - (2.3) en moyennant sur les J réalisations, on obtient la moyenne empirique (4.74) donnant la valeur du tenseur des contraintes $(\tau^h)_i^{n+1}$ au nouveau pas de temps, et on boucle.

Remarque 4.23. Il faut bien sûr noter que les sous-étapes (2.1)-(2.2)-(2.3) peuvent être effectuées en parallèle (ce qui peut être un gain de temps colossal, vu le nombre d'intervalles). Dans un gros calcul, sur un gros ordinateur, on distribue sur chaque processeur un certain nombre de tels intervalles en espace. Charge à chacun de faire évoluer d'un pas de temps “ses” haltères. De même (mais le gain est moins important, et on pourrait faire autrement), les étapes (1) et (2) décrites ci-dessus peuvent être faites simultanément.

Remarque 4.24. On remarquera qu'il y a exactement autant d'équations différentielles stochastiques que de dimensions dans l'espace de configuration. Il est donc clair que le coût du calcul est proportionnel à la dimension, et non exponentiel comme dans le cas des discrétisations de l'équation de Fokker-Planck (en effet, s'il faut N points pour une discrétisation différences finies en 1D, il faudra, pour obtenir la même précision, grosso modo N^d points en dimension d).

Ayant décrit les deux approches Fokker-Planck (méthode 1 de la Section 4.3.3) et Equations différentielles Stochastiques (méthode 2 de la Section 4.3.4), il est utile de commenter leurs intérêts respectifs.

La méthode 1 est pour l'instant restreinte aux cas de petites dimensions, vu les questions de complexité évoquées dans la Remarque 4.24. Cependant, *quand elle est possible*, elle est plus rapide que la méthode 2 (dans cette dernière, la génération du hasard, plus la gestion des différentes réalisations des processus prennent du temps), et ceci se comprend d'un point de vue heuristique si on se souvient de la Remarque 4.17 : la méthode 1 ne calcule que ce qui est requis par le modèle, à savoir la densité, alors que la méthode 2 calcule plus que cela, à savoir le processus. Le bilan actuel de la recherche en ce domaine est donc : on utilise la méthode 1 dès que cela est possible, à savoir pour les cas de petite dimension, et la méthode 2 pour traiter les plus grandes dimensions. Les efforts portent à la fois sur des tentatives d'extension de la méthode 1 à des plus grandes dimensions, et des accélérations de la méthode 2 en grandes dimensions. Bien entendu, cela n'empêche pas de tester et améliorer la méthode 2 dès la petite dimension, c'est ce que nous avons fait ici.

4.3.5 Un résultat numérique

Le résultat ci-dessus met en évidence l'effet d'*overshoot* : lorsqu'on met en mouvement un fluide viscoélastique dans un plan de Couette par un échelon de vitesse (4.40), la vitesse peut prendre localement des valeurs supérieures à la vitesse d'équilibre asymptotique

$$u(y) = 1 - \frac{y}{H},$$

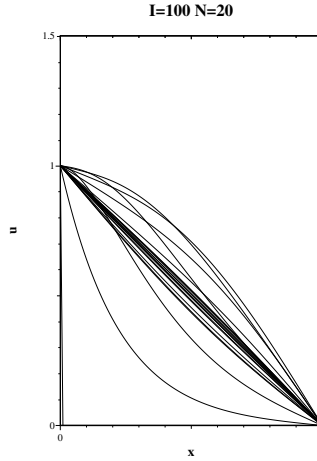


Fig. 4.6. Evolution du profil de vitesse au cours du temps. I désigne le nombre de pas de discrétisation en espace et N le nombre de pas de temps.

ce qui n'arrive jamais avec un fluide newtonien.

L'interprétation est la suivante. Quand les polymères ne sont pas orientés dans le sens de l'écoulement, le gradient de vitesse les réoriente, tout en les étirant. Les ressorts stockent alors de l'énergie. Une fois qu'ils sont orientés, les ressorts peuvent se détendre (ils ne sentent plus de gradients de vitesse) et ils libèrent alors de l'énergie dans le fluide qui s'accélère au-delà de la vitesse asymptotique. Ce phénomène a par exemple l'application suivante : on rajoute parfois des polymères dans l'eau des lances d'incendie pour qu'à puissance égale leur jet porte plus loin.

