

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

École doctorale : MSTII - Mathématiques, Sciences et technologies de l'information, Informatique

Spécialité : Mathématiques Appliquées

Unité de recherche : Laboratoire Jean Kuntzmann

Modélisation mathématique et numérique du mouvement collectif dans les épithéliums

Mathematical and numerical modelling of collective movement in epithelia

Présentée par :

Nathan SHOURICK

Direction de thèse :

Pierre SARAMITO

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS DELEGATION ALPES

Directeur de thèse

François GRANER

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS ILE-DEFRANCE VILLEJUIF

Co-directeur de thèse

Ibrahim CHEDDADI

MAITRE DE CONFERENCES, UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Co-encadrant de thèse

Rapporteurs :

OLIVIER SAUT

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS DELEGATION AQUITAIN

Président

MATTHIAS MERKEL

CHARGE DE RECHERCHE HDR, CNRS DELEGATION PROVENCE ET CORSE

Directeur de thèse

Thèse soutenue publiquement le **22 octobre 2024**, devant le jury composé de :

OLIVIER SAUT,

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS DELEGATION AQUITAIN

Co-directeur de thèse

PIERRE SARAMITO,

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS DELEGATION ALPES

Rapporteur

FRANÇOIS GRANER,

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS ILE-DEFRANCE VILLEJUIF

Examinateur

MATTHIAS MERKEL,

CHARGE DE RECHERCHE HDR, CNRS DELEGATION PROVENCE ET CORSE

Examinateur

SEBASTIEN BOYVAL,

CHARGE DE RECHERCHE HDR, ECOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEES

Examinateur

VALERIE LAURENT,

MAITRESSE DE CONFERENCES HDR, UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Examinateur

Invités :

IBRAHIM CHEDDADI

MAITRE DE CONFERENCES, UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

HELENE DELANOE-AYARI

MAITRESSE DE CONFERENCES, UNIVERSITE LYON 1 - CLAUDE BERNARD

Remerciements

Cette thèse est le fruit de quatre années et demie de travail, en comptant mon stage de M2. Dès cette époque, mes encadrants ont su m'offrir un environnement de travail stimulant et bienveillant, à tel point que j'ai décidé de poursuivre en thèse à leurs côtés. Pierre, Ibrahim, François, Hélène, laissez-moi vous exprimer toute ma gratitude pour votre accueil chaleureux, votre enthousiasme contagieux et votre soutien sans faille. J'ai vécu nos nombreux échanges, toujours conviviaux, comme la meilleure formation possible à la recherche, et pris beaucoup de plaisir à travailler avec vous.

Pierre, Ibrahim, je vous remercie infiniment pour tout ce que vous m'avez apporté durant cette thèse, autant du point de vue humain que scientifique : vos conseils toujours avisés, votre grande disponibilité et votre extrême bienveillance m'ont permis de vivre ces années de thèse dans les meilleures conditions possibles. François, je te remercie vivement pour ta disponibilité, ton implication et tes encouragements. Tes commentaires et interrogations, toujours pertinents, et ton exigence scientifique m'ont vraiment aidé et poussé à rendre cette thèse aussi aboutie que possible. Hélène, je te remercie de t'être impliquée dans cette thèse, de t'être rendue disponible aussi souvent et de m'avoir aidé à affûter ma compréhension du mouvement collectif des cellules. Enfin, je salue Guillaume Duprez, Sham Tlili et Mélina Durande qui ont pris le temps de discuter avec moi et de m'expliquer les expériences, le traitement des données qui en sont issues ainsi que les mécanismes biophysiques sous-jacents.

Je remercie grandement Olivier Saut et Matthias Merkel de m'avoir fait l'honneur de rapporter cette thèse et d'y avoir porté de l'intérêt. Je remercie également Sébastien Boyaval et Valérie Laurent d'avoir accepté de faire partie du jury. Je tiens en particulier à remercier Sébastien Boyaval d'avoir joué le rôle d'expert lors des comités de thèse et de s'être intéressé à mes recherches. Ses observations avisées et ses questions pertinentes m'ont été précieuses.

Pendant ma quatrième année de thèse, j'ai eu l'opportunité de réaliser un ATER au sein de l'Ensimag. Pour cela, je remercie Éric Blayo de m'avoir aidé à constituer le dossier de candidature, Christophe Picard pour sa disponibilité et son aide, et toute l'équipe pédagogique d'analyse numérique pour leur accueil.

Plus généralement, je souhaite remercier toutes les personnes qui m'ont apporté leur aide à un moment ou à un autre durant cette thèse. Merci aux membres des équipes EDP du LJK et BCM du TIMC pour leur accueil, en particulier à Arnaud Chauvière, Nicolas Glade et Angélique Stéphanou qui m'ont aidé à préparer une présentation. Merci au personnel administratif et informatique du LJK pour leur disponibilité et leur promptitude, notamment

Remerciements

Gaëlle Rave et Gaëlle Magand pour leur réactivité et les services qu'elles m'ont rendus.

Je salue également toutes les personnes que j'ai pu rencontrer tout au long de ma thèse, celles qui ont partagé mon bureau, celles avec qui j'ai eu l'occasion d'échanger, celles qui ont pris le temps d'assister à ma soutenance, ou celles indirectement impliquées dans ma thèse, comme Raman Sheshka, Sara Avesani et Maxime Renard.

Cette thèse n'est pas tout à fait ma première expérience dans le monde de la recherche, et les quelques personnes que j'ai eu le plaisir de côtoyer lors de mes expériences passées ont sans doute contribué au développement de mon goût pour cette discipline. J'ai donc une pensée particulière pour Jean-Loup Bascands qui m'a accueilli à l'Inserm pour mon stage de 3^e et qui a suivi avec intérêt le déroulement de cette thèse, pour Bernard Garel qui m'a accueilli à l'Institut de Mathématiques de Toulouse lors d'un stage effectué à la fin de ma prépa, et pour Florence Bertails-Descoubes, Mélina Skouras et Mickaël Ly qui m'ont accueilli dans l'équipe ELAN à l'Inria lors d'un module d'introduction à la recherche en laboratoire proposé par l'Ensimag.

Je tiens à remercier chaleureusement ma famille pour le soutien, la confiance et les encouragements qu'elle m'a toujours témoignés. Je remercie en particulier ma mère qui a accepté la lourde tâche de relire mon manuscrit pour y déceler les dernières fautes d'orthographe. Merci encore à mes parents, mon frère, mes grands-mères, mon oncle, ma tante et ma belle-famille d'avoir fait le déplacement jusqu'à Grenoble pour venir m'encourager et d'avoir organisé le pot de thèse, qui fut une grande réussite grâce à leurs efforts ! Merci à mes amis pour leur soutien, en particulier à celles et ceux venus m'encourager pendant la soutenance, que ce soit en présence ou à distance.

J'adresse mes derniers remerciements à ma compagne, Lisa, qui m'a accompagné, soutenu et encouragé tout au long de cette aventure, et qui a fait preuve d'une patience sans limite ainsi que d'un soutien salutaire lors de la rédaction du manuscrit. Je te dois beaucoup dans la réussite de cette thèse.

Modélisation mathématique et numérique du mouvement collectif dans les épithéliums

Les cellules et leur environnement constituent une matière active à l'origine de dynamiques complexes, par exemple lors du développement embryonnaire ou lors de la croissance d'une tumeur. Dans une approche interdisciplinaire, combinant mathématiques et biophysique, nous nous intéressons dans cette thèse à la modélisation mathématique du mouvement collectif dans les épithéliums, tissus constitués d'une monocouche de cellules, qui peuvent être le siège de mouvements collectifs pour assurer une fonction biologique : développement et morphogenèse des embryons, expansion d'une tumeur, ou encore recouvrement d'une zone blessée dans le cas de la réparation tissulaire. Nous mettons en place un formalisme thermodynamique prenant en compte la microstructure du tissu pour construire un modèle de tissu tridimensionnel, puis un formalisme original de moyenne des équations dans l'épaisseur pour réduire ce dernier à un système bidimensionnel. Nous proposons ensuite un algorithme robuste capable de résoudre ce système aussi bien en incompressible qu'en compressible, sur des géométries très générales. Nous démontrons la puissance de notre approche en déterminant des estimations d'énergie continue et semi-discreté de notre modèle et en réalisant des calculs numériques sur une bande avec obstacle, chose inédite dans la littérature pour ce type de modèles. Nous montrons enfin la capacité de notre modèle à reproduire certains comportements attendus chez les épithéliums sur ce type de géométries. Les outils mathématiques et numériques mis en place et les calculs réalisés lors de cette thèse offrent ainsi un cadre scientifique opérationnel pour le dialogue entre modélisation continue et expériences.

Mots-clés : Migration collective ; Polarité ; Équations aux dérivées partielles ; Thermodynamique ; Théorie des contraintes de couples ; Analyse asymptotique ; Méthodes de Galerkine discontinues ; Estimation d'énergie ; Écoulement hétérogène ; Bandes.

Mathematical and numerical modelling of collective movement in epithelia

Cells and their environment constitute an active material at the origin of complex dynamics, for example during embryonic development or during the growth of a tumour. In an interdisciplinary approach combining mathematics and biophysics, this thesis focuses on the mathematical modelling of collective movement in epithelia, tissues made up of a monolayer of cells, which may be the site of collective movement to ensure a biological function: development and morphogenesis of embryos, expansion of a tumour, or recovery of an injured area in the case of tissue repair. We implement a thermodynamic formalism that takes into account the microstructure of the tissue to build a three-dimensional tissue model, then an original formalism for shallow approximations to reduce the latter to a two-dimensional system. We then propose a robust algorithm able to solve this system in both incompressible and compressible modes, on very general geometries. We demonstrate the power of our approach by determining continuous and semi-discrete energy estimates of our model and by carrying out numerical calculations on a strip with an obstacle, which is unprecedented in the literature for this type of models. Finally, we show the ability of our model to reproduce certain behaviours expected of epithelia on this geometry. The mathematical and numerical tools developed and the calculations carried out during this thesis thus provide an operational scientific framework for the dialogue between continuous modelling and experiments.

Keywords: Collective migration; Polarity; Partial differential equations; Thermodynamics; Couple stress theory; Asymptotic analysis; Discontinuous Galerkin methods; Energy estimate; Heterogeneous flow; Strips.

Table des matières

Remerciements	iii
Résumé	v
Table des matières	vii
Notations et lexique	xv
Chapitre 1. Introduction	1
1.1. Motivations	1
1.1.1. Fonctions biologiques des épithéliums	1
1.1.2. Mouvement collectif et matière active	2
1.2. Phénoménologie	4
1.2.1. Migration à l'échelle cellulaire	4
1.2.2. Migration à l'échelle tissulaire	7
1.3. Bref état de l'art des modèles de migration cellulaire collective existants . .	10
1.3.1. Modèle discret ou continu ?	10
1.3.2. Hypothèses et notations	10
1.3.3. Modèles viscoélastiques	12
1.3.4. Brève introduction à la théorie des cristaux liquides nématiques . . .	12
1.3.5. Liens entre gels actifs et tissus biologiques	15
1.3.6. Modèle de ALERT et TREPAT (2019)	15
1.3.7. Modèle de TLILI et al. (2018)	17
1.3.8. Modèle de MARCQ (2014)	18
1.3.9. Modèle de BANERJEE et MARCHETTI (2019)	18
1.4. Organisation de cette thèse	19
1.4.1. Motivations	19
1.4.2. Première partie : Modélisation continue	20
1.4.3. Deuxième partie : Résolution numérique du modèle	21
1.4.4. Troisième partie : Comparaisons des calculs numériques et des expé- riences	21



Modélisation continue

Chapitre 2. Cadre thermomécanique théorique	25
2.1. Cadre de la mécanique classique des milieux continus	26
2.1.1. Position du problème	26
2.1.2. Loi de conservation de la masse	28
2.1.3. Loi de conservation de la quantité de mouvement	28
2.1.4. Loi de conservation du moment cinétique	28
2.1.5. Principes de la thermodynamique et inégalité de Clausius-Duhem . .	28
2.2. Conception thermodynamique classique des lois de comportement	29
2.2.1. Matériaux standards généralisés	30
2.2.2. Objectivité	32
2.2.3. Décomposition d'Edelen	35
2.2.4. Forme abstraite des équations constitutives	37
2.3. Théorie des contraintes de couple	38
2.3.1. Motivation	38
2.3.2. Thermodynamique faiblement non-locale	38
2.3.3. Lien avec la théorie des milieux micropolaires et microcontinus . .	40
2.3.4. Lois de conservation	41
2.3.5. Équations constitutives	44
2.4. Thermodynamique faiblement non-locale de la théorie des contraintes de couples	46
2.4.1. Équations constitutives	46
2.4.2. Lien avec la théorie des cristaux liquides	51
2.5. Conclusion	52
Chapitre 3. Construction d'un modèle continu tridimensionnel de tissus	53
3.1. Hypothèses physiques	53
3.1.1. Introduction	53
3.1.2. Hypothèses générales	54
3.1.3. Lois de conservation	54
3.1.4. Contraintes actives	55
3.2. Équations constitutives	56
3.2.1. Énergie libre	56
3.2.2. Potentiel de dissipation	58
3.2.3. Équations constitutives	58
3.3. Modèle tridimensionnel de tissus	60
3.3.1. Résumé des équations	60
3.3.2. Adimensionnement	61

Chapitre 4. A new framework for shallow approximations of incompressible flows	63
4.1. Introduction	63
4.2. Mathematical setting	65
4.2.1. Geometry	65
4.2.2. Evolution equations	66
4.2.3. Boundary conditions	66
4.3. The framework	67
4.3.1. Notations	67
4.3.2. Analysis of the general scalar problem	69
4.3.3. Time derivatives	73
4.4. Examples	80
4.4.1. From Navier-Stokes equations to viscous shallow water equations . .	80
4.4.2. Maxwell viscoelastic model	82
4.5. Conclusion	85
4.6. Appendix: Leibniz formulas	85
Chapitre 5. Construction du modèle de migration cellulaire collective	87
5.1. Approximation en couche mince	87
5.1.1. Position du problème	88
5.1.2. Conditions aux limites	89
5.1.3. Adimensionnement	89
5.1.4. Hypothèses	90
5.1.5. Mouvement en bloc	91
5.1.6. Modèle moyenné en épaisseur	94
5.2. Analyse thermodynamique a posteriori des équations moyennées en épaisseur	96
5.2.1. Hypothèses	96
5.2.2. Lois de conservation	98
5.2.3. Analyse asymptotique de l'inégalité de Clausius-Duhem	99
5.2.4. Équations constitutives	101
5.3. Modèle retenu	107
5.3.1. Énergie libre	108
5.3.2. Potentiel de dissipation	109
5.3.3. Conditions aux limites	109
5.3.4. Cas incompressible	110
5.3.5. Cas compressible	111
5.4. Conclusion	112



Résolution numérique

Chapitre 6. Méthodes de Galerkine discontinues	115
6.1. Brève introduction aux méthodes de Galerkine discontinues	116
6.1.1. Motivation	116
6.1.2. Principe général	116
6.1.3. Définitions	118
6.2. Équation de transport	121
6.2.1. Position du problème	122
6.2.2. Formulation variationnelle	122
6.2.3. Discrétisation	123
6.2.4. Estimation d'énergie continue	124
6.2.5. Estimation d'énergie semi-discrète	127
6.3. Équation de diffusion hétérogène	128
6.3.1. Position du problème	128
6.3.2. Formulation variationnelle	129
6.3.3. Discrétisation	129
6.3.4. Estimation d'énergie continue	131
6.3.5. Estimation d'énergie semi-discrète	134
6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction	138
6.4.1. Position du problème	138
6.4.2. Formulation variationnelle	139
6.4.3. Discrétisation	139
6.4.4. Estimation d'énergie continue	140
6.4.5. Estimation d'énergie semi-discrète	142
Chapitre 7. Discrétisation spatiale et estimations d'énergie	151
7.1. Application au système d'équations : cas incompressible	151
7.1.1. Position du problème	151
7.1.2. Formulation variationnelle	152
7.1.3. Discrétisation	155
7.1.4. Estimation d'énergie continue	157
7.1.5. Estimation d'énergie semi-discrète	160
7.2. Application au système d'équations : cas compressible	164
7.2.1. Position du problème	164
7.2.2. Formulation variationnelle	165
7.2.3. Discrétisation	166
7.2.4. Estimation d'énergie continue	169
7.3. Conclusion	170

Chapitre 8. Discrétisation temporelle	173
8.1. <i>Backward Differentiation Formula</i> (BDF)	173
8.1.1. Position du problème	173
8.1.2. Méthodes linéaires à pas multiples	174
8.1.3. BDF	176
8.2. Préserver la positivité de la densité	182
8.2.1. Motivation	182
8.2.2. <i>Adaptative-Backward Differentiation Formula</i> (A-BDF)	183
8.2.3. Limiteur	185
8.3. Schéma numérique	188
8.3.1. Discrétisation en temps du problème incompressible	189
8.3.2. Discrétisation en temps du problème compressible	190
8.3.3. Point fixe pour le problème incompressible	191
8.3.4. Point fixe pour le problème compressible	192
Chapitre 9. Implémentation et validation numérique	195
9.1. Implémentation	195
9.1.1. Critère d'arrêt pour la méthode de point fixe	196
9.1.2. Stratégie d'adaptation de pas de temps	197
9.1.3. Critères d'arrêt du calcul	197
9.1.4. Algorithme	199
9.2. Validation numérique	200
9.2.1. Protocole	201
9.2.2. Cas incompressible	203
9.2.3. Cas compressible	207



Migration autour d'un obstacle

Chapitre 10. Exploration du modèle	215
10.1. Mise en œuvre des calculs	216
10.1.1. Domaine de calcul et conditions aux limites	216
10.1.2. Approximation de l'obstacle	217
10.1.3. Condition initiale	218
10.1.4. Représentation des données	219
10.2. Étude de sensibilité au maillage	220
10.2.1. Paramètres	220
10.2.2. Maillages	220
10.2.3. Résultats	220

10.3. Exploration des paramètres	227
10.3.1. Paramètres	227
10.3.2. Effet de C_F	228
10.3.3. Effet de Pe	235
10.3.4. Discussion	244
10.4. Étude de l'influence de la contrainte active dans le disque unité	252
10.4.1. Maillage et condition initiale	252
10.4.2. Paramètres	252
10.4.3. Maillage et paramètres numériques	253
10.4.4. Condition initiale	253
10.4.5. Résultats	254
10.4.6. Discussion	259
10.5. Bilan	259
Chapitre 11. Comparaison avec les expériences de migration sur bande avec obstacle	263
11.1. Présentation de l'expérience sur bande avec obstacle circulaire	263
11.1.1. Protocole expérimental	263
11.1.2. Traitement des données	266
11.2. Comparaisons avec les expériences sur bande avec obstacle circulaire	271
11.2.1. Protocole de comparaison	271
11.2.2. Scénario avec blebbistatine et correction de la vitesse	272
11.2.3. Scénario sans blebbistatine mais avec correction de la vitesse	276
11.2.4. Discussion des résultats	276
Chapitre 12. Conclusion	281
12.1. Bilan	281
12.1.1. Première partie: Modélisation continue	281
12.1.2. Deuxième partie: Résolution numérique du modèle	282
12.1.3. Troisième partie: Exploration numérique du modèle et comparaisons avec les expériences	283
12.1.4. Conclusion	284
12.2. Perspectives	284
12.2.1. Modélisation continue	284
12.2.2. Résolution numérique	286
12.2.3. Comparaisons des calculs et des expériences	287
12.3. Le mot de la fin	290

Annexes

Annexe A. Notations	295
A.1. Tenseurs	295
A.1.1. Typographie	295
A.1.2. Définitions	296
A.1.3. Base canonique	297
A.1.4. Notations pour les vecteurs	297
A.1.5. Notations pour les matrices	297
A.1.6. Opérations de base sur les tenseurs	298
A.1.7. Opérations générales sur les tenseurs	301
A.1.8. Convention de sommation d'Einstein	302
A.1.9. Représentation vectorielle d'une matrice antisymétrique 3×3	303
A.2. Opérateurs différentiels	307
A.2.1. Définitions	307
A.2.2. Convention d'Einstein	309
A.2.3. Propriétés	310
Annexe B. Outils mathématiques	313
B.1. Quelques inégalités connues	313
B.2. Outils pour les formulations variationnelles	315
B.3. Propriétés sur les fonctionnelles	316
B.3.1. Rappel sur les fonctionnelles	316
B.3.2. Formules de transport de Reynolds	317
B.3.3. Quelques différentielles de fonctionnelles	318
B.3.4. Cadre fonctionnel pour la thermodynamique – cas scalaire	320
B.3.5. Cadre fonctionnel pour la thermodynamique – cas vectoriel	324
B.4. Notions d'analyse convexe	327
B.4.1. Définitions	327
B.4.2. Sous-différentiel	328
B.5. Outils pour les méthodes de Galerkin discontinues	331
B.6. Calcul de la fonction de courant	335
Annexe C. Outils pour la démonstration du théorème 5.2.1	337
C.1. Composantes du vecteur issu d'une matrice antisymétrique	337
C.2. Analyse asymptotique de la loi de conservation du moment cinétique	339
C.3. Outils pour l'analyse asymptotique de l'inégalité de Clausius-Duhem	340
Annexe D. Compléments du chapitre 11	343
Bibliographie	349

Notations et lexique

Algèbre tensorielle

d	dimension de l'espace
t	temps
\mathbf{x}	coordonnées cartésiennes
φ, χ	champ de scalaires quelconque
\mathbf{c}, \mathbf{y}	champ de vecteurs quelconque
$\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\gamma}$	champ de tenseurs d'ordre 2 quelconque
$\mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{X}$	champ de tenseurs d'ordre quelconque
δ_{ij}	symbole de Kronecker
ϵ_{ijk}	symbole de Levi-Civita
$\mathbb{A} \cdot \mathbb{B} = A_{i_1 \dots i_{p-1} j} B_{j k_2 \dots k_q}$	contraction simple entre deux tenseurs
$\mathbb{A} : \mathbb{B} = A_{i_1 \dots i_{p-2} j k} B_{j k l_3 \dots l_q}$	contraction double entre deux tenseurs
$\mathbb{A} \times \mathbb{B} = \epsilon_{j k l} A_{i_1 \dots i_{p-1} j} B_{k m_2 \dots m_q}$	produit vectoriel entre deux tenseurs
$\mathbb{A} \times \mathbb{B} = \epsilon_{k l m} A_{i_1 \dots i_{p-2} j k} B_{j l n_2 \dots n_q}$	produit scalaire-vectoriel entre deux tenseurs
$ \mathbf{c} := \sqrt{\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}}$	norme euclidienne canonique d'un vecteur
$ \boldsymbol{\tau} := \sqrt{\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\tau}}$	norme euclidienne canonique d'un tenseur
$\mathbf{c}^\perp := (-c_2, c_1)$	vecteur orthogonal à \mathbf{c}
$\boldsymbol{\tau}^\top$	transposée d'une matrice
$\text{sym } \boldsymbol{\tau} := \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}^\top)$	partie symétrique d'une matrice
$\text{skw } \boldsymbol{\tau} := \frac{1}{2}(\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}^\top)$	partie antisymétrique d'une matrice
δ	matrice identité

Géométrie

\mathcal{B}	domaine tridimensionnel de la migration
Ω	domaine bidimensionnel de la migration (substrat)
\mathbf{n}	vecteur unitaire normal extérieur
\mathbf{t}	vecteur unitaire tangent
$\mathbf{\delta}_i$	i -ème vecteur unitaire de la base canonique de \mathbb{R}^3

Calcul différentiel

$\nabla \mathbb{A} := \frac{\partial \mathbb{A}_{i_1 \dots i_p}}{\partial x_j}$	gradient d'un tenseur
$\nabla \cdot \mathbb{A} := \frac{\partial \mathbb{A}_{i_1 i_2 \dots i_p}}{\partial x_{i_1}}$	divergence d'un tenseur
$\text{div } \mathbb{A} := \frac{\partial \mathbb{A}_{i_1 i_2 \dots i_p}}{\partial x_{i_p}}$	définition alternative de la divergence d'un tenseur
$\Delta := \nabla \cdot \nabla$	laplacien
$\mathbf{D}(\mathbf{c}) := \mathbf{sym}(\nabla \mathbf{c})$	partie symétrique du gradient d'un vecteur
$\mathbf{W}(\mathbf{c}) := \mathbf{skw}(\nabla \mathbf{c})$	partie antisymétrique du gradient d'un vecteur
$\nabla \times \mathbf{c} := \epsilon_{ijk} \frac{\partial c_j}{\partial x_i}$	rotationnel d'un vecteur en 3D
$\text{curl } \mathbf{c} := \frac{\partial c_2}{\partial x_1} - \frac{\partial c_1}{\partial x_2}$	rotationnel d'un vecteur en 2D
$\mathbf{curl} \varphi := \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \right)$	rotationnel d'un scalaire en 2D
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	crochet de dualité
$(\cdot \cdot)$	produit scalaire canonique dans L^2

Mécanique des milieux continus

ρ	masse volumique	kg m^{-3}
ρ_s, ρ	masse surfacique	kg m^{-2}
Π	pression	Pa

ξ	épaisseur du tissu	m
ν	vecteur vitesse	m s^{-1}
σ	tenseur des contraintes de Cauchy	Pa
f	résultante des forces volumiques	N m^{-3}
f_{traction}	résultante des forces surfaciques de traction	N m^{-2}
h	tenseur de déformation de Hencky	1
$\mathbf{D}(\nu) := \mathbf{sym}(\nabla \nu)$	tenseur taux de déformation	s^{-1}
$\mathbf{W}(\nu) := \mathbf{skw}(\nabla \nu)$	tenseur taux de rotation	s^{-1}
$\omega := \frac{1}{2} \nabla \times \nu$	vecteur tourbillon	s^{-1}
μ	tenseur des contraintes de couples	N m^{-1}
m	vecteur des contraintes de couples	N m^{-1}
$\mathbf{K} := \mathbf{W}(\omega)$	tenseur taux de courbure moyenne	$\text{s}^{-1} \text{ m}^{-1}$
$k := \frac{1}{2} \nabla \times \omega$	vecteur taux de courbure moyenne	$\text{s}^{-1} \text{ m}^{-1}$
\mathbf{S}	tenseur de courbure moyenne	m^{-1}
s	vecteur de courbure moyenne	m^{-1}
Ψ	énergie libre spécifique de Helmholtz	J kg^{-1}
\mathcal{F}	énergie libre totale	J
Φ	potentiel de dissipation	$\text{J m}^{-3} \text{ s}^{-1}$
\mathbf{p}	vecteur polarité	1
$\ell(\mathbf{p}) := \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}$	force polaire dérivée de l'énergie libre	Pa
$\dot{\mathbb{A}} := \frac{\partial \mathbb{A}}{\partial t} + (\nu \cdot \nabla) \mathbb{A}$	dérivée particulaire	
$\mathring{\mathbf{c}} := \dot{\mathbf{c}} - \mathbf{W}(\nu) \cdot \mathbf{c}$	dérivée corotationnelle de Jaumann d'un vecteur	
$\mathring{\boldsymbol{\tau}} := \dot{\boldsymbol{\tau}} - 2 \mathbf{skw}(\mathbf{W}(\nu) \cdot \boldsymbol{\tau})$	dérivée corotationnelle de Jaumann d'un tenseur symétrique	
$\mathring{\mathbf{c}} := \mathring{\mathbf{c}} - a \mathbf{D}(\nu) \cdot \mathbf{c}$	dérivée objective de Gordon-Schowalter d'un vecteur	
$\mathring{\boldsymbol{\tau}} := \mathring{\boldsymbol{\tau}} - 2a \mathbf{sym}(\mathbf{D}(\nu) \cdot \boldsymbol{\tau})$	dérivée objective de Gordon-Schowalter d'un tenseur symétrique	
\mathcal{X}	variables thermodynamiques internes abstraites	

\mathcal{F}	forces thermodynamiques abstraites
\mathcal{J}	flux thermodynamiques abstraits

Paramètres physiques et nombres sans dimension

η	viscosité du tissu	Pa s
k_p	élasticité polaire	Pa
ℓ_p	longueur de cohérence polaire	m
λ_p	temps de relaxation polaire	s
f_a	coefficient de force active	Pa
k	coefficient de frottement fluide	Pa
μ_a	coefficient de contrainte active	Pa
L, H	respectivement longueur et épaisseur caractéristiques	m, m
V	vitesse caractéristique	$m s^{-1}$
$T := L/V$	temps caractéristique	s
$S := \eta V/L$	contrainte caractéristique	Pa
$B := k_p L / (\eta V)$	résistance de la polarité aux forces visqueuses	
$Pe := \lambda_p V / L$	temps de relaxation polaire adimensionné	
$\kappa := \ell_p / L$	longueur de cohérence polaire adimensionnée	
a	paramètre de la dérivée objective de Gordon-Schowalter	
$T_a := f_a L / (\eta V)$	coefficient de force active adimensionné	
$C_F := k L / \eta$	coefficient de frottement fluide adimensionné	
$\beta := k V / (S + k V)$	part de frottement dans la dissipation visqueuse totale	
$S_a := \mu_a L / (\eta V)$	coefficient de contrainte active adimensionné	

Analyse asymptotique

$\epsilon := H/L$	rapport d'aspect de la géométrie
$\mathbb{A}^{(i)}$	terme d'ordre $O(\epsilon^i)$ d'un tenseur

$\mathbf{c}_s := (c_1, c_2)$	composantes planaires d'un vecteur
$\mathbf{\tau}_{ss} := \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix}$	composantes planaires d'un tenseur
$\mathbf{\tau}_{s3} := (\tau_{13}, \tau_{23})$	composantes mixtes planaire-verticale d'un tenseur
$\mathbf{\tau}_{3s} := (\tau_{31}, \tau_{32})$	composantes mixtes verticale-planaire d'un tenseur
$\nabla_s := \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2} \right)$	gradient planaire
div_s	divergence planaire
$\Delta_s := \nabla_s \cdot \nabla_s$	laplacien planaire
$\langle \varphi \rangle_\xi := \frac{1}{\xi} \int_0^\xi \varphi \, dx_3$	moyenne dans l'épaisseur
$\text{cov}_\xi(\varphi, \chi) := \langle (\varphi - \langle \varphi \rangle_\xi)(\chi - \langle \chi \rangle_\xi) \rangle_\xi$	covariance dans l'épaisseur
$\text{var}_\xi(\varphi) := \langle (\varphi - \langle \varphi \rangle_\xi)^2 \rangle_\xi$	variance dans l'épaisseur

Lexique

actine	une des protéines constituant le cytosquelette
adénosine triphosphate (ATP)	molécule utilisée par les cellules pour stocker et convertir de l'énergie
blebbistatine	drogue d'inhibition de la myosine
cellule	plus petite unité vivante
cristal liquide	état de la matière intermédiaire entre les états solide, cristallin et liquide
cytoplasme	substance dans laquelle est immergée le noyau d'une cellule
cytosquelette	squelette de la cellule
durotaxie	migration vers les zones de plus grande rigidité
épithélium	voir tissu
filopode	protrusion cytoplasmique cylindrique
fluide viscoélastique	fluide présentant des propriétés élastiques sur des temps courts et des propriétés visqueuses sur des temps longs
force active	traction exercée par une cellule sur le substrat, dans le sens défini par sa polarité
lamellipode	protrusion cytoplasmique aplatie
microstructure	structure interne déformable qui influe sur la dynamique macroscopique du matériau qui la possède
myosine	moteur moléculaire permettant aux filaments d'actine de se déplacer

nématique	cristal liquide dans lequel les molécules sont réparties de manière désordonnée et sont en moyenne parallèles les unes aux autres, sans qu'aucun sens ne soit par contre privilégié
plithotaxie polarité	migration le long des lignes de tension maximale propriété d'une cellule issue de l'organisation et de l'orientation de son cytosquelette lui permettant de définir son sens de migration
taxie	migration induite par un ou plusieurs stimuli donnés
tissu	ici, monocouche de cellules jointives
volume élémentaire représentatif (VER)	petit volume de constituants de l'échelle discrète dont la taille permet une représentation continue à l'échelle du matériau

Introduction

1.1. Motivations

1.1.1. Fonctions biologiques des épithéliums

Au sein d'un organisme animal, les parois internes et externes de la plupart des organes (les poumons, les intestins et la peau, par exemple), des muqueuses et des vaisseaux sanguins sont protégées par un revêtement. Celui-ci se présente sous la forme d'un empilement mince de feuillets de cellules serrées les unes contre les autres, et porte le nom d'épithélium² (figure 1.1 (a)³). On estime que les cellules qui composent les tissus épithéliaux représentent plus de 60 % des cellules du corps animal [Xi+19]. Elles prolifèrent et se déplacent lors de la formation d'un embryon, cicatrisent les plaies en comblant l'espace vacant ou envahissent les tissus voisins si elles-mêmes composent des agrégats tumoraux. Dans tous les cas, ces phénomènes se traduisent en grande partie par une migration collective des cellules (figure 1.1 (a)). Ces dernières interagissent entre elles, s'attirent et se repoussent, et exhibent donc des mouvements intimement corrélés [Dup03 ; TCJ12 ; Xi+19 ; Dur20].

En modélisation mathématique pour la biologie, un large consensus s'est établi pour des modèles mécaniques viscoélastiques [Fun93 ; Cia03 ; Hum03 ; CD07 ; CV07 ; Bre+09 ; Éti+15 ; Clé+17 ; VCL20]. Dans le cas où leur agencement au sein du tissu demeure inchangé, par exemple dans les parois artérielles, les muscles ou la peau, le tissu se comporte comme un solide élastique ou viscoélastique, et peut donc être décrit à l'aide entre autres, des modèles de Kelvin-Voigt ou de Burger. Ce premier cas a été très étudié en modélisation numérique. À l'inverse, si l'agencement évolue en réponse à une déformation du tissu ou à une forte motilité des cellules, alors le tissu est soumis à de grandes déformations non bornées sur des temps relativement longs, et agit plutôt comme un fluide viscoélastique : il pourra être plus fidèlement décrit comme un fluide viscoélastique à l'aide entre autres,

2. Étymologiquement, le mot *épithélium* est issu du latin *epithelium*, lui-même dérivé du grec ancien *épi* (« sur ») et *thele* (« mamelon »), auxquels on a rajouté le suffixe latin *-ium* (« aggrégation »). Littéralement, l'épithélium est ce qui se trouve au-dessus d'une agrégation de mamelons : à l'origine, le mot désignait en effet la petite peau translucide des lèvres recouvrant les petits « mamelons » du tissu sous-jacent, leur donnant d'ailleurs leur couleur caractéristique [Ant04].

3. Lien de la vidéo : https://datadryad.org/stash/downloads/file_stream/63462

de modèles de Maxwell ou d'Oldroyd [Sar16, ch. 4]. C'est ce second cas, de mouvements collectifs de grande ampleur, qui nous intéresse ici : il a très peu été étudié du point de vue de la modélisation numérique en géométrie générale, non triviale.

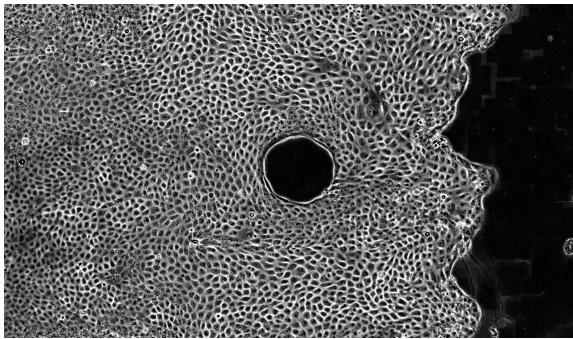
1.1.2. Mouvement collectif et matière active

Un mouvement collectif, parfois appelé agrégation (*flocking* en anglais), est un mouvement cohérent ou ordonné, survenant dans un système physique, chimique ou biologique, constitué d'un ensemble d'unités analogues, en interaction locale les unes avec les autres, se déplaçant à une vitesse similaire et capables de changer de direction pour s'aligner avec leurs voisines [TTR05 ; VZ12]. Un tel phénomène produit des effets chimiques ou mécaniques à des échelles grandes devant les unités individuelles, qui non seulement diffèrent qualitativement des comportements individuels mais les déterminent également quasiment complètement [VZ12, section 1.2]. Citons par exemple la formation de structures supracellulaires dans le contexte des tissus, ou l'existence d'ondes de déplacement (voir la section 1.2.2) analogues à celles produites par la circulation automobile [FM15], avec ses effets bien connus de bouchons et d'accordéons, même en l'absence d'inertie [Mar+13].

On observe des mouvements collectifs dans des systèmes de toutes les tailles, comme l'illustre la figure 1.1, allant de l'échelle microscopique avec des micro-organismes comme par exemple les myxobactéries [Mar+13, figure 1] ou *Dictyostelium discoideum* [TTR05, introduction], à l'échelle kilométrique avec par exemple les troupeaux de gnous [TTR05, introduction] (figure 1.1 (d)) ou certains mouvements de foules, qui peuvent réunir plusieurs millions de personnes (figure 1.1 (c)).

Parmi les systèmes qui présentent des comportements collectifs, les tissus biologiques font partie de la famille des matériaux actifs, c'est-à-dire ceux constitués d'unités auto-propulsées (les cellules dans notre cas) capables de convertir de l'énergie (préalablement emmagasinée ou immédiatement disponible dans leur environnement) en mouvement, mettant ainsi le système hors-équilibre thermodynamique [Mar+13, page 2]. Cette injection locale d'énergie dans le système, à l'échelle de tous les constituants, est ce qui caractérise véritablement les matériaux actifs. Ainsi, si les cellules peuvent se déplacer spontanément, sans intervention extérieure, c'est parce que chaque cellule est continuellement alimentée en énergie chimique via de l'ATP, une molécule qui conserve l'énergie essentielle au bon fonctionnement du métabolisme.

La transition d'un système désordonné à un mouvement collectif se traduit par une rupture de symétrie dans le système, qui s'apparente à un changement de phase dans un matériau, analogie proposée pour la première fois par VICSEK et ZAFEIRIS [Mar+13, page 3]. De même que les changements de phase s'opèrent en fonction de la valeur d'un ou de plusieurs paramètres dits d'ordre ou de contrôle (par exemple la température pour une transition solide-liquide), le degré de symétrie d'un système sujet aux comportements collectifs doit pouvoir se quantifier. C'est le cas pour les cellules, qui ont la capacité de réorganiser leur structure interne de manière asymétrique en réponse à des stimuli externes, qu'ils soient chimiques ou physiques. Cette asymétrie est appelée polarité et donne une



(a) Épithélium en migration autour d'un obstacle circulaire. Extrait de [Tli+20]. [Cliquer ici pour voir la vidéo.](#)



(b) Nuée d'oiseaux (typiquement des étourneaux).



(c) Pèlerinage à La Mecque.



(d) Troupeau de gnous.

FIGURE 1.1. – Illustration de la variété des systèmes présentant des mouvements collectifs.

direction avant-arrière à la cellule, dans laquelle elle peut exercer des forces [LMT16]. Pour décrire la migration cellulaire collective, la littérature considère essentiellement la polarité comme un vecteur [LW11 ; KP13 ; Not+16 ; BC17 ; CR17 ; HS17 ; Cza+18 ; AT19 ; BM19 ; Pér+19 ; Boo+21], que l'on note p dans la suite ; la rupture de symétrie aboutit alors à un ordre polaire. Dans d'autres situations, il peut être pertinent de plutôt décrire la polarité comme un tenseur [LMT16 ; Pop+17 ; Saw+17] ; la rupture de symétrie aboutit alors à un ordre nématique.

La nature et la caractérisation physique de cette polarité, son rôle dans l'émergence de mouvements collectifs et son couplage avec les autres grandeurs physiques en jeu constituent donc un enjeu majeur et une question très ouverte de la modélisation du mouvement collectif des épithéliums. Cette thèse tente d'y répondre en proposant un cadre mathématique rigoureux et des outils numériques poussés pouvant s'adapter aux géométries les plus générales.

1.2. Phénoménologie

Nous présentons maintenant les principaux rouages mécaniques en œuvre lors d'une migration cellulaire collective. Nous commençons par présenter le rôle des cellules constituant le tissu épithéial et leurs interactions avec le substrat, notamment les forces qu'elles y exercent, puis nous expliquons comment un phénomène collectif peut émerger de la structure même du tissu.

1.2.1. Migration à l'échelle cellulaire

Migration cellulaire individuelle

La progression d'un épithélium est d'abord rendue possible par la capacité des cellules à se mouvoir indépendamment les unes des autres. Ce déplacement individuel est principalement le résultat de la coordination entre la contraction du corps de la cellule, les adhésions focales qu'elle forme avec son substrat (le milieu qui la supporte) et les forces de traction qu'elle y développe (figures 1.2 et 1.3). En se contractant, celle-ci est en mesure de prolonger une partie de son cytoplasme¹ pour générer de fins filaments qui sont soit cylindriques (les filopodes), soit aplatis (les lamellipodes). Ces protrusions permettent par suite à la cellule d'assembler les sites d'adhérence nécessaires à l'exercice de la traction, qui dépend fortement de son niveau de contraction [Dup03 ; TCJ12 ; LMT16 ; Xi+19].

La contractilité d'une cellule est contrôlée par son cytosquelette, littéralement le squelette de la cellule. Celui-ci se présente comme une structure viscoélastique tridimensionnelle, composée de filaments polymériques, qui pourrait s'apparenter à l'ossature de la cellule, dans la mesure où elle maintient sa forme et soutient sa membrane. Le cytosquelette est cependant loin de n'être que son squelette ; il en est aussi sa musculature, pour la raison évoquée précédemment. Parmi les fibres qui le constituent, les filaments d'actine (une des protéines les plus abondantes dans la cellule) de 3 à 6 nm de diamètre, ont une place centrale dans le phénomène qui nous intéresse. Ce sont en effet eux qui composent les filopodes et lamellipodes et permettent donc à la cellule de se contracter et d'avancer [Dup03 ; TCJ12 ; Xi+19].

