
Table des matières

1	Modèles micro-macro pour les solides	1
1.1	Eléments de mécanique des milieux continus	1
1.2	De l'échelle atomique à l'énergie élastique	5
1.3	Une méthode couplée micro-macro	12
1.3.1	Le modèle	13
1.3.2	La discrétisation	15
1.3.3	Utilisation de $E(\varphi)$	19
1.4	Introduction à la topologie faible	21
1.5	Vers le calcul des variations	24
1.5.1	Quelques problèmes modèles	26
1.5.2	Techniques pour les microstructures	32
1.6	Bibliographie	37
2	Techniques d'homogénéisation	39
2.1	Le cas monodimensionnel	40
2.2	Deux cas bidimensionnels	45
2.2.1	Les matériaux lamellés	45
2.2.2	Le résultat général	48
2.2.3	Un vrai cas 2D	50
2.3	Des cas plus compliqués : la convergence à deux échelles	52
2.3.1	L'Ansatz et le développement à deux échelles	53
2.3.2	L'interprétation énergétique	59
2.3.3	Retour sur le cas monodimensionnel	62
2.3.4	Retour sur le cadre général	67
2.4	A lire en 2 ^{ème} lecture : Vers des méthodes multiéchelles avancées	70
2.5	Questions de couche limite	73
2.5.1	Deux cas simples	74
2.5.2	Couche limite rugueuse	76
2.6	Quand ça se passe mal	83
2.7	Bibliographie	87

3	Simulation moléculaire	89
3.1	Modélisation d'un système moléculaire	89
3.1.1	Les modèles complets	89
3.1.2	Découplage des échelles pour le problème statique	92
3.1.3	Découplage des échelles pour le problème dynamique	93
3.1.4	Approximation du problème électronique	98
3.2	Simulation numérique	102
3.2.1	Discretisation du problème Hartree-Fock	102
3.2.2	Discretisation de la dynamique newtonienne	108
3.2.3	Méthodes d'accélération de la dynamique moléculaire	114
3.3	Modélisation de la phase liquide	118
3.3.1	Le modèle de continuum	118
3.3.2	Résolution numérique des modèles de continuum	122
3.3.3	Notions sur les méthodes intégrales	122
3.4	Bibliographie	127
4	Modèles micro-macro pour les fluides	129
4.1	Éléments de mécanique des fluides incompressibles	129
4.2	Modélisation micro-macro des fluides polymériques	133
4.2.1	Le modèle de la chaîne libre	136
4.2.2	Le modèle d'haltères	138
4.2.3	Les équations	139
4.3	Simulation numérique de l'Écoulement de Couette	143
4.3.1	Le modèle micro-macro	144
4.3.2	La discrétisation du problème macroscopique	146
4.3.3	La discrétisation du problème microscopique : Méthode 1150	
4.3.4	La discrétisation du problème microscopique : Méthode 2153	
4.3.5	Un résultat numérique	164
4.4	A lire après le Chapitre 5 : notions de base d'analyse numérique des EDS	165
4.4.1	Convergence forte du schéma	166
4.4.2	Convergence faible du schéma	169
4.4.3	Stabilité asymptotique du schéma	170
4.5	Bibliographie	171
5	Cinétique chimique	173
5.1	Modélisation de la cinétique chimique	173
5.2	Notions rapides d'analyse numérique des EDO	174
5.2.1	Généralités et schéma d'Euler explicite	175
5.2.2	Schéma d'Euler implicite	178
5.2.3	Précision, stabilité et convergence	179
5.3	Les problèmes raides	182
5.4	Méthodes de séparations d'opérateurs	187
5.4.1	Le cas simple	188
5.4.2	Le cas raide	189

5.5	Réduction de systèmes	192
5.6	Bibliographie	198
6	Vers une unité des approches	199
6.1	Des classifications des problèmes rencontrés	199
6.2	L'unité des approches	200
6.3	Sur le front de la recherche	202
Références		205
Index		211



<http://www.springer.com/978-3-540-25313-6>

Systèmes multi-échelles

Modélisation et simulation

Le Bris, C.

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

ISBN: 978-3-540-25313-6