4.4 A lire après le Chapitre 5 : notions de base d'analyse numérique des EDS

Nous donnons ici quelques éléments d'analyse numérique pour les schémas de discrétisation des équations différentielles stochastiques. Comme l'indique son titre, cette section est à lire *en deuxième lecture*, quand le Chapitre 5, où figurent notamment les notions de base pour l'analyse numérique des équations différentielles *ordinaires*, c'est-à-dire déterministes, aura été étudié.

Pour notre exposé, nous allons prendre comme prototype d'équation différentielle stochastique l'équation suivante

$$dX_t = f(X_t) dt + \sigma(X_t) dB_t, \quad (4.78)$$

de donnée initiale X_0 , pour des données f et σ suffisamment régulières (i.e. lipschitziennes et à croissance au plus linéaire). Des extensions à de telles

fonctions f et σ dépendant explicitement du temps (i.e. $f(t, X_t)$ et $\sigma(t, X_t)$) peuvent être envisagées, mais elles ne le seront pas ici. De même que ne le seront pas le cas de données f et σ moins régulières.

Comme d'habitude, on rappelle que (4.78) n'est qu'une *notation* pour l'équation

$$X_t = X_0 + \int_0^t f(X_s) ds + \int_0^t \sigma(X_s) dB_s, \quad (4.79)$$

vraie presque sûrement, et pour tout temps t . Pour l'approximation de la solution X_t de cette équation aux temps $t_n = n\Delta t$ par une variable aléatoire en temps discret X_n , le schéma le plus simple est le schéma dit *schéma d'Euler-Maruyama* suivant, très intuitif,

$$X_{n+1} = X_n + f(X_n) \Delta t + \sigma(X_n) (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}). \quad (4.80)$$

C'est en fait le schéma que nous avons spontanément utilisé en (4.71). Dans la pratique, comme l'accroissement $B_{t_{n+1}} - B_{t_n}$ est une variable aléatoire gaussienne centrée de variance $t_{n+1} - t_n = \Delta t$, on simulera

$$X_{n+1} = X_n + f(X_n) \Delta t + \sigma(X_n) \sqrt{\Delta t} \mathcal{N}(0, 1), \quad (4.81)$$

où $\mathcal{N}(0, 1)$ est une variable aléatoire gaussienne centrée réduite.

Comme X_{t_n} , solution exacte de (4.78) au temps $t_n = n\Delta t$, et X_n sont des variables aléatoires, toutes les normes ne sont pas équivalentes pour évaluer leur différence. Il s'ensuit différentes notions de convergence du schéma numérique.

4.4.1 Convergence forte du schéma

La première notion de convergence est la suivante.

Définition 4.25. *Le schéma numérique pour la simulation de l'équation différentielle stochastique est dit avoir l'ordre $\alpha > 0$ de convergence forte s'il existe une constante C , éventuellement dépendant de l'intervalle $[0, T]$ de simulation, telle que, pour toute discrétisation de pas Δt , on a, pour tout n ,*

$$\mathbf{E}(|X_n - X_{t_n}|) \leq C (\Delta t)^\alpha. \quad (4.82)$$

A l'aide de cette définition, regardons en détail la discrétisation que nous avons effectuée en (4.71). Nous avons écrit une approximation du type

$$\begin{aligned} X_{n+1} - X_n &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(X_t) dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} dB_t \\ &\approx f(X_n) \Delta t + (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) \end{aligned} \quad (4.83)$$

pour une équation différentielle stochastique en fait de la forme (4.61) i.e.

$$dX_t = f(t, X_t) dt + \sigma dB_t.$$

Il est intuitif de voir (et ceci peut évidemment se montrer rigoureusement) que l'ordre de cette approximation est Δt , puisque l'erreur d'approximation est entièrement due au premier terme d'intégrale et est celle de l'habituel schéma d'Euler explicite. Cependant, cette situation simplifiée où $\sigma \equiv 1$ (la dispersion est constante devant le brownien) est une situation trompeuse. En fait, en toute généralité, on peut montrer que le schéma d'Euler-Maruyama est fortement convergent d'ordre $\alpha = 1/2$ seulement.