Les filaments d'actine n'ont néanmoins pas la capacité de se déplacer spontanément ; ce sont les moteurs moléculaires qui en ont la charge. Ce sont des protéines qui convertissent l'énergie chimique de la cellule (par hydrolyse de l'ATP) en énergie mécanique. La myosine, dont le rôle est fondamental dans la migration des cellules, en est l'un d'eux. Elle est composée d'une longue tige dont l'une des extrémités présente deux têtes constituant le domaine catalytique moteur. L'une est capable de fixer l'ATP tandis que l'autre est capable de se lier aux fibres d'actine. Lorsque la myosine interagit avec l'ATP, celui est hydrolysé. La libération d'énergie qui en résulte change la conformation du moteur moléculaire, c'est-

1. Le cytoplasme d'une cellule est une solution viscoélastique qui remplit la membrane cellulaire, et dans laquelle baignent le noyau et les divers organites.

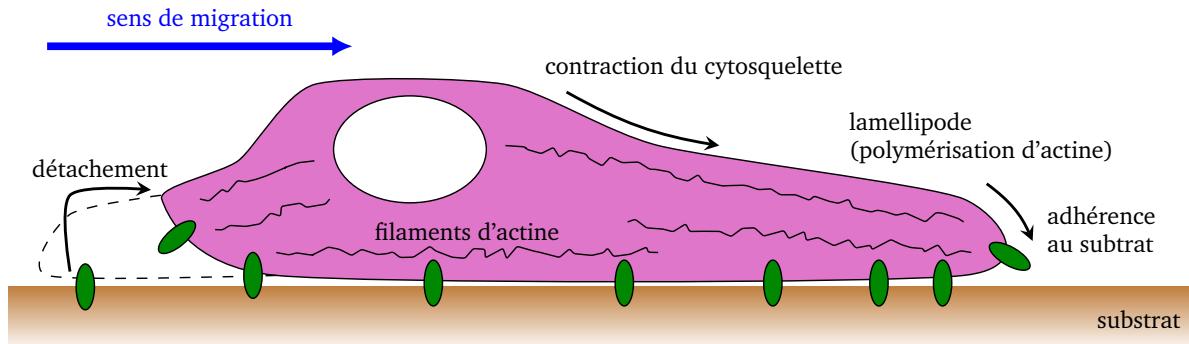


FIGURE 1.2. – Schématisation simplifiée des mécanismes en œuvre dans une cellule lors de sa migration. Reproduction de la figure 6 dans [Dup03].

à-dire le pousse à modifier sa position, son étendue et son orientation dans l'espace de sorte qu'il puisse entrer en contact avec le filament d'actine. La libération des produits de l'hydrolyse de l'ATP s'accompagne par un retour à la conformation d'origine de la myosine, tout en entraînant le déplacement du filament d'actine. Cette suite d'étapes s'enchaîne de manière cyclique et se traduit finalement par la contraction de la cellule [Dup03]. Les contraintes et déformations actives ainsi produites peuvent centupler la rigidité du réseau d'actine, assurant une forme de protection à la cellule contre les sollicitations mécaniques auxquelles elle serait exposée. Par exemple, soumises à de grandes forces (de l'ordre de quelques, voire de dizaines, de nN), les fibres d'actine peuvent s'épaissir et, si besoin, se réorganiser en un ordre nématique, dans lequel elles sont localement parallèles, ce qui favorise la synergie des forces de traction produites par le complexe d'actomyosine, qui vont alors avoir tendance à s'exercer dans le même sens. Autrement dit, plus les filaments s'alignent, plus le niveau de contraction de la cellule augmente [LMT16 ; Xi+19].

L'organisation et l'orientation particulières du cytosquelette dans le cas de la migration confèrent à la cellule, au moins partiellement, une propriété singulière – vis-à-vis des matériaux habituellement rencontrés en physique –, appelée polarité, qui s'adapte aux stimulations de son environnement. Cette caractéristique, liée à une distribution hétérogène et anisotrope de protéines au sein de la cellule, est ce qui définit l'avant et l'arrière de cette dernière, qui indiquent le sens dans lequel celle-ci peut produire les protrusions puis tirer ; la traction ainsi produite, appelée force active, est donc plus importante au niveau de son front (figure 1.3). Pour certains auteurs, comme ALERT et TREPAT [AT19], le sens de la polarité peut être spécifié par le vecteur reliant le centre de masse de la cellule à la position de l'extension cytoplasmique ; pour d'autres, comme DURANDE [Dur20], par le vecteur reliant le centre d'inertie du noyau à celui de la cellule ; pour d'autres encore, comme GOMES, JANI et GUNDERSEN ; NASTALY et al. [GJG05 ; Nas+20], par l'orientation de l'appareil de Golgi, un composant cellulaire qui, entre autres, trie et transfère des macromolécules, et modifie des protéines. La forme de la cellule n'est par contre pas entièrement déterminée par le réarrangement de sa structure interne, même si les deux ont une forte propension à

s'aligner, comme on pourrait s'y attendre.

Forces en jeu dans la migration

La contraction induite par l'activité du complexe d'actomyosine génère donc deux types de contraintes, la force active et une autre liée aux adhésions formées par la cellule avec le substrat. Si ce dernier est suffisamment rigide pour éviter d'être trop déformé par la force exercée par la cellule, alors cette dernière est en mesure de réguler ses caractéristiques mécaniques, telles que sa viscosité ou son élasticité, de manière active et donc de se déplacer [Xi+19]. Ce déplacement se produit préférentiellement en direction des zones où la rigidité du substrat est la plus grande ; ce mécanisme est appelé durotaxie [LMT16 ; Xi+19]. Précisons que cette thèse ne s'attache pas à modéliser le substrat en tant que tel, et l'on supposera que celui-ci a une rigidité uniforme et suffisante pour permettre le mouvement.

La migration est de manière plus générale influencée par un grand nombre de stimuli différents ; c'est le phénomène de taxie, ou de tactisme. Par exemple, la polarité est fortement contrôlée par les signaux mécaniques et chimiques qu'échange, justement à travers les adhésions, la cellule avec son environnement immédiat en réponse à diverses sollicitations, notamment mécaniques. Ces comportements actifs différencient fondamentalement la cellule des matériaux dits passifs. Pour autant, elle réagit aussi passivement et peut, par exemple, se contracter en réponse à une élongation, indépendamment de toute activité liée au complexe d'actomyosine. Ce dernier point suggère que la viscoélasticité et les mécanismes cellulaires ne peuvent pas être entièrement expliqués par le réseau d'actine. Et, en effet, la cellule peut agir comme un matériau viscoélastique passif en réponse à certaines contraintes mécaniques de courte durée (allant de la seconde à la minute), comme elle peut activement renforcer sa raideur et sa force de traction face à des contraintes de plus longue durée (jusqu'à 1 h) [Xi+19].

Une cellule en migration est à l'équilibre mécanique et on peut supposer que les forces extérieures qui lui sont appliquées se compensent exactement. En particulier, l'effet de la gravité l'est complètement par la réaction du substrat. De surcroît, pour un tel phénomène, les forces inertielles sont totalement dominées par les effets visqueux ; la quantité issue du rapport des deux, appelée nombre de Reynolds, est alors suffisamment petite pour que l'on puisse négliger les effets inertiels. Par conséquent, l'ensemble des forces qui s'exercent sur la cellule doivent se compenser, ce qui est le cas si les contraintes actives générées par le cytosquelette et transmises au substrat, sont contrebalancées par le frottement de la cellule sur son support (figure 1.3). Sur des échelles de temps suffisamment longues, la force de friction induite est semblable à une traînée et pourrait donc être supposée, en première approche, proportionnelle à la vitesse du tissu [AT19].

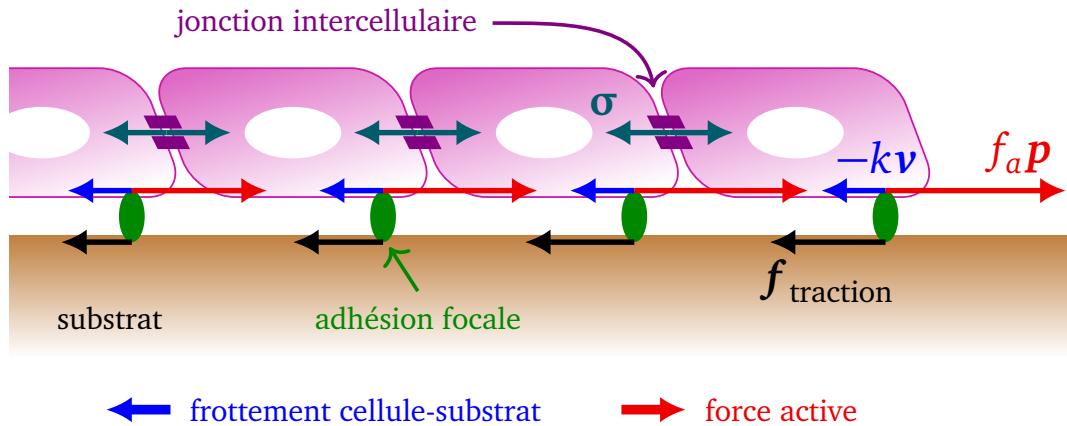


FIGURE 1.3. – Vue schématique des forces et interactions en jeu lors de la migration cellulaire collective. Schéma adapté de [BM19, Figure 1].

1.2.2. Migration à l'échelle tissulaire

Maintien de la cohésion tissulaire

L'intégrité d'un épithélium est à la fois assurée par l'adhérence des cellules au substrat et les jonctions entre cellules adjacentes. Leurs cytosquelettes sont alors attachés ensemble, ce qui renforce la cohésion tissulaire, permet une déformation et une contraction locale du tissu et confère au tissu une tension superficielle l'empêchant de s'étaler indéfiniment (figure 1.3). Ces fixations intercellulaires s'assemblent alors en une sorte de fillet continu qui s'étend sur l'ensemble de l'épithélium (figure 1.4), lui octroyant une résistance mécanique et l'imperméabilisant à la diffusion de certaines molécules [Gum96 ; CD07].

Si le tissu est étiré lentement, pendant dix minutes par exemple, de sorte à ce que les cellules soient en grande déformation, alors, comme cela a été évoqué en introduction, les cellules ont le temps de changer de voisines. Ces réarrangements, appelés transitions T1 (figure 1.5), s'accompagnent de la destruction et de la formation de jonctions cellule-cellule et confèrent au tissu une viscosité globale d'autant plus grande que la cohésion tissulaire est importante. Chez les embryons, l'épithélium a même la capacité de continuer à assurer sa résistance mécanique et son rôle de premier rempart pour l'organisme lorsque ces réarrangements internes ont lieu [CD07]. Si le tissu est au contraire amené en grande déformation (si l'étirement double au minimum sa longueur par exemple) trop rapidement, de l'ordre de quelques secondes, alors les transitions T1 ne peuvent avoir lieu, entraînant sa déchirure au niveau des jonctions intercellulaires [Xi+19]. Puisque les cellules sont attachées entre elles, un changement local de la configuration du tissu entraîne aussi leur déformation, car elles sont aussi des matériaux élastiques, contribuant à lui donner une certaine élasticité. Les contacts entre cellules participent donc plus généralement à l'émergence de propriétés viscoélastiques chez l'épithélium [Xi+19 ; AT19].

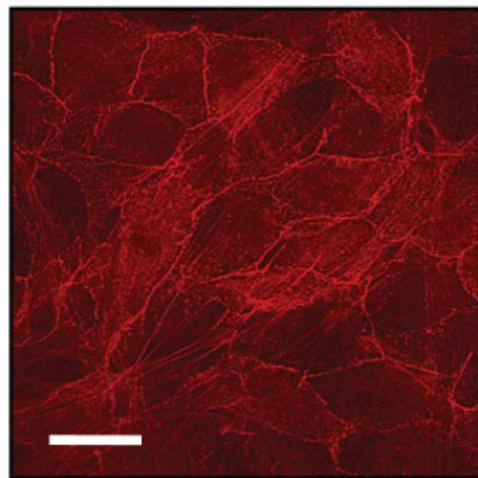


FIGURE 1.4. – Exemple d'un réseau d'actine dans des cellules épithéliales en migration. Extrait de [Dur20, figure I.3]. Barre d'échelle à $10\text{ }\mu\text{m}$.

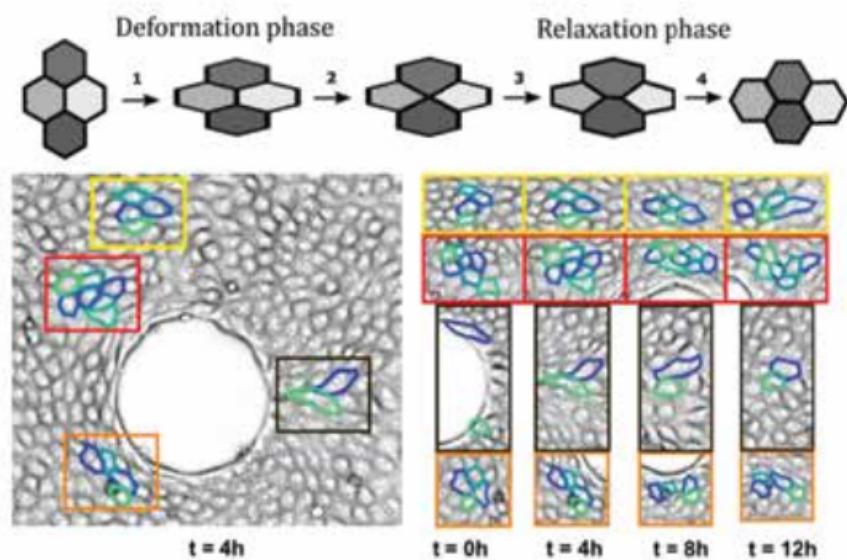


FIGURE 1.5. – Exemples de réarrangements au sein d'un épithélium. Le schéma illustre le déroulement d'une transition T1 tandis que l'image de dessous se focalise sur de tels réarrangements dans le cas d'une migration cellulaire collective autour d'un obstacle. Extrait de [Tli+20, figure 1].

Coordination de la migration

Les cellules épithéliales ne sont pas seulement fixées les unes aux autres, mais s'organisent en structures et s'échangent diverses informations, qu'elles soient chimiques ou mécaniques. Les jonctions permettent notamment la transmission des forces cellulaires à travers le tissu, contribuant ainsi à coordonner les mouvements des cellules [Xi+19]. La tension tissulaire qui en résulte est alors hétérogène et anisotrope. Si le déplacement des cellules est en partie guidé par les gradients de rigidité du substrat, il l'est aussi par cette tension. En effet, les cellules se dirigent préférentiellement le long des lignes de tension maximale ; ce mécanisme est appelé plithotaxie [LMT16]. De manière équivalente, elles tendent à minimiser, à travers l'exercice d'un couple de forces, la contrainte de cisaillement qui leur est appliquée [AT19]. Signalons l'existence de câbles d'actine à travers le tissu dont la contraction coordonne également la migration ; elle explique d'ailleurs la motilité de l'épithélium pour refermer les plaies ou dans l'embryon naissant, par exemple [LMT16].

Les lignes de tension tissulaire ne définissent que des directions et il est nécessaire qu'un processus supplémentaire rompe la symétrie sous-jacente pour indiquer le sens du mouvement. À l'échelle tissulaire, les mécanismes de rupture de symétrie peuvent être obtenus à partir d'un gradient supracellulaire de contrainte intercellulaire, dû par exemple à un déséquilibre des forces de traction exercées sur le substrat [LMT16]. Au sein d'un épithélium, les cellules ont tendance à aligner leur polarité, contribuant ainsi à faire de la migration du tissu un phénomène collectif [LMT16 ; AT19]. L'apparition d'orientations préférentielles est par conséquent une caractéristique multi-échelle, ayant aussi bien lieu au niveau du cytosquelette que des groupes de cellules, régulée par les interactions avec le substrat et entre cellules [LMT16]. Outre les raisons déjà évoquées, émerge également une propension des cellules à se réorienter dans le sens de la vitesse de la migration, en particulier dans le cas où le flot est uniforme [AT19]. Cet alignement n'a malgré tout pas toujours lieu, comme l'atteste l'existence de structures supracellulaires locales très particulières ; elles se présentent par exemple sous la forme de tourbillons, de comètes ou de triangles [LMT16 ; Xi+19].

Uniquement au front de l'épithélium en mouvement, le cas échéant, on rencontre aussi une autre sorte d'organisation cellulaire, dont la forme longitudinale conduit à l'adoption du mot « doigt » pour la désigner. À son extrémité se trouve ce que l'on nomme une cellule de tête, qui est très polarisée et forme des protrusions cytoplasmiques assez larges, ce qui lui permet d'appliquer sur le substrat une traction plus importante que les autres cellules [LMT16 ; HS17 ; Xi+19]. L'émergence des cellules de tête s'explique en partie par un nombre amoindri de jonctions intercellulaires au niveau du front du tissu épithelial. Les structures de forme digitale constituent un autre phénomène issu de la coordination du mouvement et de la rupture de la symétrie. Elles sont un exemple de l'influence du bord libre à l'avant du tissu, dont l'existence suffirait à déclencher la migration [HS17]¹. Sa présence peut en effet induire une variation des contraintes au sein de l'épithélium et

1. Il y aurait même un adage selon lequel « un épithélium ne tolère pas un bord libre » [HS17].

briser la symétrie évoquée supra [Xi+19], à travers un couplage entre la courbure locale du bord et l’agencement des filaments d’actine [LMT16].

La migration avec front libre a aussi la particularité de produire des ondes mécaniques qui, naissant de la propagation de la déformation des cellules de tête, se déplacent dans le sens inverse au mouvement [Tli+18 ; Xi+19]. Celles-ci sont par contre atténuées dans les tissus à densité cellulaire importante. Combinée avec les différentes interactions et l’activité cellulaires, cette densité peut même provoquer ce qui pourrait s’apparenter à une « transition d’encombrement » (*jamming transition* en anglais), expression empruntée à la théorie des milieux granulaires, durant laquelle l’agglutination des cellules les unes contre les autres déclenche leur rigidification et ralentit progressivement leur déplacement [HS17 ; Xi+19].

1.3. Bref état de l’art des modèles de migration cellulaire collective existants

1.3.1. Modèle discret ou continu ?

Il existe globalement deux approches pour modéliser les mouvements collectifs. La première aborde le problème d’un point de vue de la mécanique discrète et s’attache à modéliser le comportement individuel des cellules et leurs interactions [CR17 ; HS17 ; AT19 ; Xi+19 ; Bea+22]. Elle permet de faire apparaître des effets collectifs et de relier les ingrédients à l’échelle cellulaire avec les comportements émergents à l’échelle tissulaire. La deuxième approche se base sur la mécanique des milieux continus ; c’est celle qui est adoptée pour cette thèse. Elle est pertinente dans la mesure où, expérimentalement, il est possible d’extraire des quantités mécaniques descriptives statistiquement homogènes et continues, c’est-à-dire de négliger l’effet des fluctuations intrinsèques à la microstructure de l’épithélium par rapport aux variables qui ont été moyennées sur un petit groupe représentatif de cellules [Tli+18]. Ainsi, il est possible de procéder à une description locale du tissu, au niveau de ces groupes cellulaires, via l’utilisation de variables tensorielles régulières en espace et en temps, ce qui justifie la démarche [CD07 ; Gra+08] – elle est d’ailleurs déjà largement employée dans la littérature pour décrire ce genre de systèmes [Sto84 ; GP93 ; Fun93 ; Eri99 ; Eri01 ; Hum03 ; CD07 ; Mar+13 ; Tli+15 ; HS17 ; JGS18 ; AT19 ; Xi+19]. Notons enfin l’existence de formalismes généraux permettant de décrire des matériaux actifs [Mar+13 ; JGS18] ou directement la dynamique des tissus [Tli+15].

1.3.2. Hypothèses et notations

Nous présentons une liste non exhaustive de modèles continus de mouvement collectif dans les épithéliums, qui satisfont tous à un ensemble d’hypothèses :

- (i) les tissus considérés sont assimilables à des fluides isothermes en couche mince : ce

sont des milieux continus en grandes déformations dont l'épaisseur est supposée négligeable devant la longueur caractéristique, de sorte que la migration puisse être considérée bidimensionnelle ;

- (ii) le système respecte les principes de base de la mécanique des milieux continus et est à l'équilibre mécanique : la migration est très lente, de l'ordre du micron par minute, donc l'inertie peut être négligée ;
- (iii) la migration se fait indépendamment de la croissance, des divisions ou de la mort des cellules ;
- (iv) les effets mécaniques sont décorrélés des effets génétiques ;
- (v) l'activité des cellules est suffisante pour qu'elles puissent se réarranger sans seuil de déformation, et donc on peut négliger la contribution de la plasticité à la rhéologie.

Précisons que la température, n'est pas toujours constante au sein d'un organisme animal. Seuls ceux dits homéothermes possèdent cette faculté de régulation interne, indépendamment du milieu extérieur ; c'est ainsi le cas des mammifères et des oiseaux. Il est par exemple bien connu que la température moyenne chez l'être humain avoisine les 37 °C, ce qui permet aux cellules et aux protéines d'assurer leurs fonctions [Hum03]. Pour simplifier, nous supposons donc que la température est uniforme.

Les hypothèses (ii) et (iii) se traduisent en équation sous la forme

$$\operatorname{div}(\xi \boldsymbol{\sigma}^T) = \mathbf{f}_{\text{traction}}, \quad (1.1a)$$

$$\frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_s \mathbf{v}) = 0, \quad (1.1b)$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes, $\mathbf{f}_{\text{traction}}$ la force surfacique de traction, \mathbf{v} la vitesse, ξ l'épaisseur du tissu et ρ_s la masse surfacique des cellules. La première équation traduit l'équilibre mécanique du mouvement dans un fluide en couche mince, d'épaisseur ξ , et la seconde la conservation de la masse. Nous y reviendrons plus en détail dans les chapitres 2 et 4. Nous verrons en particulier dans la section 2.3 pourquoi le tenseur des contraintes n'est pas forcément symétrique. Les pages xv à xix et l'annexe A fournissent une description détaillée des notations utilisées dans ce document. En particulier, nous notons $\dot{\varphi} := \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi$ la dérivée particulaire d'une quantité φ quelconque, définition que l'on généralise naturellement aux champs de vecteurs et de tenseurs.

Dans la suite, les modèles sont présentés en spécifiant les choix qui ont été faits par les différents auteurs quant aux expressions du tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ et de la traction $\mathbf{f}_{\text{traction}}$, et à la forme de l'équation d'évolution de la polarité, le cas échéant.

1.3.3. Modèles viscoélastiques

En modélisation mathématique pour la biologie, un large consensus s'est établi pour des modèles mécaniques viscoélastiques, en particulier de type Maxwell pour les matériaux à caractère fluide [Fun93 ; Cia03 ; Hum03 ; CD07 ; CV07 ; Éti+15 ; Clé+17 ; VCL20].

Sans doute un des modèles pour fluides viscoélastiques les plus emblématiques, le modèle d'Oldroyd s'écrit [Old50 ; Sar16]

$$\boldsymbol{\sigma} := 2\eta_0 \mathbf{D}(\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{\sigma}_e - \Pi \boldsymbol{\delta}, \quad (1.2a)$$

$$\lambda \overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}_e + \boldsymbol{\sigma}_e = 2\eta_c \mathbf{D}(\boldsymbol{v}), \quad (1.2b)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_e$ est le tenseur des contraintes élastiques ou intercellulaires, Π la pression, $\boldsymbol{\delta}$ la matrice identité (cf. annexe A.1.2) et $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}_e := \dot{\boldsymbol{\sigma}}_e - \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}_e - \boldsymbol{\sigma}_e \cdot \nabla \boldsymbol{v}^\top$ une dérivée objective (voir la section 2.2.2). Les paramètres E , η_0 , η_c et $\lambda := \eta_c/E$ sont respectivement le module d'élasticité effectif d'une cellule, la viscosité intracellulaire, la viscosité intercellulaire et le temps de relaxation. Le tenseur $\mathbf{D}(\boldsymbol{v}) := \frac{1}{2}(\nabla \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v}^\top)$ définit classiquement le tenseur taux de déformation et $\boldsymbol{\sigma}_e/E$ représente les déformations élastiques. Lorsque l'on prend $\eta_0 = 0$, le modèle d'Oldroyd se réduit au modèle de Maxwell. Lorsque l'on prend $\lambda = 0$, il se réduit aux équations de Navier-Stokes avec comme viscosité $\eta_0 + \eta_c$.

Ce modèle peut servir à décrire la tendance des cellules à s'étirer en réponse à une contrainte puis à revenir à leur forme de repos. Ce retour à la forme initiale est appelé relaxation et s'opère sur une durée effective λ .

1.3.4. Brève introduction à la théorie des cristaux liquides nématiques

Une grande majorité des modèles de mouvement cellulaire collectif puisent leur origine dans la théorie des gels actifs, qui elle-même généralise celle des cristaux liquides [Mar+13 ; AT19 ; BM19]. Cette dernière fournit un cadre théorique permettant de construire des équations de la mécanique des milieux continus couplant un paramètre d'ordre décrivant le niveau de symétrie du système, comme expliqué dans la section 1.1.2, avec les champs mécaniques usuels (vitesse, contrainte, etc.). L'objectif de cette section est de donner un aperçu de la théorie des cristaux liquides nématiques, maintenant bien établie du point de vue de la mécanique des milieux continus. Nous nous basons pour cela principalement sur l'ouvrage très complet de GENNES et PROST [GP93, chapitres 1, 3 et 5], et en partie sur celui de CHANDRASEKHAR [Cha92, chapitre 3]. D'autres présentations dans le cadre de théories plus générales existent également [Sto84 ; Eri01]. Nous reviendrons brièvement sur cette théorie dans la section 2.4.2.

Présentation générale

Un cristal liquide est un état de la matière intermédiaire entre les états solide cristallin – dans lequel les positions et orientations des constituants (atomes, molécules ou autres)

sont organisées de manière spatialement périodique – et liquide. Un matériau dans cet état s'écoule comme un fluide et arbore des propriétés propres à un cristal, notamment l'ordre périodique de certains degrés de liberté de position et d'orientation. On retrouve par exemple de tels liquides dans les membranes cellulaires animales ou dans certaines montres à affichage numérique.

Les cristaux liquides dits nématiques partagent certaines propriétés mécaniques avec les cellules animales et, dans une certaine mesure, avec les épithéliums. Dans l'état nématique, les constituants individuels sont répartis de manière désordonnée et sont en moyenne parallèles les uns aux autres (figure 1.6) – de la même manière que les cellules alignent leurs polarités – sans qu'aucun sens ne soit par contre privilégié. Ces cristaux sont le plus souvent des objets allongés – c'est par exemple le cas des filaments polymériques, qui peuvent être rigides ou flexibles, chaînés ou non – mais peuvent aussi se présenter sous forme d'ellipses.

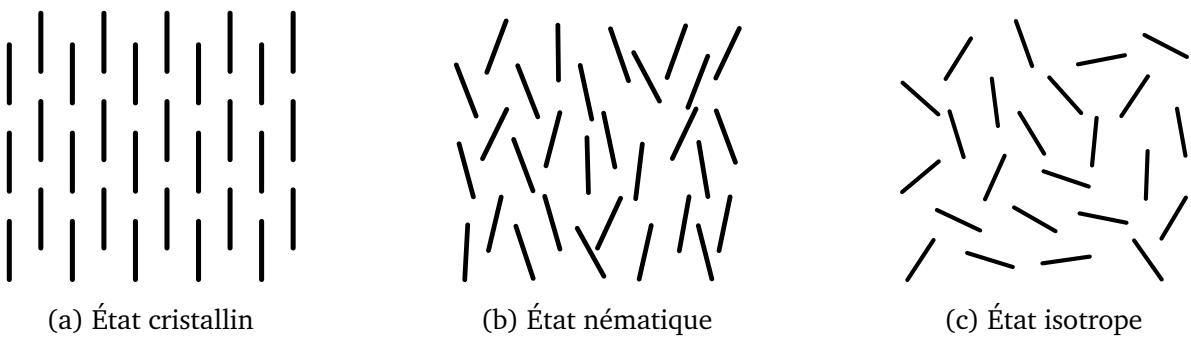


FIGURE 1.6. – Comparaison des états cristallin, nématiche et isotrope. Reproduction de la figure 1.1.1 dans [Cha92, chapitre 1].

L'orientation moyenne des molécules d'un cristal liquide nématique est représentée par le vecteur \mathbf{p} , appelé directeur et supposé unitaire, c'est-à-dire $|\mathbf{p}| = 1$. À travers cette contrainte, la théorie considère implicitement les molécules comme des bâtonnets rigides : la distinction des extrémités des molécules n'est pas pertinente, de sorte que les rôles joués par $-\mathbf{p}$ et \mathbf{p} sont identiques. Mathématiquement, cela se traduit par une équation d'évolution invariante par la transformation $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$. Dans le cadre qui nous intéresse, cela est adapté pour la partie axiale de l'anisotropie des cellules, en l'occurrence leur forme, mais pas pour la partie polaire représentée par le vecteur \mathbf{p} , qui distingue l'avant et l'arrière de la cellule

Aperçu du formalisme de la théorie des cristaux liquides

Dans un cristal liquide nématique, les molécules tendent à s'aligner localement, en interagissant sur de courtes distances seulement [GP93, section 3.1.2]. Cet alignement se crée au travers de forces de rotation d'autant plus importantes que les variations spatiales du directeur, appelées distorsions, le sont. Ces forces sont issues d'une énergie potentielle,

dite libre, de distorsion, notée Ψ , dont l'expression générale est donnée par [GP93, équation (3.15)]

$$\Psi = \frac{K_1}{2}(\operatorname{div} \mathbf{p})^2 + \frac{K_2}{2}[\mathbf{p} \cdot (\nabla \times \mathbf{p})]^2 + \frac{K_3}{2}|\mathbf{p} \times (\nabla \times \mathbf{p})|^2. \quad (1.3)$$

où K_1 , K_2 et K_3 sont connues sous le nom de constantes d'élasticité de Frank (en J m^{-1}). Le premier terme pénalise les conformations dans lesquelles molécules s'organiseraient en « éventail » (*splay* en anglais), le deuxième les torsions (*twist* en anglais) et le dernier les courbures (*bend* en anglais) ; voir la figure 1.7. Pour simplifier, il est d'usage d'adopter

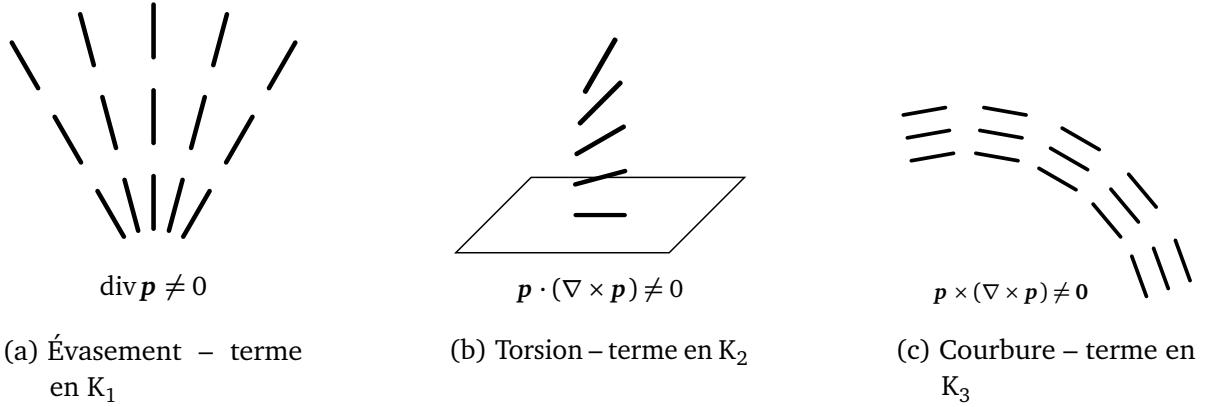


FIGURE 1.7. – Les trois types de configurations qui contribuent à l'énergie de distorsion dans (1.3). Adaptation de la figure 3.1 dans [GP93, chapitre 3].

« l'approximation à une constante » [GP93, section 3.1.3.2], c'est-à-dire de supposer que $K_1 = K_2 = K_3 = K$, auquel cas l'expression de l'énergie de distorsion devient

$$\Psi = \frac{K}{2}|\nabla \mathbf{p}|^2 - \frac{K}{2} \operatorname{div}(\nabla \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}) + \frac{K}{2} \operatorname{div}[(\operatorname{div} \mathbf{p}) \mathbf{p}]. \quad (1.4)$$

Les deux derniers termes sont équivalents à des termes de surface (après intégration par parties) et sont pour cette raison négligés [GP93, équation (3.17)]. La force issue de cette énergie est alors donnée par

$$\mathbf{f}_p := K \Delta \mathbf{p}. \quad (1.5)$$

Il est dès lors possible d'établir une équation d'évolution pour le directeur et de donner une expression du tenseur des contraintes (voir [GP93, section 5.1]). Dans la théorie des cristaux liquides nématiques, cela se fait à partir de considérations thermodynamiques, et cela aboutit à des équations très générales, qui sont ensuite simplifiées au cas par cas. Une équation d'évolution du directeur est alors de la forme [Mar+13, équation 42b]

$$\lambda_p \square \mathbf{p} - \mathbf{f}_p = \mathbf{0}, \quad (1.6)$$

où $\square \mathbf{p} := \dot{\mathbf{p}} - \frac{1+a}{2} \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} + \frac{1-a}{2} \nabla \mathbf{v}^\top \cdot \mathbf{p}$ est une dérivée objective paramétrée par une constante a (voir la section 2.2.2). Il existe d'autres formes plus générales [GP93, équation (5.25)]

mais nous nous cantonnerons à celle-ci. Le tenseur des contraintes correspondant est quant à lui donné par [GP93, équation (5.42)] [Mar+13, équation (45a)]

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta_0 \mathbf{D}(\mathbf{v}) + \boldsymbol{\sigma}_E + \frac{1-a}{2} \mathbf{f}_p \otimes \mathbf{p} - \frac{1+a}{2} \mathbf{p} \otimes \mathbf{f}_p, \quad (1.7)$$

où a est la constante qui paramétrise la dérivée \square et $\boldsymbol{\sigma}_E$ désigne le tenseur des contraintes de Ericksen, défini par [GP93, équation (3.100)]

$$\boldsymbol{\sigma}_E := -\Pi\boldsymbol{\delta} - K\nabla\mathbf{p}^\top \cdot \nabla\mathbf{p}. \quad (1.8)$$

Dans la suite, tous les modèles présentés se basent sur ce formalisme et respectent donc la structure des équations données dans cette section. Leur description se résumera dans la plupart des cas à donner une expression de la résultante des forces volumiques \mathbf{f} et des forces de torsion \mathbf{f}_p .

1.3.5. Liens entre gels actifs et tissus biologiques

Les filaments de protéines (comme l'actine) qui composent le cytosquelette sont des objets allongés plongés dans le cytoplasme. Lorsque la cellule se polarise, les fibres se contractent et surtout s'alignent. Mais à la différence d'un cristal liquide, la cellule est un matériau actif et peut réguler ses propriétés mécaniques ainsi que sa microstructure. Un tel matériau est en général appelé gel actif [Mar+13]. Comme évoqué dans la section 1.2.1, c'est la consommation d'ATP qui rend possible cette activité.

Si l'on assimile un tissu à son réseau de protéines sous-jacent, alors on peut le traiter comme un gel actif, mais au prix de plusieurs simplifications : on ne tient pas compte du fait que \mathbf{p} est un vecteur dont le module peut varier, du fait que \mathbf{p} et $-\mathbf{p}$ sont des vecteurs différents, et du fait que les matériaux cellulaires peuvent avoir une plasticité due aux réarrangements cellulaires. Moyennant ces simplifications, la plupart des modèles de migration cellulaire collective de la littérature sont d'ailleurs une adaptation de la théorie des gels actifs. Celle-ci adapte le formalisme des cristaux liquides aux gels actifs, principalement via l'introduction d'un tenseur des contraintes actives de la forme [Mar+13, équation (45b)]

$$\boldsymbol{\sigma}_a := -\mu_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}, \quad (1.9)$$

où μ_a est le coefficient de contrainte active. Dans le contexte tissulaire, on peut par exemple estimer qu'il résulte de la contraction des filaments d'actine induite par les moteurs moléculaires. La grande particularité de ce nouveau terme est qu'il peut a priori adopter n'importe quel signe, traduisant autant une contraction ($\mu_a < 0$) qu'une distension ($\mu_a > 0$). En pratique, le signe de μ_a est fixé à l'avance, et le coefficient est majoritairement pris positif.

1.3.6. Modèle de Alert et Trepat (2019)

La revue [AT19] contient sans doute l'une des formes les plus générales qu'il est possible de donner aux équations de la migration. Cette forme combine les théories des gels actifs

et d'agrégation de TONER, TU et RAMASWAMY [TTR05 ; Mar+13]. Le modèle que nous développons dans cette thèse est un cas particulier de celui présenté ici.

Équation de comportement de la polarité

C'est dans l'expression de la force polaire f_p que transparaît le plus l'apport de la théorie du mouvement collectif développée par TONER, TU et RAMASWAMY. Elle s'écrit [AT19, section 3.5.2]

$$f_p = -\beta \left(|\mathbf{p}|^2 + \frac{\alpha}{\beta} \right) \mathbf{p} + w \nabla \rho_s + K \Delta \mathbf{p}, \quad (1.10)$$

où $\beta > 0$ et $\alpha, w \in \mathbb{R}$. Lorsque $\alpha > 0$, le premier terme représente une force toujours orientée dans le sens opposé à la polarité dans le but de la faire tendre vers 0 : l'état non-ordonné est stable. Au contraire, lorsque $\alpha < 0$, son orientation est dictée par le signe de $|\mathbf{p}|^2 + \alpha/\beta$ dans le but de faire tendre le système vers un état ordonné. Dans cet état stable, la polarité a une norme constante égale à $\sqrt{-\alpha/\beta}$. Remarquons que si $\mathbf{p} = \mathbf{0}$, alors cette force disparaît encore même si $\alpha < 0$, mais ce n'est a priori pas l'état privilégié par le système, car instable. Le second terme couple la polarité au gradient de densité, et décrit la tendance des cellules à se polariser dans la direction de plus forte variation de densité. Par exemple, le cas $w < 0$ correspond à une fuite des régions denses. Le troisième terme pénalise les variations spatiales de la polarité, comme expliqué dans la section 1.3.4.

Dans [AT19], l'équation d'évolution de la polarité (1.6) a également été généralisée, notamment via l'ajout d'un terme source proportionnel à la vitesse. Elle prend la forme [AT19, équation (13)]

$$\lambda_p \left(\square \mathbf{p} + \bar{a} (\operatorname{div} \mathbf{v}) \mathbf{p} \right) - f_p = \gamma \mathbf{v}, \quad (1.11)$$

où \bar{a} traduit un couplage supplémentaire de la polarité avec le taux local de croissance du tissu, et γ fournit un terme d'alignement polarité-vitesse, en particulier pour les migrations à vitesse uniforme.

Interactions intercellulaires

Le tenseur des contraintes décrit les interactions intercellulaires. Ici, il est toujours de la forme (1.7) avec la partie active (1.9) en plus. ALERT et TREPAT définissent en particulier un terme de pression de la forme [AT19, section 3.5.3]

$$\begin{aligned} \Pi := \frac{\varkappa}{2} (\rho_s^2 - (\rho_s^*)^2) + w (\operatorname{div} \mathbf{p}) \rho_s^* - D \left(\operatorname{div} (\rho_s \nabla \rho_s) - \frac{1}{2} |\nabla \rho_s|^2 \right) \\ - \frac{\alpha}{2} |\mathbf{p}|^2 - \frac{\beta}{4} |\mathbf{p}|^4 - \frac{K}{2} |\nabla \mathbf{p}|^2, \end{aligned} \quad (1.12)$$

où \varkappa et D sont deux constantes positives. Comme pour la polarité, le terme attaché à \varkappa pénalise les variations de la densité autour de la densité de référence ρ_s^* , tandis que le terme

associé à D pénalise les variations spatiales de la densité, qui tend donc à l'uniformiser à travers le tissu. Remarquons que $\sqrt{D/\varkappa}$ est homogène à une longueur : l'introduction de ce terme définit une longueur de corrélation de la densité. Les autres termes ont une origine thermodynamique.

Interactions cellules-substrat

La force de traction f_{traction} naît de l'interaction entre les cellules et le substrat, qui sert de support à la migration. L'hypothèse la plus courante dans la littérature est que celle-ci se compose de deux termes : la force active $f_a p$ exercée par les cellules sur le substrat, d'intensité f_a et de direction p (en général on prend f_a fixe et p de module variable, mais le choix inverse est mathématiquement équivalent), et le frottement $-kv$ du tissu avec le substrat, où k est le coefficient de friction. Formellement, on a donc $f_{\text{traction}} = kv - f_a p$. Remarquons que cette relation fournit un autre terme d'alignement polarité-vitesse via la l'équation d'équilibre mécanique (1.1a), qui peut entrer en contradiction avec celui introduit dans la section 1.3.6. Dans [AT19], les auteurs évoquent un troisième terme dans la force de traction, de la forme $\gamma \dot{p}$, qui serait une conséquence de l'ajout dans l'équation d'évolution de la polarité du terme d'alignement mentionné.

Couplage avec la viscoélasticité

ALERT et TREPAT [AT19] complètent finalement le modèle simplement par l'ajout d'une contribution viscoélastique σ_e au tenseur des contraintes, où σ_e est solution de (1.2b). Pour être exact, ils ne considèrent qu'un modèle de Maxwell (pour lequel $\eta_c = 0$), mais un modèle d'Oldroyd pourrait tout aussi bien convenir ici.