On peut en fait interpréter cet écart d'un demi-ordre entre le schéma et son analogue déterministe comme une "erreur de calcul" dans l'établissement du schéma d'Euler-Maruyama. D'une certaine manière, on a mené pour écrire le schéma (4.80) à partir de l'équation (4.78) un calcul différentiel habituel (c'est-à-dire déterministe) alors qu'on aurait dû faire un calcul différentiel particulier, dit *calcul d'Itô*, tenant compte du fait que le mouvement brownien n'est pas à variation quadratique bornée (ou, en termes plus simples, que $(dB_t)^2$ est d'ordre dt).

Une manière de faire percevoir l'erreur commise est la suivante. Pour l'intégrale de Lebesgue, il est évident que

$$\left| \sum_{n=0}^{N-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\sigma(t) - \sigma(t_n)) dt \right| \leq \|\sigma'\|_{L^\infty} \sum_{n=0}^{N-1} (t_{n+1} - t_n)^2 = O(dt). \quad (4.84)$$

Mais pour l'intégrale d'Itô, la même stratégie de majoration donne formellement

$$\left| \sum_{n=0}^{N-1} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (\sigma(B_t) - \sigma(B_{t_n})) dB_t \right| \leq \|\sigma'\|_{L^\infty} \sum_{n=0}^{N-1} (B_{t_{n+1}} - B_{t_n})^2 = O(1), \quad (4.85)$$

en vertu de la loi forte des grands nombres (les variables aléatoires $(B_{t_{n+1}} - B_{t_n})^2$ sont indépendantes et toutes d'espérance $t_{n+1} - t_n = dt$). Approcher la fonction par la fonction en escalier "naturelle" ne conduit donc pas à la qualité d'approximation voulue. Alternativement, au niveau continu, cela correspond au fait que la loi de dérivation des fonctions composées n'est pas celle du cadre déterministe (on parle de formule d'Itô pour une telle loi).

Précisons un peu cela. Avec un calcul différentiel classique, on écrit à partir de (4.78), c'est-à-dire de la forme intégrée (4.79),

$$\begin{aligned} X_{n+1} - X_n &= \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(X_t) dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \sigma(X_t) dB_t \\ &\approx f(X_n) \Delta t + \sigma(X_n) (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) \end{aligned} \quad (4.86)$$

où l'approximation de la seconde intégrale est simplement

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \sigma(X_t) dB_t \approx \sigma(X_n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} dB_t = \sigma(X_n) (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) \quad (4.87)$$

d'où le schéma (4.80). Cette approximation (4.87) n'est pas exacte à l'ordre Δt , mais à l'ordre $(\Delta t)^{1/2}$ parce qu'elle consiste à négliger la dérivée de $\sigma(X_s)$ (ce qui n'a aucune influence dans le cas où σ est constant, conformément à ce qu'on a vu ci-dessus). On a en fait oublié un terme d'ordre supérieur à Δt , rendant impossible d'obtenir un schéma fortement convergent d'ordre 1.

En fait, la bonne façon de procéder est de faire un calcul d'Itô sur $\sigma(X_t)$ qui s'écrit (on l'admet)

$$\begin{aligned}\sigma(X_t) &= \sigma(X_{t_n}) + \int_{t_n}^t \sigma(X_s) \sigma'(X_s) dB_s \\ &\quad + \int_{t_n}^t \left(\sigma'(X_s) f(X_s) + \frac{1}{2} \sigma''(X_s) \sigma^2(X_s) \right) ds.\end{aligned}$$

Cette relation est la forme mathématique de

$$d(\sigma(X_t)) = \sigma'(X_t) dX_t + \frac{1}{2} \sigma''(X_t) \sigma^2(X_t) dt,$$

qui est une loi des fonctions composées différente du cas déterministe. Elle conduit donc à approcher $\sigma(X_t)$ selon

$$\sigma(X_t) \approx \sigma(X_{t_n}) + \int_{t_n}^t \sigma(X_s) \sigma'(X_s) dB_s \approx \sigma(X_{t_n}) + \sigma(X_n) \sigma'(X_n) (B_t - B_{t_n})$$