1.3.7. Modèle de Tlili et al. (2018)

TLILI et al. [Tli+18] ont proposé un modèle unidimensionnel simple pour tenter de décrire phénoménologiquement la migration longue distance d'un épithélium dans un canal. Celui-ci couple explicitement le tenseur des contraintes élastiques à la polarité dans l'équation d'évolution de cette dernière, qui s'écrit alors

$$\lambda_p \dot{p} + p = 1 + m\sigma_e, \quad (1.13)$$

où m est le coefficient de couplage. La constante 1 dans le second membre a été ajoutée pour forcer une polarisation du tissu et ainsi assurer la création d'un mouvement. Une analyse de stabilité linéaire montre que ce modèle est capable de prédire l'apparition d'ondes de déplacement, en accord avec les observations expérimentales. La généralisation de cette équation aux géométries bidimensionnelles n'est par contre pas immédiate, en raison des natures tensorielles différentes du vecteur polarité et du tenseur des contraintes élastiques.

1.3.8. Modèle de Marcq (2014)

MARCQ [Mar14] a également proposé un modèle unidimensionnel couplant viscoélasticité et polarité, comme TLILI et al. [Tli+18], capable de prédire la propagation d'ondes d'élasticité et de polarité, et pouvant potentiellement servir à expliquer l'apparition d'ondes dans la migration cellulaire collective. Par rapport au modèle proposé par TLILI et al., les équations ici proposées sont plus riches :

$$\sigma = \eta_0 \frac{\partial \nu}{\partial x} + \sigma_e + \alpha \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (1.14a)$$

$$\lambda \dot{\sigma}_e + \sigma_e = \eta_c \frac{\partial \nu}{\partial x} - \beta \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (1.14b)$$

$$\lambda_p \square p + p + \zeta p \frac{\partial p}{\partial x} - K \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \nu \frac{\partial^4 p}{\partial x^4} = \gamma \frac{\partial \sigma_e}{\partial x}, \quad (1.14c)$$

où α , β et γ sont les paramètres du couplage. En une dimension, la dérivée objective $\square p$ est définie par $\square p := \dot{p} - a \frac{\partial \nu}{\partial x} p$. Notons la présence de deux nouveaux termes $\zeta p \frac{\partial p}{\partial x}$ et $\nu \frac{\partial^4 p}{\partial x^4}$. Le second terme a été introduit pour ajouter de la stabilité au système. Nous expliquerons le premier dans la prochaine section.

1.3.9. Modèle de Banerjee et Marchetti (2019)

[BM19] prennent en compte, en plus de la viscoélasticité et de la polarité, la concentration massique d'actomyosine (voir la section 1.2.1), représentée par le scalaire c et modélisée par une équation de type diffusion-advection-réaction [BM19, équation (11)]. Cette nouvelle variable permet de préciser le comportement de la contrainte active, a priori induite par la myosine (voir la section 1.3.5) :

$$\sigma_a = \frac{\gamma c^n}{c_*^n + c^n} \delta - \mu_a(c) \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}, \quad (1.15)$$

où la constante $n > 1$ indique le comportement coopératif au-delà d'une concentration critique c_* , γ est l'intensité de la contrainte active isotrope et le coefficient de contrainte active μ_a est maintenant supposé dépendre de c (les auteurs n'en donnent pas une expression explicite).

La concentration est également couplée à la polarité via un gradient, indiquant que les cellules tendent à se polariser dans la direction de plus forte variation de concentration, ce qui pourrait traduire une forme de plithotaxie, phénomène évoqué dans la section 1.2.2. L'équation d'évolution de la polarité prend la forme suivante [BM19, équation (10)] :

$$\lambda_p \square \mathbf{p} + \beta(\mathbf{p} \cdot \nabla) \mathbf{p} - \mathbf{f}_p = w \nabla c, \quad (1.16a)$$

$$\mathbf{f}_p = -\alpha(|\mathbf{p}|^2 - 1) \mathbf{p} - K \Delta \mathbf{p}, \quad (1.16b)$$

avec $\alpha = 0$ dans l'expression de la dérivée objective \bar{p} et $w > 0$ le couplage polarité-actomyosine. L'expression de la force polaire f_p est un cas particulier de celle proposée dans [AT19], présentée dans la section 1.3.6. Le paramètre α module la force de retour à l'état stable polarisé $|\bar{p}| = 1$. Déjà apparent dans le modèle précédent, le terme fortement non linéaire $\beta(\bar{p} \cdot \nabla)\bar{p}$ est similaire à celui obtenu dans la théorie des mouvements collectifs de TONER, TU et RAMASWAMY, à la différence que dans cette dernière, la vitesse et la polarité sont confondues. Dans ce contexte, les auteurs justifient sa présence par le besoin de modéliser les processus pilotés par l'ATP.

Précisons finalement qu'ici le modèle de Kelvin-Voigt a été préféré au modèle de Maxwell, ce qui, selon les auteurs, serait plus en accord avec les dernières expériences rhéologiques réalisées [BM19, section 2.1].

Une version légèrement simplifiée de ce modèle a par exemple été appliquée dans [Not+16]. Une étude théorique du couplage entre polarité et concentration de protéines a été menée dans [IM23], montrant un effet de stabilisation des déformations anisotropes subies par un tissu. Citons enfin le modèle proposé par CZAJKOWSKI et al. [Cza+18] qui se base sur un autre type de couplage, mêlant polarité et anisotropie de la forme des cellules, le but étant de décrire ce qu'ils appellent la morphotaxie, c'est-à-dire la préférence des tissus à adopter certains motifs plutôt que d'autres.

1.4. Organisation de cette thèse

1.4.1. Motivations

La figure 1.1 (a) montre un épithélium, tissu mince, migrant sur un substrat rectangulaire, présentant un obstacle circulaire [Tli+20]. Initialement, les cellules sont confinées dans la partie gauche du domaine. Quand elles sont relâchées, un peu à la manière d'un lâcher de barrage (à des échelles temporelles et spatiales différentes), le tissu se polarise, ce qui initie le mouvement dans la direction du bord libre, de gauche à droite. Quand les cellules rencontrent l'obstacle, elles sont forcées à le contourner, ce qui crée des hétérogénéités dans la migration, la rendant véritablement bidimensionnelle. Cette expérience est présentée en détail dans le chapitre 11.

En rhéologie, cette expérience, dite de Stokes, du nom du physicien l'ayant imaginée pour la première fois en 1850 [Sto50], permet de sonder les propriétés du matériau étudié ou des modèles utilisés pour le décrire. Elle a par exemple été adaptée aux écoulements de mousses, ce qui a permis d'en démontrer leur caractère visco-élasto-plastique [Che+11]. De manière similaire, TLILI et al. ont montré [Tli+20] la compatibilité de leur expérience de migration tissulaire autour d'un obstacle avec un modèle de Maxwell, qui décrit la rhéologie de fluides viscoélastiques (voir la section 1.3.3). TLILI et al. ont même pu déterminer le temps de relaxation viscoélastique correspondant à environ 70 min, qui est indépendant de la taille de l'obstacle.

Cette expérience a été conçue en anticipant la présente thèse, avec déjà comme objectif

la modélisation mathématique et numérique : elle est réalisée *in vitro* pour s'affranchir des effets d'hétérogénéité génétique que l'on peut constater *in vivo* [Gui+15]. L'idée est de séparer ces deux difficultés, mécanique et génétique, qui se combinent lors de la morphogenèse. Toujours dans cette optique de modélisation, l'expérience a été réalisée sur un domaine de grande taille – un rectangle d'environ 4 mm sur 1 mm, avec un obstacle d'un rayon de l'ordre de 200 μm – pendant une longue durée (au moins 12 h). En conséquence, les quantités mesurées présentent alors un bon rapport signal sur bruit, et sont donc suffisamment fiables pour être utilisées dans des comparaisons avec des calculs numériques.

Dans cette thèse, nous abordons donc la modélisation mathématique de la polarité et de la rhéologie des épithéliums sans tenir compte des effets génétiques. Nous cherchons en particulier à modéliser cette expérience de migration tissulaire autour d'un obstacle. Pour cela, nous construisons rigoureusement un modèle mathématique continu minimal de migration cellulaire collective, comme cas particulier de celui présenté dans la section 1.3.6. Ensuite, nous élaborons un algorithme de résolution numérique performant et adaptable à tout type de géométries. Puis, nous l'appliquons à la géométrie autour d'un obstacle circulaire, et démontrons finalement sa pertinence par des comparaisons qualitatives et semi-quantitatives avec les données expérimentales *in vitro*.

1.4.2. Première partie : Modélisation continue

Dans le chapitre 2, nous mettons en place les outils de la mécanique des milieux continus et de la thermodynamique qui nous permettront de construire un modèle de mouvement collectif des cellules. Nous présentons un cadre thermodynamique [Sar24] plus puissant que celui utilisé par les modèles présentés dans la section 1.3, permettant toujours d'obtenir la conformité des équations aux principes généraux de la mécanique des milieux continus, notamment le second principe de la thermodynamique. Nous présentons également la théorie des contraintes de couples [HHD15] qui offre un cadre plus général que celle des cristaux liquides ou des gels actifs pour décrire des fluides à microstructure. À cette théorie, nous appliquons aussi le formalisme thermodynamique développé au préalable, proposant ainsi une connexion inédite entre ces deux théories.

Dans le chapitre 3, nous construisons un modèle de migration cellulaire collective tridimensionnel thermodynamiquement cohérent, aussi simple que possible, à partir des théories présentées dans le chapitre 2. Il peut être vu comme un cas particulier de celui présenté dans la section 1.3.6.

Dans le but de réaliser une approximation en couche mince rigoureuse du modèle tridimensionnel, nous présentons dans le chapitre 4 un nouveau cadre théorique pour l'analyse asymptotique d'équations décrivant les écoulements incompressibles de matériaux non newtoniens. Ce cadre permet d'éviter certaines hypothèses mathématiques redondantes et de réduire drastiquement le nombre de calculs formels fastidieux. Ce travail a donné lieu à une publication [SCS23].

Les outils mis en place dans le chapitre 4 sont alors utilisés dans le chapitre 5 pour réduire le modèle tridimensionnel construit précédemment en un système bidimensionnel moins

coûteux à résoudre. Dans une démarche continue de simplification des procédés, nous proposons également une analyse asymptotique a posteriori des lois de conservation et des équations constitutives, établissant ainsi un cadre permettant de construire rigoureusement des modèles bidimensionnels déjà moyennés en épaisseur et conformes aux principes de la mécanique des milieux continus, à l'erreur de l'approximation en couche mince près. Nous aboutissons finalement à deux problèmes, l'un incompressible comme cas d'étude préliminaire, et l'autre compressible.

1.4.3. Deuxième partie : Résolution numérique du modèle

Le chapitre 6 introduit les méthodes de Galerkine discontinues [PE11] qui seront utilisées pour discréteriser spatialement les équations obtenues dans la partie précédente. Nous présentons leurs applications aux problèmes simples de transport et de diffusion, et au problème moins évident de diffusion-advection-réaction. Pour les deux premiers problèmes, nous proposons des estimations d'énergie continue et discrète en espace, dont une nouvelle pour l'équation de diffusion. Nous montrons par contre qu'il n'est pas possible d'obtenir d'estimation équivalente pour le dernier problème sans couplage avec d'autres équations.

Dans le chapitre 7, nous discrétonisons ensuite en espace les problèmes posés dans la partie précédente, et en proposons des estimations d'énergie continue et discrète en espace pour le modèle incompressible, et seulement continue pour le modèle compressible.

Nous consacrons enfin le chapitre 8 à la discréterisation en temps des équations discrétes en espace. Nous utilisons pour cela des méthodes de formulation de différentiation à l'envers (*Backward Differentiation Formula*, ou BDF) [HWN93] et nous présentons une stratégie connue pour garantir au niveau discret la positivité de la densité, combinant de manière inédite les méthodes BDF adaptatives (A-BDF) [Fre98] et un limiteur de positivité [Zha17].

1.4.4. Troisième partie : Comparaisons des calculs numériques et des expériences

Dans le chapitre 9, nous détaillons l'implémentation pratique de l'algorithme de résolution numérique, puis validons le schéma numérique proposé en vérifiant l'ordre de convergence des solutions approchées vers des solutions connues.

Le chapitre 10 est dédié à l'exploration numérique du modèle sur bande avec obstacle et sur disque. Nous y étudions la sensibilité du modèle au maillage, le rôle des paramètres et montrons la diversité et la complexité des comportements que le modèle est capable de produire, comme par exemple des dissymétries haut/bas et amont/aval relativement à l'obstacle ou un sursaut de la vitesse en aval de l'obstacle.

Dans le chapitre 11, nous procédons enfin aux comparaisons qualitatives et semi-quantitatives avec les données produites sur l'expérience de migration autour d'un obstacle (voir la figure 1.1 (a)). Nous montrons en quoi notre modèle est capable de décrire la migration d'un tissu.

Première partie

Modélisation continue

Chapitre

Cadre thermomécanique théorique

2

Dans ce chapitre, nous mettons en place les outils de la mécanique des milieux continus et de la thermodynamique qui nous permettront de construire un modèle de mouvement collectif des cellules. Tout modèle issu de la mécanique des milieux continus commence avec les lois de conservation – ici celles de la quantité de mouvement, de la masse, du moment cinétique et de l'énergie (section 2.1). Ces lois traduisent les principes physiques fondamentaux de déformation et de mouvement, communs à tous les matériaux dits continus (dont les fluides ou les tissus à certaines échelles). Le comportement spécifique de chaque milieu est alors décrit au moyen d'équations dites constitutives, qu'il est possible d'obtenir à l'aide d'outils thermodynamiques (section 2.2). Ceux-ci permettent la construction de modèles cohérents du point de vue thermodynamique et limitent alors le rôle de la physique au choix d'une énergie potentielle, dite libre ou de Helmholtz, et d'un potentiel de dissipation. Nous présentons enfin dans la section 2.3 une extension de la mécanique des milieux continus, connue sous le nom de théorie des contraintes de couple [Sto84] [HD11]. Celle-ci suppose qu'en plus des forces habituelles, un volume élémentaire du milieu continu est également soumis à des moments de forces, indépendants des premières forces évoquées, en conséquence de quoi, le tenseur des contraintes de Cauchy n'est plus symétrique.

Table des matières

2.1. Cadre de la mécanique classique des milieux continus	26
2.2. Conception thermodynamique classique des lois de comportement	29
2.3. Théorie des contraintes de couple	38
2.4. Thermodynamique faiblement non-locale de la théorie des contraintes de couples	46
2.5. Conclusion	52

2.1. Cadre de la mécanique classique des milieux continus

Cette section rappelle les lois de conservation de la mécanique des milieux continus (voir par exemple [Sto84, chapitres 1 et 2], [BAH87, section 1.1] [GM95], [Sar16, chapitres 1 et 5] ou [Sar24, chapitre 1] pour connaître leur origine). Nous renvoyons à l'annexe A pour le détail des notations adoptées et la définition exacte des opérateurs différentiels.

2.1.1. Position du problème

Nous considérons un tissu comme un milieu continu *isotherme* occupant, à tout instant $t \geq 0$, un volume donné \mathcal{B} , vu comme une partie ouverte bornée de l'espace physique en trois dimensions \mathbb{R}^3 . Son évolution est suivie au travers de petits volumes élémentaires, appelés *volumes élémentaires représentatifs* (VER) [Gra+08, section 4.1], dont la taille est suffisamment grande devant les constituants individuels discrets (ici, les cellules) et suffisamment petite devant l'échelle du matériau (ici, le tissu). Les mesures moyennes de vitesse, de déformation, de masse volumique, etc., faites à cette échelle sont supposées être caractéristiques du matériau continu et indépendantes des fluctuations provenant de l'échelle discrète [Gra+08, section 4.1]. Dans le contexte des tissus, un VER est par exemple un petit ensemble de cellules.

D'un point de vue mathématique, les VER sont assimilés à des points matériels localisés par leurs centres de masse respectifs. Du point de vue expérimental, les VER sont des boîtes fixes dans lesquelles sont entre autres mesurées la vitesse et la déformation des cellules qui s'y trouvent à un instant donné (figure 2.1).

Dans cette thèse, nous adoptons la description *eulérienne* du mouvement du milieu, c'est-à-dire que nous nous plaçons dans le référentiel, supposé Galiléen, d'un observateur qui ne suit pas du regard les cellules au cours du temps, mais qui les regarde plutôt passer en chaque point fixe de \mathcal{B} à chaque instant (figure 2.1). Ces points fixes sont identifiés par des coordonnées cartésiennes $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ dans le repère $\mathcal{R}(O, \delta_1, \delta_2, \delta_3)$, où O est l'origine et les δ_i , $i \in \{1, 2, 3\}$, sont les vecteurs unitaires de la base canonique de \mathbb{R}^3 . La description eulérienne est ici privilégiée car elle est plus adaptée aux matériaux en grandes déformations [Sar24, page ix], éventuellement non bornées, comme ça peut être le cas des tissus [Tli+15, section II.C.2].

La masse volumique, la vitesse et la contrainte sont notées, à un instant $t \geq 0$ et en un point $\mathbf{x} \in \mathcal{B}$, respectivement $\rho(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = (v_i(\mathbf{x}, t))_{1 \leq i \leq 3}$ et $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, t) = (\sigma_{ij}(\mathbf{x}, t))_{1 \leq i, j \leq 3}$. On note simplement ρ le champ de scalaires représentant la masse volumique, \mathbf{v} le champ de vecteurs représentant la vitesse et $\boldsymbol{\sigma}$ le champ de tenseurs représentant la contrainte, parfois simplement appelé tenseur des contraintes (de Cauchy). Celui-ci encapsule l'ensemble des forces dites surfaciques qui s'appliquent tout volume élémentaire. Si on note $\mathcal{V} \subset \mathcal{B}$ un tel volume élémentaire et \mathbf{n} le vecteur unitaire normal à la frontière de \mathcal{V} , orienté vers l'extérieur, alors $\boldsymbol{\sigma}^\top \cdot \mathbf{n}$ représente ces dites forces surfaciques qui s'appliquent sur la frontière $\partial \mathcal{V}$ du volume élémentaire \mathcal{V} [Sto84, section 2.5]. L'existence du tenseur de Cauchy est en

2.1. Cadre de la mécanique classique des milieux continus

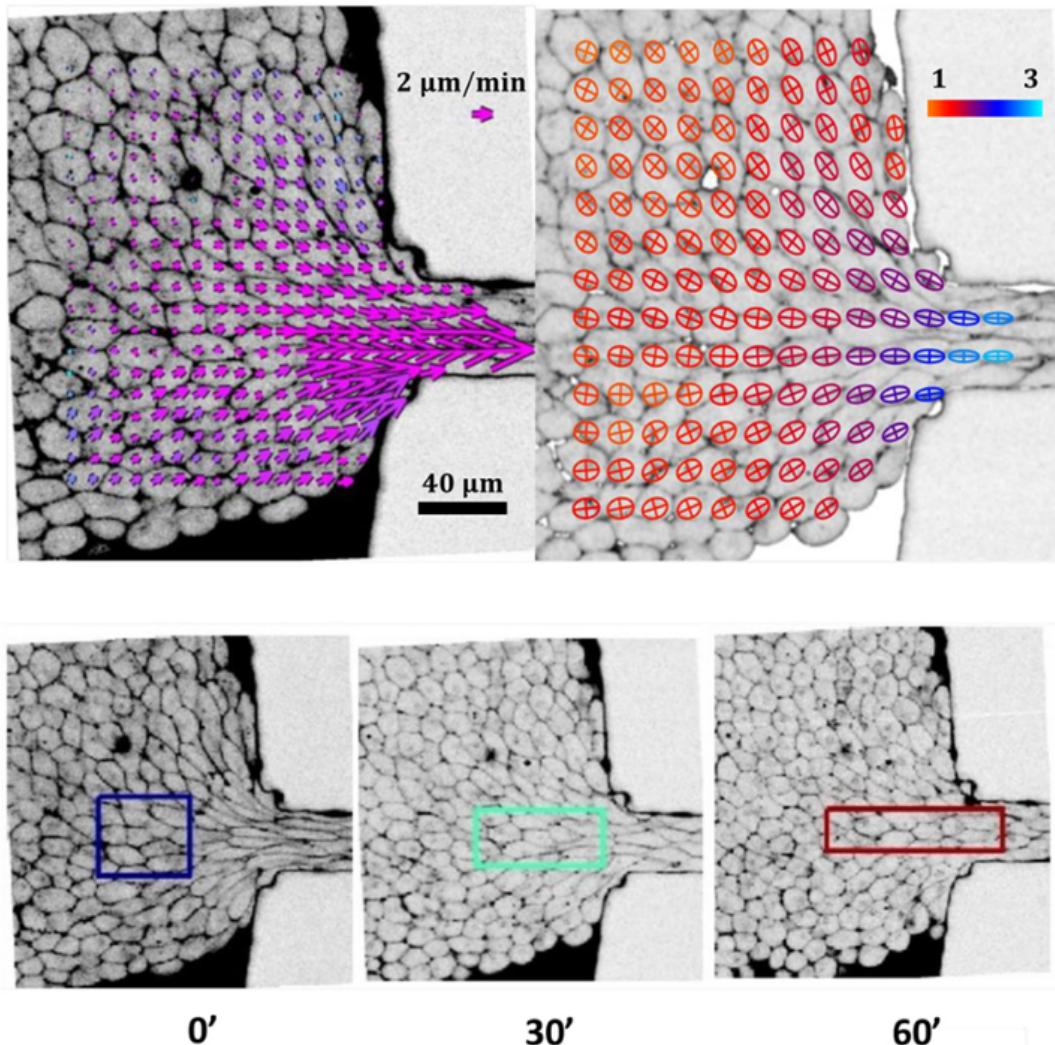


FIGURE 2.1. – Agrégat de cellules embryonnaires aspiré à travers une constriction dans un canal microfluidique. Les deux figures du haut illustrent la description eulérienne : les vecteurs vitesse et les ellipses de déformation ne sont pas attachés aux cellules. Les trois figurent du bas illustrent au contraire l'approche lagrangienne : les cellules sont suivies individuellement. Extrait de [TGD22, figure 4].

réalité un résultat mathématique établi par Cauchy [Sto84, section 2.5] [Sar24, proposition 1.11], que nous admettons.

Dans la suite, chacun de ces champs est supposé suffisamment régulier pour que les opérations classiques de calcul différentiel et intégral puissent leur être appliquées.

2.1.2. Loi de conservation de la masse

La loi de conservation de la masse s'écrit localement [Sto84, section 1.8] [BAH87, section 1.1a] [Sar24, théorème 1.1]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[. \quad (2.1)$$

2.1.3. Loi de conservation de la quantité de mouvement

La loi de conservation de la quantité de mouvement s'écrit localement [Sto84, section 2.6] [BAH87, section 1.1b] [Sar24, théorème 1.2]

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) - \operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}^T) = \mathbf{f}, \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (2.2)$$

où \mathbf{f} représente la résultante des forces volumiques. Cette loi généralise la deuxième loi du mouvement de Newton, ou principe fondamental de la dynamique, aux milieux continus. Elle est uniquement valable dans des référentiels galiléens (voir [Sar24, remarque 1.5]). Elle traduit l'égalité entre les variations temporelles de la quantité de mouvement $\rho \mathbf{v}$ et la résultante des forces s'appliquant sur le système, ici représentée par la somme des forces surfaciques et volumiques, soit $\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}^T) + \mathbf{f}$.

2.1.4. Loi de conservation du moment cinétique

En mécanique *classique* des milieux continus, la loi de conservation du moment cinétique se traduit par la symétrie du tenseur des contraintes, soit $\boldsymbol{\sigma}^T = \boldsymbol{\sigma}$ [Sar24, proposition 1.15]. Nous verrons dans la section 2.3 une forme plus générale, pour laquelle cette propriété n'est plus satisfaite.

2.1.5. Principes de la thermodynamique et inégalité de Clausius-Duhem

À ces lois de conservation se rajoutent les deux principes de la thermodynamique que sont la conservation de l'énergie et le second principe de la thermodynamique [Sto84, sections 2.8 et 2.9] [BAH87, section 1.1c] [Sar24, section 1.4]. Les équations constitutives développées dans la section 2.2 sont obtenues directement à partir de ces deux lois, de sorte qu'elles satisfassent automatiquement le second principe. Une expression équivalente de ce second principe, plus commode pour la construction des lois de comportement,

est l'inégalité de Clausius-Duhem, qui s'écrit localement à température uniforme [Sto84, section 2.9] [Sar24, corollaire 1.20]

$$-\rho \dot{\Psi} + \sigma : D(v) \geq 0, \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (2.3)$$

où Ψ désigne l'énergie libre spécifique de Helmholtz (voir [Sar24, définition 1.18]), $D(v) := \text{sym}(\nabla v)$ le tenseur taux de déformation, défini comme la partie symétrique du gradient de vitesse (voir la définition A.1.11), et $\dot{\varphi} := \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (v \cdot \nabla) \varphi$ la dérivée particulaire ou matérielle d'une quantité φ quelconque, définition que l'on généralise naturellement aux champs de vecteurs et de tenseurs. Cette dernière se généralise aux vecteurs et aux tenseurs par application composante par composante.

2.2. Conception thermodynamique classique des lois de comportement

Les principes de base de la mécanique classique des milieux continus ont été exposés dans la section précédente. Ceux-ci se traduisent par 4 équations scalaires et une inéquation, une avec la loi de conservation de la masse (2.1), trois avec la loi de conservation de la quantité de mouvement (2.2) et une avec l'inégalité de Clausius-Duhem (2.3). Ces équations réunissent au total 11 inconnues scalaires, une avec la masse volumique ρ , trois avec la vitesse v , six avec le tenseur des contraintes σ – puisqu'il est ici symétrique – et une avec l'énergie libre Ψ . On a donc deux fois plus d'inconnues que d'équations : le système est sous-déterminé. Comme évoqué en introduction, ces équations sont communes à tous les milieux continus, il est donc nécessaire de spécifier le comportement du matériau étudié. Mathématiquement, cela revient à formuler des équations constitutives, qui expriment par exemple une relation entre le tenseur des contraintes et le gradient de vitesse.

La construction de ces équations constitutives ne saurait être purement phénoménologique ou empirique. Elle doit suivre un ensemble de principes physiques. ERINGEN dans [Eri80, section 5.3] énonce huit axiomes à respecter pour écrire des équations constitutives physiquement et mathématiquement acceptables. Nous ne les citons pas tous ici, car certains sont soit triviaux, soit peu pertinents dans le cadre de cette thèse. Parmi eux, nous retenons les axiomes d'objectivité et d'admissibilité. Le premier demande à ce que les équations constitutives soient indépendantes du référentiel choisi pour les exprimer [Eri80, axiome (iv)] [Sar24, postulat 2.1] ; le second à ce qu'elles soient soumises aux principes de base de la mécanique des milieux continus [Eri80, axiome (viii)], c'est-à-dire aux lois introduites dans la section précédente, en particulier le second principe de la thermodynamique, ici traduit en équation par l'inégalité de Clausius-Duhem.

La section 2.2.1 présente la théorie des matériaux standards généralisés (restreinte au cas isotherme) [HS75] [Sar16, section 5.3] qui permet de construire, sous l'hypothèse des petites déformations, des équations constitutives automatiquement admissibles, au sens de l'axiome d'admissibilité. Les trois sections suivantes étendent cette théorie aux grandes

déformations. La section 2.2.2 revient sur l'axiome d'objectivité, et introduit les dérivées en temps objectives et le tenseur de déformation de Hencky. La section 2.2.3 énonce le théorème d'Edelen, qui pose un cadre de résolution des inégalités fonctionnelles. Enfin, la section 2.2.4 donne la forme générale, abstraite, des équations constitutives, sur laquelle nous nous appuierons pour construire notre modèle de tissus.

2.2.1. Matériaux standards généralisés

Hypothèse des petites déformations

L'hypothèse des petites déformations consiste à considérer le gradient du champ de déplacement \mathbf{d} comme petit, c'est-à-dire à supposer que $|\nabla \mathbf{d}| \ll 1$. En conséquence, tout tenseur de déformation [Sar24, définition 3.3] peut être approché au premier ordre par le tenseur de déformation linéarisé $\boldsymbol{\epsilon} := \mathbf{D}(\mathbf{d})$ [Sar24, remarque 3.7].

En outre, toujours dans le cadre de cette hypothèse, le terme d'advection dans la dérivée particulière peut également être négligé, soit $\dot{\varphi} \approx \frac{\partial \varphi}{\partial t}$, quel que soit le champ scalaire φ . En particulier, $\dot{\boldsymbol{\epsilon}} = \mathbf{D}(\dot{\mathbf{v}})$ représente donc le tenseur taux de déformation.

Définition

Un matériau standard généralisé est un milieu continu en petites déformations complètement caractérisé par la données de deux fonctionnelles : (i) l'énergie libre $\Psi(\mathcal{X})$, supposée différentiable (voir l'annexe B.3) et (ii) le potentiel de dissipation $\Phi(\dot{\mathcal{X}})$, une fonction convexe à valeurs réelles positives et nulle lorsque $\dot{\mathcal{X}} = 0$, où $\mathcal{X} = (\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_m)$ constitue un ensemble de $m \geq 1$ variables d'état du système thermodynamique, appelées variables thermodynamiques internes. Dans le cas isotherme, la première variable thermodynamique interne est toujours le tenseur de déformation linéarisé, soit $\mathcal{X}_1 = \boldsymbol{\epsilon}$. Les équations constitutives d'un tel matériau s'écrivent alors

$$\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\epsilon}} \in \partial_{\boldsymbol{\epsilon}} \Phi, \quad (2.4a)$$

$$-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i} \in \partial_{\dot{\mathcal{X}}_i} \Phi, \quad i = 2, \dots, m, \quad (2.4b)$$

où $\partial_{\dot{\mathcal{X}}_i} \Phi$ le sous-différentiel de Φ par rapport à $\dot{\mathcal{X}}_i$ (cf. définition B.4.4). Lorsque Φ est différentiable par rapport à $\dot{\mathcal{X}}_i$, le symbole \in peut être remplacé par une simple égalité. L'annexe B.3 détaille les notations utilisées pour les différentielles et fournit quelques rappels utiles à leur sujet. En combinant ces équations constitutives aux lois de conservation présentée dans la section 2.1, nous avons maintenant autant d'équations que d'inconnues, à savoir $m + 2$.

Un matériau standard généralisé est par construction admissible ; il vérifie en particulier le second principe de la thermodynamique [Sar16, théorème 5.5], ce qui est une conséquence

directe des hypothèses formulées sur le potentiel de dissipation. Notons que la réciproque n'est pas vrai : un potentiel de dissipation ne doit pas nécessairement être convexe pour garantir le second principe [Sar24, remarque 4.4] ; le théorème 2.2.7 d'Edelen en donne les conditions nécessaires et suffisantes. Cependant, l'hypothèse des petites déformations n'est pas vérifiée par la plupart des fluides, en particulier les tissus qui nous intéressent. Nous proposons donc d'explorer à partir de la section 2.2.2 un cadre théorique plus général qui permettra de sortir de cette hypothèse.

Exemple d'application : équations de Navier-Stokes incompressibles

Dans cet exemple, nous considérons un fluide incompressible, c'est-à-dire vérifiant la loi de conservation de la masse (2.1), avec une densité constante, ou encore vérifiant la contrainte $\operatorname{div} \mathbf{v} = \operatorname{tr} \mathbf{D}(\mathbf{v}) = 0$. Au sein de ce cadre théorique, les équations de Navier-Stokes incompressibles sont obtenues en choisissant une seule variable thermodynamique interne, le tenseur de déformation linéarisé, une énergie libre nulle et un potentiel de dissipation sous la forme

$$\Phi(\mathbf{D}) = \mathcal{I}_{\ker \operatorname{tr}}(\mathbf{D}) + \eta |\mathbf{D}|^2, \quad (2.5)$$

où $\eta \geq 0$ est la viscosité du fluide et $\mathcal{I}_{\ker \operatorname{tr}}$ représente l'indicatrice du noyau de la trace, au sens de l'analyse convexe, introduite dans la définition B.4.6. C'est elle qui impose la contrainte d'incompressibilité, puisque cette fonction vaut $+\infty$ dès lors que $\operatorname{tr} \mathbf{D}(\mathbf{v}) = \operatorname{div} \mathbf{v} \neq 0$. Remarquons que cette fonction n'est pas différentiable, donc Φ ne l'est pas non plus.

À l'aide des équations de la théorie des matériaux standards généralisés (2.4) et de la proposition B.4.5, caractérisant la sous-différentielle de $\mathcal{I}_{\ker \operatorname{tr}}$, sous l'hypothèse que $\operatorname{tr} \mathbf{D}(\mathbf{v}) = 0$, on obtient l'expression du tenseur des contraintes pour notre fluide incompressible, à savoir

$$\boldsymbol{\sigma} = -\Pi \boldsymbol{\delta} + 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{v}), \quad (2.6)$$

où $\boldsymbol{\delta}$ est la matrice identité (cf. annexe A.1.2). D'après la proposition B.4.5, la pression Π qui vient d'être introduite agit comme un multiplicateur de Lagrange pour la contrainte d'incompressibilité. Elle correspond également bien à la pression physique, puisque $\Pi = -\frac{1}{3} \operatorname{tr} \boldsymbol{\sigma}$.

En combinant les lois de conservation de la masse (2.1) et de la quantité de mouvement (2.2) et l'équation (2.6), on obtient alors les équations de Navier-Stokes incompressibles :

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \\ \rho \dot{\mathbf{v}} - \eta \Delta \mathbf{v} + \nabla \Pi = \mathbf{f}. \end{cases}$$

Remarquons que ce modèle vérifie bien le second principe de la thermodynamique puisque $-\rho \dot{\Psi} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}(\mathbf{v}) = 2\eta |\mathbf{D}(\mathbf{v})|^2 \geq 0$, donc l'inégalité de Clausius-Duhem (2.3) est vérifiée.

2.2.2. Objectivité

L'axiome d'objectivité demande à ce que les équations constitutives ne soient pas affectées par un changement de référentiel, ou plus formellement, à ce qu'elles ne dépendent que de variables thermodynamiques internes objectives et qu'elles ne fassent appel qu'à des dérivées en temps objectives. Tandis que les tenseurs de déformation linéarisé $\boldsymbol{\epsilon}$ et taux de déformation $\mathbf{D}(\boldsymbol{\nu})$ sont objectifs [Sar24, propositions 2.8 et 2.15], la dérivée particulière appliquée à des champs vectoriels ou tensoriels ne l'est pas sans l'hypothèse des petites déformations [Sar24, proposition 2.5].

Ainsi, si les variables thermodynamiques internes sont à valeurs vectorielles ou tensorielles, le potentiel de dissipation ne peut pas dépendre de leurs dérivées particulières, au risque de violer le principe d'objectivité. De même, il est nécessaire de trouver une autre mesure de la déformation, puisque $\dot{\boldsymbol{\epsilon}} \neq \mathbf{D}(\boldsymbol{\nu})$ sans l'hypothèse des petites déformations.

Dérivées en temps objectives

Toute une famille de dérivées en temps objectives, prenant en compte les rotations et déformations du milieu, ont été proposées. Elles sont appelées les

Définition 2.2.1 – Dérivées de Gordon-Schowalter

Les dérivées de Gordon-Schowalter d'un champ de vecteurs \mathbf{p} et d'un champ de tenseurs symétriques $\boldsymbol{\tau}$ sont respectivement définies par [Sar24, définitions 2.9, 2.18 et 2.20]

$$\square \mathbf{p} = \dot{\mathbf{p}} - (\mathbf{W}(\boldsymbol{\nu}) + a\mathbf{D}(\boldsymbol{\nu})) \cdot \mathbf{p} \quad (2.7a)$$

$$\text{et } \square \boldsymbol{\tau} = \dot{\boldsymbol{\tau}} - 2 \operatorname{sym}[(\mathbf{W}(\boldsymbol{\nu}) + a\mathbf{D}(\boldsymbol{\nu})) \cdot \boldsymbol{\tau}], \quad (2.7b)$$

où $a \in \mathbb{R}$ est un paramètre, souvent restreint à l'intervalle $]-1, 1[$, et $\mathbf{W}(\boldsymbol{\nu}) = \operatorname{skw}(\nabla \boldsymbol{\nu})$ est le tenseur taux de vorticité, défini comme la partie antisymétrique du gradient de vitesse (cf. définition A.1.12).

Ces dérivées sont plus souvent rencontrées lorsque $a \in \{-1, 0, 1\}$:

- Cas $a = -1$: aussi appelée dérivée convectée inférieure, elle s'écrit

$$\triangle \mathbf{p} := \dot{\mathbf{p}} + \nabla \boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.8aa)$$

$$\triangle \boldsymbol{\tau} := \dot{\boldsymbol{\tau}} + \nabla \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \boldsymbol{\nu}^T; \quad (2.8ab)$$

- Cas $a = 0$: aussi appelée dérivée corotationnelle ou de Zaremba-Jaumann, elle s'écrit

$$\circ \mathbf{p} := \dot{\mathbf{p}} - \mathbf{W}(\boldsymbol{\nu}) \cdot \mathbf{p}, \quad (2.8ba)$$

$$\circ \boldsymbol{\tau} := \dot{\boldsymbol{\tau}} - \mathbf{W}(\boldsymbol{\nu}) \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{W}(\boldsymbol{\nu}); \quad (2.8bb)$$

- Cas $a = 1$: aussi appelée dérivée convectée supérieure, elle s'écrit

$$\overset{\nabla}{p} := \dot{p} - \nabla v \cdot p, \quad (2.8ca)$$

$$\overset{\nabla}{\tau} := \dot{\tau} - \nabla v \cdot \tau - \tau \cdot \nabla v^T. \quad (2.8cb)$$

Proposition 2.2.1 – De la dérivée particulière à la corotationnelle

Soient p un champ de vecteurs et τ un champ de tenseurs symétriques.

- (i) Pour tout champ de vecteurs q colinéaire à p , on a

$$\dot{p} \cdot q = \overset{\circ}{p} \cdot q. \quad (2.1)$$

- (ii) Pour tout champ de tenseurs ζ commutant avec p , c'est-à-dire tel que $\tau \cdot \zeta = \zeta \cdot \tau$, on a

$$\dot{\tau} : \zeta = \overset{\circ}{\tau} : \zeta. \quad (2.2)$$

Démonstration.

- (i) Par hypothèse, on peut écrire $q = kp$, $k \in \mathbb{R}$. Alors, par définition (2.8ba) de la dérivée corotationnelle, on a

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{p} \cdot q &= \dot{p} \cdot q - (\mathbf{W}(v) \cdot p) \cdot q \\ &= \dot{p} \cdot q - k \mathbf{W}(v) : (p \otimes p). \end{aligned}$$

On conclut avec la proposition A.1.2 en remarquant que $\mathbf{W}(v)$ est antisymétrique par construction et que $p \otimes p$ est symétrique.

- (ii) Par définition (2.8bb) de la dérivée corotationnelle, on a

$$\overset{\circ}{\tau} : \zeta = \dot{\tau} : \zeta - (\mathbf{W}(v) \cdot \tau) : \zeta + (\tau \cdot \mathbf{W}(v)) : \zeta. \quad (*.1)$$

Il suffit donc de montrer que les deux derniers termes s'annulent. D'après la propriété A.1.1, on peut regrouper ces termes, par symétrie de τ , comme suit :

$$-(\mathbf{W}(v) \cdot \tau) : \zeta + (\tau \cdot \mathbf{W}(v)) : \zeta = \mathbf{W}(v) : (\tau \cdot \zeta - \zeta \cdot \tau) = 0, \quad (*.2)$$

puisque les deux matrices commutent.

Tenseur de déformation de Hencky

Les dérivées objectives précédemment introduites peuvent être substituées aux dérivées particulières des variables thermodynamiques internes vectorielles ou tensorielles dans l'expression du potentiel de dissipation, telle que donnée dans la section 2.2.1. La seule exception concerne le tenseur de déformation linéarisé $\boldsymbol{\epsilon}$, qui ne peut être utilisé pour les grandes déformations, bien qu'objectif. Il doit donc être remplacé par un autre. Ce tenseur de substitution doit alors vérifier trois propriétés qui feront de lui une mesure de la déformation : (i) il doit pouvoir être approché au premier ordre par le tenseur de déformation linéarisé, (ii) il doit être objectif et (iii) le tenseur taux de déformation $\mathbf{D}(\mathbf{v})$ doit pouvoir s'exprimer comme une dérivée objective de celui-ci. Une possibilité est alors de considérer le tenseur de déformation de Green-Lagrange $\mathbf{E} := \boldsymbol{\epsilon} + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{d} \cdot \nabla \mathbf{d}^\top$ [Sar24, définition 3.2]. Ce tenseur vérifie les deux premières propriétés [Sar24, proposition 3.5 et remarque 3.7] mais pas la troisième. En réalité, seul un tenseur vérifie toutes ces propriétés à la fois ; il s'agit du tenseur de déformation de Hencky.

Théorème 2.2.2 – Tenseur de déformation de Hencky

Le tenseur de Hencky $\mathbf{h} := \frac{1}{2} \log(\mathbf{\delta} + 2\mathbf{E})$ est objectif et est l'unique tenseur de déformation à partir duquel il est possible d'exprimer le tenseur taux de déformation comme une dérivée objective d'un tenseur de déformation. Celle-ci se note $\overset{\circ}{\mathbf{h}}^{(\log)} = \mathbf{D}(\mathbf{v})$ et vérifie $(\overset{\circ}{\mathbf{h}}^{(\log)} - \overset{\circ}{\mathbf{h}}) : \mathbf{\tau} = 0$ pour toute matrice $\mathbf{\tau}$ commutant avec \mathbf{h} . De plus, $\mathbf{h} \approx \boldsymbol{\epsilon}$ au premier ordre.

Remarque 2.2.1 – Définition de la dérivée objective $\overset{\circ}{\mathbf{h}}^{(\log)}$: Nous ne donnons pas une expression explicite de $\overset{\circ}{\mathbf{h}}^{(\log)}$ car nous n'en aurons pas besoin pour la suite. Une définition est donnée par le théorème 3.1 dans [Sar24].

Démonstration. Dans [Sar24], l'objectivité est montrée par la proposition 3.5, l'existence de la dérivée objective par le théorème 3.1, le calcul par le corollaire 3.27 et l'approximation au premier ordre par la remarque 3.7. ■

Objectivité de l'énergie libre et du potentiel de dissipation

Avoir des dérivées et des variables thermodynamiques internes objectives ne suffit pas pour obtenir des équations constitutives objectives si l'énergie libre et le potentiel de dissipation ne préservent pas cette propriété, étant donné que ces équations sont directement construites à partir des expressions de leurs différentielles (voir [Sar24, section 2.5] pour une présentation détaillée).

Une autre propriété que l'on peut demander à l'énergie libre est d'être isotrope relativement à chacune des variables thermodynamiques internes, c'est-à-dire d'être invariante par changement de base orthogonale de ses arguments (voir [Sar24, section 2.7] pour une présentation détaillée). En pratique, cela impose à l'énergie libre de ne dépendre que des

2.2. Conception thermodynamique classique des lois de comportement

invariants des variables thermodynamiques internes, et de leurs combinaisons possibles (voir [Eri80, annexe B] pour une liste très complète d'invariants ou [Sar24, remarques 2.37 et 2.44] pour connaître les principaux). Parmi eux, citons les normes au carré et les traces des différentes puissances d'une matrice.

Enfin, citons deux implications importantes de l'objectivité et de l'isotropie, qui seront notamment utilisées dans les sections 2.2.3 et 2.4.1.

Proposition 2.2.3 – Fonction objective isotrope dépendant d'un vecteur

Si l'énergie libre dépend d'une variable thermodynamique interne vectorielle, alors elle est objective et isotrope par rapport à cette variable si, et seulement si, elle ne dépend que de la norme au carré de cette variable. De plus sa différentielle par rapport à cette variable est colinéaire à celle-ci.

Démonstration. Voir [Sar24, proposition 2.43].

Proposition 2.2.4 – Fonction objective isotrope dépendant d'une matrice

Si l'énergie libre dépend d'une variable thermodynamique interne matricielle et est objective et isotrope par rapport à cette variable, alors sa différentielle par rapport à cette variable commute avec celle-ci.

Démonstration. Voir [Sar24, théorème 2.2].

Théorème 2.2.5 – Énergie libre et tenseur de Hencky

Si l'énergie libre est objective et isotrope, alors sa différentielle par rapport au tenseur de Hencky commute avec celui-ci.

Démonstration. Voir [Sar24, théorème 3.2].

2.2.3. Décomposition d'Edelen

Maintenant que tous les outils pour construire des équations objectives sont en place, il ne manque plus qu'à montrer que la structure des équations constitutives (2.4) présentée dans la section 2.2.1 est préservée par passage aux grandes déformations.

Pour cela, nous notons encore $\mathcal{X} = (\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_m)$ un ensemble de $m \geq 1$ variables thermodynamiques internes, représentant l'état thermodynamique du matériau. Dans le cas isotherme en grandes déformations, la première variable thermodynamique interne est cette fois le tenseur de déformation Hencky, soit $\mathcal{X}_1 = \mathbf{h}$. On peut alors formellement calculer la dérivée en temps de l'énergie libre.

Lemme 2.2.6 – Dérivée en temps de l'énergie libre

Si l'énergie libre Ψ est objective et isotrope par rapport à chacune des variables thermodynamiques internes \mathcal{X}_i , $1 \leq i \leq m$, alors

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} : \mathbf{D}(\mathbf{v}) + \sum_{i=2}^m \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}, \dot{\mathcal{X}}_i \right\rangle, \quad (2.3)$$

où l'on a noté $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le crochet de dualité et $\dot{\varphi} := \dot{\varphi}$ la dérivée corotationnelle d'une fonction scalaire pour rester général.

Démonstration. D'après le théorème B.3.2 de dérivation des fonctions composées, on a

$$\dot{\Psi} = \sum_{i=1}^m \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}, \dot{\mathcal{X}}_i \right\rangle = \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} : \dot{\mathbf{h}} + \sum_{i=2}^m \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}, \dot{\mathcal{X}}_i \right\rangle. \quad (*.1)$$

Comme l'énergie libre est objective et isotrope, $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}$ est colinéaire à \mathcal{X}_i si \mathcal{X}_i est un champ de vecteurs, d'après la proposition 2.2.3, ou $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}$ commute avec \mathcal{X}_i si \mathcal{X}_i est un champ de tenseurs symétriques, d'après la proposition 2.2.4. On conclut avec la proposition 2.2.1 et les théorèmes 2.2.2 et 2.2.5. ■

En injectant (2.3) dans l'inégalité de Clausius-Duhem (2.3), on obtient

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} \right) : \mathbf{D}(\mathbf{v}) - \sum_{i=2}^m \left\langle \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}, \dot{\mathcal{X}}_i \right\rangle \geq 0. \quad (2.4)$$

Cette inégalité peut alors être mise sous une forme plus compacte comme suit :

$$\langle \mathcal{J}, \mathcal{Z} \rangle \geq 0, \quad (2.5)$$

où

$$\mathcal{J} = \left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}}, \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i} \right)_{2 \leq i \leq m} \right), \quad (2.6a)$$

$$\text{et } \mathcal{Z} = \left(\mathbf{D}(\mathbf{v}), \left(\dot{\mathcal{X}}_i \right)_{2 \leq i \leq m} \right) \quad (2.6b)$$

désignent respectivement les flux et forces thermodynamiques [Eri99, section 2.4][Mar+13, page 21]. Le produit $\langle \mathcal{J}, \mathcal{Z} \rangle$ est appelé dissipation. Le théorème d'Edelen est un résultat permettant de résoudre ce type d'inéquations.

Théorème 2.2.7 – Théorème d’Edelen

Soit $(X_i)_{1 \leq i \leq m}$ une famille de $m \geq 1$ espaces vectoriels préhilbertiens de dimension finie, respectivement munis des produits scalaires $(\cdot | \cdot)_i$ pour tout $i = 1, \dots, m$. On note $X := X_1 \times \dots \times X_m$ l'espace produit muni du produit scalaire $(\mathcal{Y} | \mathcal{Z}) := \sum_{i=1}^m (\mathcal{Y}_i | \mathcal{Z}_i)$, quels que soient $\mathcal{Y} = (\mathcal{Y}_1, \dots, \mathcal{Y}_m)$ et $\mathcal{Z} = (\mathcal{Z}_1, \dots, \mathcal{Z}_m)$ dans X , avec $\mathcal{Y}_i, \mathcal{Z}_i \in X_i$ pour tout $i = 1, \dots, m$. Soit enfin E un espace vectoriel quelconque.

Soient $\mathcal{Z} \in X$, $\mathcal{X} \in E$ et $\mathcal{J} : X \times E \rightarrow X$ une application continûment différentiable sur X et continue sur E . Alors l'inégalité

$$(\mathcal{J}(\mathcal{Z}, \mathcal{X}) | \mathcal{Z}) \geq 0 \quad (2.7)$$

est satisfaite si, et seulement si, il existe une application $\Phi : X \times E \rightarrow \mathbb{R}_+$ vérifiant $\Phi(0, \cdot) \equiv 0$, et une application $\mathcal{W} : X \times E \rightarrow X$ vérifiant $(\mathcal{W}(\mathcal{Z}, \mathcal{X}) | \mathcal{Z}) = 0$ et $\mathcal{W}(0, \cdot) \equiv 0$, telles que

$$\mathcal{J}_i(\mathcal{Z}, \mathcal{X}) - \mathcal{W}_i(\mathcal{Z}, \mathcal{X}) \in \partial_{\mathcal{Z}_i} \Phi(\mathcal{Z}, \mathcal{X}), \quad i = 1, \dots, m. \quad (2.8)$$

De plus, \mathcal{W} est unique, tandis que Φ est unique à une constante près.

Remarque 2.2.II – Principe d’Onsager: La plupart des modèles vérifient le principe de symétrie d’Onsager-Edelen [Eri99, section 2.4] [Mar+13, page 21] [Sar24, section 4.3], ou simplement principe d’Onsager, qui impose en plus les relations de symétrie suivantes :

$$\frac{\partial \mathcal{J}_i}{\partial \mathcal{Z}_j} = \frac{\partial \mathcal{J}_j}{\partial \mathcal{Z}_i}, \quad 1 \leq i, j \leq m. \quad (2.9)$$

Si on suppose que Φ est de classe \mathcal{C}^2 et que \mathcal{W} est de classe \mathcal{C}^1 sur X , alors ces relations de symétrie sont satisfaites si, et seulement si, $\mathcal{W} = 0$ [Sar24, théorème 4.2]. Dans la suite, nous supposerons donc toujours que $\mathcal{W} = 0$.

Démonstration. Voir [Ede74, théorème 1 page 124] ou [Sar24, lemme 4.2].

2.2.4. Forme abstraite des équations constitutives

D’après le théorème 2.2.7 d’Edelen, et en tenant compte de la remarque 2.2.II, l’inéquation (2.5) est vérifiée si, et seulement si il existe une application $\Phi(\mathcal{Z}, \mathcal{X})$ vérifiant $\Phi(0, \cdot) \equiv 0$, appelée potentiel de dissipation, telle que

$$\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} \in \partial_{D(\mathbf{v})} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), (\mathring{\mathcal{X}}_i)_{2 \leq i \leq m}, \mathcal{X} \right], \quad (2.10a)$$

$$-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i} \in \partial_{\mathring{\mathcal{X}}_i} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), (\mathring{\mathcal{X}}_i)_{2 \leq i \leq m}, \mathcal{X} \right], \quad i = 2, \dots, m. \quad (2.10b)$$

Remarquons que ces équations ont une structure très similaire à celles issues de la théorie des matériaux standards généralisés (2.4). Les différences viennent essentiellement de l'axiome d'objectivité, avec notamment l'utilisation des dérivées objectives et du tenseur de Hencky. Notons également la dépendance du potentiel de dissipation aux variables thermodynamiques internes \mathcal{X} ; celle-ci est optionnelle. Au contraire, on peut montrer que l'énergie libre ne peut en aucun cas dépendre des forces thermodynamiques \mathcal{F} [Sar24, théorème 4.1].

2.3. Théorie des contraintes de couple

2.3.1. Motivation

Comme expliqué dans les sections 1.1.2 et 1.2.2, les cellules présentent la capacité d'aligner localement leurs polarités, comme des sardines s'orienteraient dans la même direction que leurs voisines dans un banc. La taille à laquelle cet alignement s'opère s'appelle longueur de cohérence; au-delà, les cellules n'interagissent plus. Pour créer cet alignement, les cellules peuvent être amenées à exercer des couples, à l'aide de rotations se produisant à une échelle microscopique, relativement à la taille du tissu, que nous appellerons *microrotations*. De ce point de vue, les tissus sont des milieux continus dont l'échelle microscopique peut influer de manière non négligeable sur le comportement macroscopique. A priori, la mécanique classique des milieux continus ne permet pas de prendre en compte ces échelles de longueur.

Au premier abord, la polarité s'inscrit dans le modèle comme variable thermodynamique interne dont il faudra déterminer l'équation d'évolution, c'est-à-dire comme l'un des \mathcal{X}_i pour $i = 2, \dots, m$, définis précédemment. Ainsi, mathématiquement, l'existence de cette longueur de cohérence se traduira par la présence d'un laplacien dans l'équation d'évolution de la polarité. Or, le cadre théorique développé jusqu'à présent ne permet pas l'introduction de laplacien dans les équations constitutives (puisque l'énergie libre ne peut a priori pas dépendre du gradient des variables thermodynamiques), il est donc nécessaire de l'étendre pour pouvoir contrevenir à ces limitations.

Motivés par la théorie des cristaux liquides (section 1.3.4) et des gels actifs (section 1.3.5), nous introduisons brièvement ici la thermodynamique faiblement non-locale [Grm93] qui, combinée à la théorie des contraintes de couples présentée plus loin, nous amènera à notre objectif.

2.3.2. Thermodynamique faiblement non-locale

Nous expliquons dans cette section comment il est possible d'introduire une dépendance de l'énergie libre au gradient d'une variable thermodynamique interne vectorielle dans le but de faire apparaître un laplacien dans l'équation constitutive associée à cette variable. Nous montrons également pourquoi l'équation constitutive ainsi construite échoue à satisfaire

le second principe de la thermodynamique dans le cadre de la théorie classique de la mécanique des milieux continus.

Nous considérons un fluide dont l'état thermodynamique peut être décrit par le tenseur de Hencky et un champ vectoriel \mathbf{p} , c'est-à-dire $\mathcal{X}_1 = \mathbf{h}$ et $\mathcal{X}_2 = \mathbf{p}$ avec les notations de la section précédente. Nous supposons en plus que le gradient de $\boldsymbol{\gamma} := \nabla \mathbf{p}$ est aussi une variable thermodynamique interne, indépendante de \mathbf{p} ; on note alors $\mathcal{X}_3 = \boldsymbol{\gamma}$. L'objectif ici est de pouvoir construire une équation constitutive pour \mathbf{p} prenant en compte ses variations spatiales, c'est-à-dire faisant intervenir son laplacien. Si on applique directement le section 2.2.4, on obtient l'existence d'un potentiel de dissipation $\Phi = \Phi(\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathring{\mathbf{p}}, \mathring{\boldsymbol{\gamma}})$ qui dépend en particulier de la dérivée corotationnelle de $\boldsymbol{\gamma}$ et que l'on suppose différentiable par commodité. D'après (2.10b), on a donc

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathring{\mathbf{p}}} + \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} = 0, \quad (2.11a)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathring{\boldsymbol{\gamma}}} + \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} = 0. \quad (2.11b)$$

Ainsi, la théorie classique aboutit à deux équations constitutives, dont une pour $\boldsymbol{\gamma} := \nabla \mathbf{p}$, et non pas à une seule comme on l'aurait voulu.

Une solution possible vient de la thermodynamique faiblement non-locale [Grm93], également considérée dans le cadre des cristaux liquides [GP93, section 3.1.3.4]. Elle consiste à considérer non pas l'énergie libre locale, ou spécifique, mais l'énergie libre totale

$$\mathcal{F} := \int_{\mathcal{B}} \rho \Psi \, d\mathbf{x}. \quad (2.12)$$

Dans l'exemple considéré, on aurait donc

$$\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) = \int_{\mathcal{B}} \rho \Psi(\mathbf{h}, \mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, d\mathbf{x}, \quad (2.13)$$

en considérant Ψ comme une fonctionnelle des variables indépendantes \mathbf{h} , \mathbf{p} et $\boldsymbol{\gamma}$.

Si on suppose par simplicité, pour cet exemple, que la masse volumique est constante et que

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \right|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial \mathcal{B}, \quad (2.14)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal unitaire extérieur à la frontière du domaine $\partial \mathcal{B}$, alors d'après la proposition B.3.10

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} - \text{div} \left(\rho \left. \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \right|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right). \quad (2.15)$$

Cette approche permet donc bien de coupler la variable thermodynamique interne et son gradient. Remarquons par contre que $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}$ et \mathbf{p} ne sont pas colinéaires : \mathcal{F} n'est pas

une fonction isotrope en \mathbf{p} (cf. la proposition 2.2.3). En d'autres termes, cela signifie que $\mathring{\mathbf{p}}$ ne peut apparaître comme un taux lagrangien de \mathbf{p} relativement à $\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}$ (voir la proposition 2.2.1), et donc que l'on ne peut pas appliquer le raisonnement de la section 2.2.3 pour déterminer les équations constitutives qui satisfont le second principe. En effet,

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \dot{\mathbf{p}} - \mathring{\mathbf{p}} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \mathbf{W}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{p} \right\rangle = \int_{\mathcal{B}} \text{skw} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}} \otimes \mathbf{p} \right) : \mathbf{W}(\mathbf{v}) \, dx \neq 0, \quad (2.16)$$

par définition de la dérivée corotationnelle (2.8ba). Si l'on souhaite utiliser le cadre thermodynamique théorique de la section 2.2, alors deux problèmes se posent :

- (i) Le théorème 2.2.7 d'Edelen ne s'applique à notre connaissance qu'à des inégalités sur des produits scalaires définis sur des espaces de dimension finie. Ici \mathcal{F} est a priori définie sur des espaces fonctionnels de dimension infinie.
- (ii) D'après la section 2.2.2, l'axiome d'objectivité impose l'utilisation de dérivées objectives, ce qui presuppose de pouvoir remplacer les dérivées particulières dans l'expression de la dérivée en temps de l'énergie libre par des dérivées corotationnelles, comme cela a été fait dans le lemme 2.2.6. Ici, c'est chose impossible, en vertu de l'équation (2.16), puisque $\mathbf{W}(\mathbf{v})$ n'est pas une dérivée corotationnelle d'une variable thermodynamique interne [CN63], c'est-à-dire n'est pas une force thermodynamique (cf. (2.6b)), ce qui empêche encore une fois l'application du théorème 2.2.7 d'Edelen.

La difficulté (i) peut être contournée si, comme dans le cadre des matériaux standards généralisés (section 2.2.1), on demande au potentiel de dissipation d'être en plus convexe par rapport à chacun des flux thermodynamiques. Autrement dit, quand le théorème 2.2.7 d'Edelen donne une condition nécessaire et suffisante à la satisfaction du second principe de la thermodynamique, nous n'aurions dans ce cas plus qu'une condition suffisante. La difficulté (ii) demande quant à elle une théorie plus générale. Nous proposons donc d'étudier la théorie des contraintes de couples.

2.3.3. Lien avec la théorie des milieux micropolaires et microcontinus

Nous présentons dans cette section un bref historique de la théorie des contraintes de couples (*couple-stress theory* en anglais). Celui-ci est non exhaustif et inspiré des articles [HD11 ; HHD15].

La première tentative de mise en équation du concept de microrotation remonte sans doute au début du XX^e siècle avec la publication de la *Théorie des corps déformables* [CC09], qui développa les prémisses de la théorie des milieux dits micropolaires, dans laquelle une nouvelle variable cinématique est introduite, la microrotation, supposée indépendante de la rotation macroscopique. Cette théorie a depuis été généralisée par la théorie des milieux microcontinus, dont une présentation très complète est donnée dans les livres *Microcontinuum Field Theories I et II* [Eri99 ; Eri01], et qui s'applique aussi bien aux

solides [Eri99] qu'aux fluides [Eri01]. Elle permet de généraliser la théorie des cristaux liquides [Eri01, section 12.11] et a par exemple été utilisée dans la modélisation mécanique d'un tissu œsophagien [San+14].

Un milieu microcontinu est un milieu continu dont les constituants microscopiques sont eux-mêmes considérés comme des milieux continus déformables qui contribuent au comportement macroscopique du matériau. La déformabilité intrinsèque et l'orientation d'un constituant microscopique sont décrites à l'aide d'un tenseur dit de microdéformation, qui généralise le concept de microrotation et est supposé pouvoir être représenté par un champ de tenseurs continu au niveau macroscopique. Celui-ci ajoute donc un certain nombre de degrés supplémentaires au niveau cinématique, selon le matériau considéré. En particulier, la théorie des milieux micropolaires en ajoute trois supplémentaires. Ainsi, les lois de conservation issues de cette théorie des milieux microcontinus sont beaucoup plus volumineuses que dans le cadre de la mécanique classique des milieux continus : dans le cadre le plus général, aux équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement, il faut rajouter une équation de conservation dite de la microinertie (6 équations) et celle du moment cinétique (9 équations), qui fait intervenir un tenseur d'ordre 3. Outre la complexité d'une telle théorie, le concept de microdéformation n'est pas forcément légitime : c'est un champ continu qui tente de décrire une microstructure discontinue [HD11, introduction].

La théorie des contraintes de couples, au contraire, cherche à décrire l'influence de la microstructure sur le comportement macroscopique uniquement à partir de champs continus purement cinématiques. Elle introduit également le concept de tenseur de contraintes de couples, qui est l'analogue du tenseur des contraintes de Cauchy pour les rotations. Une première version de cette théorie appliquée aux solides est apparue au début des années 1960, avant d'être adaptée aux fluides en 1966 [Sto66]. Le livre *Theories of Fluids with Microstructure* [Sto84] est une bonne introduction aux principales théories traitant de la modélisation des microstructures. Cependant, dans la théorie telle que développée dans ce livre, la trace du tenseur des contraintes de couples est absente des équations constitutives, donc indéterminée. HADJESFANDIARI, HAJESFANDIARI et DARGUSH ont plus récemment proposé une théorie des contraintes de couples cohérente, qui résout entre autres cette difficulté [HHD15]. C'est celle-ci que nous souhaitons à présent brièvement introduire et inscrire dans le cadre thermodynamique théorique développé dans la section précédente.

2.3.4. Lois de conservation

Mesures de la courbure et de la torsion

En cinématique pure, les taux de changement de configuration sont représentés par des tenseurs. Ainsi, en mécanique des milieux continus, le tenseur taux de déformation $\mathbf{D}(\mathbf{v})$ mesure les taux d'élongation, de compression et de cisaillement, tandis que le tenseur $\mathbf{W}(\mathbf{v})$ mesure les taux de rotation. Comme ce dernier est antisymétrique, il ne possède que trois composantes indépendantes, que l'on regroupe généralement dans un vecteur appelé

vecteur tourbillon, noté ω et vérifiant

$$\omega = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{v} = -\frac{1}{2} \delta \times \mathbf{W}(\mathbf{v}), \quad (2.17)$$

d'après la propriété A.2.1, où l'on a utilisé les notations de l'annexe A.1.9. Réciproquement, d'après la proposition A.1.7, on a $\mathbf{W}(\mathbf{v}) = \delta \times \omega$. Le vecteur tourbillon ne doit pas être confondu avec la vorticité, définie comme son double, qui adopte souvent la même notation.

HADJESFANDIARI, HAJESFANDIARI et DARGUSH [HHD15, section 4] proposent deux autres tenseurs mesurant respectivement les taux de torsion et les taux de courbure moyenne ; il s'agit des tenseurs $\mathbf{D}(\omega) := \frac{1}{2}(\nabla\omega + \nabla\omega^T)$ et

$$\mathbf{K} := \mathbf{W}(\omega). \quad (2.18)$$

Les composantes diagonales de $\nabla\omega$ $\omega_{1,1}$, $\omega_{2,2}$ et $\omega_{3,3}$ représentent des taux de torsion dans les directions x_1 , x_2 et x_3 , respectivement. Ses autres composantes représentent les taux de courbure dans les plans parallèles aux plans des coordonnées. Ainsi, $\omega_{1,2}$ est le taux de courbure dans la direction x_2 parallèlement aux plans Ox_1x_2 et Ox_2x_3 .

Les auteurs montrent en particulier que seul \mathbf{K} représente un tenseur approprié pour mesurer le taux de courbure [HHD15, page 14], contrairement au tenseur taux de courbure-torsion introduit dans [Sto84, section 1.6] et défini par $\nabla\omega^T$, qui mesure en plus le taux de torsion. Comme \mathbf{K} est antisymétrique, on définit de manière analogue au vecteur tourbillon, le vecteur taux de courbure moyenne

$$k := -\frac{1}{2} \delta \times \mathbf{K}. \quad (2.19)$$

D'après la propriété A.2.1, on a

$$k = \frac{1}{2} \nabla \times \omega. \quad (2.20)$$

Loi de conservation du moment cinétique

Dans la théorie des contraintes de couples, un VER qui subit des forces surfaciques (voir section 2.1.1) peut aussi subir des couples surfaciques indépendants, que l'on encapsule dans un tenseur dit de contraintes de couples, noté μ . HADJESFANDIARI, HAJESFANDIARI et DARGUSH montrent que ce tenseur doit être antisymétrique [HHD15, équation (65)], résultat ignoré dans [Sto84]. Ses composantes sont représentées sur la figure 2.2.

La loi de conservation du moment cinétique s'écrit en fonction de ce nouveau tenseur

$$\text{div}(\mu^T) + \delta \times \sigma = \mathbf{0}. \quad (2.21)$$

Ainsi, dans la théorie plus générale des contraintes de couples, le tenseur des contraintes de Cauchy σ n'est pas forcément symétrique. De manière similaire à ce qui a été fait dans la section précédente, nous introduisons alors le vecteur contraintes de couples

$$\mathbf{m} := -\frac{1}{2} \delta \times \mu. \quad (2.22)$$

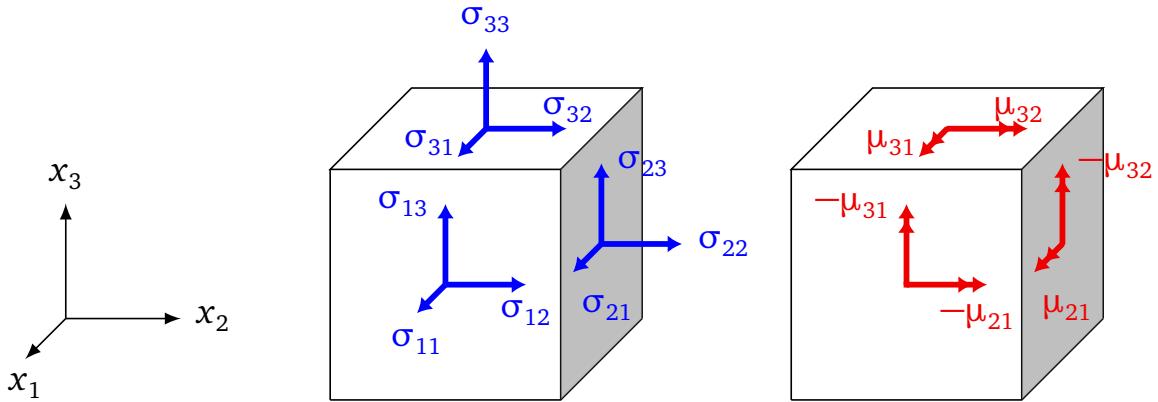


FIGURE 2.2. – Composantes cartésiennes des tenseurs des contraintes σ et des contraintes de couples μ . Une double flèche représente le moment d'une force. Reproduction de la figure 2 dans [HHD15].

Remarquons quand même qu'avec $\mu = \mathbf{0}$, l'équation se réduit à $\delta \cdot \sigma = \mathbf{0}$, ce qui montre, d'après le corollaire A.1.5, que σ est symétrique, comme prévu par la mécanique des milieux continus classiques.

Remarque 2.3.I – Couples volumiques : On pourrait imaginer qu'un VER qui subit des couples surfaciques, tout comme il subit des forces volumiques, pourrait aussi subir des couples volumiques. Dans ce cas, de même que l'on a un terme source f dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.2) de manière générale, on pourrait aussi avoir un terme source dans (2.21). Ce n'est pourtant pas possible : on peut montrer [HHD15, page 10] que tout couple volumique \mathbf{c} vérifie [HHD15, équation (52)]

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{c} \cdot \boldsymbol{\omega} \, dx = \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{2} (\nabla \times \mathbf{c}) \cdot \mathbf{v} \, dx + \int_{\partial \mathcal{V}} \frac{1}{2} (\mathbf{c} \times \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} \, ds \quad (2.23)$$

pour tout volume élémentaire \mathcal{V} . Autrement dit, tout couple volumique \mathbf{c} est la combinaison d'une contribution semblable à une force volumique $\frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{c}$ et d'une autre semblable à une force surfacique $\frac{1}{2} \mathbf{c} \times \mathbf{n}$: l'équation (2.23) montre que la puissance d'un couple ne peut être distinguée, d'un point de vue énergétique, de la puissance d'une force.

Proposition 2.3.1 – Partie antisymétrique du tenseur des contraintes

La partie antisymétrique du tenseur des contraintes vérifie

$$\text{skw } \sigma = \mathbf{W}(\mathbf{m}). \quad (2.24)$$

Démonstration. Cette démonstration est une adaptation des calculs menés dans [HHD15, page 12].

Par définition du vecteur contraintes de couples (2.22) et d'après la proposition A.1.7, on a

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{m}. \quad (*.1)$$

En utilisant la propriété A.2.1 et la loi de conservation du moment cinétique (2.21), on obtient

$$\boldsymbol{\delta} \times (\nabla \boldsymbol{m}^T + \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{0}. \quad (*.2)$$

Ainsi, d'après le corollaire A.1.5, $\nabla \boldsymbol{m}^T + \boldsymbol{\sigma}$ est symétrique, donc sa partie antisymétrique $-\mathbf{W}(\boldsymbol{m}) + \mathbf{skw} \boldsymbol{\sigma}$ est nulle, d'où le résultat. ■

Connaissant une expression de la partie antisymétrique du tenseur des contraintes, on peut réécrire la loi de conservation de la quantité de mouvement (2.2) sous la forme

$$\begin{aligned} \rho \dot{\boldsymbol{v}} - \operatorname{div}(\operatorname{sym} \boldsymbol{\sigma}) + \operatorname{div}(\mathbf{W}(\boldsymbol{m})) &= \boldsymbol{f} \\ \iff \rho \dot{\boldsymbol{v}} - \operatorname{div}(\operatorname{sym} \boldsymbol{\sigma}) + \Delta \boldsymbol{m} - \nabla \operatorname{div} \boldsymbol{m} &= \boldsymbol{f}. \end{aligned}$$

Inégalité de Clausius-Duhem

Dans le cadre de la théorie des contraintes de couples, l'inégalité de Clausius-Duhem se réécrit [HHD15, équation (95)]

$$-\rho \dot{\Psi} + \operatorname{sym} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}(\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{\mu} : \mathbf{K}^T \geq 0, \quad (2.25a)$$

$$\text{ou } -\rho \dot{\Psi} + \operatorname{sym} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D}(\boldsymbol{v}) - 2\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{k} \geq 0, \quad (2.25b)$$

d'après la propriété A.1.8. Remarquons que le tenseur taux de torsion $\mathbf{D}(\boldsymbol{\omega})$ introduit à la section 2.3.4 n'intervient pas dans l'inégalité, par antisymétrie de $\boldsymbol{\mu}$ (voir proposition A.1.2). Dès lors, il n'est pas considéré comme une mesure fondamentale du taux de déformation général du milieu [HHD15, page 8].

2.3.5. Équations constitutives

Introduction

Avec cette nouvelle forme de la loi de conservation du moment cinétique (2.21), les lois de base de la théorie des contraintes de couples cumulent au total 8 équations, c'est-à-dire 3 de plus que dans le cas classique (cf. l'introduction de la section 2.2). Comme dans le cas classique, le comportement de chaque matériau doit être spécifié au moyen des équations constitutives. Nous proposons donc d'appliquer les outils développés dans la section 2.2 pour construire la forme générale des équations constitutives (voir équation (2.10)).

Dans le but d'obtenir les équations constitutives les plus générales possibles, nous introduisons de manière analogue au tenseur de Hencky (cf. le théorème 2.2.2), le vecteur de courbure moyenne \mathbf{s} comme variable thermodynamique interne supplémentaire, défini

comme la solution unique du problème de Cauchy suivant :

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{s}} = \mathbf{k}, \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[\\ \mathbf{s}(t=0) = \mathbf{s}_0, \text{ dans } \mathcal{B}. \end{cases} \quad (2.26a)$$

$$(2.26b)$$

Nous supposons que \mathbf{s} est objectif. Nous ne pouvons pas appliquer le même principe pour trouver une primitive en temps du tenseur taux de courbure \mathbf{K} car celui-ci est antisymétrique, et a priori, la dérivée corotationnelle ne s'applique qu'aux tenseurs symétriques. Par contre, par analogie avec la relation liant \mathbf{K} et \mathbf{k} (2.19), nous pouvons définir le tenseur de courbure moyenne par

$$\mathbf{S} := \mathbf{\delta} \times \mathbf{s}. \quad (2.27)$$

Construction des équations

De même que nous avons choisi $\mathcal{X}_1 = \mathbf{h}$ dans la section 2.2.3, nous prenons ici $\mathcal{X}_2 = \mathbf{s}$. Dans ce cas, le lemme 2.2.6 est encore vérifié et l'inégalité de Clausius-Duhem (2.25b) devient

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} \right) : \mathbf{D}(\mathbf{v}) - \left(2\mathbf{m} + \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) \cdot \mathbf{k} - \sum_{i=3}^m \left\langle \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i}, \dot{\mathcal{X}}_i \right\rangle \geq 0. \quad (2.28)$$

de la même façon que (2.4). On note alors

$$\mathcal{J} = \left(\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}}, -2\mathbf{m} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}}, \left(-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i} \right)_{3 \leq i \leq m} \right), \quad (2.29a)$$

$$\text{et } \mathcal{Z} = \left(\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \left(\dot{\mathcal{X}}_i \right)_{3 \leq i \leq m} \right) \quad (2.29b)$$

Comme dans la section 2.2.4, on obtient les équations constitutives générales à l'aide du théorème 2.2.7 d'Edelen, en tenant compte du principe d'Onsager (cf. la remarque 2.2.II). On obtient alors l'existence du potentiel de dissipation $\Phi(\mathcal{Z}, \mathcal{X})$ vérifiant $\Phi(0, \cdot) \equiv 0$, tel que

$$\boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} \in \partial_{\mathbf{D}(\mathbf{v})} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, (\dot{\mathcal{X}}_i)_{2 \leq i \leq m}, \mathcal{X} \right], \quad (2.30a)$$

$$-2\mathbf{m} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \in \partial_{\mathbf{k}} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, (\dot{\mathcal{X}}_i)_{2 \leq i \leq m}, \mathcal{X} \right], \quad (2.30b)$$

$$-\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{X}_i} \in \partial_{\dot{\mathcal{X}}_i} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, (\dot{\mathcal{X}}_i)_{2 \leq i \leq m}, \mathcal{X} \right], \quad i = 3, \dots, m. \quad (2.30c)$$

Si Φ est différentiable en \mathbf{k} , alors $\mathbf{m} = -\frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} - \frac{1}{2} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}}$ et d'après la proposition 2.3.1, la partie antisymétrique du tenseur des contraintes vérifie

$$\mathbf{skw} \boldsymbol{\sigma} = -\frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) - \frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}} \right). \quad (2.31)$$

Ainsi, si par exemple Ψ ne dépend pas de s et Φ est quadratique en k , $\mathbf{skw}\boldsymbol{\sigma} \propto -W(\nabla \times \mathbf{v})$, où \propto signifie « proportionnel à », prenant en particulier en compte le paramètre matériel nécessaire à l'obtention d'une relation homogène. Notons que dans ce cas, le tenseur des contraintes dépend des dérivées d'ordre 3 de la vitesse, ce qui suppose une forte régularité de la solution et des données expérimentales. C'est à partir de ce type de relations que la théorie des contraintes de couples permet l'introduction d'échelle de longueurs dans les milieux continus, comme évoqué en introduction de cette section, puisqu'en effet, le paramètre matériel mentionné un peu avant est homogène au produit d'une pression et d'une longueur au carré (voir [Sto84, chapitre 3 et en particulier équation (3.2.5)] [HHD15, sections 6 et 7]).

2.4. Combinaison de la thermodynamique faiblement non-locale et de la théorie des contraintes de couples

Nous combinons enfin la thermodynamique faiblement non-locale introduite dans la section 2.3.2 et la théorie des contraintes de couples développée tout au long de la section 2.3 dans le but de répondre à la difficulté (ii) soulevée dans la section 2.3.2. À notre connaissance, un tel couplage n'a jamais été considéré dans la littérature.

Nous reprenons donc les notations de la section 2.3.2, en ajoutant le vecteur de courbure moyenne s comme variable thermodynamique interne, et nous supposons que le domaine peut évoluer dans le temps, de sorte que l'énergie libre totale (2.13) s'écrit

$$\mathcal{F}(\mathbf{h}, s, \mathbf{p}) := \int_{\mathcal{B}(t)} \rho \Psi(\mathbf{h}, s, \mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, d\mathbf{x}. \quad (2.32)$$

De manière analogue à ce que nous avons déjà fait dans les sections précédentes, nous construisons maintenant les équations constitutives dans le cadre de la combinaison de la thermodynamique faiblement non-locale et de la théorie des contraintes de couples, ce qui donne lieu au théorème 2.4.3. Nous établissons ensuite un bref lien entre l'approche présente et la théorie des cristaux liquides.

2.4.1. Équations constitutives

Comme dans les sections précédentes, nous commençons par développer l'expression de la dérivée en temps de l'énergie libre, injectons le développement dans l'inégalité de Clausius-Duhem (2.25b) puis en déduisons les équations constitutives. Comme expliqué dans le point (i) de la section 2.3.2, le théorème 2.2.7 d'Edelen ne pourra pas s'appliquer directement ici, nous donnerons donc uniquement une condition suffisante sur les équations constitutives pour qu'elles satisfassent le second principe de la thermodynamique.

2.4. Thermodynamique faiblement non-locale de la théorie des contraintes de couples

Les produits scalaires canoniques dans $L^2(\mathcal{B}(t))$, $L^2(\mathcal{B}(t))^3$ et $L^2(\mathcal{B}(t))^{3 \times 3}$ sont respectivement définis par

$$(\varphi | \chi) = \int_{\mathcal{B}(t)} \varphi \chi \, dx, \quad (\mathbf{p} | \mathbf{q}) = \int_{\mathcal{B}(t)} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} \, dx, \quad (\boldsymbol{\tau} | \boldsymbol{\zeta}) = \int_{\mathcal{B}(t)} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\zeta} \, dx. \quad (2.33)$$

Proposition 2.4.1 – Dérivée en temps de l'énergie libre totale

Si l'énergie libre \mathcal{F} est objective par rapport à chacune des variables thermodynamiques internes \mathcal{X}_i , $1 \leq i \leq 3$, alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p})) = & \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} + a \operatorname{sym}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) - \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right| \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right) \\ & + \left(\frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) + \operatorname{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \Big| \mathbf{W}(\mathbf{v}) \right) + \left(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \overset{\square}{\mathbf{p}} \right) \\ & + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \cdot (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\omega}) \, ds + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \rho \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (2.34) \end{aligned}$$

où $\overset{\square}{\mathbf{p}}$ désigne la dérivée de Gordon-Schowalter de paramètre $a \in \mathbb{R}$ (voir équation (2.7a)) et

$$\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) := \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} - \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right). \quad (2.35)$$

Démonstration. D'après le théorème B.3.15, on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p})) = & \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{h}}, \dot{\mathbf{h}} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{s}}, \dot{\mathbf{s}} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \dot{\mathbf{p}} \right\rangle \\ & - \int_{\mathcal{B}(t)} \rho \left(\nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right) : \nabla \mathbf{v} \, dx \quad (*.1) \end{aligned}$$

où, d'après la proposition B.3.13,

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{h}}, \boldsymbol{\zeta} \right\rangle = \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} \Big| \boldsymbol{\zeta} \right) \quad (*.2a)$$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{s}}, \mathbf{q} \right\rangle = \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \Big| \mathbf{q} \right) \quad (*.2b)$$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \mathbf{q} \right\rangle = (\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) | \mathbf{q}) + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \rho \mathbf{q} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds, \quad (*.2c)$$

et $\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p})$ est défini par (2.35). On utilise ensuite l'isotropie de Ψ par rapport à γ (proposition 2.2.4) et la proposition A.1.2 pour obtenir

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p})) &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{h}}, \dot{\mathbf{h}} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{s}}, \dot{\mathbf{s}} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \dot{\mathbf{p}} \right\rangle \\ &\quad - \int_{\mathcal{B}(t)} \rho \left(\nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \right) : \mathbf{D}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x}, \quad (*.3) \end{aligned}$$

puis la définition de la dérivée de Gordon-Schowalter (proposition 2.2.1), la propriété A.1.3, les théorèmes 2.2.2 et 2.2.5 l'isotropie de Ψ par rapport à \mathbf{s} et l'équation (2.26a), ce qui donne

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p})) &= \\ &\left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} + a \operatorname{sym}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) - \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \right) \mathbf{D}(\mathbf{v}) \\ &+ \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \Big| \mathbf{k} \right) + (\operatorname{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \mid \mathbf{W}(\mathbf{v})) + \left(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \square \mathbf{p} \right) \\ &\quad + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \rho \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \cdot \mathbf{n} \, ds. \quad (*.4) \end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à transformer le deuxième terme dans le membre de droite pour conclure. Pour cela, on utilise la définition (2.20) de \mathbf{k} puis on intègre par parties :

$$\begin{aligned} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \Big| \mathbf{k} \right) &= \int_{\mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\omega}) \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial s_i} \epsilon_{ijk} \omega_{k,j} \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathcal{B}(t)} -\frac{1}{2} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial s_i} \right)_{,j} \epsilon_{ijk} \omega_k \, d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial s_i} \epsilon_{ijk} \omega_k n_j \, ds \\ &= \int_{\mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) : \mathbf{W}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \cdot (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\omega}) \, ds, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé les relations $\mathbf{W}(\mathbf{v}) = \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\omega}$ (voir la section 2.3.4) et (A.27). ■

D'après la formule de Reynolds (B.14) et la loi de conservation de la masse (2.1), on a

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int_{\mathcal{B}(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho \Psi) + \operatorname{div}(\rho \Psi \mathbf{v}) \right) \, d\mathbf{x} = \int_{\mathcal{B}(t)} \rho \dot{\Psi} \, d\mathbf{x}. \quad (2.36)$$

2.4. Thermodynamique faiblement non-locale de la théorie des contraintes de couples

En intégrant l'inégalité de Clausius-Duhem (2.25a) sur $\mathcal{B}(t)$, on obtient alors

$$-\frac{d\mathcal{F}}{dt} + (\text{sym } \boldsymbol{\sigma} \mid \mathbf{D}(\boldsymbol{v})) + (\boldsymbol{\mu} \mid \mathbf{K}^T) \geq 0. \quad (2.37)$$

Lemme 2.4.2

$$(\boldsymbol{\mu} \mid \mathbf{K}^T) = -(\text{skw } \boldsymbol{\sigma} \mid \mathbf{W}(\boldsymbol{v})) + \int_{\partial\mathcal{B}(t)} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\omega} \, ds. \quad (2.38)$$

Démonstration. L'application directe de la proposition A.1.2 donne

$$(\boldsymbol{\mu} \mid \mathbf{K}^T) = (\boldsymbol{\mu}^T \mid \mathbf{K}) = \int_{\mathcal{B}(t)} \boldsymbol{\mu}^T : \nabla \boldsymbol{\omega} \, dx. \quad (*.1)$$

On calcule ensuite à l'aide d'une intégration par parties

$$(\boldsymbol{\mu} \mid \mathbf{K}^T) = \int_{\mathcal{B}(t)} -\text{div}(\boldsymbol{\mu}^T) \cdot \boldsymbol{\omega} \, dx + \int_{\partial\mathcal{B}(t)} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\omega} \, ds. \quad (*.2)$$

On conclut avec la loi de conservation du moment cinétique (2.21) et la proposition A.2.2. ■

Théorème 2.4.3 – Équations constitutives générales

Supposons que

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\mathcal{B}(t), \quad (2.39a)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial s} \cdot (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\omega}) = 0 \text{ sur } \partial\mathcal{B}(t), \quad (2.39b)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \right|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla p} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\mathcal{B}(t). \quad (2.39c)$$

Si $\Phi(\mathbf{D}(\boldsymbol{v}), \mathbf{k}, \mathbf{p}^\square, \mathbf{p})$ est un potentiel de dissipation convexe, positif et tel que $\Phi(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{q}) = 0$ pour tout \mathbf{q} , alors les équations constitutives sont données par

$$\text{skw } \boldsymbol{\sigma} = -\frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) + \text{skw}(\mathbf{p} \otimes \boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p})), \quad (2.40a)$$

$$\begin{aligned} \text{sym } \boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} - a \text{sym}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \\ + \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \in \partial_{\mathbf{D}(\mathbf{v})} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \mathbf{\bar{p}}, \mathbf{p} \right], \end{aligned} \quad (2.40b)$$

$$-\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \in \partial_{\mathbf{p}} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \mathbf{\bar{p}}, \mathbf{p} \right], \quad (2.40c)$$

où $\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p})$ est défini par (2.35), et le second principe (2.25b) est vérifié.