En insérant cela dans l'intégrale (4.87), on obtient donc

$$\begin{aligned}\int_{t_n}^{t_{n+1}} \sigma(X_t) dB_t &\approx \sigma(X_{t_n}) (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) + \sigma(X_n) \sigma'(X_n) \int_{t_n}^{t_{n+1}} (B_t - B_{t_n}) dB_t \\ &= \sigma(X_{t_n}) (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) + \sigma(X_n) \sigma'(X_n) ((B_{t_{n+1}} - B_{t_n})^2 - \Delta t)\end{aligned}$$

En regroupant, on a introduit le schéma dit *schéma d'Euler-Milstein*

$$\begin{aligned}X_{n+1} - X_n &= f(X_n) \Delta t + \sigma(X_n) (B_{t_{n+1}} - B_{t_n}) \\ &\quad + \frac{1}{2} \sigma(X_n) \sigma'(X_n) ((B_{t_{n+1}} - B_{t_n})^2 - \Delta t)\end{aligned}\tag{4.88}$$

Ce schéma est, lui, fortement convergent d'ordre 1 pour la discrétisation de (4.78) (avec des données f et σ assez régulières), comme son analogue déterministe, le schéma d'Euler explicite. On notera bien sûr que, quand le terme σ devant le brownien est une fonction constante, ce qui est le cas dans notre simulation de fluides polymériques, les deux schémas d'Euler-Maruyama et Euler-Milstein sont identiques.

4.4.2 Convergence faible du schéma

La notion d'ordre de convergence forte mesure l'écart entre simulation numérique et solution exacte en termes d'espérance, c'est-à-dire en moyenne. Elle a notamment une implication sur l'écart pour chaque réalisation, puisque dès que les variables aléatoires $|X_n - X_{n\Delta t}|$ sont d'espérance bornée, on peut affirmer

$$\mathbb{P}(|X_n - X_{t_n}| \geq a) \leq \frac{1}{a} \mathbb{E}(|X_n - X_{t_n}|), \quad (4.89)$$

et donc, dans la situation d'un schéma d'ordre $1/2$,

$$\mathbb{P}\left(|X_n - X_{t_n}| \geq (\Delta t)^{1/4}\right) \leq C(\Delta t)^{1/4}, \quad (4.90)$$

ce qui donne une évaluation, réalisation par réalisation, de l'erreur numérique réalisée.

On peut être moins exigeant que la convergence forte, qui demande la convergence en moyenne, et introduire la.

Définition 4.26. *Dans les mêmes conditions que la Définition précédente, on dit que le schéma a l'ordre β de convergence faible, s'il existe une constante C telle que*

$$\left| \mathbb{E}(\varphi(X_n)) - \mathbb{E}(\varphi(X_{n\Delta t})) \right| \leq C (\Delta t)^\beta, \quad (4.91)$$

pour toute fonction φ de classe C^∞ , telle qu'elle-même et toutes ses dérivées soient à croissance polynômiale à l'infini.

Cette définition se justifie en ce que, dans la plupart des situations pratiques, on ne cherche pas à calculer véritablement le processus X_t lui-même, mais seulement une espérance bâtie à partir de ce processus, ne faisant donc intervenir que la densité de ce processus, ou en d'autres termes des $\mathbb{E}(\varphi(X_{n\Delta t}))$, dont la précision est précisément régie par cette notion de convergence faible. Ceci est exactement la situation pour notre simulation de fluides polymériques, puisque les équations différentielles stochastiques sont alors utilisées pour calculer le tenseur des contraintes par la formule (4.70), c'est-à-dire une espérance.

On peut montrer que le schéma d'Euler-Maruyama est faiblement convergent d'ordre $\beta = 1$ pour l'approximation de l'équation différentielle stochastique (4.78) avec des données f et σ suffisamment régulières. La notion de convergence faible permet donc de retrouver le résultat d'ordre du cadre déterministe.