Démonstration. En injectant (2.34) dans l'inégalité (2.37) et en utilisant le lemme ci-dessus, on obtient alors

$$\begin{aligned} & \left(\text{sym } \boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} - a \text{sym}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) + \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \Big| \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right) \\ & - \left(\text{skw } \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) + \text{skw}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \Big| \mathbf{W}(\mathbf{v}) \right) - \left(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \mathbf{\bar{p}} \right) \\ & + \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\omega} \, ds - \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \cdot (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\omega}) \, ds - \int_{\partial \mathcal{B}(t)} \rho \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds \geq 0. \quad (*.1) \end{aligned}$$

Avant de déduire de cette inégalité les équations constitutives, remarquons la présence de $\mathbf{W}(\mathbf{v})$ qui, comme expliqué dans la section 2.3.2, ne peut pas être considéré comme un flux thermodynamique [CN63]. Dès lors, il convient d'annuler le terme faisant intervenir $\mathbf{W}(\mathbf{v})$, d'où l'équation (2.40a).

L'inégalité (*1) se réécrit alors en tenant compte des conditions aux limites (2.39)

$$\begin{aligned} & \left(\text{sym } \boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} - a \text{sym}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) + \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \Big| \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right) \\ & - \left(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \mathbf{\bar{p}} \right) \geq 0. \quad (*.2) \end{aligned}$$

On conclut en appliquant le même argument de convexité sur le potentiel dissipation que dans le cadre des matériaux standards généralisés (section 2.2.1). ■

Remarque 2.4.I – Conditions aux limites: Si les conditions aux limites (2.39) ne sont pas imposées, des intégrales de surface font leur apparition dans l'inégalité (*1) (cf. (2.38)), et comme les termes $\boldsymbol{\omega}$ et $\dot{\mathbf{p}}$ sont arbitraires et indépendants, la positivité de l'inégalité n'est plus garantie.

Remarque 2.4.II – Application du théorème d'Edelen : Comme expliqué dans la section 2.3.2 (point (i)), le théorème 2.2.7 d'Edelen ne peut s'appliquer directement ici car les variables impliquées vivent a priori dans des espaces fonctionnels de dimension infinie. Par contre l'argument de convexité sur le potentiel de dissipation invoqué dans le cadre des matériaux standards généralisés (section 2.2.1) s'applique encore. La convexité de la fonction de dissipation est une condition suffisante au second principe, mais pas nécessaire, ce dont on peut se passer pour construire les équations constitutives. Le théorème d'Edelen est plus général, car il en donne une condition nécessaire et suffisante : s'il s'applique, alors pour tout système d'équations constitutives qui vérifie le second principe de la thermodynamique, il existe un potentiel de dissipation.

Remarque 2.4.III – Équation constitutive pour μ : Pourquoi n'obtient-on pas une équation constitutive pour μ ? On pourrait penser que le terme $\text{div}(\frac{\partial \Psi}{\partial \gamma})$ dans l'expression de $\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p})$ (2.35), pourrait s'intégrer par parties avec $\mathbf{W}(\mathbf{v})$ dans l'inégalité de Clausius-Duhem pour faire apparaître le produit scalaire entre un nouveau terme et le tenseur taux de courbure moyenne \mathbf{K} . Malheureusement, un calcul (que nous ne faisons pas ici) montre que l'on obtient au contraire le tenseur de torsion-courbure total $\nabla \boldsymbol{\omega}^T$ et que le nouveau terme évoqué auparavant n'est pas antisymétrique, d'où l'impossibilité de convertir le premier terme pour faire apparaître un véritable flux thermodynamique. Remarquons que cette limitation est levée dans la théorie des contraintes de couples portée dans [Sto84], mais annoncée comme incomplète dans [HHD15], ou encore pour les systèmes bidimensionnels, comme nous le verrons dans la section 5.2.4 (voir le théorème 5.2.3).

En comparant l'expression de la partie antisymétrique du tenseur des contraintes (2.40a) avec l'expression (2.24), on trouve par contre une expression du vecteur de contraintes de couples :

$$\mathbf{W}(\mathbf{m}) = \text{skw}(\mathbf{p} \otimes \ell(\mathbf{h}, \mathbf{p})), \quad (2.41)$$

ou encore, en appliquant $\delta \times \square$ de part et d'autre de l'équation à l'aide de l'identité (A.26f) et de la propriété A.2.1

$$\nabla \times \mathbf{m} = \ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \times \mathbf{p}. \quad (2.42)$$

Cela montre que \mathbf{m} (ou μ de manière équivalente, d'après (2.22)) est bien déterminé, même si aucune équation constitutive ne lui est associée.

2.4.2. Lien avec la théorie des cristaux liquides

Des équations constitutives abstraites de la forme (2.40) ont déjà été obtenues dans [SV01] par exemple (voir équations (60) et (61)). Dans cet article, les auteurs proposent de déterminer les équations générales satisfaites par un fluide possédant une microstructure pouvant être décrite par un tenseur d'ordre quelconque. Comme nous, ils font appel à l'axiome d'objectivité et se basent sur la théorie des contraintes de couples, mais en ignorant que le tenseur de contraintes de couples μ doit être antisymétrique. Pour construire les équations constitutives, ils raisonnent, contrairement à nous, à partir de principes variationnels mêlant

formalisme lagrangien, puissances et dissipation de Rayleigh.

Encore avant, des développements théoriques similaires avaient été menés pour déterminer les équations générales satisfaites par des cristaux liquides nématiques, essentiellement menés par Ericksen, Leslie et Parodi [GP93, page 199]. Ericksen avait déjà en particulier mis en évidence le caractère non symétrique du tenseur des contraintes, qui se compose en partie d'un tenseur portant aujourd'hui son nom et qui ne dépend que du directeur, c'est-à-dire de l'orientation des molécules dans le cristal liquide. Avec les notations de la section 2.4.1 précédente, ce tenseur prendrait la forme [GP93, équation (3.100) page 153]

$$\boldsymbol{\sigma}_E := -\Pi \boldsymbol{\delta} - \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{p}, \nabla \boldsymbol{p}) \right)^T \cdot \nabla \boldsymbol{p}, \quad (2.43)$$

où \boldsymbol{p} représente dans ce contexte le directeur, Π la pression et Ψ l'énergie spécifique de distorsion, définie par (1.4) dans la section 1.3.4, en introduction. À partir de raisonnements thermodynamiques proches de ce que nous proposons dans ce chapitre, il est possible d'obtenir des équations très similaires à (2.40) (cf. [GP93, section 5.1.4.5 page 208]), sans passer par la théorie des contraintes de couples en tant que telle. Nous renvoyons à la section 5.1 dans [GP93] pour les détails. Ces raisonnements aboutissent en particulier à l'expression d'un couple de la forme [GP93, équation (5.17) page 203] $\boldsymbol{\ell}(\boldsymbol{h}, \boldsymbol{p}) \times \boldsymbol{p}$, où $\boldsymbol{\ell}(\boldsymbol{h}, \boldsymbol{p})$ est défini par (2.35) et Ψ par (1.4). Remarquons que ce couple apparaît dans l'équation (2.42). Dans la théorie des cristaux liquides, l'opposé de $\boldsymbol{\ell}(\boldsymbol{h}, \boldsymbol{p})$, que nous avons noté \boldsymbol{f}_p dans la section 1.3.4, est appelé champ moléculaire, une dénomination issue du magnétisme [GP93, équation (3.21) page 107]. C'est une quantité homogène à une contrainte qui tend à réorienter les molécules pour maximiser leur alignement.

2.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons d'abord résumé le formalisme thermodynamique développé dans [Sar24], qui permet de construire dans le cadre classique de la mécanique des milieux continus des équations constitutives satisfaisant automatiquement le second principe de la thermodynamique. Dans l'optique d'introduire par la suite des effets multi-échelles dans nos équations, nous avons ensuite présenté la théorie des contraintes de couples utilisée pour modéliser les fluides sujets à des microrotations, dans laquelle le tenseur des contraintes de Cauchy s'avère non nécessairement symétrique. Nous avons construit de manière inédite au sein de ce cadre non classique des équations constitutives satisfaisant également automatiquement le second principe, à l'aide du formalisme thermodynamique évoqué plus haut. Nous avons enfin proposé un dernier niveau de généralisation en combinant ces théories avec la thermodynamique faiblement non-locale, nous permettant alors d'introduire des laplaciens dans les équations constitutives, ce qui n'est pas possible dans le cadre thermodynamique classique.

Chapitre

Construction d'un modèle continu tridimensionnel de tissus

3

Dans ce chapitre, nous construisons un modèle tridimensionnel de migration cellulaire collective thermodynamiquement cohérent à l'aide des deux chapitres précédents. Après avoir écrit les équations constitutives en explicitant l'énergie libre et le potentiel de dissipation choisis et les conditions aux limites, nous énonçons précisément le problème tridimensionnel qui en résulte et l'adimensionnons.

Table des matières

3.1. Hypothèses physiques	53
3.2. Équations constitutives	56
3.3. Modèle tridimensionnel de tissus	60

3.1. Hypothèses physiques

3.1.1. Introduction

Comme expliqué dans la section 1.3.2, nous choisissons d'assimiler les épithéliums à des fluides polaires actifs incompressibles isothermes. De ce point de vue, ces tissus sont donc des milieux continus en grande déformation, dont les cellules peuvent se polariser et exercer des forces actives avec pour effet de créer du mouvement. Dans ce chapitre, nous utilisons les outils de la mécanique des milieux continus, en particulier ceux développés dans le chapitre 2, pour construire un modèle de migration cellulaire collective.

Tout l'enjeu de cette construction repose sur la définition de la polarité. Suivant la littérature (cf. la section 1.1.2), nous choisissons la représentation vectorielle, ce qui permet de distinguer naturellement l'avant et l'arrière d'une cellule, et nous supposons que p est sans dimension.

3.1.2. Hypothèses générales

Dans notre modélisation, nous reprenons exactement les hypothèses formulées dans la section 1.3.2, que nous adaptons au cas tridimensionnel. Nous considérons donc que

- (i) un tissu est assimilable à un fluide incompressible isotherme : c'est un milieu continu en grandes déformations ;
- (ii) la masse volumique ρ des cellules est uniforme en espace et en temps et vaut environ 10^3 kg m^{-3} ;
- (iii) le système respecte les principes de base de la mécanique des milieux continus et est à l'équilibre mécanique : la vitesse \mathbf{v} est très faible, de l'ordre du micron par minute, donc l'inertie peut être négligée ;
- (iv) la migration se fait indépendamment de la croissance, des divisions ou de la mort des cellules ;
- (v) les effets mécaniques sont décorrélés des effets génétiques ;
- (vi) l'activité des cellules est suffisante pour qu'elles puissent se réarranger sans seuil de déformation, et donc on peut négliger la contribution de la plasticité à la rhéologie.

Dans ce chapitre, nous ne supposons pas (encore) que le tissu est mince. Nous traiterons cette hypothèse et ses conséquences dans le chapitre 5. Nous notons $\mathcal{B}(t) \subset \mathbb{R}^3$ le volume occupé par les cellules à un instant $t \geq 0$, que nous définissons comme une partie ouverte bornée de l'espace physique en trois dimensions \mathbb{R}^3 .

3.1.3. Lois de conservation

Sous l'hypothèse (ii), la loi de conservation de la masse (2.1) se réduit à

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0 \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[. \quad (3.1)$$

Sous l'hypothèse (iii), la loi de conservation de la quantité de mouvement (2.2) se réduit à

$$-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}^T) = \mathbf{f} \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (3.2)$$

où l'on rappelle que $\boldsymbol{\sigma}$ désigne le tenseur des contraintes de Cauchy.

Les couples exercés par les cellules pour aligner leurs polarités entre elles sont représentés par le tenseur antisymétrique des contraintes de couples $\boldsymbol{\mu}$ (cf. section 2.3). Celui-ci intervient dans la loi de la conservation du moment cinétique (2.21)

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\mu}^T) + \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[. \quad (3.3)$$

Ainsi, nous ne faisons pas l'hypothèse d'un tenseur des contraintes symétrique, sinon on aurait $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$.

Les lois de comportement qu'il reste à construire concernent donc le tenseur des contraintes σ , des contraintes de couples μ et la polarité p . Nous décidons de les obtenir à partir du cadre thermodynamique présenté dans le chapitre 2. Le point de départ de ce cadre est l'inégalité de Clausius-Duhem (2.25a)

$$-\rho\dot{\Psi} + \text{sym } \sigma : D(v) + \mu : K^T \geq 0 \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (3.4)$$

où Ψ est l'énergie libre spécifique, $D(v)$ le tenseur taux de déformation ou la partie symétrique du gradient de vitesse et $K := W(\omega)$ le tenseur taux de courbure moyenne ou la partie antisymétrique de la moitié de la vorticité¹.

L'avantage du cadre théorique présenté dans le chapitre 2, et en particulier dans la section 2.4, est de fournir directement la forme explicite que doivent adopter les équations constitutives pour être objectives, c'est-à-dire invariantes par changement de référentiel, et admissibles, c'est-à-dire pour respecter le second principe de la thermodynamique, formalisé ici par l'inégalité de Clausius-Duhem (3.4). Ainsi, nous pouvons choisir les ingrédients physiques de notre modèle uniquement en donnant une expression de l'énergie libre spécifique Ψ , du potentiel de dissipation volumique Φ et en spécifiant le comportement du tissu sur les frontières du domaine. L'interaction entre les cellules et le substrat occupe en particulier une place fondamentale car c'est de cette interaction que naît la force active et donc en partie, la migration.

Dans le but, entre autres, de prendre en compte les variations spatiales de la polarité p , nous adoptons donc la forme de l'énergie libre (2.32) utilisée dans la section 2.4, à savoir

$$\mathcal{F}(h, s, p) := \int_{\mathcal{B}} \rho \Psi(h, s, p, \nabla p) dx. \quad (3.5)$$

3.1.4. Contraintes actives

Le cadre théorique développé dans le chapitre 2 ne permet a priori pas l'introduction *naturelle* du tenseur des contraintes actives évoqué dans la section 1.3.5. La théorie des gels actifs propose de prendre en compte une paire thermodynamique flux-force supplémentaire (μ_a, \dot{r}_a) [Mar+13, section III.A.1], où μ_a représente l'énergie gagnée pour chaque molécule d'ATP consommée et r_a le nombre de molécules d'ATP dépensées par unité de volume. De ce point de vue, l'activité est simplement introduite via la nouvelle variable thermodynamique interne r_a . En conséquence, comme expliqué dans [Mar+13, section III.A.1], $\mu_a := -\frac{\partial \Psi}{\partial r_a}$ dérive alors de l'énergie libre. Ainsi, si l'on souhaitait introduire un terme similaire au tenseur des contraintes actives de la section 1.3.5, on pourrait le faire en choisissant un potentiel de dissipation dépendant du produit $p \otimes p$, ce qui est permis par la théorie, et en formulant quelques hypothèses supplémentaires, comme par exemple le fait que μ_a n'est pas une inconnue du problème.

1. On rappelle que $\omega = \frac{1}{2} \nabla \times v$ ne représente pas la vorticité mais sa moitié.

Dans la théorie des gels actifs, KRUSE et al. [Kru+05] sont les premiers à avoir formulé une justification thermodynamique de l'introduction d'un tenseur des contraintes actives. Malheureusement, nous pensons qu'elle est incomplète car elle considère à la fois μ_a et \dot{r}_a comme deux nouvelles inconnues du système, tout en ne proposant qu'une nouvelle équation constitutive reliant les deux. Normalement, l'expression de μ_a devrait être expliquée au moyen de l'énergie libre, ce qui donnerait lieu à une équation d'évolution sur r_a . Quoi qu'il en soit, l'objectif visé est l'introduction d'un terme de la forme $\sigma_a := -\mu_a p \otimes p$ dans l'expression du tenseur des contraintes, comme expliqué dans la section 1.3.5, et non l'ajout d'une nouvelle équation d'évolution difficile à justifier phénoménologiquement et non souhaitable pour la construction pratique d'un modèle.

Dans cette thèse, nous proposons plutôt d'introduire les contraintes actives au travers de la résultante des forces volumiques f . Précisément, nous définissons cette dernière par $f = \operatorname{div} \sigma_a$. La loi de conservation de la quantité de mouvement (3.2) devient alors

$$-\operatorname{div}(\sigma_{\text{tot}}^T) = 0, \quad (3.6)$$

où

$$\sigma_{\text{tot}} := \sigma + \sigma_a. \quad (3.7)$$

3.2. Équations constitutives

La forme générale des équations constitutives est donnée par le théorème 2.4.3. Pour obtenir un modèle de tissus, nous devons encore choisir l'énergie libre Ψ et le potentiel de dissipation Φ . C'est donc par ce biais que les ingrédients biophysiques sont ajoutés aux équations. Insistons sur le fait qu'avec cette approche, nous n'avons pas besoin d'étudier les équations obtenues pour en déduire l'énergie et le potentiel de dissipation, ou encore pour montrer qu'elles satisfont bien le second principe de la thermodynamique, puisque c'est le cas par construction. Rappelons enfin que Ψ doit être objective et isotrope d'après la section 2.2.2, et que Φ doit être objective, convexe, positive et nulle lorsque les flux thermodynamiques sont nuls, d'après le théorème sus-cité.

3.2.1. Énergie libre

Définition 3.2.1 – Énergie libre pour le modèle des tissus

L'énergie libre spécifique Ψ pour le modèle des tissus est définie par

$$\rho\Psi(h, s, p, \gamma) := k_p \left(W(p) + \frac{1}{2} \ell_p^2 |\gamma|^2 \right), \quad (3.8)$$

où W est la fonctionnelle en double-puits (figure 3.1) définie par

$$W(p) := \frac{1}{4}(|p|^2 - 1)^2, \quad (3.9)$$

k_p est un paramètre homogène à une contrainte et ℓ_p la longueur de cohérence de la polarité.

Cette définition de l'énergie libre n'est pas nouvelle ; elle synthétise les approches classiques développées par exemple dans [ZSA12 ; Mar14 ; Not+16 ; Cza+18 ; AT19]. Notons en particulier qu'elle ne dépend ni du tenseur de Hencky \mathbf{h} , ni du vecteur de courbure moyenne \mathbf{s} . Nous y introduisons essentiellement deux ingrédients physiques : (i) dans le but d'assurer du mouvement, nous considérons une énergie en double-puits (équation (3.9)) qui définit l'état polarisé $|\mathbf{p}| = 1$ comme étant stable (l'énergie est minimale pour cet état), contrairement à l'état $|\mathbf{p}| = 0$ qui est instable (voir la figure 3.1) ; (ii) les variations spatiales de la polarité sont pénalisées de sorte que les vecteurs polarité dans un même voisinage de taille ℓ_p ont tendance à s'aligner. On retrouve exactement ces ingrédients dans [Not+16]. Dans le cas le plus général, on peut retrouver jusqu'à cinq ingrédients si on ajoute une dépendance à la densité cellulaire [AT19, équation (11)], voire plus si l'on introduit de nouveaux champs pour décrire d'autres quantités physico-chimiques, comme la concentration de myosine [Not+16 ; BM19], l'anisotropie de la forme des cellules [Cza+18] ou l'activité de l'ERK (*Extracellular signal-Regulated Kinases*), une enzyme ayant une influence sur le complexe d'actomyosine, et donc sur la force active [Boo+21]. Nous renvoyons à la section 1.3 pour plus de détails.

Remarque 3.2.I – Viscoélasticité : Dans cette thèse, nous supposons que l'élasticité des cellules est négligeable devant la force active et les contraintes actives et visqueuses. Nous nous plaçons donc dans le régime où le module d'élasticité E (voir la section 1.3.3) tend vers 0. Ce choix nous permet également de mieux isoler le rôle de la polarité dans la dynamique des équations.

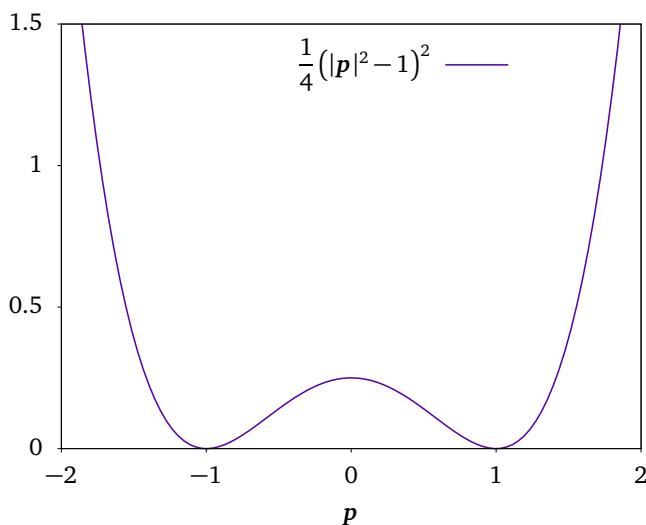


FIGURE 3.1. – Potentiel en double-puits.

3.2.2. Potentiel de dissipation

Nous choisissons un potentiel de dissipation quadratique simple, indépendant des variables constitutives, composé d'une partie dissipative visqueuse et d'un terme polaire découplés, de sorte que la positivité et la convexité soient facilement assurées.

Définition 3.2.2 – Potentiel de dissipation pour le modèle des tissus

Le potentiel de dissipation pour le modèle des tissus est défini par

$$\Phi(\mathbf{D}, \mathbf{p}^\square) := \eta |\mathbf{D}|^2 + \mathcal{J}_{\text{kertr}}(\mathbf{D}) + \frac{1}{2} k_p \lambda_p |\mathbf{p}^\square|^2, \quad (3.10)$$

où η est la viscosité du tissu et λ_p est le temps de relaxation de la polarité.

Le produit $k_p \lambda_p$ est homogène à une viscosité. Dans le contexte des gels actifs, celle-ci est appelée viscosité rotationnelle [Mar+13, page 21] : elle contrôle l'intensité des effets dissipatifs induits par les contraintes de couples. De manière plus prosaïque, le troisième terme dans (3.10) permet d'obtenir une dérivée objective dans l'équation d'évolution de la polarité.

3.2.3. Équations constitutives

Nous explicitons maintenant les équations constitutives données dans le théorème 2.4.3 qui découlent du choix que l'on vient de faire pour l'énergie libre (3.8) et pour le potentiel de dissipation (3.10).

Lemme 3.2.1 – Différentielles de Ψ

Les différentielles de l'énergie libre Ψ (3.8) sont données par

$$\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} = \mathbf{0}, \quad (3.11a)$$

$$\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} = k_p W'(\mathbf{p}) = k_p (|\mathbf{p}|^2 - 1) \mathbf{p} \quad (3.11b)$$

$$\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} = k_p \ell_p^2 \boldsymbol{\gamma}. \quad (3.11c)$$

Démonstration. Immédiat. ■

Le potentiel de dissipation Φ (3.10) n'est pas différentiable par rapport à \mathbf{D} mais l'est par rapport à \mathbf{p}^\square .

Lemme 3.2.2 – Différentielles de Φ

Le sous-différentiel du potentiel de dissipation Φ (3.10) est caractérisé par

$$\tau \in \partial_D \Phi(D(v), k, \overset{\square}{p}) \iff \exists \Pi \in \mathbb{R}, \tau = -\Pi \delta + 2\eta D(v). \quad (3.12a)$$

La différentielle de Φ par rapport à $\overset{\square}{p}$ est donnée par

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \overset{\square}{p}}(D, \overset{\square}{p}) = k_p \lambda_p \overset{\square}{p}. \quad (3.12b)$$

Démonstration. On remarque que dans l'expression de Φ , seul le terme $\mathcal{I}_{\text{kertr}}$ n'est pas différentiable. La différentielle du premier est donnée par $2\eta D$. Par la loi de conservation de la masse (3.1), on a $\text{tr } D(v) = \text{div } v = 0$, donc on peut appliquer le proposition B.4.5 pour caractériser le sous-différentiel de $\mathcal{I}_{\text{kertr}}$, d'où (3.12a), par additivité du sous-différentiel. La formule (3.12b) s'obtient sans difficulté. ■

Proposition 3.2.3 – Expression de $\ell(h, p)$

Avec le choix (3.8) pour l'énergie libre spécifique, on a

$$\ell(h, p) = k_p(|p|^2 - 1)p - k_p \ell_p^2 \Delta p. \quad (3.13)$$

Comme ℓ ne dépend pas de h , nous noterons simplement ce champ $\ell(p)$ par la suite.

Démonstration. Immédiat avec la définition de ℓ (2.35) et le lemme 3.2.2. ■

Proposition 3.2.4 – Expression du tenseur des contraintes

Le tenseur des contraintes s'écrit explicitement

$$\sigma = -\Pi \delta + 2\eta D(v) + \frac{a+1}{2} p \otimes \ell(p) + \frac{a-1}{2} \ell(p) \otimes p - k_p \ell_p^2 \nabla p^\top \cdot \nabla p, \quad (3.14)$$

où Π est la contrainte de Lagrange associée à la contrainte d'incompressibilité (3.1), c'est-à-dire la pression, et $\ell(p)$ est défini par (3.13). On remarque que le tenseur obtenu est bien non-symétrique.

Remarque 3.2.II – Pression : Il est important de noter que la pression physique totale est donnée par $-\text{tr } \sigma / 3$ et que Π n'est qu'une contribution à celle-ci. La variable Π est ici seulement le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte d'incompressibilité (3.1) $\text{div } v = 0$.

Démonstration. C'est une conséquence directe des équations constitutives (2.40b) et (2.40a) et des lemme 3.2.2. ■

Proposition 3.2.5 – Équation d'évolution de la polarité —

L'équation d'évolution de la polarité \mathbf{p} est donnée par

$$k_p \lambda_p \square \mathbf{p} + \ell(\mathbf{p}) = \mathbf{0}, \quad (3.15)$$

où $\ell(\mathbf{p})$ est défini par (3.13), ou encore par

$$\lambda_p \square \mathbf{p} + (|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} - \ell_p^2 \Delta \mathbf{p} = \mathbf{0}, \quad (3.16)$$

en supposant que $k_p \neq 0$.

Démonstration. C'est une conséquence directe de l'équation constitutive (2.40c), du lemme 3.2.2 et de la proposition 3.2.3. ■

3.3. Modèle tridimensionnel de tissus

3.3.1. Résumé des équations

— **Problème 3.3.1 – Modèle tridimensionnel de tissus.** Étant donné la polarité initiale \mathbf{p}_0 , trouver \mathbf{v} , Π et \mathbf{p} définies dans $\mathcal{B} \times]0, +\infty[$ telles que

$$-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^\top) = \mathbf{0} \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (3.17a)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (3.17b)$$

$$\lambda_p \square \mathbf{p} + (|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} - \ell_p^2 \Delta \mathbf{p} = \mathbf{0} \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[. \quad (3.17c)$$

Le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ est quant à lui défini par

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} = -\Pi \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) + \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p}) + \boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}), \quad (3.17d)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) := 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{v}), \quad (3.17e)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p}) := \frac{a+1}{2} \mathbf{p} \otimes \ell(\mathbf{p}) + \frac{a-1}{2} \ell(\mathbf{p}) \otimes \mathbf{p} - k_p \ell_p^2 \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \nabla \mathbf{p}, \quad (3.17f)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}) := -\mu_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \quad (3.17g)$$

où l'on rappelle que

$$\ell(\mathbf{p}) = k_p (|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} - k_p \ell_p^2 \Delta \mathbf{p}. \quad (3.17h)$$

Démonstration. C'est une conséquence directe des lois de conservation (3.6) et (3.1), et des équations constitutives (3.14), (3.16) et (3.13). ■

Comme évoqué dans la section 3.2.1, les équations obtenues ici ne sont totalement inédites dans la littérature ; elles synthétisent les approches classiques développées par exemple dans [ZSA12 ; Mar14 ; Not+16 ; Cza+18 ; AT19]. Elles n'ont par contre jamais été réellement étudiées sous cette forme, ni résolues numériquement, ce que nous proposons de faire dans les deux prochaines parties de cette thèse. Nous y avons introduit essentiellement trois ingrédients physiques : (i) le terme en double puits dans l'équation (3.17c) tend à polariser le tissu – puisque l'état polarisé $|\mathbf{p}| = 1$ est stable par construction, contrairement à l'état isotrope $|\mathbf{p}| = 0$ –, ce qui amènera à créer du mouvement quand on ajoutera dans le chapitre 5 une interaction avec le substrat ; (ii) le laplacien dans cette même équation tend à aligner les vecteurs polarité dans un voisinage de taille effective ℓ_p ; (iii) le tenseur des contraintes actives (3.17g), qui tend à déstabiliser le système. On retrouve également les deux premiers termes dans l'expression du tenseur des contraintes (3.17f), imposés par construction pour que le second principe de la thermodynamique soit vérifié (voir la section 2.4).

3.3.2. Adimensionnement

Dans cette section, nous procédons à un changement de variable permettant de faire apparaître dans les équations du problème 3.3.1 des nombres sans dimension.

Soient L , H et V respectivement une longueur, une épaisseur et une vitesse caractéristiques de la migration. Soient également $T := L/V$ et $S := \eta V/L$ respectivement un temps et une contrainte caractéristiques.

Nous réécrivons maintenant le problème 3.3.1 en utilisant des ensembles, des variables et des opérateurs adimensionnés. Pour éviter d'alourdir les notations, nous ne distinguons pas les quantités avec et sans dimension. Ainsi, à partir de cette section, toutes les quantités apparaissant dans la suite du document sont par défaut sans dimension, sauf mention explicite du contraire.

Problème 3.3.2 – Modèle de tissus tridimensionnel adimensionné. Étant donné la polarité initiale \mathbf{p}_0 , trouver \mathbf{v} , Π et \mathbf{p} définies dans $\mathcal{B} \times]0, +\infty[$ telles que

$$-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T) = \mathbf{0} \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (3.18a)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[, \quad (3.18b)$$

$$P \mathbf{e} \mathbf{\bar{p}} + (|\mathbf{p}|^2 - 1) \mathbf{p} - \kappa^2 \Delta \mathbf{p} = \mathbf{0} \text{ dans } \mathcal{B} \times]0, +\infty[. \quad (3.18c)$$

Le tenseur des contraintes totales de Cauchy adimensionné $\boldsymbol{\sigma}$ est quant à lui défini par

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} = -\Pi \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) + \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p}) + \boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}), \quad (3.18d)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) := 2\mathbf{D}(\mathbf{v}), \quad (3.18e)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p}) := \frac{a+1}{2} \mathbf{p} \otimes \ell(\mathbf{p}) + \frac{a-1}{2} \ell(\mathbf{p}) \otimes \mathbf{p} - \kappa^2 \mathbf{B} \nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{p}, \quad (3.18f)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}) := -S_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}, \quad (3.18g)$$

où

$$\ell(\mathbf{p}) = B(|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} - \kappa^2 B \Delta \mathbf{p}. \quad (3.18h)$$

Dans la formulation de ce problème, nous n'avons pas spécifié les conditions aux limites pour rester général. Nous en discutons plus loin, dans les sections 5.1.2 et 5.3.3.

Au total, le problème 3.3.2 compte six nombres sans dimension, dont nous donnons les définitions par ordre d'apparition ci-dessous.

- $Pe := \lambda_p V/L$: en respectant la nomenclature en vigueur, il s'agit du nombre de Péclet, mais il s'interprète plus comme un nombre de Weissenberg polaire ou vectoriel, par analogie aux fluides viscoélastiques. C'est le rapport entre le temps de relaxation de la polarité et le temps caractéristique de la migration. En multipliant en haut et en bas par k_p , on obtient $Pe = (k_p \lambda_p V)/(k_p L)$, qui s'interprète alors comme le ratio entre forces visqueuses de rotation et forces élastiques polaires (voir la section 3.2.2).
- $\kappa := \ell_p/L$: rapport de la longueur de cohérence de la polarité et de la taille caractéristique du domaine.
- a : paramètre de la dérivée objective de Gordon-Schowalter ; cf. la définition 2.2.1.
- $B := k_p L/(\eta V)$: rapport entre forces élastiques polaires et forces visqueuses. Un paramètre alternatif est le nombre d'Ericksen (du même nom que le tenseur des contraintes dans la section 2.4.2), défini par $Er := (\eta VL)/(k_p \ell_p^2)$, de sorte que $B = 1/(\kappa^2 Er)$. Pour des raisons pratiques, nous préférons l'utilisation de B directement. Lorsque B est grand, autrement dit lorsque les forces visqueuses sont petites devant les forces élastiques polaires, la polarité a une forte résistance aux variations de déformation du tissu. En résumé, le paramètre B caractérise la résistance de la polarité aux forces visqueuses.
- $S_a := \mu_a L/(\eta V)$: le coefficient de contrainte active adimensionné.

A new framework for shallow approximations of incompressible flows

Nous développons ici un cadre formel qui nous permettra de réaliser dans le chapitre 5 une approximation en couche mince du problème 3.3.2 obtenu précédemment. Ce chapitre est une recopie de l'article [SCS23] que nous avons publié durant la thèse. Pour cette raison, certaines notations peuvent être à nouveau introduites.

Table des matières

4.1. Introduction	63
4.2. Mathematical setting	65
4.3. The framework	67
4.4. Examples	80
4.5. Conclusion	85
4.6. Appendix : Leibniz formulas	85

4.1. Introduction

The scientific literature addresses a wide range of thin-layer flow problems, suitable for geophysical, biological and industrial applications. The corresponding approximation leads to reduce a tridimensional time-dependent and free-surface flow problem to a bidimensional one with an explicit description of the elevation of the free-surface. The problem is then much simpler, from both theoretical and numerical points of view.

This approach was first introduced in 1871 by Saint-Venant [Sai71] for the so-called shallow-water equations that approximate the Euler's fluid equations. Since then, significant progress has been made in obtaining reduced equations. Especially, asymptotic analysis allows a rigorous formal development, up to an arbitrary order, of quantities with respect to ϵ , the small aspect ratio of the thin geometry (see Fig. 4.1). Among others, it has allowed

to obtain thin-layer approximations of Navier-Stokes model [GP00 ; Mar07], of the Bingham viscoplastic fluid model [LM90 ; BC99 ; BSS14 ; FNV10], and more recently of the Maxwell viscoelastic model [BB13]. See e.g. [BB16] for a recent review, including slowly varying topography effects. Note that the reduced equations obtained after asymptotic analysis strongly depend upon the boundary conditions imposed on the substrate on which the fluid is moving. In the literature, two main cases are considered: a slip-friction together with a no-penetration condition [Mar07 ; GP00 ; FNV10 ; BB13 ; BB16] and a no-slip condition [LM90 ; BC99].

Our aim is to propose a general framework for facilitating the formal derivation of the thin-layer approximation of incompressible fluids, either Newtonian or non-Newtonian, with slip-friction and no-penetration boundary condition on a flat substrate. It allows both to avoid redundant mathematical hypotheses and to dramatically reduce most tedious formal calculations. While we focus on fluid mechanics applications, the present framework could be suitable to a wider class of partial differential equations from mathematical physics. The idea to provide some kind of generalization has already been suggested in the literature. In 2004, Bouchut and Westdickenberg [BW04] studied general varying topographies and, in 2016, Bouchut and Boyaval [BB16] proposed for the first time a unified framework for deriving thin-layer models for shallow free-surface flows driven by gravity, with slip-friction and no-penetration boundary condition, and under the *motion by slices* hypothesis. The present framework requires a minimal number of assumptions. In particular, we neither assume that the system is driven by gravity nor that the motion by slices hypothesis is satisfied.

The viscoelastic Maxwell model is studied as a proof of concept for the proposed framework. It writes [Old50] :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda \left(\frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - \nabla \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \boldsymbol{v}^\top \right) + \boldsymbol{\tau} = 2\eta \mathbf{D}(\boldsymbol{v}), \\ \rho \left(\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \boldsymbol{v} \right) - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \rho \mathbf{g}, \\ \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (4.1a) \\ (4.1b) \\ (4.1c) \end{array}$$

where the total stress tensor is $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - \Pi \boldsymbol{\delta}$, and the three unknowns are $\boldsymbol{\tau}$, the elastic stress tensor, \boldsymbol{v} , the velocity field and Π , the pressure. Here, ρ is the density of the fluid, assumed to be constant, and \mathbf{g} is the constant gravity vector. The parameter η is a viscosity and λ is a relaxation time. The notation $\mathbf{D}(\boldsymbol{v})$ stands for the rate of deformation tensor, that is the symmetric part of the velocity gradient, defined by $\mathbf{D}(\boldsymbol{v}) := (\nabla \boldsymbol{v} + \nabla \boldsymbol{v}^\top)/2$. Note that when $\lambda = 0$, the Maxwell model reduces to the Navier-Stokes one. Rather than directly performing the asymptotic analysis of the system (4.1), we propose in this paper to treat the following general equation :

$$\mathcal{A}(u) - \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (4.2)$$

where \mathcal{A} is a given scalar operator depending on the scalar unknown u and \mathbf{j} is the equivalent of a flux. This equation is scalar but it can correspond component by component

to vectorial conservation equations such as (4.1b), and tensorial evolution equations such as (4.1a), and, in general, to a large class of equations from mathematical physics.

After a presentation of the general mathematical setting in section 4.2, the asymptotic analysis of (4.2) will be presented along with sufficient conditions for the motion by slices. This section ends with the asymptotic analysis of the general objective Gordon-Schowalter derivatives of both vector and tensor fields. Finally, section 4.4 turns to applications to Navier-Stokes and Maxwell systems. To the best of our knowledge, the tools presented here are new and we hope that they will (i) help to clarify the mathematical hypothesis required for asymptotic analysis, and (ii) make formal calculations easier for future applications in the study of complex materials.

4.2. Mathematical setting

4.2.1. Geometry

We consider here a thin-layer fluid domain $\mathcal{B} \subset \mathbb{R}^3$ moving at velocity $\mathbf{v} : \mathcal{B} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^3$, with a free surface characterized by its height $h : \mathcal{B} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$, assumed small compared to the flow length. Let Σ_s be the three-dimensional rigid substrate on which the fluid flows. It is defined as the set of points \mathbf{x} with $x_3 = 0$, and $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ its two-dimensional counterpart such that $\Sigma_s := \Omega \times \{0\}$, see Fig. 4.1. The free surface is defined as the set $\Sigma_f(t) := \Omega \times \{h(t)\}$. The thin-layer approximation aims at obtaining a two-dimensional problem defined over Ω .

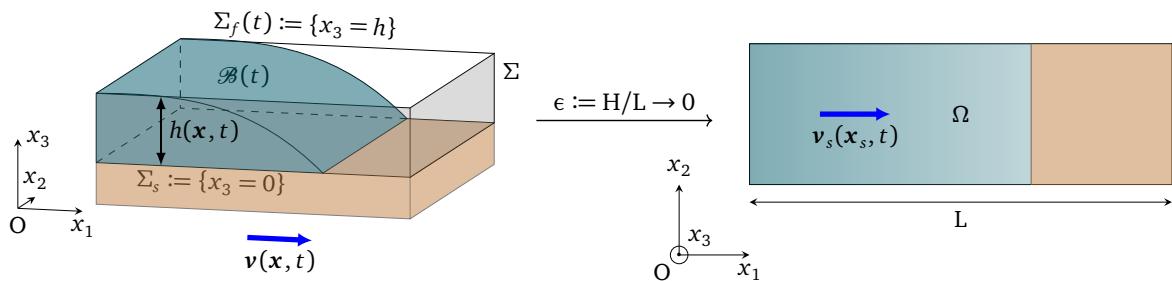


FIGURE 4.1. – Asymptotic analysis of a free-surface flow of a shallow fluid.

4.2.2. Evolution equations

A large part of the equations derived from mechanics can be written as one of the following equations :

$$\lambda \frac{D\varphi}{Dt} + b(\varphi) - \operatorname{div} \mathbf{j} = f, \quad (4.3a)$$

$$\lambda \frac{\mathcal{D}_a \mathbf{u}}{\mathcal{D}t} + \mathbf{b}(\mathbf{u}) - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{f}, \quad (4.3b)$$

$$\text{or } \lambda \frac{\mathcal{D}_a \boldsymbol{\tau}}{\mathcal{D}t} + \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{\tau}) - \operatorname{div} \mathbf{J} = \boldsymbol{\phi}, \quad (4.3c)$$

where λ is a time relaxation, b (resp. \mathbf{b} and $\boldsymbol{\beta}$) is a generic scalar-valued (resp. vector and symmetric tensor) source term, \mathbf{j} (resp. $\boldsymbol{\sigma}$ and \mathbf{J}) is a vector-valued (resp. tensor-valued and order 3 tensor-valued) flux and f (resp. \mathbf{f} and $\boldsymbol{\phi}$) is a scalar-valued (resp. vector and symmetric tensor) source term independent of the scalar (resp. vector and symmetric tensor) unknown φ (resp. \mathbf{u} and $\boldsymbol{\tau}$). Three time derivatives have also been introduced. The first one is the Lagrangian derivative $D\Box/Dt := \partial\Box/\partial t + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\Box$. The two others are the vector and the tensor Gordon-Schowalter derivatives, parameterized by $a \in \mathbb{R}$ and defined by

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{D}_a \mathbf{u}}{\mathcal{D}t} &:= \frac{D\mathbf{u}}{Dt} - (\mathbf{W}(\mathbf{v}) + a\mathbf{D}(\mathbf{v})) \cdot \mathbf{u}, \\ \frac{\mathcal{D}_a \boldsymbol{\tau}}{\mathcal{D}t} &:= \frac{D\boldsymbol{\tau}}{Dt} - 2 \operatorname{sym}((\mathbf{W}(\mathbf{v}) + a\mathbf{D}(\mathbf{v})) \cdot \boldsymbol{\tau}), \end{aligned}$$

where $\operatorname{sym}(\cdot)$ is the tensor symmetric part operator and $\mathbf{W}(\mathbf{v}) := (\nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{v}^\top)/2$ is the vorticity tensor, *i.e.* the skew-symmetric part of the velocity gradient. Note that these time derivatives are defined for a general velocity field \mathbf{v} , not necessarily divergence-free.

Note that all the three variants of (4.3) reduce component-by-component to the general case (4.2) for a suitable choice of the \mathcal{A} that includes both the time derivative, the source and the right-hand-side terms. This approach leads to split the difficulties for the asymptotic analysis of the next section 4.3 : we first study (4.2) with a general operator \mathcal{A} before we deal with the complicated terms involved by Gordon-Schowalter derivatives.

4.2.3. Boundary conditions

Only the boundary conditions satisfied on the free surface and on the substrate are involved by the asymptotic analysis. Indeed, conditions on vertical boundary walls have no effects on the reduced models.

On the free surface

For fluid flow systems such as Navier-Stokes or Maxwell (4.1), the boundary conditions on the free surface $\Sigma_f(t)$ write [Mar07 ; BB16] :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \gamma \kappa \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (4.4a)$$

$$\text{and } \frac{\partial h}{\partial t} + v_1 \frac{\partial h}{\partial x_1} + v_2 \frac{\partial h}{\partial x_2} = v_3 \quad (4.4b)$$

where \mathbf{n} is the unit outward normal vector, along the direction $(-\partial h / \partial x_1, -\partial h / \partial x_2, 1)$. Eqn. (4.4a) expresses the normal-stress continuity condition where γ is the surface tension at the air/fluid interface and $\kappa := -\text{div } \mathbf{n}$ is the local mean curvature while (4.4b) is the usual free surface kinematic equation. Note that (4.4a) is a non-homogeneous Neumann boundary condition. By extension, for our general scalar equation (4.2), we consider the general condition on free surface $\Sigma_f(t)$:

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = q. \quad (4.5)$$

On the substrate

On the substrate Σ_s , we consider :

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (4.6a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{nt} = -k \mathbf{v}_t, \quad (4.6b)$$

where $\boldsymbol{\sigma}_{nt} := \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ is the tangential part of the normal stress, $\mathbf{v}_t := \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$ is the tangential part of the velocity. Relation (4.6a) expresses the *no-penetration* of the flow material across the substrate surface while (4.6b) is the tangential *slip-friction* condition, where k is the friction coefficient, which is constant for laminar flows.

Condition (4.6) is the usual starting point of most *motion by slices* approximate models. Note that a popular alternative is the *no-slip* condition $\mathbf{v} = \mathbf{0}$, which is the starting point of the so-called *lubrication* approximate models [LM90 ; BC99 ; BSS14]. For simplicity, the later will not be considered and we assume (4.6) all along this paper.

4.3. The framework

4.3.1. Notations

Asymptotic analysis

Let H , L and U be the characteristic height, length and velocity, respectively. For instance L is the substrate length. The asymptotic analysis consists in exploiting the small, yet fixed, aspect ratio

$$\epsilon := H/L$$

in order to reduce the three-dimensional problem to a bidimensional one. For this purpose, we are going to scale the spatial coordinates with this parameter, distinguishing the contribution from planar and horizontal dimensions. We then assume each *dimensionless* unknown admits a Taylor expansion with respect to ϵ at second order, which, to fix ideas, writes

$$\varphi = \varphi^{(0)} + \varphi^{(1)}\epsilon + \varphi^{(2)}\epsilon^2 + O(\epsilon^3). \quad (4.7)$$

By convention, we consider that both the height and the x_3 -coordinate are exactly of order one while both the x_1 -coordinate and x_2 -coordinate do not depend on ϵ :

$$\mathbf{x}_s = L\mathbf{x}_s^{(0)}, \quad x_3 = Lx_3^{(1)}\epsilon, \quad t = \frac{L}{U}t^{(0)}, \quad (4.8)$$

where the s index refers to the planar components of a given variable, *e.g.* $\mathbf{x}_s := (x_1, x_2)$. We deduce the following scaling for differential operators :

$$\nabla_s = \frac{1}{L}\nabla_s^{(0)}, \quad \frac{\partial}{\partial x_3} = \frac{1}{\epsilon L}\frac{\partial}{\partial x_3^{(1)}}, \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{U}{L}\frac{\partial}{\partial t^{(0)}}, \quad (4.9)$$

where $\nabla_s := (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2)^\top$ is the planar gradient. We also define the planar divergence operator $\text{div}_s \square := \partial \square_{i_1 \dots i_{p-1}}/\partial x_1 + \partial \square_{i_1 \dots i_{p-1}}/\partial x_2$, where p is the order of the given tensor, and the planar Laplacian $\Delta_s := \nabla_s \cdot \nabla_s$. Similarly, we assume that the dimensionless velocity field \mathbf{v}/U and the dimensionless height field h/L satisfy an expansion of the form (4.7) with $v_3^{(0)} = 0$ and $h^{(0)} = 0$. This choice is justified by our wish to have ϵU as the characteristic vertical speed and $H = \epsilon L$ as the characteristic height.

Observe that the notation $\varphi^{(k)}$ makes it possible to immediately recognise the order with respect to ϵ of the considered term. For instance, the product $\varphi^{(k)}\psi^{(l)}$ will be associated to a term of order $O(\epsilon^{k+l})$, while the quotient $\varphi^{(k)}/\psi^{(l)}$ will be associated to a term of order $O(\epsilon^{k-l})$.

From now until the section 4.4, we assume that every field, parameter and differential operator is dimensionless, for convenience. In particular, when we refer to the dimensionless height (resp. vertical velocity), we mean the height scaled by L (resp. U), in order to keep the property presented in the previous paragraph.

Depth averaging

Depth averaging is the final stage of the reduction of equations. It is defined through the following operator :

Définition 4.3.1 – depth average

Let $\varphi : \mathcal{B} \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ a continuous scalar field with respect to x_3 . Its depth average is defined by the quantity

$$\langle \varphi \rangle_h(x_s, t) := \begin{cases} \frac{1}{h} \int_0^h \varphi((x_s, x_3), t) dx_3, & \forall (x_s, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_+ \quad \text{when } h(x_s, t) \neq 0, \\ \varphi((x_s, 0), t) & \text{otherwise.} \end{cases}$$

This linear operator extends componentwise to any vector or tensor field. We also define the depth variance and covariance :

Définition 4.3.2 – depth variance and covariance

Let φ and ψ be two scalar fields defined in $\mathcal{B} \times \mathbb{R}_+$, continuous with respect to x_3 .

- The depth variance of φ is defined by the quantity

$$\text{var}_h(\varphi) := \langle (\varphi - \langle \varphi \rangle_h)^2 \rangle_h.$$

- The depth covariance of φ and ψ is defined by the quantity

$$\text{cov}_h(\varphi, \psi) := \langle (\varphi - \langle \varphi \rangle_h)(\psi - \langle \psi \rangle_h) \rangle_h.$$

In particular, $\text{cov}_h(\varphi, \varphi) = \text{var}_h(\varphi)$.

Those operators satisfy the Cauchy-Schwartz inequality

$$|\text{cov}_h(\varphi, \psi)|^2 \leq \text{var}_h(\varphi) \text{var}_h(\psi), \quad (4.10a)$$

and the König-Huygens theorem-like

$$\text{var}_h(\varphi) = \langle \varphi^2 \rangle_h - \langle \varphi \rangle_h^2, \quad (4.10b)$$

$$\text{cov}_h(\varphi, \psi) = \langle \varphi \psi \rangle_h - \langle \varphi \rangle_h \langle \psi \rangle_h. \quad (4.10c)$$

Note the following useful identities :

$$\langle x_3 \rangle_h = h/2 \quad \text{and} \quad \text{var}_h x_3 = h^2/12. \quad (4.11)$$

4.3.2. Analysis of the general scalar problem

Considering equation (4.2) together with the Neumann condition (4.5), let us perform the asymptotic analysis of the following general scalar problem :

Problème 4.3.1 – general scalar. Find u , defined in $\mathcal{B} \times \mathbb{R}_+$, such that for any time $t \in \mathbb{R}_+$

$$\begin{cases} \mathcal{A}(u(t)) - \operatorname{div} \mathbf{j}(t) = \mathbf{0} & \text{in } \mathcal{B}(t), \\ \mathbf{j}(t) \cdot \mathbf{n} = q & \text{on } \Sigma_f(t). \end{cases} \quad (4.12a)$$

$$\mathbf{j}(t) \cdot \mathbf{n} = q \quad (4.12b)$$

Recall that this scalar problem extends componentwise to a vector or a tensor one. Assume that u is a solution of (4.12) and that the following expansions hold :

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}^{(-1)} \frac{1}{\epsilon} + \mathcal{A}^{(0)} + \mathcal{A}^{(1)} \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (4.13a)$$

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}^{(-1)} \frac{1}{\epsilon} + \mathbf{j}^{(0)} + \mathbf{j}^{(1)} \epsilon + \mathbf{j}^{(2)} \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (4.13b)$$

$$q = q^{(-1)} \frac{1}{\epsilon} + q^{(0)} + q^{(1)} \epsilon + q^{(2)} \epsilon^2 + \mathcal{O}(\epsilon^3) \quad (4.13c)$$

Then (4.12a) leads to

$$-\frac{\partial j_3^{(-1)}}{\partial x_3^{(1)}} \frac{1}{\epsilon^2} + \sum_{k=-1}^1 \left(\mathcal{A}^{(k)} - \operatorname{div}_s \mathbf{j}_s^{(k)} - \frac{\partial j_3^{(k+1)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \epsilon^k + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 0,$$

while the boundary condition (4.12b) becomes

$$(j_3^{(-1)} - q^{(-1)}) \frac{1}{\epsilon} + \sum_{k=-1}^1 (j_3^{(k+1)} - \mathbf{j}_s^{(k)} \cdot \nabla_s h^{(1)} - q^{(k+1)}) \epsilon^{k+1} + \mathcal{O}(\epsilon^2) = 0 \quad \text{on } \Sigma_f(t).$$

By identification, we get, for any $k \in \{-1, 0, 1\}$

$$\frac{\partial j_3^{(-1)}}{\partial x_3^{(1)}} = 0, \quad (4.15a)$$

$$\mathcal{A}^{(k)} - \operatorname{div}_s \mathbf{j}_s^{(k)} = \frac{\partial j_3^{(k+1)}}{\partial x_3^{(1)}}, \quad (4.15b)$$

$$j_3^{(-1)} = q^{(-1)} \quad \text{on } \Sigma_f(t), \quad (4.15c)$$

$$j_3^{(k+1)} = \nabla_s h^{(1)} \cdot \mathbf{j}_s^{(k)} + q^{(k+1)} \quad \text{on } \Sigma_f(t). \quad (4.15d)$$

From (4.15a) and (4.15c), we also deduce $j_3^{(-1)} = q^{(-1)}$ in $\Omega \times \mathbb{R}_+$.

Définition 4.3.3 – hypotheses $\mathcal{H}^{(k)}$

For any $k \in \{-1, 0, 1\}$, we say hypothesis $\mathcal{H}^{(k)}$ holds if and only if $\mathcal{A}^{(k)} = 0$ and $\mathbf{j}_s^{(k)} = \mathbf{0}$.

Lemme 4.3.1 – vertical flux and Neumann BC

Assume expansions (4.13) are satisfied. Then,

- the term of order -1 of the vertical flux is given by

$$j_3^{(-1)} = q^{(-1)} \quad \text{in } \Omega \times \mathbb{R}_+. \quad (4.16a)$$

- if hypothesis $\mathcal{H}^{(k)}$ also holds, for $k \in \{-1, 0, 1\}$,

$$j_3^{(k+1)} = q^{(k+1)} \quad \text{in } \Omega \times \mathbb{R}_+. \quad (4.16b)$$

Démonstration. The first point has already been proven in the main text. Under hypothesis $\mathcal{H}^{(k)}$, (4.15b) reduces to

$$\frac{\partial j_3^{(k+1)}}{\partial x_3^{(1)}} = 0 \quad \text{in } \Omega \times \mathbb{R}_+,$$

whence the result, from the boundary condition (4.15d). ■

This lemma is the starting point for obtaining the property of motion by slices (see corollary 4.3.3).

It remains to average in depth the problem defined by equations (4.15a)–(4.15b) together with boundary conditions (4.15c)–(4.15d). This can be performed thanks to corollary 4.6.3 in appendix 4.6, which gives the

Problème 4.3.2 – reduced general scalar. Find $\langle u^{(0)} \rangle_h$ and $\langle u^{(1)} \rangle_h$, defined in $\Omega \times \mathbb{R}_+$, such that for any time $t \in \mathbb{R}_+$ and any index $k \in \{-1, 0, 1\}$

$$h^{(1)} \langle \mathcal{A}^{(k)} \rangle_h - \operatorname{div}_s (h^{(1)} \langle \mathbf{j}_s^{(k)} \rangle_h) = q^{(k+1)} - j_3^{(k+1)}(x_3 = 0). \quad (4.17)$$

Théorème 4.3.2 – asymptotic analysis of the general problem

Let u be the solution of problem 4.3.1, which is assumed to be satisfying expansion (4.13), and $\langle u^{(0)} \rangle_h$ and $\langle u^{(1)} \rangle_h$ be solutions of problem 4.3.2. Then,

$$\langle u \rangle_h = \langle u^{(0)} \rangle_h + \langle u^{(1)} \rangle_h \epsilon + O(\epsilon^2). \quad (4.18)$$

In other words, the reconstructed solution $\langle u^{(0)} \rangle_h + \langle u^{(1)} \rangle_h \epsilon$ is an approximation of order $O(\epsilon^2)$ of the averaged exact solution $\langle u \rangle_h$.

Corollaire 4.3.3 – motion by slices

Under the same assumptions than the above theorem 4.3.2, let us assume in addition that $\mathbf{j} = \nu \nabla u + \mathbf{m}$, where $\nu > 0$ and \mathbf{m} is a vector field that does not depend on ∇u .

If \mathbf{m} expands as $\mathbf{m} = \mathbf{m}^{(0)} + \mathbf{m}^{(1)}\epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2)$, $q^{(-1)} = 0$ and $\nu = \mathbf{O}(1)$, then

$$\frac{\partial u^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = 0.$$

Démonstration. By construction, $j_3^{(-1)} = \nu \partial u^{(0)} / \partial x_3^{(1)}$. The result follows then from (4.16a). ■

Remarque 4.3.I – no-slip condition: More generally, if \mathbf{m} expands as $\mathbf{m} = \mathbf{m}^{(-1)}/\epsilon + \mathbf{m}^{(0)} + \mathbf{m}^{(1)}\epsilon + \mathbf{m}^{(2)}\epsilon^2 + \mathbf{O}(\epsilon^3)$ and $\nu = \mathbf{O}(\epsilon^n)$, with $n \in \{0, \dots, 3\}$, then

$$\frac{\partial u^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \frac{1}{\nu} (q^{(n-1)} - m_3^{(n-1)}), \text{ that is } \langle u^{(0)} \rangle_h = u^{(0)}(x_3 = 0) + \frac{h^{(1)}}{2\nu} q^{(n-1)} - \left\langle \int_0^{x_3} \frac{1}{\nu} m_3^{(n-1)} dx_3 \right\rangle_h. \quad (4.19)$$

Instead of the Neumann boundary condition (4.12b), we could consider a Dirichlet condition on u . In that case, we do no more have information on the normal flux $\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}$ on the substrate. This could be a difficulty since this term is involved in the right-hand-side of (4.17). Note that a popular case of such Dirichlet condition is the no-slip condition on the substrate, which is the starting point of lubrication shallow models. In that case, there is no more motion by slices, but this asymptotic expansion still allows to obtain an explicit expression of the zeroth order depth average of u . Moreover, from (4.16b) and under assumption $\mathcal{H}^{(k)}$ (see lemma 4.3.1), it is possible to extend the result to any $k \in \{-1, 0, 1\}$ as

$$\langle u^{(k+1)} \rangle_h = u^{(k+1)}(x_3 = 0) + \frac{h^{(1)}}{2\nu} q^{(n+k)} - \left\langle \int_0^{x_3} \frac{1}{\nu} m_3^{(n+k)} dx_3 \right\rangle_h, \quad (4.20)$$

See e.g. [BC99, section 3.1] or [BSS14] for practical examples of lubrication problems.

Corollaire 4.3.4 – asymptotic analysis of the pressure

For any $i \in \{1, 2, 3\}$, assume the i -th component of a vector field \mathbf{u} is solution of a problem of the form (4.12) with vector flux $(\sigma_{ij})_{1 \leq j \leq 3}$ and operator \mathcal{A}_i . Assume in addition that these three problems satisfy the expansion (4.13). Assume also that the tensor flux writes $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - \Pi \boldsymbol{\delta}$, where $\boldsymbol{\tau}$ is a tensor field and Π is a scalar field, called the pressure, both of them being of order at most $\mathbf{O}(1/\epsilon)$. Then the depth average of

the pressure Π is given by

$$\begin{aligned}\langle \Pi^{(-1)} \rangle_h &= \langle \tau_{33}^{(-1)} \rangle_h - q^{(-1)}, \\ \langle \Pi^{(k+1)} \rangle_h &= \langle \tau_{33}^{(k+1)} \rangle_h - q^{(k+1)} - \left\langle \int_{x_3}^h (\operatorname{div}_s \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)} - \mathcal{A}_3^{(k)}) dx_3 \right\rangle_h - \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)}(x_3 = h) \cdot \nabla_s h^{(1)},\end{aligned}$$

for any $k \in \{-1, 0, 1\}$.

Démonstration. The first result is immediate from (4.16a). From (4.15b), we get

$$\frac{\partial \Pi^{(k+1)}}{\partial x_3} = \frac{\partial \tau_{33}^{(k+1)}}{\partial x_3} + \operatorname{div}_s \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)} - \mathcal{A}_3^{(k)},$$

and then, by integrating between x_3 and h

$$\Pi^{(k+1)}(x_3 = h) - \Pi^{(k+1)} = \tau_{33}^{(k+1)}(x_3 = h) - \tau_{33}^{(k+1)} + \int_{x_3}^h (\operatorname{div}_s \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)} - \mathcal{A}_3^{(k)}) dx_3.$$

From the Neumann boundary condition (4.15d), we obtain the relation

$$\tau_{33}^{(k+1)}(x_3 = h) - \Pi^{(k+1)}(x_3 = h) = \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)}(x_3 = h) \cdot \nabla_s h^{(1)} + q^{(k+1)}.$$

A depth integration allows then to conclude. ■

Remarque 4.3.II – simplifications : If $\mathbf{\tau}_{3s}^{(k)}$ is independent upon x_3 , we have the much simpler result

$$\langle \Pi^{(k+1)} \rangle_h = \langle \tau_{33}^{(k+1)} \rangle_h - q^{(k+1)} - \operatorname{div}_s (h^{(1)} \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)}) + \frac{h^{(1)}}{2} \operatorname{div}_s \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)} + \left\langle \int_{x_3}^h \mathcal{A}_3^{(k)} dx_3 \right\rangle_h.$$

Similarly, if $\mathcal{A}_3^{(k)}$ is also independent of x_3 , we have the even simpler result

$$\langle \Pi^{(k+1)} \rangle_h = \langle \tau_{33}^{(k+1)} \rangle_h - q^{(k+1)} - \operatorname{div}_s (h^{(1)} \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)}) + \frac{h^{(1)}}{2} \operatorname{div}_s \mathbf{\tau}_{3s}^{(k)} + \frac{h^{(1)}}{2} \mathcal{A}_3^{(k)}.$$

4.3.3. Time derivatives

The aim of this section is to derive the depth average of the time derivatives that we introduced in Section 4.2.2, namely the material derivative D/Dt and the vector and tensor Gordon-Schowalter derivatives $\mathcal{D}_a/\mathcal{D}t$, and express them as functions of their equivalents

in the plane Ω . We will do so under the assumptions that lead to motion by slices (see corollary 4.3.3) :

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}, \quad (4.22)$$

and the fact that the velocity field \mathbf{v} is divergence-free (incompressibility) and satisfies to the no-penetration constraint on the substrate. To exploit this, we will first need to perform the asymptotic analysis of the divergence-free condition.

Divergence-free condition

Let us start by the asymptotic analysis of the divergence-free condition

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (4.23)$$

under the boundary conditions

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \iff v_3 = 0 \text{ on } \Sigma_s, \quad (4.24a)$$

$$\frac{D_s h}{Dt} = v_3 \text{ on } \Sigma_f(t), \quad (4.24b)$$

where we noted $\frac{D_s}{Dt} := \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v}_s \cdot \nabla_s)$ the material derivative advected by the velocity \mathbf{v}_s .

Proposition 4.3.5 – averaged vertical velocity

Assume that \mathbf{v} is divergence-free and that the property of motion by slices (4.22) and the boundary conditions (4.24) are satisfied. Then the vertical velocity v_3 is given by:

$$v_3 = -\operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)})x_3 - \langle \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) \rangle_{x_3} \epsilon + O(\epsilon^3), \text{ that is } v_3^{(1)} = -\operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)})x_3^{(1)}. \quad (4.25)$$

Démonstration. Note that $\operatorname{div} \mathbf{v} = \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s + \partial v_3 / \partial x_3 = 0$. Therefore, the result follows directly from an integration of the equation (4.23) using the hypothesis of motion by slices and the boundary condition (4.24a). ■

Corollaire 4.3.6 – averaged free surface evolution

Under the same conditions as in the above proposition, the height h is solution of the equation

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \operatorname{div}_s(h\mathbf{v}_s^{(0)}) + \operatorname{div}_s(h\langle \mathbf{v}_s^{(1)} \rangle_h) \epsilon = O(\epsilon^3). \quad (4.26)$$

Démonstration. Immediate from proposition 4.3.5, corollary 4.6.3 (see appendix 4.6) and boundary condition (4.24b). ■

By identification, we immediately obtain the equation satisfied by the height at order $O(\epsilon)$:

$$\frac{\partial h^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div}_s(h^{(1)} \mathbf{v}_s^{(0)}) = 0. \quad (4.27)$$

Solving (4.27) instead of (4.26) leads to an error of order $O(\epsilon)$ since¹ $h/\epsilon = h^{(1)} + O(\epsilon)$.

Lagrangian derivative

The depth average of the Lagrangian derivative is expressed as a function of the planar material derivative, advected by the velocity $\mathbf{v}_s^{(0)}$, noted

$$\frac{D_s^{(0)} \varphi}{Dt} := \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{v}_s^{(0)} \cdot \nabla_s) \varphi,$$

for any scalar field φ defined in $\Omega \times \mathbb{R}_+$. It extends componentwise to any vector or tensor field. Thanks to the new mass conservation law (4.26), we deduce the

Proposition 4.3.7 – averaged Lagrangian derivative

Assume that \mathbf{v} is divergence-free and that the property of motion by slices (4.22) and the boundary conditions (4.24) are satisfied. Then, any scalar field u defined in $\mathcal{B} \times \mathbb{R}_+$ satisfies the relation

$$\left\langle \frac{Du}{Dt} \right\rangle_h = \frac{D_s^{(0)} \langle u \rangle_h}{Dt} + O(\epsilon), \quad (4.28)$$

Moreover, if we assume $\operatorname{cov}_h(\nabla_s u, \mathbf{v}_s^{(1)}) = O(\epsilon)$, then we have a better approximation :

$$\left\langle \frac{Du}{Dt} \right\rangle_h = \frac{D_s^{(0)} \langle u \rangle_h}{Dt} + (\langle \mathbf{v}_s^{(1)} \rangle_h \cdot \nabla_s) \langle u \rangle_h \epsilon + O(\epsilon^2), \quad (4.29)$$

Démonstration. We show this property in the second case, the first result being independent of the assumption $\operatorname{cov}_h(\nabla_s u, \mathbf{v}_s^{(1)}) = O(\epsilon)$. The calculation is performed in two steps, by noting that $D/Dt = D_s/Dt + v_3 \partial/\partial x_3 = D_s/Dt + v_3^{(1)} \partial/\partial x_3^{(1)} + O(\epsilon)$ and by using the linearity of the operator $\langle \cdot \rangle_h$.

1. Two direct applications of the Leibniz formula (corollary 4.6.2 in appendix 4.6) and

1. As a reminder, the height was scaled by the characteristic length L , not by the characteristic height H , as mentioned in section 4.3.1.

one of the formula (4.10c) gives

$$\begin{aligned}
 h \left\langle \frac{D_s u}{D t} \right\rangle_h &= \frac{D_s^{(0)}}{D t} (h \langle u \rangle_h) - u(x_3 = h) \frac{D_s^{(0)} h}{D t} + h \langle (\mathbf{v}_s^{(1)} \cdot \nabla_s) u \rangle_h \epsilon + O(\epsilon^3) \\
 &= h \left(\frac{D_s^{(0)} \langle u \rangle_h}{D t} + (\langle \mathbf{v}_s^{(1)} \rangle_h \cdot \nabla_s) \langle u \rangle_h \epsilon \right) + h \text{cov}_h(\nabla_s u, \mathbf{v}_s^{(1)}) \epsilon \\
 &\quad + (\langle u \rangle_h - u(x_3 = h)) \left(\frac{D_s^{(0)} h}{D t} + (\langle \mathbf{v}_s^{(1)} \rangle_h \cdot \nabla_s) h \epsilon \right) + O(\epsilon^3).
 \end{aligned}$$

2. A direct application of the appendix formula (4.46e), after expansion of the vertical velocity using the proposition 4.3.5 and use of the hypothesis of motion by slices, gives

$$\begin{aligned}
 h \left\langle v_3 \frac{\partial u}{\partial x_3} \right\rangle_h &= -(h \text{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} + h \langle \text{div}_s \mathbf{v}_s^{(1)} \rangle_h \epsilon) \left\langle x_3 \frac{\partial u}{\partial x_3} \right\rangle_h + O(\epsilon^3) \\
 &= (h \text{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} + h \langle \text{div}_s \mathbf{v}_s^{(1)} \rangle_h \epsilon) (\langle u \rangle_h - u(x_3 = h)) + O(\epsilon^3).
 \end{aligned}$$

The sum of the two above results and the application of equality (4.26) allow to conclude. ■

This result still holds true when replacing u with a vector or a tensor field, in particular with the velocity field \mathbf{v} .

Gordon-Schowalter derivative of a vector

First, the depth average of the Gordon-Schowalter derivative of a vector is expressed as a function of its plane equivalent, with respect to the zeroth-order planar velocity $\mathbf{v}_s^{(0)}$:

$$\frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \mathbf{w}_s}{\mathcal{D} t} := \frac{D_s^{(0)} \mathbf{w}_s}{D t} - \mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \cdot \mathbf{w}_s - a \mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \cdot \mathbf{w}_s, \quad (4.30)$$

for any planar vector \mathbf{w}_s defined in $\Omega \times \mathbb{R}_+$.

Théorème 4.3.8 – Gordon-Schowalter derivative of a vector

Let \mathbf{u} be a vector field defined in $\mathcal{B} \times \mathbb{R}_+$ such that $\text{var}_h(\mathbf{u}) = O(\epsilon)$ (closure assumption). Assume that \mathbf{v} is divergence-free and that the property of motion by slices (4.22) and the boundary conditions (4.24) are satisfied. Then the depth-average of

the Gordon-Schowalter derivative of \mathbf{u} is given by

$$\begin{aligned} \left(\left\langle \frac{\mathcal{D}_a \mathbf{u}}{\mathcal{D}t} \right\rangle_h \right)_s &= \frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \langle \mathbf{u}_s \rangle_h}{\mathcal{D}t} - \frac{1+a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} u_3 \right\rangle_h - \left(\langle [\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) + a\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)})] \cdot \mathbf{u}_s \rangle_h \right. \\ &\quad \left. + \frac{1+a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} u_3 \right\rangle_h + \frac{(1-a)h^{(1)}}{4} \langle u_3 \rangle_h \nabla_s \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} \right) \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2), \end{aligned} \quad (4.31a)$$

$$\begin{aligned} \left(\left\langle \frac{\mathcal{D}_a \mathbf{u}}{\mathcal{D}t} \right\rangle_h \right)_3 &= \frac{\mathbf{D}_s^{(0)} \langle u_3 \rangle_h}{\mathbf{D}t} + \frac{1-a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \mathbf{u}_s \right\rangle_h + a \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \langle u_3 \rangle_h \\ &\quad + \left(\frac{1-a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \mathbf{u}_s \right\rangle_h + \frac{(1+a)h^{(1)}}{4} \nabla_s \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} \cdot \langle \mathbf{u}_s \rangle_h + a \langle \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) u_3 \rangle_h \right) \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.31b)$$

Démonstration. Recall that

$$\frac{\mathcal{D}_a \mathbf{u}}{\mathcal{D}t} := \frac{\mathbf{D}\mathbf{u}}{\mathbf{D}t} - \mathbf{W}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} - a\mathbf{D}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{u}.$$

As in the previous demonstration, we will treat each of the terms separately, and we use the previous result for the first term. The expansions (4.7), (4.8) and 4.9 applied to the velocity field, and the motion by slices assumption lead to

$$\begin{aligned} 2\mathbf{W}(\mathbf{v}) &= \begin{pmatrix} 2\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + 2\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(1)})\epsilon & \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + \left(\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} - \nabla_s v_3^{(1)} \right) \epsilon \\ \left(\nabla_s v_3^{(1)} - \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \epsilon - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} - \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} & 0 \end{pmatrix} + \mathbf{O}(\epsilon^2), \\ 2\mathbf{D}(\mathbf{v}) &= \begin{pmatrix} 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)})\epsilon & \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + \left(\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} + \nabla_s v_3^{(1)} \right) \epsilon \\ \left(\nabla_s v_3^{(1)} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \epsilon + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} & 2 \frac{\partial v_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + 2 \frac{\partial v_3^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \epsilon \end{pmatrix} + \mathbf{O}(\epsilon^2). \end{aligned}$$

Therefore, the second and third terms in the definition of the Gordon-Schowalter derivative

are

$$\mathbf{W}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \cdot \mathbf{u}_s + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} u_3 + \left(\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) \cdot \mathbf{u}_s + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \frac{u_3}{2} - \nabla_s v_3^{(1)} \frac{u_3}{2} \right) \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2) \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \mathbf{u}_s + \frac{\epsilon}{2} \left(\nabla_s v_3^{(1)} - \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \cdot \mathbf{u}_s + \mathbf{O}(\epsilon^2) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{v}) \cdot \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \cdot \mathbf{u}_s + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} u_3 + \left(\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) \cdot \mathbf{u}_s + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \frac{u_3}{2} + \nabla_s v_3^{(1)} \frac{u_3}{2} \right) \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2) \\ \frac{1}{2} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \mathbf{u}_s + \frac{\partial v_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} u_3 + \left(\frac{1}{2} \left[\nabla_s v_3^{(1)} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right] \cdot \mathbf{u}_s + \frac{\partial v_3^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} u_3 \right) \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2) \end{pmatrix},$$

where we used the proposition 4.3.5. Depth averaging is easily done using the motion by slices assumption. However, it is necessary to treat the terms consisting in a product of two terms, a priori dependent on the coordinate x_3 , carefully. We deal with the term $u_3 \nabla_s v_3^{(1)} = -x_3^{(1)} \nabla_s \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) u_3$ for the example, whose average can be calculated through $\langle x_3^{(1)} u_3 \rangle_h$. By successively applying the formulas (4.10c) and (4.11), we get

$$\langle x_3^{(1)} u_3 \rangle_h = \frac{h^{(1)}}{2} \langle u_3 \rangle_h + \operatorname{cov}_h(x_3^{(1)}, u_3) \approx \frac{h^{(1)}}{2} \langle u_3 \rangle_h.$$

The closure assumption allows then to prove the approximation since, from the result (4.10a) and the formula (4.11),

$$\left| \operatorname{cov}_h(x_3^{(1)}, u_3) \right|^2 \leq \operatorname{var}_h(x_3^{(1)}) \operatorname{var}_h(u_3) = \frac{h^{(1)^2}}{12} \operatorname{var}_h(u_3) = \mathbf{O}(\epsilon).$$

The linearity of $\langle \cdot \rangle_h$ and the proposition 4.3.7 on the asymptotic analysis of the Lagrangian derivative finally lead to the conclusion. ■

Remarque 4.3.III – average of a product: The expression of the depth-average of the Gordon-Schowalter derivative involves averages of products, which is not desirable for closing the reduced problem: we would prefer instead a product of averaged quantities. The simplification of those products is actually case-dependent: one at least of the two quantities involved by the product should be independent upon x_3 . For instance, either the first-order planar velocity $\mathbf{v}_s^{(1)}$ or the vector field \mathbf{u} involved by the Gordon-Schowalter derivative should be independent upon x_3 .

Gordon-Schowalter derivative of a tensor

Then, the depth average of the Gordon-Schowalter derivative of a tensor is expressed as a function of its plane equivalent, with respect to the zeroth-order planar velocity $\mathbf{v}_s^{(0)}$:

$$\frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \boldsymbol{\sigma}_{ss}}{\mathcal{D}t} := \frac{D_s^{(0)} \boldsymbol{\sigma}_{ss}}{Dt} - 2 \operatorname{sym} [\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss} - a \mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{ss}], \quad (4.32)$$

for any planar tensor $\boldsymbol{\sigma}_{ss}$ in $\Omega \times \mathbb{R}_+$.

Théorème 4.3.9 – Gordon-Schowalter derivative of a tensor

Let $\boldsymbol{\tau}$ be a symmetric tensor field defined in $\mathcal{B} \times \mathbb{R}_+$, whose zeroth order vertical variation with respect to ϵ is negligible, that is $\operatorname{var}_h(\boldsymbol{\tau}^{(0)}) = O(\epsilon)$ (closure assumption). Assume that \mathbf{v} is divergence-free and that the property of motion by slices (4.22) and the boundary conditions (4.24) are satisfied. Then the depth-average of the Gordon-Schowalter derivative of $\boldsymbol{\tau}$ is given by

$$\begin{aligned} \left(\left\langle \frac{\mathcal{D}_a \boldsymbol{\tau}}{\mathcal{D}t} \right\rangle_h \right)_{ss} &= \frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \langle \boldsymbol{\tau}_{ss} \rangle_h}{\mathcal{D}t} - (1+a) \operatorname{sym} \left(\left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \otimes \boldsymbol{\tau}_{3s} \right\rangle_h \right) \\ &\quad - \operatorname{sym} \left(\left\langle \{ \mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) + a \mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) \} \cdot \boldsymbol{\tau}_{ss} \right\rangle_h + (1+a) \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \otimes \boldsymbol{\tau}_{3s} \right\rangle_h \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1-a)h^{(1)}}{2} \nabla_s \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} \otimes \langle \boldsymbol{\tau}_{3s} \rangle_h \right) \epsilon + O(\epsilon^2), \quad (4.33a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\left\langle \frac{\mathcal{D}_a \boldsymbol{\tau}}{\mathcal{D}t} \right\rangle_h \right)_{s3} &= \frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \langle \boldsymbol{\tau}_{s3} \rangle_h}{\mathcal{D}t} + \frac{1-a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \boldsymbol{\tau}_{ss} \right\rangle_h - \frac{1+a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \boldsymbol{\tau}_{33} \right\rangle_h \\ &\quad + a \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) \langle \boldsymbol{\tau}_{s3} \rangle_h + \left\{ - \left\langle [\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) + a \mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)})] \cdot \boldsymbol{\tau}_{s3} \right\rangle_h \right. \\ &\quad \left. + \frac{h^{(1)}}{4} [(1+a) \langle \boldsymbol{\tau}_{ss} \rangle_h - (1-a) \langle \boldsymbol{\tau}_{33} \rangle_h \mathbf{I}_{ss}] \cdot \nabla_s \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1-a}{2} \left\langle \boldsymbol{\tau}_{ss} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right\rangle_h - \frac{1+a}{2} \left\langle \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \boldsymbol{\tau}_{33} \right\rangle_h + a \langle \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) \boldsymbol{\tau}_{3s} \rangle_h \right\} \epsilon + O(\epsilon^2), \quad (4.33b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \left(\left\langle \frac{\mathcal{D}_a \boldsymbol{\tau}}{\mathcal{D}t} \right\rangle_h \right)_{33} &= \frac{D_s^{(0)} \langle \boldsymbol{\tau}_{33} \rangle_h}{Dt} + (1-a) \left\langle \frac{\partial \boldsymbol{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \boldsymbol{\tau}_{s3} \right\rangle_h + 2a \operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}) \langle \boldsymbol{\tau}_{33} \rangle_h \\
 &+ \left[\left\langle \left(\frac{(1+a)h^{(1)}}{2} \nabla_s \operatorname{div}_s \boldsymbol{v}_s^{(0)} + (1-a) \frac{\partial \boldsymbol{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \cdot \boldsymbol{\tau}_{s3} \right\rangle_h + 2a \langle \operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(1)}) \boldsymbol{\tau}_{33} \rangle_h \right] \epsilon + O(\epsilon^2),
 \end{aligned} \tag{4.33c}$$

Démonstration. By noticing that we just need to develop the expression of the tensor product $(\mathbf{W}(\boldsymbol{v}) + a\mathbf{D}(\boldsymbol{v})) \cdot \boldsymbol{\tau}$ and to use the decomposition

$$2 \operatorname{sym}(\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta}) = \begin{pmatrix} 2 \operatorname{sym}(\boldsymbol{\xi}_{ss} \cdot \boldsymbol{\zeta}_{ss} + \boldsymbol{\xi}_{s3} \otimes \boldsymbol{\zeta}_{3s}) & \boldsymbol{\xi}_{ss} \cdot \boldsymbol{\zeta}_{s3} + \boldsymbol{\xi}_{3s} \cdot \boldsymbol{\zeta}_{ss} + \boldsymbol{\xi}_{s3} \boldsymbol{\zeta}_{33} + \boldsymbol{\xi}_{33} \boldsymbol{\zeta}_{3s} \\ 2(\boldsymbol{\xi}_{3s} \cdot \boldsymbol{\zeta}_{s3} + \boldsymbol{\xi}_{33} \boldsymbol{\zeta}_{33}) & \end{pmatrix},$$

we can return to the proof of the previous theorem and conclude. ■

4.4. Examples

4.4.1. From Navier-Stokes equations to viscous shallow water equations

Problem statement

The constitutive equation of an incompressible Newtonian fluid write :

$$\boldsymbol{\sigma} = 2\eta \mathbf{D}(\boldsymbol{v}) - \Pi \boldsymbol{\delta}, \tag{4.34}$$

where $\boldsymbol{\sigma}$ is the symmetric Cauchy stress tensor and Π a contribution to the pressure. The constant material parameter is the viscosity $\eta > 0$. These constitutive equations are coupled with standard conservation of mass (4.35a) and momentum (4.35b) equations. Assuming that the density ρ is constant, *i.e.* the fluid is incompressible, the conservation equations write :

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0, \tag{4.35a}$$

$$\rho \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = \rho \mathbf{g}, \tag{4.35b}$$

where $\mathbf{g} = -g \hat{\mathbf{u}}$ is the constant gravity vector, with $\hat{\mathbf{u}}$ some given unit vector. The previous set of equations is closed by initial and boundary conditions. For the latter, we use, on the free surface, the conditions (4.4) with no surface tension ($\gamma = 0$), and, on the substrate, the conditions (4.6) with no friction ($k = 0$).