4.4.3 Stabilité asymptotique du schéma

Introduisons une dernière notion. Pour juger de la qualité d'un schéma de discrétisation numérique sur les longs temps d'intégration, nous avons introduit pour les équations différentielles ordinaires la notion de stabilité, mesuré sur l'équation prototype (5.22) à savoir

$$y'(t) = \lambda y(t)$$

pour $\lambda \in \mathbb{C}$. Nous mesurons alors la capacité d'un schéma à reproduire la convergence en temps long vers zéro, lorsque λ a une partie réelle négative. Ici, pour notre cadre stochastique, nous introduisons de même l'équation différentielle stochastique

$$dX_t = \lambda X_t dt + \mu X_t dB_t, \quad (4.92)$$

où λ et μ sont deux complexes fixés. Il est facile de voir que selon la position de λ et μ dans le plan complexe, on a le comportement suivant de la solution de (4.92) quand $t \rightarrow +\infty$,

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(X_t^2) = 0 \quad \text{si et seulement si} \quad \operatorname{Re}(\lambda) + \frac{1}{2} |\mu|^2 < 0 \quad (4.93)$$

ce qu'on appelle *stabilité en moyenne* et

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} |X_t| = 0 \text{ avec probabilité 1} \quad \text{si et seulement si} \quad \operatorname{Re}(\lambda - \frac{1}{2} \mu^2) < 0 \quad (4.94)$$

ce qu'on appelle *stabilité asymptotique*. Noter que les deux notions de stabilité coïncident dans le cas déterministe $\mu = 0$, et redonnent ce qui est connu. De là, la double définition suivante.

Définition 4.27. *On appelle domaine de stabilité en moyenne, et respectivement domaine de stabilité asymptotique, d'un schéma numérique donné les domaines des valeurs de $(\Delta t, \lambda, \mu)$ dans $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{C}^2$ pour lesquelles le schéma numérique reproduit pour la solution discrète les comportements des membres de gauche de (4.93) et (4.94).*

Pour le schéma d'Euler-Maruyama, on peut montrer

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \mathbb{E}(X_n^2) = 0 \quad \text{si et seulement si} \quad |1 + \Delta t \lambda|^2 + \Delta t |\mu|^2 < 1 \quad (4.95)$$

et

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} |X_n| = 0 \quad \text{avec probabilité 1} \quad (4.96)$$

$$\text{si et seulement si} \quad \mathbb{E} \left(\log |1 + \Delta t \lambda + \sqrt{\Delta t} \mu \mathcal{N}(0, 1)| \right) < 0$$

En conclusion de cette section sur les équations différentielles stochastiques, soulignons le fait que l'on ne doit pas s'étonner du fait que les résultats d'analyse numérique sur la simulation de ces équations sont beaucoup plus pauvres que leurs analogues sur les équations déterministes. La raison est essentiellement que les difficultés sont plus grandes, et le sujet plus jeune (il a à peine 50 ans alors que la convergence du schéma d'Euler a été utilisée par Cauchy pour sa preuve constructive de solution).

4.5 Bibliographie

Les modèles standards de fluides newtoniens incompressibles, ainsi que leur simulation numérique peuvent être lus respectivement dans Y. Bamberger [10], B. Lucquin et O. Pironneau [54] M. Gunzburger [40] par ordre de difficulté. Pour la simulation des fluides non newtoniens par des modèles purement macroscopiques on pourra se reporter à R. Keunings [48].

La physique et la rhéologie des polymères font l'objet d'une littérature importante. Les propriétés basiques des polymères que nous avons décrites sont extraites du cours de F. Devreux [32]. Pour les modèles micro-macro pour les fluides polymériques, les références les plus pédagogiques, avec lesquelles ont été écrites les pages qui précèdent sont constituées par les traités de M. Doi [28], M. Doi et S.F. Edwards [29], R. Bird, Ch. Curtiss, C. Armstrong, O. Hassager [14], H.C. Ottinger [62]. Une autre excellente référence est le livre de R. Owens et T. Phillips [63].

On pourra lire aussi dans [62] des éléments de théorie des probabilités adaptés aux modèles étudiés. Pour une introduction très pédagogique à la simulation des équations différentielles stochastiques, on recommande l'article de D. J. Higham [45].

Enfin, signalons que l'analyse mathématique et numérique de modèles micro-macro abordés rapidement ici fait l'objet d'une série de travaux récents par B. Jourdain, T. Lelièvre et C. Le Bris initiés dans [47]. On pourra lire aussi des travaux effectués par d'autres groupes (notamment celui de Weinan E à Princeton, celui de Felix Otto à Bonn, et celui de Pingwen Zhang à Pékin) sur les mêmes sujets ou des sujets reliés.

Systèmes multi-échelles

Modélisation et simulation

Le Bris, C.

2005, XII, 214 p. 35 ill., Softcover

ISBN: 978-3-540-25313-6