Asymptotic analysis

With $\Sigma := \eta U/L$ as characteristic stress, the dimensionless problem writes :

Problème 4.4.1 – Navier stokes equations. Find \mathbf{v} defined in Ω such that

$$Re \frac{D\mathbf{v}}{Dt} - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = -\frac{Re}{Fr^2} \hat{\mathbf{u}}, \quad (4.36a)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad (4.36b)$$

with $\boldsymbol{\sigma} = 2\mathbf{D}(\mathbf{v}) - \Pi\boldsymbol{\delta}$, where $Re := \rho UL/\eta$ is the Reynolds number and $Fr := U/\sqrt{gL}$ is the Froude number.

The same notation is used for dimensioned and dimensionless field for convenience.

We would like to use the framework developed in section 4.3.2 to get a shallow formulation of the above Navier-Stokes problem. To do so, $\mathcal{A}(u)$ is identified with $ReDv_i/Dt + (Re/Fr^2)\hat{u}_i$ and j with $(\sigma_{ij})_{1 \leq j \leq 3}$, for i successively taken in $\{1, 2, 3\}$. Then, the condition of motion by slices is satisfied, up to order 1 at least, for each component of the velocity, thanks to corollary 4.3.3. As a consequence, the rate of deformation expands with respect to ϵ as

$$2\mathbf{D}(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -2\operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)}) & \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} - \nabla_s \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} x_3^{(1)} \\ \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} - \nabla_s \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)\top} x_3^{(1)} & -2\operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(1)} \end{pmatrix} \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (4.37)$$

where we used proposition 4.3.5.

Following the literature, we make the fundamental assumption that $Re/Fr^2 = \mathcal{O}(1/\epsilon)$. Therefore, due to the form of the deformation rate tensor (4.37), applying the corollary 4.3.4 leads to

$$\Pi^{(-1)} = 0, \quad \langle \Pi^{(0)} \rangle_h = -2\operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + \frac{\hat{u}_3}{2} \frac{Re}{Fr^2} h^{(1)}. \quad (4.38)$$

We can now apply theorem 4.3.2, proposition 4.3.7 and corollary 4.3.6 to get a shallow formulation of the above Navier-Stokes problem.

Problème 4.4.2 – Shallow water equations. Find $\mathbf{v}_s^{(0)}$ and $h^{(1)}$ defined in Ω such that

$$\frac{\partial h^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div}_s(h^{(1)}\mathbf{v}_s^{(0)}) = 0, \quad (4.39a)$$

$$Re h^{(1)} \frac{D_s^{(0)} \mathbf{v}_s^{(0)}}{Dt} - \operatorname{div}_s(h^{(1)} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_h) = -\frac{\epsilon Re}{Fr^2} h^{(1)} \hat{\mathbf{u}}, \quad (4.39b)$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_h = 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + 2\operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)})\boldsymbol{\delta}_{ss} - \frac{\hat{u}_3}{2} \frac{Re}{Fr^2} h^{(1)} \boldsymbol{\delta}_{ss}. \quad (4.39c)$$

This reduced model was first obtained in 2006 by Marche [Mar07] after substantial formal calculations. In comparison, our approach requires less than one page. Solving

problem 4.4.2 instead of problem 4.4.1 leads to an error of order $O(\epsilon)$ on velocity and height (cf. theorem 4.3.2 or end of section 4.3.3).

4.4.2. Maxwell viscoelastic model

We use the constitutive equations of a Maxwell viscoelastic fluid (4.1) along with initial and boundary conditions. For the latter, we use, on the free surface, the conditions (4.4) with no surface tension ($\gamma = 0$), and, on the substrate, the conditions (4.6) with no friction ($k = 0$).

With $\Sigma := \eta U/L$ again as characteristic stress, the dimensionless problem writes :

Problème 4.4.3 – Maxwell model. Find \boldsymbol{v} and $\boldsymbol{\tau}$ defined in Ω such that

$$Re \frac{D\boldsymbol{v}}{Dt} - \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = - \frac{Re}{Fr^2} \hat{\boldsymbol{u}}, \quad (4.40a)$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0, \quad (4.40b)$$

$$We \frac{\mathcal{D}_1 \boldsymbol{\tau}}{Dt} + \boldsymbol{\tau} = 2\mathbf{D}(\boldsymbol{v}), \quad (4.40c)$$

with $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\tau} - \Pi \boldsymbol{\delta}$, where $We := \lambda U/L$ is the Weissenberg number.

The same notation is used for dimensioned and dimensionless field for convenience.

Sufficient conditions for the motion by slices

With the help of our formalism, we can derive a new sufficient condition for the motion by slices in the context of the Maxwell model :

Corollaire 4.4.1 – motion by slices for the Maxwell model

Let $\boldsymbol{\tau}$ be the elastic stress defined in the Maxwell model (4.1), and assume that it expands as $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}^{(0)} + \boldsymbol{\tau}^{(1)}\epsilon + O(\epsilon^2)$ and that the Weissenberg number We is of order $O(1)$, then

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \frac{\partial \boldsymbol{u}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}.$$

Démonstration. Let us write the components $s3$ and 33 of the equation (4.40c) :

$$We \left(\frac{D\boldsymbol{\tau}_{s3}}{Dt} - \tau_{33} \frac{\partial \boldsymbol{v}_s}{\partial x_3} - \left(\nabla_s \boldsymbol{v}_s + \frac{\partial \boldsymbol{v}_3}{\partial x_3} \boldsymbol{\delta} \right) \cdot \boldsymbol{\tau}_{s3} - \boldsymbol{\tau}_{ss} \cdot \nabla_s \boldsymbol{v}_3 \right) + \boldsymbol{\tau}_{s3} = \frac{\partial \boldsymbol{v}_s}{\partial x_3} + \nabla_s \boldsymbol{v}_3, \quad (*.1a)$$

$$We \left(\frac{D\boldsymbol{\tau}_{33}}{Dt} - 2\nabla_s \boldsymbol{v}_3 \cdot \boldsymbol{\tau}_{s3} - 2 \frac{\partial \boldsymbol{v}_3}{\partial x_3} \boldsymbol{\tau}_{33} \right) + \boldsymbol{\tau}_{33} = 2 \frac{\partial \boldsymbol{v}_3}{\partial x_3}. \quad (*.1b)$$

By assumption, we know the only term of order $O(1/\epsilon)$ in (*.1a) satisfies

$$-We \tau_{33}^{(0)} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}}. \quad (*.1c)$$

Now, $We = 0$ leads to the result. Assume the opposite and that $\tau_{33}^{(0)} = -1/We$. Then, from equation (*.1b), we have

$$\tau_{33}^{(0)} = -\frac{1}{We} = 0 \quad (*.2)$$

since $-2We \tau_{33}^{(0)} = 2$ and $2\nabla_s v_3 \cdot \tau_{s3}$ is at most of order $O(\epsilon)$. This leads to a contradiction: $\tau_{33}^{(0)}$ cannot be uniformly constant equal to $-1/We$. We finally conclude from (*.1c) that $\partial \mathbf{v}_s^{(0)} / \partial x_3^{(1)} = \mathbf{0}$. Note that if $\tau_{33}^{(0)} = 0$ is assumed, then the proof is still valid.

Hypothesis $\mathcal{H}^{(-1)}$ is satisfied then, from lemma 4.3.1, there holds $\sigma_{s3}^{(0)} = \mathbf{0}$, which leads to $\tau_{s3}^{(0)} = \mathbf{0}$, and then, from (*.1a)

$$(We \tau_{33}^{(0)} + 1) \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}, \quad (*.3)$$

which leads to the second result, since $\tau_{33}^{(0)}$ cannot be uniformly constant equal to $-1/We$. ■

Asymptotic analysis

In what follows, we assume that the asymptotic expansion of τ is of the form $\tau = \tau^{(0)} + \tau^{(1)}\epsilon + \tau^{(2)}\epsilon^2 + O(\epsilon^3)$, whereas Re/Fr^2 is of order $O(1/\epsilon)$, as in the previous example. Corollary 4.4.1 ensures that the property of motion by slices is satisfied.

Momentum equation – Asymptotic. The asymptotic analysis of the momentum equation has already been done in the previous example. Similar to what was done to deduce the pressure in the previous example, the zeroth order of the averaged pressure is given by $\langle \Pi^{(0)} \rangle_h = \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h + \hat{u}_3 \epsilon Re / (2Fr^2) h^{(1)}$, whence

$$\langle \sigma_{ss}^{(0)} \rangle_h = \langle \tau_{ss}^{(0)} \rangle_h - \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h \delta_{ss} - \frac{\hat{u}_3 \epsilon Re}{2 Fr^2} h^{(1)} \delta_{ss}. \quad (4.41)$$

In addition, assumption $\mathcal{H}^{(-1)}$ (see lemma 4.3.1) is satisfied for both planar velocity components, then

$$\sigma_{s3}^{(0)} = \tau_{s3}^{(0)} = \mathbf{0}. \quad (4.42)$$

Maxwell equation – Asymptotic. Taking into account the very last result (4.42) and applying theorem 4.3.9 and proposition 4.3.5 lead to the shallow formulation of the Maxwell

equation (4.1) :

$$We \frac{\mathcal{D}_1^{(0)} \langle \boldsymbol{\tau}_{ss}^{(0)} \rangle_h}{\mathcal{D}t} + \langle \boldsymbol{\tau}_{ss}^{(0)} \rangle_h = 2\mathbf{D}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}), \quad (4.43a)$$

$$We \left(\frac{D_s^{(0)} \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h}{Dt} + 2 \operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}) \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h \right) + \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h = -2 \operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}). \quad (4.43b)$$

Remarque 4.4.I: From a microscopic perspective, it is known [BAH87, p. 90] that the elastic stress can be expressed in terms of the conformation tensor $\mathbf{c} \propto \langle \boldsymbol{\ell} \otimes \boldsymbol{\ell} \rangle$ defined as an average over all possible directions $\boldsymbol{\ell}$ of molecules constituting the considered fluid :

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\eta}{\lambda} (\mathbf{c} - \mathbf{\delta}). \quad (4.44)$$

On the reasonable assumption that $\boldsymbol{\ell}$ expands with respect to ϵ as $\boldsymbol{\ell} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}(1) \\ \mathbf{O}(\epsilon) \end{pmatrix}$, we deduce a possible expansion for the conformation tensor as $\mathbf{c} = \begin{pmatrix} \mathbf{O}(1) & \mathbf{O}(\epsilon) \\ \mathbf{O}(\epsilon) & \mathbf{O}(\epsilon^2) \end{pmatrix}$. Thus, at zeroth order, the component 33 of the elastic stress reads $\tau_{33}^{(0)} = -1/We$, but it would lead to the contradiction $-1/We = 0$, according to equation (4.43b). If this expansion does not work for \mathbf{c} , does it at least work for $\boldsymbol{\tau}$? Assume $\tau_{33}^{(0)} = 0$, then $\operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}) = 0$ from equation (4.43b). If this does not lead to a contradiction, it implies a strong physical constraint, which does not hold in most situations. We therefore understand that the order with respect to ϵ of a given quantity (here $\boldsymbol{\tau}$) must be componentwise at least of the order of the second member (here $\mathbf{D}(\boldsymbol{v})$).

Summary. The shallow formulation of the Maxwell problem writes

Problème 4.4.4 – Reduced Maxwell model. Find $\boldsymbol{v}_s^{(0)}$, $h^{(1)}$, $\langle \boldsymbol{\tau}_{ss}^{(0)} \rangle_h$ and $\langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h$ defined in Ω such that

$$\frac{\partial h^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div}_s(h^{(1)} \boldsymbol{v}^{(0)}) = 0, \quad (4.45a)$$

$$Re h^{(1)} \frac{D_s^{(0)} \boldsymbol{v}_s^{(0)}}{Dt} - \operatorname{div}_s(h^{(1)} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_h) = -\frac{\epsilon Re}{Fr^2} h^{(1)} \hat{\mathbf{u}}_s, \quad (4.45b)$$

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_h = \langle \boldsymbol{\tau}_{ss}^{(0)} \rangle_h - \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h \mathbf{\delta}_{ss} - \frac{\hat{u}_3}{2} \frac{Re}{Fr^2} h^{(1)} \mathbf{\delta}_{ss}, \quad (4.45c)$$

$$We \frac{\mathcal{D}_1^{(0)} \langle \boldsymbol{\tau}_{ss}^{(0)} \rangle_h}{\mathcal{D}t} + \langle \boldsymbol{\tau}_{ss}^{(0)} \rangle_h = 2\mathbf{D}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}), \quad (4.45d)$$

$$We \left(\frac{D_s^{(0)} \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h}{Dt} + 2 \operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}) \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h \right) + \langle \tau_{33}^{(0)} \rangle_h = -2 \operatorname{div}_s(\boldsymbol{v}_s^{(0)}). \quad (4.45e)$$

It is consistent with what has been derived in [BB13]. When $We = 0$, it reduces to the same asymptotic (4.39) as the Navier-Stokes equation. Solving problem 4.4.4 instead of problem 4.4.3 leads to an error of order $O(\epsilon)$ on velocity, height and all other averaged quantities (cf. theorem 4.3.2 or end of section 4.3.3).

4.5. Conclusion

A new framework for asymptotic analysis has been presented in this paper. We have proposed a set of tools for performing thin-layer approximations of free-surface fluid models with flat topography and no-penetration boundary condition. The motion by slices is no more an arbitrary assumption, and minimal assumptions for obtaining it have been pointed out. Moreover, for the first time, to the best of our knowledge, the first-order expansion of the Gordon-Schowalter derivatives has been developed. The proposed framework makes it possible to clarify the necessary assumptions and to simplify the asymptotic analysis of a wide variety of partial differential equations from continuum physics, whether they are scalar, vector or tensor, with objective derivative and/or diffusive, reactive or advective terms. This framework has been illustrated by two applications : the Navier-Stokes and the Maxwell models. In perspective, a generalisation of this work would be to consider here an arbitrary topography, following the work made in [BW04] for the Saint-Venant system.

4.6. Appendix : Leibniz formulas

Proposition 4.6.1 – Leibniz's Integral Rule

Let X and I be two intervals of \mathbb{R} and $f : (x, t) \in X \times I \mapsto f(x, t) \in \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}^*$, a sufficiently smooth function. Let also a and b two differentiable functions defined from X to I . Then the parameterized integral function F , defined in X by

$$F(x) = \int_{a(x)}^{b(x)} f(x, t) dt,$$

is differentiable and

$$F'(x) = \int_{a(x)}^{b(x)} \frac{\partial f}{\partial x} dt + f(x, b(x))b'(x) - f(x, a(x))a'(x).$$

Corollaire 4.6.2 – Leibniz's Integral Rule for depth average

Let \mathcal{L} be a first order differential linear operator, depending only on partial derivatives ∂_t , ∂_{x_1} and ∂_{x_2} . For any sufficiently smooth scalar field φ , the following formula is satisfied :

$$\mathcal{L}(h\langle\varphi\rangle_h) = h\langle\mathcal{L}\varphi\rangle_h + \varphi(x_3 = h)\mathcal{L}h. \quad (4.46a)$$

Corollaire 4.6.3

For any sufficiently smooth vector field \mathbf{u} , the following formulas are satisfied :

$$\operatorname{div}_s(h\langle\mathbf{u}\rangle_h) = h\langle\operatorname{div}_s \mathbf{u}\rangle_h + \mathbf{u}_s(x_3 = h) \cdot \nabla_s h, \quad (4.46b)$$

$$\Delta_s(h\langle\mathbf{u}\rangle_h) = h\langle\Delta_s \mathbf{u}\rangle_h + 2\nabla_s \mathbf{u}_s(x_3 = h) \cdot \nabla_s h + \mathbf{u}_s(x_3 = h)\Delta_s h, \quad (4.46c)$$

$$h\langle\Delta_s \mathbf{u}\rangle_h = \operatorname{div}_s(h\langle\nabla_s \mathbf{u}\rangle_h) - \nabla_s \mathbf{u}_s(x_3 = h) \cdot \nabla_s h. \quad (4.46d)$$

We close this section by giving a last relation that will be useful :

$$\langle x_3 \partial_{x_3} \varphi \rangle_h + \langle \varphi \rangle_h = \varphi(x_3 = h). \quad (4.46e)$$

Chapitre

Construction du modèle de migration cellulaire collective

5

Dans ce chapitre, nous moyennons en épaisseur le modèle tridimensionnel obtenu au chapitre 3. Les cellules sont considérées incompressibles en trois dimensions, mais comme elles peuvent s'étaler sur le substrat, le système bidimensionnel est compressible ; nous en présentons également une version incompressible. Nous proposons ensuite une analyse thermodynamique a posteriori des équations moyennées en épaisseur, dans le but d'obtenir une méthode de construction du modèle moyenné plus directe, basée sur l'équivalent moyenné du potentiel de dissipation et de l'énergie libre, dont les ingrédients peuvent être modifiés directement, sans avoir à réécrire les équations constitutives et l'analyse asymptotique. Grâce à cette méthode, nous ajoutons deux nouveaux ingrédients au modèle compressible, qu'il aurait été plus difficile d'obtenir à partir du modèle tridimensionnel.

Table des matières

5.1. Approximation en couche mince	87
5.2. Analyse thermodynamique a posteriori des équations moyennées en épaisseur	96
5.3. Modèle retenu	107
5.4. Conclusion	112

5.1. Approximation en couche mince

Dans le cadre de cette thèse, nous cherchons à modéliser le mouvement collectif dans les épithéliums à surface libre, qui sont des monocouches minces de cellules. La migration peut alors être considérée bidimensionnelle. Du point de vue théorique comme numérique, les problèmes bidimensionnels sont bien plus simples. Dans cette section, nous réalisons donc une approximation en couche mince des équations du problème 3.3.2 en exploitant le faible ratio $\epsilon = H/L \ll 1$ qui existe entre l'épaisseur du tissu et sa longueur. Mathématiquement,

nous pratiquons une analyse asymptotique à l'aide des outils théoriques développés dans le chapitre 4. Ce faisant, nous obtenons deux modèles s'exprimant uniquement sur les composantes dans le plan des différents champs à l'ordre 0 : l'un incompressible, ce qui revient à considérer que le tissu est à épaisseur uniforme (ou à densité constante), et l'autre compressible. Ce sont ces modèles que nous étudions dans les chapitres suivants.

5.1.1. Position du problème

Considérons un épithélium en migration et occupant un volume donné $\mathcal{B}(\xi) \subset \mathbb{R}^3$, que nous définissons comme une partie ouverte bornée de l'espace physique en trois dimensions \mathbb{R}^3 , caractérisé par son épaisseur ξ . Nous supposons que la migration a lieu en surface libre sur un substrat solide bidimensionnel et plan Ω , dont la rigidité est suffisante pour permettre le mouvement, et à une vitesse inconnue \mathbf{v} . La surface libre est notée $\Sigma_f(\xi(t))$, où $\xi(x_1, x_2, t)$ représente donc l'épaisseur du tissu au point $(x_1, x_2) \in \Omega$ au temps t . Finalement, nous ne formulons aucune hypothèse sur les bords verticaux $\Sigma(\xi)$ du domaine, permettant ainsi d'imaginer tout type de géométries, même les plus complexes.

Pour résumer, le domaine de migration et sa frontière sont respectivement définis par

$$\mathcal{B}(\xi) := \Omega \times \Sigma_f(\xi), \quad (5.1a)$$

$$\partial \mathcal{B}(\xi) := \Sigma_s \sqcup \Sigma_f(\xi) \sqcup \Sigma(\xi), \quad (5.1b)$$

$$\Sigma_s := \Omega \times \{0\}, \quad (5.1c)$$

$$\Sigma_f(\xi) := \Omega \times \{\xi\}, \quad (5.1d)$$

$$\Sigma(\xi) := \partial \Omega \times \Sigma_f(\xi), \quad (5.1e)$$

où \sqcup désigne une union disjointe. Un exemple d'une telle géométrie est présenté sur la figure 5.1.

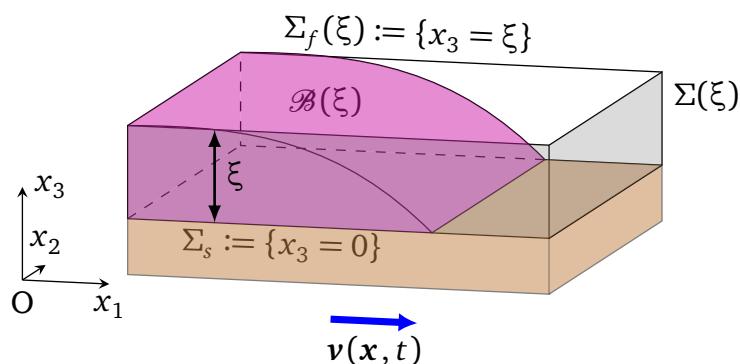


FIGURE 5.1. – Géométrie simplifiée du domaine de migration du tissu.

5.1.2. Conditions aux limites

Comme nous considérons une migration bidimensionnelle à surface libre, nous reprenons les conditions aux limites données dans la section 4.2.3, valables sur la surface libre et sur le substrat.

Sur la surface libre, nous ne supposons pas qu'il y ait une tension de surface, donc nous choisissons simplement $\gamma = 0$ dans (4.4a). Nous ajoutons en plus une condition de Neumann homogène pour la polarité. En résumé, nous avons

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \nu_1 \frac{\partial \xi}{\partial x_1} + \nu_2 \frac{\partial \xi}{\partial x_2} = \nu_3, \quad (5.2a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}, \quad (5.2b)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0}. \quad (5.2c)$$

L'équation (5.2a) est une condition cinématique de surface libre et (5.2b) traduit l'équilibre des forces sur la surface libre. Remarquons que la condition (5.2c) est cohérente avec la condition (2.39c) demandée pour respecter le second principe (voir la remarque 2.4.I).

Sur le substrat, de manière similaire à (4.6) et suivant [AT19] (section 1.3.6), nous prenons

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (5.3a)$$

$$(\boldsymbol{\sigma}^T)_{nt} = f_a \mathbf{p}_t - k \mathbf{v}_t, \quad (5.3b)$$

$$k_p \ell_p^2 \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0}. \quad (5.3c)$$

La condition (5.3b) exprime un bilan des forces à l'équilibre sur le substrat, comme l'illustre la figure 5.2. On retrouve la partie tangentielle du vecteur des contraintes normales $(\boldsymbol{\sigma}^T)_{nt}$, donc celles de cisaillement, contrebalancée par une force active $f_a := f_a \mathbf{p}_t$, que l'on suppose colinéaire à la polarité, et une force de frottement fluide proportionnelle à la vitesse, où $f_a > 0$ et $k > 0$ sont respectivement les coefficients de force active et de frottement. Cette condition aux limites est essentielle. C'est elle qui caractérise l'interaction principale entre les cellules et le substrat et qui permet d'introduire une force active au système, celle-là même qui pourra être à même d'amener le système hors équilibre, au sens thermodynamique du terme. Par ailleurs, c'est l'analyse asymptotique que nous nous apprêtons à réaliser qui va permettre de faire remonter cet équilibre des forces dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement.

5.1.3. Adimensionnement

Puisque les équations tridimensionnelles ont déjà été adimensionnées dans la section 3.3.2, nous adimensionnons également la géométrie et l'épaisseur du tissu. On note ρ_s la masse surfacique du tissu dans le plan, que l'on définit comme le produit de

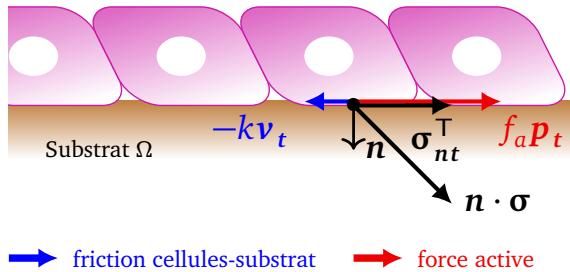


FIGURE 5.2. – Illustration de l’interaction cellules-substrat. La force active tend à créer le mouvement, la friction à le freiner.

la masse volumique (qui est pour rappel uniforme) par l’épaisseur du tissu, soit $\rho_s := \rho\xi$. Si on utilise comme grandeur caractéristique associée $H\rho$, alors on obtient après adimensionnement, $\rho_s/(H\rho) = \xi/H$, ce qui signifie que la masse surfacique adimensionnée, que nous appellerons densité, coïncide avec l’épaisseur adimensionnée. Dans l’optique d’utiliser le plus possible des notations usuelles pour désigner les quantités physiques en jeu, nous utiliserons donc dans la suite la densité en lieu et place de l’épaisseur adimensionnée.

Nous introduisons également quelques nouveaux nombres sans dimension, issus des conditions aux limites exprimées dans la section 5.1.2 précédente. Nous reprenons pour cela les notations de la section 3.3.2.

- $T_a := (f_a L)/(\eta V)$: la traction active matérialise la compétition entre force active et forces visqueuses.
- $C_F := kL/\eta$: le coefficient de friction caractérise le frottement du tissu avec le substrat, ce qui a tendance à le freiner dans son mouvement. Puisque C_F est sans dimension, cela montre que η/k est homogène à une longueur.

Remarquons que deux grandeurs non polaires jouent un rôle dissipatif, ce qui tend à freiner le mouvement du tissu ; il s’agit de la contrainte caractéristique S et la friction caractéristique kV . Nous aurions ainsi pu plutôt introduire la dissipation totale $S + kV$ et définir le nombre sans dimension $\beta = kV/(S + kV) = kL/(\eta + kL) \in]0, 1[$, qui représente la proportion de friction dans la dissipation totale. Les adimensionnements utilisant respectivement S et $S + kV$ comme contrainte caractéristique sont équivalents et il est possible de passer de l’un à l’autre en remarquant que $C_F = \beta/(1 - \beta)$ ou $\beta = C_F/(1 + C_F)$.

5.1.4. Hypothèses

Nous formulons les hypothèses suivantes :

(H1) Chacune des inconnues du problème 3.3.2 admet un développement de Taylor par

rapport à ϵ de la forme

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^{(0)} + \mathbf{v}^{(1)}\epsilon + \mathbf{v}^{(2)}\epsilon^2 + \mathbf{O}(\epsilon^3), \quad (5.4a)$$

$$\Pi = \Pi^{(0)} + \Pi^{(1)}\epsilon + \Pi^{(2)}\epsilon^2 + \mathbf{O}(\epsilon^3), \quad (5.4b)$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^{(0)} + \mathbf{p}^{(1)}\epsilon + \mathbf{p}^{(2)}\epsilon^2 + \mathbf{O}(\epsilon^3), \quad (5.4c)$$

$$\rho_s = \rho_s^{(1)}\epsilon + \rho_s^{(2)}\epsilon^2 + \mathbf{O}(\epsilon^3). \quad (5.4d)$$

Nous négligeons en plus les composantes verticales de la vitesse et de la polarité à l'ordre 0, c'est-à-dire $v_3^{(0)} = 0$ et $p_3^{(0)} = 0$.

(H2) Le terme d'ordre 2 de la polarité est indépendant de x_3 , c'est-à-dire

$$\frac{\partial \mathbf{p}^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}. \quad (5.5)$$

(H3) $C_F = C_F^{(1)}\epsilon$ et $T_a = T_a^{(1)}\epsilon$, avec $C_F^{(1)} = \mathbf{O}(1)$ et $T_a^{(1)} = \mathbf{O}(1)$. Par défaut, tous les autres nombres sans dimension sont en $\mathbf{O}(1)$.

5.1.5. Mouvement en bloc

Lemme 5.1.1

Les termes d'ordre 0 et 1 des composantes planaires de la polarité sont indépendants de x_3 . Autrement dit,

$$\frac{\partial \mathbf{p}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \frac{\partial \mathbf{p}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}. \quad (5.6)$$

Démonstration. À l'aide du théorème 4.3.8, remarquons en premier lieu que, puisque l'hypothèse de mouvement en bloc n'a pas encore été démontrée, le terme d'ordre le plus élevé (en $\mathbf{O}(1/\epsilon)$ dans ce cas) de $\mathbf{q} := \text{Pe} \mathbf{p} + (|\mathbf{p}|^2 - 1) \mathbf{p}$ est

$$-\frac{a+1}{2} \text{Pe} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} p_3^{(0)} \quad (*.1)$$

pour les composantes planaires, et

$$-\frac{a-1}{2} \text{Pe} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \mathbf{p}_s^{(0)} \quad (*.2)$$

pour la composante verticale. Or par (H1), $p_3^{(0)} = 0$, donc $\mathbf{q}_s = \mathbf{O}(1)$, mais $q_3 = \mathbf{O}(1/\epsilon)$. Ainsi, l'hypothèse $\mathcal{H}^{(0)}$ (voir la définition 4.3.3) est satisfaite pour les composantes horizontales de l'équation d'évolution de la polarité (3.18c).

On conclut avec le corollaire 4.3.3 appliqué composante par composante à l'équation d'évolution de la polarité (3.18c), sous l'hypothèse (H1) du développement asymptotique (5.4). ■

Lemme 5.1.2 – Développement asymptotique de $\nabla p^\top \cdot \nabla p$

Le développement asymptotique de $\nabla p^\top \cdot \nabla p$ par rapport à ϵ est donné par

$$\nabla p^\top \cdot \nabla p = \begin{pmatrix} (\nabla_s p_s^{(0)})^\top \cdot \nabla_s p_s^{(0)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \left| \frac{\partial p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} \right|^2 \end{pmatrix} + \mathbf{O}(\epsilon). \quad (5.7)$$

Démonstration. À l'aide de la décomposition

$$\nabla p = \begin{pmatrix} \nabla_s p_s & \frac{\partial p_s}{\partial x_3} \\ \nabla_s p_3^\top & \frac{\partial p_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}, \quad (*.1)$$

on en déduit que

$$\nabla p^\top \cdot \nabla p = \begin{pmatrix} \nabla_s p_s^\top \cdot \nabla_s p_s + \nabla_s p_3 \otimes \nabla_s p_3 & \nabla_s p_s^\top \cdot \frac{\partial p_s}{\partial x_3} + \nabla_s p_3^\top \frac{\partial p_3}{\partial x_3} \\ \frac{\partial p_s}{\partial x_3} \cdot \nabla_s p_s + \frac{\partial p_3}{\partial x_3} \nabla_s p_3^\top & \left| \frac{\partial p_s}{\partial x_3} \right|^2 + \left| \frac{\partial p_3}{\partial x_3} \right|^2 \end{pmatrix} \quad (*.2)$$

Il suffit ensuite d'appliquer la décomposition de l'hypothèse (H1) et le lemme 5.1.1. ■

Dans la suite, nous notons par commodité $\ell = \ell(p)$.

Lemme 5.1.3 – Développement asymptotique de $\ell(p)$

Le développement asymptotique de ℓ par rapport à ϵ est donné par

$$\ell_s = B(|p_s^{(0)}|^2 - 1)p_s^{(0)} - \kappa^2 B \Delta_s p_s^{(0)} - \kappa^2 B \left(\Delta_s p_s^{(1)} + \frac{\partial^2 p_s^{(3)}}{\partial x_3^{(1)2}} \right) \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2), \quad (5.8a)$$

$$\ell_3 = -\kappa^2 B \frac{\partial^2 p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} \frac{1}{\epsilon} + \left[B(|p_s^{(0)}|^2 - 1)p_3^{(1)} - \kappa^2 B \left(\Delta_s p_s^{(1)} + \frac{\partial^2 p_s^{(3)}}{\partial x_3^{(1)2}} \right) \right] \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2). \quad (5.8b)$$

Démonstration. D'une part, puisque $|\mathbf{p}|^2 = |\mathbf{p}_s|^2 + p_3^2 = |\mathbf{p}_s^{(0)}|^2 + O(\epsilon)$, alors

$$(|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} = (|\mathbf{p}^{(0)}|^2 - 1)\mathbf{p}^{(0)} + [(|\mathbf{p}^{(0)}|^2 - 1)\mathbf{p}^{(1)} + 2(\mathbf{p}^{(0)} \cdot \mathbf{p}^{(1)})\mathbf{p}^{(0)}]\epsilon + O(\epsilon^2). \quad (*.1)$$

D'autre part,

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{p} &= \Delta_s \mathbf{p} + \frac{\partial^2 \mathbf{p}}{\partial x_3^2} \\ &= \frac{\partial^2 \mathbf{p}^{(0)}}{\partial x_3^{(1)2}} \frac{1}{\epsilon^2} + \frac{\partial^2 \mathbf{p}^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} \frac{1}{\epsilon} + \Delta_s \mathbf{p}^{(0)} + \frac{\partial^2 \mathbf{p}^{(2)}}{\partial x_3^{(1)2}} + \left(\Delta_s \mathbf{p}^{(1)} + \frac{\partial^2 \mathbf{p}^{(3)}}{\partial x_3^{(1)2}} \right) \epsilon + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (*.2)$$

On conclut avec le lemme 5.1.1, les hypothèses (H1) et (H2) et la définition (3.18h) de ℓ . ■

Proposition 5.1.4 – Mouvement en bloc

La migration du tissu se fait en bloc, c'est-à-dire

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}. \quad (5.9)$$

De plus,

$$\frac{\partial^2 p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} = 0. \quad (5.10)$$

Démonstration. De la même manière que dans la démonstration du lemme 5.1.1, nous écrivons le terme d'ordre -1 de l'équation d'évolution de la polarité (3.18c) à l'aide du lemme 5.1.3, ce qui donne la condition

$$-\frac{a-1}{2} Pe \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} \cdot \mathbf{p}_s^{(0)} - \kappa^2 \frac{\partial^2 p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} = 0. \quad (*.1)$$

D'après le lemme 4.3.1, on sait également que $\boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(-1)} = \mathbf{0}$. Or d'après (3.18d),

$$\boldsymbol{\sigma}_{3s} = \frac{\partial \mathbf{v}_s}{\partial x_3} + \frac{a+1}{2} p_3 \boldsymbol{\ell}_s + \frac{a-1}{2} \boldsymbol{\ell}_3 \mathbf{p}_s, \quad (*.2)$$

puis en appliquant les lemmes 5.1.2 et 5.1.3

$$\boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(-1)} = \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} - \kappa^2 B \frac{a-1}{2} \frac{\partial^2 p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} \mathbf{p}_s^{(0)}, \quad (*.3)$$

donc

$$\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \kappa^2 B \frac{a-1}{2} \frac{\partial^2 p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} \mathbf{p}_s^{(0)}. \quad (*.4)$$

En substituant cette expression de la dérivée partielle de la vitesse planaire dans (*.1), on obtient alors

$$-\kappa^2 \left(\frac{(a-1)^2}{4} \kappa^2 B P e |\mathbf{p}_s^{(0)}|^2 + 1 \right) \frac{\partial^2 p_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)2}} = 0, \quad (*.5)$$

d'où le second résultat de la proposition puis, à partir de (*.4), le premier. ■

5.1.6. Modèle moyenné en épaisseur

Proposition 5.1.5 – Expression du champ ℓ moyen

La moyenne dans l'épaisseur du champ ℓ est donnée par

$$\rho_s^{(1)} \langle \ell_s^{(0)} \rangle_{\rho_s} = \rho_s^{(1)} \ell_s^{(0)} = B \rho_s^{(1)} (|\mathbf{p}_s^{(0)}|^2 - 1) \mathbf{p}_s^{(0)} - \kappa^2 B \operatorname{div}_s (\rho_s^{(1)} \nabla_s \mathbf{p}_s^{(0)}). \quad (5.11)$$

Par commodité, nous notons $\ell(\rho_s^{(1)}, \mathbf{p}^{(0)}) = \rho_s^{(1)} \ell_s^{(0)}$ dans la suite.

Démonstration. C'est une conséquence directe des lemmes 5.1.1 et 5.1.3 et du théorème 4.3.2, en prenant en compte les conditions aux limites (5.2c) et (5.3c), dans lequel on a identifié $\mathcal{A}(u)$ à $(|\mathbf{p}|^2 - 1) p_i$ et \mathbf{j} à $\kappa^2 \nabla p_i$, pour i pris successivement dans $\{1, 2\}$. ■

Proposition 5.1.6 – Expression du tenseur des contraintes moyen

Le tenseur des contraintes moyen dans l'épaisseur du tissu est donné à l'ordre 0 par

$$\rho_s^{(1)} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} = \rho_s^{(1)} \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} = \rho_s^{(1)} \boldsymbol{\sigma}_{\text{visc},ss}^{(0)} + \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra},ss}^{(0)}(\rho_s^{(1)}, \mathbf{p}_s^{(0)}), \quad (5.12a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{visc},ss}^{(0)} = 2(\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + \operatorname{div}_s \mathbf{v}_s^{(0)} \boldsymbol{\delta}_{ss}), \quad (5.12b)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra},ss}^{(0)}(\rho_s^{(1)}, \mathbf{p}_s^{(0)}) &= \frac{a+1}{2} \mathbf{p}_s^{(0)} \otimes \ell(\rho_s^{(1)}, \mathbf{p}_s^{(0)}) + \frac{a-1}{2} \ell(\rho_s^{(1)}, \mathbf{p}_s^{(0)}) \otimes \mathbf{p}_s^{(0)} \\ &\quad - \kappa^2 B (\nabla_s \mathbf{p}_s^{(0)})^\top \cdot \nabla_s \mathbf{p}_s^{(0)}, \end{aligned} \quad (5.12c)$$

où $\ell_s(\rho_s^{(1)}, \mathbf{p}_s^{(0)})$ est défini par (5.11).

Démonstration. Un calcul direct à partir de (3.18d) (sans prendre en compte les

contraintes actives) et des lemmes 5.1.2 et 5.1.3 montre que

$$\sigma_{33}^{(0)} = -\Pi^{(0)} + \frac{\partial v_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + a p_3^{(0)} \ell_3^{(0)} = -\Pi^{(0)} + \frac{\partial v_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}}. \quad (*.1)$$

En appliquant ensuite la proposition 4.3.5 et la proposition 5.1.4, on obtient directement la pression moyennée à l'ordre 0 :

$$\Pi^{(-1)} = 0, \quad \langle \Pi^{(0)} \rangle_{\rho_s} = -2 \operatorname{div}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}). \quad (*.2)$$

On conclut à partir de (3.18d), des lemmes 5.1.1 et 5.1.2 et des propositions 5.1.4 et 5.1.5. ■

Problème 5.1.1 – Modèle de tissus moyenné en épaisseur. Trouver $v_s^{(0)}$, $\rho_s^{(1)}$ et $\mathbf{p}_s^{(0)}$ telles que

$$-\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)}(\boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)})^T) + C_F^{(1)} \mathbf{v}_s^{(0)} = T_a^{(1)} \mathbf{p}_s^{(0)} + \operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \boldsymbol{\sigma}_{a,ss}^{(0)}) \text{ dans } \Omega \times \mathbb{R}_+, \quad (5.13a)$$

$$\frac{\partial \rho_s^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_s^{(1)} \mathbf{v}_s^{(0)}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_+, \quad (5.13b)$$

$$\begin{aligned} Pe \rho_s^{(1)} \frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \mathbf{p}_s^{(0)}}{\mathcal{D}t} + \rho_s^{(1)} (|\mathbf{p}_s^{(0)}|^2 - 1) \mathbf{p}_s^{(0)} \\ - \kappa^2 \operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \nabla_s \mathbf{p}_s^{(0)}) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_+, \quad (5.13c)$$

où $\boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)}$ est défini dans la proposition 5.1.6 et $\frac{\mathcal{D}_a^{(0)} \mathbf{p}_s^{(0)}}{\mathcal{D}t}$ dans le théorème 4.3.8, et $\boldsymbol{\sigma}_{a,ss}^{(0)} = -S_a \mathbf{p}_s^{(0)} \otimes \mathbf{p}_s^{(0)}$.

Démonstration. La loi de conservation (3.18a) se moyenne directement grâce au théorème 4.3.2 et à l'hypothèse (H3).

La nouvelle loi de conservation de la masse est une conséquence du corollaire 4.3.6. L'équation d'évolution de la polarité, quant à elle, s'obtient en combinant les résultats de la proposition 5.1.5 et du théorème 4.3.8. ■

5.2. Analyse thermodynamique a posteriori des équations moyennées en épaisseur

Malgré le cadre théorique développé dans le chapitre 4 [SCS23], l'analyse asymptotique reste un procédé long et délicat, au vu du coût en calcul que cela implique, comme en témoigne la section précédente. De manière plus générale, lorsque l'on cherche à développer un modèle et que l'on est amené à modifier les ingrédients physiques à incorporer dans ce dernier, soit en changeant l'expression de l'énergie libre ou du potentiel de dissipation, soit en sélectionnant d'autres conditions aux limites, par exemple, alors on doit à nouveau calculer les différentielles le cas échéant (lemme 3.2.2) puis déterminer les équations constitutives (propositions 3.2.3 à 3.2.5), réaliser l'adimensionnement des équations (section 3.3.2) et enfin procéder à l'approximation en couche mince (section 5.1). Dans notre cas, cela correspond à environ quatorze pages de calculs, ce qui est non négligeable et favorable aux erreurs de calcul.

Dans le but de réduire le nombre d'étapes à réaliser à chaque fois qu'un changement dans le modèle est entrepris, nous proposons ici un moyennage dans l'épaisseur des équations constitutives directement, de sorte que seul le calcul des équations constitutives soit nécessaire à chaque modification d'un ingrédient physique.

5.2.1. Hypothèses

Nous gardons les mêmes notations que dans les sections suivantes et considérons toujours un fluide incompressible à surface libre, d'épaisseur/de densité ρ_s (nous rappelons que nous pratiquons toujours les analyses asymptotiques après adimensionnement) et évoluant dans le domaine $\mathcal{B}(\rho_s)$. Nous formulons les hypothèses suivantes :

- (H1) La vitesse (supposée à divergence nulle), la densité du tissu et l'énergie libre admettent un développement de Taylor par rapport à ϵ de la forme

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{(0)} + \boldsymbol{v}^{(1)}\epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2), \quad (5.14a)$$

$$\rho_s = \rho_s^{(1)}\epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2), \quad (5.14b)$$

$$\Psi = \Psi^{(0)} + \Psi^{(1)}\epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2). \quad (5.14c)$$

Comme dans la section précédente, nous négligeons en plus la composante verticale de la vitesse, c'est-à-dire $v_3^{(0)} = 0$.

- (H2) Le mouvement se fait en bloc aux ordres 0 et 1, c'est-à-dire

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} = \frac{\partial \boldsymbol{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} = \mathbf{0}. \quad (5.15)$$

- (H3) Les tenseurs des contraintes admettent respectivement chacun un développement de Taylor par rapport à ϵ de la forme

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{(-1)} \frac{1}{\epsilon} + \boldsymbol{\sigma}^{(0)} + \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2), \quad (5.16a)$$

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}^{(-1)} \frac{1}{\epsilon} + \boldsymbol{\mu}^{(0)} + \boldsymbol{\mu}^{(1)} \epsilon + \mathbf{O}(\epsilon^2). \quad (5.16b)$$

Nous supposons en outre que $\boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(-1)} = \mathbf{0}$, $\sigma_{33}^{(-1)} = 0$ et $\boldsymbol{\mu}_{s3}^{(-1)} = \mathbf{0}$ (par antisymétrie, on a aussi $\boldsymbol{\mu}_{3s}^{(-1)} = \mathbf{0}$).

- (H4) Les conditions aux limites (5.2a), (5.2b) et (5.3a) sont satisfaites. De plus, pour tout $i \in \{0, 1\}$, $\boldsymbol{\omega}^{(i)}(x_3 = \rho_s) = \mathbf{0}$.
- (H5) La moyenne en épaisseur d'un produit est approximativement égale au produit des moyennes en épaisseur (hypothèse de fermeture). Plus précisément, si on note φ et χ deux champs de scalaires représentant les composantes deux à deux conjuguées de n'importe quelle quantité impliquée dans l'inégalité de Clausius-Duhem (3.4), alors on suppose que

$$\sqrt{\text{var}_{\rho_s}(\varphi) \text{var}_{\rho_s}(\chi)} = \mathbf{O}(\epsilon), \quad (5.17)$$

où $\text{var}_{\rho_s} \cdot$ est une notation introduite dans la définition 4.3.2. En conséquence, d'après la formule de König-Huygens (4.10c) et l'inégalité de Cauchy-Schwarz (4.10a), on a

$$|\langle \varphi \chi \rangle_{\rho_s} - \langle \varphi \rangle_{\rho_s} \langle \chi \rangle_{\rho_s}| = |\text{cov}_{\rho_s}(\varphi, \chi)| \leq \sqrt{\text{var}_{\rho_s}(\varphi) \text{var}_{\rho_s}(\chi)} = \mathbf{O}(\epsilon). \quad (5.18)$$

Ainsi, on a l'approximation

$$\langle \varphi \chi \rangle_{\rho_s} = \langle \varphi \rangle_{\rho_s} \langle \chi \rangle_{\rho_s} + \mathbf{O}(\epsilon). \quad (5.19)$$

L'hypothèse (5.17) signifie donc que les variations verticales des variables φ et χ autour de leurs moyennes en épaisseur respectives sont de l'ordre de ϵ . Nous en avons notamment besoin pour traiter les moyennes des produits qui apparaissent dans l'inégalité de Clausius-Duhem (2.37).

L'hypothèse (H3) fait écho à la remarque 4.4.I: le tenseur des contraintes est conjugué au tenseur taux de déformation via l'inégalité de Clausius-Duhem, donc nous lui avons choisi un développement asymptotique analogue à celui que l'on obtient par calcul pour

$\mathbf{D}(\mathbf{v})$. Nous rappelons son développement jusqu'au premier ordre ainsi que celui de $\mathbf{W}(\mathbf{v})$:

$$2\mathbf{W}(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + 2\mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(1)})\epsilon & \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + \left(\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} - \nabla_s v_3^{(1)} \right) \epsilon \\ \left(\nabla_s v_3^{(1)} - \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \epsilon - \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} - \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} & 0 \end{pmatrix} + \mathbf{O}(\epsilon^2),$$

$$2\mathbf{D}(\mathbf{v}) = \begin{pmatrix} 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(0)}) + 2\mathbf{D}_s(\mathbf{v}_s^{(1)})\epsilon & \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + \left(\frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} + \nabla_s v_3^{(1)} \right) \epsilon \\ \left(\nabla_s v_3^{(1)} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \right) \epsilon + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(0)}}{\partial x_3^{(1)}} + \frac{\partial \mathbf{v}_s^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} & 2 \frac{\partial v_3^{(1)}}{\partial x_3^{(1)}} + 2 \frac{\partial v_3^{(2)}}{\partial x_3^{(1)}} \epsilon \end{pmatrix} + \mathbf{O}(\epsilon^2).$$

Remarquons qu'avec l'hypothèse (H2) de mouvement en bloc, on pourrait d'ores et déjà éliminer les termes en $\mathbf{O}(1/\epsilon)$ et certains $\mathbf{O}(1)$. Dans la suite, on note $\mathbf{D} := \mathbf{D}(\mathbf{v})$ et $\mathbf{W} := \mathbf{W}(\mathbf{v})$ par commodité.

5.2.2. Lois de conservation

Loi de conservation de la masse

En vertu des hypothèses (H1) et (H2) et du corollaire 4.3.6, la condition d'incompressibilité (3.1) est remplacée à l'ordre 0 par

$$\frac{\partial \rho_s^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \mathbf{v}_s^{(0)}) = 0. \quad (5.21)$$

Loi de conservation de la quantité de mouvement

En vertu des hypothèses (H1) et (H4) et du théorème 4.3.2, la loi de conservation de la quantité de mouvement (3.2) est remplacée à l'ordre 0 par

$$-\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s}) = -\boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(1)}(x_3 = 0). \quad (5.22)$$

Dans la section 5.1, nous avons appliqué la condition aux limites (5.3b) pour remplacer $-\boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(1)}(x_3 = 0)$ par la différence de la force active et du frottement fluide. Ici, nous ne faisons pas cette hypothèse pour rester général.

Enfin, puisque l'hypothèse $\mathcal{H}^{(-1)}$ est satisfaite pour la troisième composante de la loi de conservation de la quantité de mouvement, on vérifie à l'aide du lemme 4.3.1 que

$$\boldsymbol{\sigma}_{33}^{(0)} = 0. \quad (5.23)$$

Loi de conservation du moment cinétique

De la proposition C.2.1, on tire la loi de conservation du moment cinétique moyennée en épaisseur à l'ordre 0 :

$$\operatorname{curl}(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s}) + \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{12}^{(0)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{21}^{(0)} \rangle_{\rho_s}) = 0. \quad (5.24)$$

De manière similaire à ce que l'on avait obtenu dans la proposition 2.3.1, on peut montrer qu'en 2D aussi,

$$\rho_s^{(1)} \operatorname{skw} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} = \mathbf{W}_s (\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s}). \quad (5.25)$$

5.2.3. Analyse asymptotique de l'inégalité de Clausius-Duhem

Théorème 5.2.1 – Analyse asymptotique de l'inégalité de Clausius-Duhem

Sous les hypothèses de la section 5.2.1, l'inégalité de Clausius-Duhem moyennée en épaisseur s'écrit à l'ordre 0

$$-\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \Psi^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx + \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \operatorname{sym} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} : \mathbf{D}_{ss}^{(0)} dx - \int_{\Omega} 2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s} \cdot \mathbf{k}_s^{(0)} dx \geq 0. \quad (5.26)$$

Démonstration. Les outils utiles à la démonstration sont donnés dans l'annexe C.

Commençons par remarquer que pour tout champ de scalaires,

$$\int_{\mathcal{B}(\rho_s)} \varphi dx = \int_{\Omega} \left(\int_0^{\rho_s} \varphi dx_3 \right) dx_s = \int_{\Omega} \rho_s \langle \varphi \rangle_{\rho_s} dx. \quad (*.1)$$

Ainsi, l'inégalité de Clausius-Duhem (2.37) devient à l'aide de la propriété A.1.8

$$-\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_s \langle \Psi \rangle_{\rho_s} dx + \int_{\Omega} \rho_s \langle \operatorname{sym} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{D} \rangle_{\rho_s} dx - \int_{\Omega} 2\rho_s \langle \mathbf{m} \cdot \mathbf{k} \rangle_{\rho_s} dx \geq 0. \quad (*.2)$$

Par linéarité des produits scalaires et en utilisant les hypothèses (H1), (H3) et (H5), on

obtient alors

$$\begin{aligned}
 & -\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \Psi^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx + \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{sym} \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} : \langle \mathbf{D}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx \\
 & + \sum_{\substack{i,j=-1 \\ -1 \leq i+j \leq 0}}^1 \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s} + \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \cdot \langle \mathbf{D}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} dx + \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \boldsymbol{\sigma}_{33}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle \mathbf{D}_{33}^{(j)} \rangle_{\rho_s} dx \\
 & - \int_{\Omega} 2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s} \cdot \langle \mathbf{k}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx - \sum_{\substack{i,j=-1 \\ -1 \leq i+j \leq 0}}^1 \int_{\Omega} 2\rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle k^{(j)} \rangle_{\rho_s} dx + O(\epsilon) \geq 0. \quad (*.3)
 \end{aligned}$$

On réécrit alors le dernier terme en appliquant la proposition C.3.2 et l'hypothèse (H4), ce qui donne pour tous entiers i et j dont la somme vaut soit -1 soit 0 ,

$$\int_{\Omega} -2\rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle k^{(j)} \rangle_{\rho_s} dx = \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_h - \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_h) \cdot \langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} dx. \quad (*.4)$$

Or, d'après (5.20) et (5.20) et par hypothèse (H2) de mouvement en bloc, $\langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} + \langle \mathbf{D}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} = \mathbf{0}$ pour tout $j \in \{-1, 0, 1\}$. De même, $\langle \mathbf{D}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} - \langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} = \langle \nabla_s \boldsymbol{\nu}_3^{(j)} \rangle_{\rho_s} = \mathbf{0}$ dès que $j \in \{-1, 0, 1\}$ par (H1). Donc en premier lieu

$$\begin{aligned}
 & (\langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s} + \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \cdot \langle \mathbf{D}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} + (\langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_h - \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_h) \cdot \langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} \\
 & = \langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot (\langle \mathbf{D}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} + \langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s}) + \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot (\langle \mathbf{D}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} - \langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s}) = 0, \quad (*.5)
 \end{aligned}$$

puis, en second lieu, (*.3) devient

$$\begin{aligned}
 & -\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \Psi^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx + \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{sym} \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} : \langle \mathbf{D}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx + \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \boldsymbol{\sigma}_{33}^{(0)} \rangle_{\rho_s} \langle \mathbf{D}_{33}^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx \\
 & - \int_{\Omega} 2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s} \cdot \langle \mathbf{k}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s} dx + O(\epsilon) \geq 0. \quad (*.6)
 \end{aligned}$$

On conclut à l'aide de (5.23) et en remarquant que, par hypothèse (H2) de mouvement en bloc, $\langle \mathbf{D}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s} = \mathbf{D}_{ss}^{(0)}$ et, en vertu de la proposition 4.3.5,

$$\langle \mathbf{D}_{33}^{(0)} \rangle_{\rho_s} = \mathbf{D}_{33}^{(0)} = -\operatorname{div}_s \boldsymbol{\nu}_s^{(0)} = -\operatorname{tr} \mathbf{D}_{ss}^{(0)} = -\boldsymbol{\delta} : \mathbf{D}_{ss}^{(0)}. \quad (*.7)$$

■

5.2.4. Équations constitutives

Tenseur de Hencky

Les développements précédents se sont faits indépendamment du choix des variables constitutives du modèle. Pourtant, comme on l'a vu dans la section 2.2.2, le tenseur de Hencky joue un rôle fondamental dans la construction des équations constitutives. Nous proposons donc de montrer, dans les grandes lignes, que le tenseur $\langle \mathbf{h}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s}$ constitue bien le remplaçant naturel du tenseur de Hencky tridimensionnel à l'issu d'une analyse asymptotique. Une démonstration devrait être possible en repartant de la définition du tenseur de Hencky (théorème 2.2.2).

Comme dans le chapitre 4, on pourrait déduire naturellement en cascade les développements asymptotiques du gradient de la transformation (voir [Sar24, section 2.1]), du tenseur de Cauchy-Green à gauche (voir [Sar24, définition 2.14]) puis du tenseur de Hencky (voir [Sar24, définition 3.5]). Nous ne détaillons pas le procédé car nous n'avons pas pris la peine d'introduire ces concepts plus tôt. Mais, comme pour le tenseur taux de déformation \mathbf{D} (5.20), on obtient un développement de la forme

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} \mathbf{h}_{ss}^{(0)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & h_{33}^{(0)} \end{pmatrix} + \mathbf{O}(\epsilon). \quad (5.27)$$

Nous montrons maintenant que $h_{33}^{(0)}$ n'est pas une quantité indépendante de $\mathbf{h}_{ss}^{(0)}$ pour un fluide incompressible. En effet, d'après [Sar24, équation (3.18)], puisque l'on a supposé la masse volumique uniforme, $\text{tr } \mathbf{h} = \text{tr } \mathbf{h}_{ss} + h_{33} = 0$. On obtient donc directement

$$h_{33}^{(0)} = -\text{tr } \mathbf{h}_{ss}^{(0)}. \quad (5.28)$$

Nous conjecturons que toutes les propriétés vérifiées par \mathbf{h} le sont aussi par $\langle \mathbf{h}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s}$, à ϵ près. En particulier,

$$\rho_s^{(1)} = \rho_{s,0}^{(1)} \exp(-\text{tr} \langle \mathbf{h}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s}), \quad (5.29)$$

ce qui montre que $\rho_s^{(1)}$ ne peut pas être considérée comme une variable thermodynamique interne indépendante. Mais cette propriété est aussi intéressante parce qu'elle signifie que l'énergie libre $\langle \Psi^{(0)} \rangle_{\rho_s}$ peut dépendre de $\rho_s^{(1)}$, la densité du tissu, via $\langle \mathbf{h}_{ss}^{(0)} \rangle_{\rho_s}$, donc sans contrevéniir à des principes thermodynamiques.

Vecteur de courbure moyenne

Comme le tenseur de Hencky \mathbf{h} , le vecteur de courbure moyenne \mathbf{s} introduit dans la section 2.3.5 par le problème (2.26) a son importance dans l'écriture des équations constitutives générales des matériaux avec contraintes de couples (cf. (2.30) ou le théorème 2.4.3). Comme nous n'en avons qu'une définition indirecte, via le problème (2.26), nous nous contentons de supposer que son développement asymptotique suit celui de \mathbf{k} . Plus spécifiquement, au vu de l'inégalité de Clausius-Duhem réduite (5.26), nous considérons que $\langle \mathbf{s}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s}$ constitue un remplaçant naturel du vecteur \mathbf{s} à l'issu de l'analyse asymptotique.

Polarité

Dans la section 5.1.4, nous avons supposé que la composante verticale de \mathbf{p} était d'ordre ϵ . Nous ne revenons pas sur cette hypothèse et nous considérons donc comme unique variable thermodynamique interne bidimensionnelle valable le vecteur $\langle \mathbf{p}_s^{(0)} \rangle_{\rho_s}$. Nous avons démontré dans la section 5.1.5 que la polarité était indépendante de x_3 aux deux premiers ordres. Nous pourrions donc supposer ce résultat comme toujours vérifié dans le contexte de cette section, mais en réalité, cette hypothèse n'est pas nécessaire pour les raisonnements à suivre, dans la mesure où l'analyse asymptotique a déjà été menée à son terme. Elle pourrait par contre s'avérer utile si l'on voulait montrer la cohérence de l'expression à venir de l'énergie libre $\langle \Psi^{(0)} \rangle_{\rho_s}$ par rapport à celle de Ψ (3.8).

Énergie libre

À partir de cette section et jusqu'à la fin du document, toutes les quantités sont bidimensionnelles, en conséquence de quoi nous omettons tout indice s ou 3, tout exposant de la forme (i) et toute évocation au symbole $\langle \cdot \rangle_{\rho_s}$.

Nous adoptons les mêmes notations qu'en 3D pour les produits scalaires. Ainsi, les produits scalaires canoniques dans $L^2(\Omega)$, $L^2(\Omega)^2$ et $L^2(\Omega)^{2 \times 2}$, sont encore notés

$$(\varphi | \chi) = \int_{\Omega} \varphi \chi \, dx, \quad (\mathbf{p} | \mathbf{q}) = \int_{\Omega} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} \, dx, \quad (\boldsymbol{\tau} | \boldsymbol{\zeta}) = \int_{\Omega} \boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\zeta} \, dx. \quad (5.30)$$

Suivant les sections 2.3.5 et 2.4.1 et la section précédente sur le tenseur de Hencky, nous supposons que l'énergie libre Ψ est une fonctionnelle objective et isotrope de \mathbf{h} , de \mathbf{s} , de \mathbf{p} et de $\nabla \mathbf{p}$. Nous notons donc $\Psi = \Psi(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\gamma})$ dans l'optique de choisir $\boldsymbol{\gamma} = \nabla \mathbf{p}$. On note également

$$\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p}) = \int_{\Omega} \rho \Psi(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, dx, \quad (5.31)$$

où l'on rappelle que la densité ρ dépend explicitement du tenseur de Hencky via la relation (voir l'équation (5.29))

$$\rho = \rho_0 \exp(-\text{tr } \mathbf{h}). \quad (5.32)$$

Proposition 5.2.2 – Dérivée en temps de l'énergie libre totale

La dérivée en temps de l'énergie libre totale \mathcal{F} vérifie

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p})) &= \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} + a \operatorname{sym}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) - \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \Big| \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right) \\ &\quad + \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} - 2\rho \left(\mathbf{p}^\perp \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right)^\perp \Big| \mathbf{k} \right) + \left(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \mathbf{\bar{p}} \right) \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi \, ds - \int_{\partial \Omega} \rho \mathbf{p}^\perp \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds + \int_{\partial \Omega} \rho \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds, \quad (5.33) \end{aligned}$$

où $\mathbf{\bar{p}}$ désigne la dérivée de Gordon-Schowalter de paramètre $a \in \mathbb{R}$ (voir équation (2.7a)) et

$$\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) := \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} - \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right). \quad (5.34)$$

Démonstration. La démonstration est quasiment identique à celle de la proposition 2.4.1. Comme dans celle-ci, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p})) &= \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} + a \operatorname{sym}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) - \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \Big| \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right) \\ &\quad + \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \Big| \mathbf{k} \right) + (\operatorname{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \mid \mathbf{W}(\mathbf{v})) + \left(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \mathbf{\bar{p}} \right) \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi \, ds + \int_{\partial \Omega} \rho \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds. \quad (*.1) \end{aligned}$$

L'intégrale de surface

$$\int_{\partial \Omega} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi \, ds \quad (*.2)$$

apparaît en plus car la formule de Reynolds (B.14) utilisée pour la démonstration du théorème B.3.15 ne s'applique plus ici. Il faut donc la retrancher pour obtenir le résultat. On transforme ensuite le terme $(\operatorname{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \mid \mathbf{W}(\mathbf{v}))$. Par isotropie de Ψ par rapport à son argument \mathbf{p} , $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}}$ est colinéaire à \mathbf{p} , donc $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}} \otimes \mathbf{p}$ est symétrique, puis son produit scalaire avec $\mathbf{W}(\mathbf{v})$ est nul, par antisymétrie de ce dernier et d'après la proposition A.1.2. Ainsi, en

remarquant que, encore d'après la proposition A.1.2, $\text{skw}(\ell \otimes \mathbf{p}) : \mathbf{W}(\mathbf{v}) = (\ell_2 p_1 - \ell_1 p_2) \omega$

$$\begin{aligned} (\text{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) | \mathbf{W}(\mathbf{v})) &= \int_{\Omega} \text{skw} \left(\mathbf{p} \otimes \text{div} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \right) \right) : \mathbf{W}(\mathbf{v}) \, dx \\ &= \int_{\Omega} \left(p_2 \text{div} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_1} \Big|_{\gamma=\nabla p} \right) - p_1 \text{div} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_2} \Big|_{\gamma=\nabla p} \right) \right) \omega \, dx. \end{aligned}$$

On rappelle également que $\boldsymbol{\tau}_i$ représente la i -ème ligne du tenseur $\boldsymbol{\tau}$. On intègre ensuite par parties pour obtenir

$$\begin{aligned} (\text{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) | \mathbf{W}(\mathbf{v})) &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_2} \cdot \nabla [\omega p_1] - \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_1} \cdot \nabla [\omega p_2] \right) \, dx \\ &\quad + \int_{\partial \Omega} \rho \left(p_2 \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_1} \cdot \nabla \omega - p_1 \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_2} \cdot \nabla \omega \right) \, ds \\ &= \int_{\Omega} \rho \omega \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_2} \cdot \nabla p_1 - \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_1} \cdot \nabla p_2 \right) \, dx \tag{*3} \\ &\quad + \int_{\Omega} \rho \left(p_1 \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_2} \cdot \nabla \omega - p_2 \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_1} \cdot \nabla \omega \right) \, dx \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho \mathbf{p}^{\perp} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \cdot \mathbf{n} \, ds. \end{aligned}$$

Or, par isotropie de Ψ par rapport à son argument γ ,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_2} \Big|_{\gamma=\nabla p} \cdot \nabla p_1 - \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma_1} \Big|_{\gamma=\nabla p} \cdot \nabla p_2 = 0, \tag{*4}$$

donc

$$(\text{skw}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) | \mathbf{W}(\mathbf{v})) = \int_{\Omega} \rho \mathbf{p}^{\perp} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \cdot \nabla \omega \, dx - \int_{\partial \Omega} \rho \mathbf{p}^{\perp} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \Big|_{\gamma=\nabla p} \cdot \mathbf{n} \, ds. \tag{*5}$$

On conclut en remarquant que $\mathbf{p}^{\perp} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \cdot \nabla \omega = -(\mathbf{p}^{\perp} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma})^{\perp} \cdot \text{curl} \omega$, et en invoquant la définition de $\mathbf{k} = \frac{1}{2} \text{curl} \omega$. ■

Équations constitutives

Théorème 5.2.3 – Équations constitutives générales

Supposons que

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad (5.35a)$$

$$\left. \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \right|_{\gamma=\nabla p} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\Omega. \quad (5.35b)$$

Si $\Phi(\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{h}, \mathbf{p})$ est un potentiel de dissipation convexe, positif et tel que $\Phi(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{q}) = 0$ pour tout \mathbf{q} , alors les équations constitutives sont données par

$$\begin{aligned} \rho \operatorname{sym} \boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} - a \operatorname{sym}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) \\ + \rho \nabla \mathbf{p}^\top \cdot \left. \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \right|_{\gamma=\nabla p} \in \partial_{\mathbf{D}(\mathbf{v})} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{h}, \mathbf{p} \right], \end{aligned} \quad (5.36a)$$

$$2\rho \left[\left(\mathbf{p}^\perp \cdot \left. \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \right|_{\gamma=\nabla p} \right)^\perp - \frac{1}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} - \mathbf{m} \right] \in \partial_{\mathbf{k}} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{h}, \mathbf{p} \right], \quad (5.36b)$$

$$-\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \in \partial_{\mathbf{p}} \Phi \left[\mathbf{D}(\mathbf{v}), \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{h}, \mathbf{p} \right], \quad (5.36c)$$

où $\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p})$ est défini par (5.34), et le second principe est vérifié.

Remarque 5.2.I – Équation constitutive pour \mathbf{m} : Ces équations sont plus générales, d'un certain côté, que celles que l'on a obtenues dans le théorème 2.4.3. En effet, dans ce cas, on a en plus une équation constitutive sur le vecteur des contraintes de couples \mathbf{m} , alors que nous n'en avions pas pour le tenseur associé en 3D ; nous renvoyons à la remarque 2.4.III pour un commentaire détaillé. La proposition 5.2.4 à venir en montre la conséquence sur l'expression de la partie symétrique du tenseur des contraintes.

Démonstration. En injectant (5.33) dans l'inégalité (5.26), on obtient

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \left(\mathbf{sym} \boldsymbol{\sigma} - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} - a \mathbf{sym}(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) + \rho \nabla \mathbf{p}^T \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right) : \mathbf{D}(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} \\
 & + \int_{\Omega} 2\rho \left[\left(\mathbf{p}^\perp \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right)^\perp - \frac{1}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} - \mathbf{m} \right] \cdot \mathbf{k} \, d\mathbf{x} - \left(\ell(\mathbf{h}, \mathbf{p}) \Big| \square \mathbf{p} \right) \\
 & + \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi \, ds + \int_{\partial \Omega} \rho \mathbf{p}^\perp \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds \\
 & - \int_{\partial \Omega} \rho \dot{\mathbf{p}} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \cdot \mathbf{n} \, ds \geq 0. \quad (*.1)
 \end{aligned}$$

Comme dans le cas tridimensionnel (cf. la démonstration du théorème 2.4.3 et la remarque 2.4.II) et comme expliqué dans la section 2.3.2, on peut conclure en appliquant le même argument de convexité sur le potentiel dissipation que dans le cadre des matériaux standards généralisés (section 2.2.1) et en tenant compte des conditions aux limites (5.35). ■

Proposition 5.2.4 – Partie antisymétrique du tenseur des contraintes

Sous les mêmes hypothèses que celles du théorème précédent, si le potentiel de dissipation Φ est différentiable par rapport à \mathbf{k} , alors la partie antisymétrique du tenseur des contraintes est donnée par

$$\mathbf{skw} \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{skw}(\mathbf{p} \otimes \ell(\mathbf{h}, \mathbf{p})) - \frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) - \frac{1}{2} \mathbf{W} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}} \right). \quad (5.37)$$

Démonstration. Par hypothèse, on obtient de l'équation constitutive (5.36b) la relation

$$2\rho \mathbf{m} = 2\rho \left(\mathbf{p}^\perp \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right)^\perp - \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}}. \quad (*.1)$$

On en prend alors le rotationnel puis on multiplie le résultat par une fonction χ quelconque avant d'intégrer sur Ω :

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} 2 \operatorname{curl}(\rho \mathbf{m}) \chi \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} 2 \operatorname{curl} \left[\rho \left(\mathbf{p}^\perp \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\gamma}} \Big|_{\boldsymbol{\gamma}=\nabla \mathbf{p}} \right)^\perp - \frac{1}{2} \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right] \chi \, d\mathbf{x} \\
 & - \int_{\Omega} \operatorname{curl} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}} \right) \chi \, d\mathbf{x}. \quad (*.2)
 \end{aligned}$$

On intègre ensuite par parties à l'aide de la proposition A.2.5 en tenant compte de la

condition aux limites (5.35b), ce qui donne

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} 2 \operatorname{curl}(\rho \mathbf{m}) \chi \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} 2\rho \left(\mathbf{p}^{\perp} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}} \Big|_{\mathbf{r}=\nabla \mathbf{p}} \right)^{\perp} \cdot \operatorname{curl} \chi \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \operatorname{curl} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) \chi \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \operatorname{curl} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}} \right) \chi \, d\mathbf{x}. \quad (*.3) \end{aligned}$$

En réalisant exactement le même calcul que dans la démonstration de la proposition 2.4.1, on obtient ensuite

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} 2 \operatorname{curl}(\rho \mathbf{m}) \chi \, d\mathbf{x} &= - \int_{\Omega} 2 \operatorname{skw} \left[\mathbf{p} \otimes \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}} \Big|_{\mathbf{r}=\nabla \mathbf{p}} \right) \right] : \zeta \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \operatorname{curl} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) \chi \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \operatorname{curl} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}} \right) \chi \, d\mathbf{x}, \quad (*.4) \end{aligned}$$

où l'on a noté ζ la matrice antisymétrique définie par $\zeta_{21} = \chi$. En remarquant que $\operatorname{curl}(\mathbf{c})\chi = \mathbf{W}(\mathbf{c}) : \zeta$ et que $(\mathbf{p} \otimes \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{p}}) : \zeta = 0$ par isotropie de Ψ par rapport à \mathbf{p} , on obtient finalement avec l'équation (5.25)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} 2 \operatorname{skw} \sigma : \zeta \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} 2 \operatorname{skw}(\mathbf{p} \otimes \ell(\mathbf{h}, \mathbf{p})) : \zeta \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \mathbf{W} \left(\rho \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{s}} \right) : \zeta \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \mathbf{W} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{k}} \right) : \zeta \, d\mathbf{x}. \quad (*.5) \end{aligned}$$

Cette égalité est vraie pour tout ζ , d'où le résultat. ■

5.3. Modèle retenu

Dans cette section, nous construisons à nouveau le problème 5.1.1, mais cette fois en partant directement des lois de conservation moyennées, montrant ainsi la « commutativité » des procédés thermodynamiques des sections 2.4 et 3.2 et asymptotiques des sections 5.1 et 5.2. Dans la section 5.3.1, nous y ajoutons deux ingrédients physiques permettant un couplage minimal de la densité avec la dynamique.

Il est par contre difficile a priori, d'estimer si ces ingrédients suffisent pour établir un modèle de migration dans laquelle la densité joue un rôle sinon prééminent, au moins majeur, comme dans le cas d'une migration avec front sec par exemple (figure 1.1 (a)) [Tli+18 ; Tli+20]. Dans une volonté de d'abord comprendre le comportement du modèle en l'état, qui présente déjà un grand nombre de difficultés (non-linéarités, tenseur non symétrique, nombreux paramètres), nous préférons étudier le modèle sans l'influence de la densité dans les chapitres suivants. Ayant malgré tout proposé des outils d'approximation en couche

mince, nous retenons deux modèles bidimensionnels au total, l'un incompressible, l'autre compressible. Pour chacun d'eux, nous proposons dans les chapitres suivants un algorithme de résolution numérique et une validation numérique des ordres de convergence des schémas. Nous gardons le modèle compressible dans le but de proposer les outils numériques qui pourront servir au développement d'un modèle proposant un couplage plus abouti de la densité avec la dynamique.

Pour le modèle incompressible, les expressions de l'énergie libre (3.8) et du potentiel de dissipation (3.10) peuvent être immédiatement transposées au cas bidimensionnel. Plus rigoureusement, il est même possible d'appliquer directement les méthodes d'analyse asymptotique présentées précédemment sur ces expressions pour confirmer que leur structure est bien conservée après l'approximation en couche mince. Cela se fait aisément à l'aide du lemme 5.1.1 et de la proposition 5.1.4.

L'énergie libre et le potentiel de dissipation que nous présentons ci-après sont uniquement valables pour le modèle compressible, dans le but de montrer que l'on peut bien retrouver les équations du problème 5.1.1 et ajouter de nouveaux ingrédients.

5.3.1. Énergie libre

Nous transposons ici la définition de l'énergie libre introduite dans la section 3.2.1 au cas bidimensionnel. Cela se fait assez naturellement, la structure de l'énergie libre étant conservée après analyse asymptotique. Il est possible de directement appliquer les méthodes de l'analyse asymptotique sur l'expression de l'énergie libre tridimensionnelle (3.8), ce qui se fait aisément à l'aide du lemme 5.1.1 et de la proposition 5.1.4. Nous omettons ici ces calculs et donnons directement le résultat :

$$\Psi(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\gamma}) := B \left(W(\mathbf{p}) + \frac{1}{2} \kappa |\boldsymbol{\gamma}|^2 \right), \quad (5.38)$$

où W est encore le potentiel en double-puits défini par (3.9). Comparé à son homologue tridimensionnel, l'énergie libre exprimée ici est déjà adimensionnée.

L'analyse développée dans la section 5.2 a l'avantage de permettre une dépendance de l'énergie libre par rapport à la densité, comme expliqué dans la section 5.2.4. Suivant [AT19] (voir la section 1.3.6), nous ajoutons deux ingrédients : un terme pénalisant les variations de la densité et un autre transformant l'énergie en double-puits en une énergie dont le nombre de puits dépend de la densité. L'idée est de pouvoir modéliser des transitions de phase comme évoquées dans la section 1.1.2, c'est-à-dire des transitions d'un état désordonné (isotrope) à un état ordonné (polaire), ou l'inverse, lorsque la densité dépasse un certain seuil ρ_{\min} . Mathématiquement, cela signifie que le potentiel en double-puits W , défini par (3.9), peut passer d'un potentiel en simple puits lorsque $\rho < \rho_{\min}$, favorisant ainsi l'état isotrope, à un double-puits lorsque $\rho > \rho_{\min}$, favorisant alors l'état polaire. Avec ces deux nouveaux ingrédients, l'énergie libre prend la forme suivante :

$$\rho \Psi(\mathbf{h}, \mathbf{s}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\gamma}) := \frac{c_0}{\gamma} \rho^{\gamma+1} + B \rho W(\mathbf{p}) + \frac{B}{2} \rho_{\min} |\mathbf{p}|^2 + \frac{1}{2} \kappa^2 B |\boldsymbol{\gamma}|^2, \quad (5.39)$$

où l'on rappelle que la densité ρ est liée au tenseur de Hencky \mathbf{h} via (5.32).

En conséquence, d'après le théorème 5.2.3, le tenseur des contraintes sera en plus composé d'un terme de pression de la forme

$$-\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{h}} = -\frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{h}} = \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \boldsymbol{\delta}. \quad (5.40)$$

On note $\Pi(\rho, \mathbf{p})$ ce terme de pression qui, avec la définition de l'énergie libre (5.39), s'écrit

$$\Pi(\rho, \mathbf{p}) := \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho}(\mathbf{h}, \mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) = c_0 \rho^\gamma - \frac{\rho_{\min} B}{\rho} \frac{B}{2} |\mathbf{p}|^2. \quad (5.41)$$

Toujours d'après le théorème 5.2.3, le champ $\boldsymbol{\ell}$ est quant à lui donné par

$$\boldsymbol{\ell}(\mathbf{h}, \mathbf{p}) = B \rho_{\min} \left[\frac{\rho}{\rho_{\min}} |\mathbf{p}|^2 - \left(\frac{\rho}{\rho_{\min}} - 1 \right) \right] \mathbf{p} - \kappa^2 \operatorname{div}(\rho \nabla \mathbf{p}). \quad (5.42)$$

Avec cette expression, on comprend mieux en quoi l'ajout de la densité critique ρ_{\min} peut modéliser des transitions de phase. En effet, si $\rho < \rho_{\min}$, alors le terme entre crochets est toujours positif et l'état $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ est stable. Au contraire, si $\rho > \rho_{\min}$, alors c'est l'état $|\mathbf{p}| = \sqrt{1 - \rho_{\min}/\rho}$ qui est stable.

5.3.2. Potentiel de dissipation

L'expression du potentiel de dissipation est quasiment identique à celle proposée dans la section 3.2.2, la grande différence étant l'apparition du terme visqueux isotrope $2(\operatorname{div} \mathbf{v}) \boldsymbol{\delta}$ dans le tenseur des contraintes (proposition 5.1.6) au profit de la pression. Si l'on souhaite à nous obtenir les équations du problème 5.1.1, il faut donc poser

$$\Phi(\mathbf{D}, \mathbf{p}) := \eta |\mathbf{D}|^2 + \eta (\operatorname{tr} \mathbf{D})^2 + \frac{1}{2} B P e |\mathbf{p}|^2. \quad (5.43)$$

5.3.3. Conditions aux limites

Nous donnons une forme très générale des conditions sur les bords du domaine $\partial\Omega$, dans l'optique de balayer le plus grand nombre de situations possible, ignorant ainsi la condition (5.35b), qui est uniquement suffisante pour obtenir le second principe. Pour cela, nous partitionnons $\partial\Omega$ de deux manières :

$$\partial\Omega = \Gamma_D^v \sqcup \Gamma_N^v \sqcup \Gamma' \sqcup \Gamma_0 = \Gamma_D^p \sqcup \Gamma_N^p, \quad (5.44)$$

de sorte que le champ $\mathbf{c} \in \{\mathbf{v}, \mathbf{p}\}$ satisfasse une condition de Dirichlet sur Γ_D^u et une condition de Neumann sur Γ_N^u , avec $u \in \{v, p\}$. On demande en outre à la vitesse d'avoir ses composantes tangentielle et normale nulles sur Γ' et Γ_0 respectivement. La notation

□ indique que l'union entre les ensembles est disjointe. Les conditions sur Γ sont alors données par les relations

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_D \quad \text{sur } \Gamma_D^v, \quad (5.45a)$$

$$\rho \boldsymbol{\sigma}^T \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma_N^v, \quad (5.45b)$$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{t} = 0 \quad \text{et } \rho \sigma_{nn} = 0 \text{ sur } \Gamma', \quad (5.45c)$$

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{et } \rho (\boldsymbol{\sigma}^T)_{nt} = 0 \text{ sur } \Gamma_0, \quad (5.45d)$$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_D \quad \text{sur } \Gamma_D^p, \quad (5.45e)$$

$$-\rho \kappa^2 \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \Gamma_N^p, \quad (5.45f)$$

$$\rho = \rho_{in} \quad \text{sur } \partial \Omega_-(t), \quad (5.45g)$$

où ρ_{in} désigne la densité entrante (*inflow density* en anglais), supposée donnée, et $\partial \Omega_-$ la partie amont de la frontière (*upstream* en anglais), et est défini en tout instant $t > 0$ par

$$\partial \Omega_-(t) := \{x \in \partial \Omega \mid \mathbf{v}(x, t) \cdot \mathbf{n}(x) < 0\}. \quad (5.46)$$

Le fait que les ensembles de part et d'autre de la seconde égalité (5.44) puissent s'intersecter n'est pas contradictoire. En effet, il est nécessaire d'imposer la vitesse et la polarité sur $\partial \Omega$. Il faut donc bien deux conditions pour avoir un système bien posé de deux équations à deux inconnues. En particulier, les conditions imposées sur Γ_N^v et sur Γ_N^p , qui font toutes les deux intervenir la vitesse et la polarité, sont compatibles.

5.3.4. Cas incompressible

Problème 5.3.1 – Modèle moyené de tissus incompressibles. Étant donné la polarité initiale \mathbf{p}_0 , trouver \mathbf{v} , Π et \mathbf{p} telles que

$$-\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_{tot}^T) + C_F \mathbf{v} = T_a \mathbf{p} \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \quad (5.47a)$$

$$\operatorname{div}(\mathbf{v}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \quad (5.47b)$$

$$Pep + (|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} - \kappa^2 \Delta \mathbf{p} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \quad (5.47c)$$

et satisfaisant les conditions aux limites (5.45) (en prenant $\rho = 1$). Le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ est quant à lui défini par

$$\boldsymbol{\sigma}_{tot} = -\Pi \boldsymbol{\delta} + \boldsymbol{\sigma}_{visc}(\mathbf{v}) + \boldsymbol{\sigma}_{extra}(\mathbf{p}) + \boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}), \quad (5.48a)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{visc}(\mathbf{v}) := 2D(\mathbf{v}), \quad (5.48b)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{extra}(\mathbf{p}) := aB(|\mathbf{p}|^2 - 1)\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} - B\kappa^2 \nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{p} \quad (5.48c)$$

$$+ \frac{1}{2}B\kappa^2((1-a)\Delta \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} - (1+a)\mathbf{p} \otimes \Delta \mathbf{p}),$$

$$\boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}) = -S_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}. \quad (5.48d)$$

5.3.5. Cas compressible

Problème 5.3.2 – Modèle moyené de tissus compressibles. Étant donné la polarité initiale \mathbf{p}_0 et la densité initiale ρ_0 , trouver \mathbf{v} , ρ et \mathbf{p} telles que

$$-\operatorname{div}(\rho \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T) + C_F \mathbf{v} = T_a \mathbf{p} \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \quad (5.49a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \quad (5.49b)$$

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{p} \square + \rho_{\min} \left[\frac{\rho}{\rho_{\min}} |\mathbf{p}|^2 - \left(\frac{\rho}{\rho_{\min}} - 1 \right) \right] \mathbf{p} \\ - \kappa^2 \operatorname{div}(\rho \nabla \mathbf{p}) = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \quad (5.49c) \end{aligned}$$

et satisfaisant les conditions aux limites (5.45). Le tenseur des contraintes de Cauchy $\boldsymbol{\sigma}$ est quant à lui défini par

$$\rho \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} = -\rho \Pi(\rho, \mathbf{p}) \boldsymbol{\delta} + \rho \boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) + \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\rho, \mathbf{p}) + \rho \boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}), \quad (5.50a)$$

$$\Pi(\rho, \mathbf{p}) = c_0 \rho^\gamma - \frac{\rho_{\min} B}{\rho} |\mathbf{p}|^2, \quad (5.50b)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) := 2(\mathbf{D}(\mathbf{v}) + \operatorname{div}(\mathbf{v}) \boldsymbol{\delta}), \quad (5.50c)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\rho, \mathbf{p}) := a B \rho_{\min} \left[\frac{\rho}{\rho_{\min}} |\mathbf{p}|^2 - \left(\frac{\rho}{\rho_{\min}} - 1 \right) \right] \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} - B \kappa^2 \rho \nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{p} \\ + \frac{1}{2} B \kappa^2 ((1-a) \operatorname{div}(\rho \nabla \mathbf{p}) \otimes \mathbf{p} - (1+a) \mathbf{p} \otimes \operatorname{div}(\rho \nabla \mathbf{p})), \quad (5.50d) \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}) = -S_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} - S'_a |\mathbf{p}|^2 \boldsymbol{\delta}. \quad (5.50e)$$

Si l'on prend $c_0 = 0$ et $\rho_{\min} = 0$, on retombe bien sur le problème 5.1.1.

Nous avons ajouté le terme supplémentaire $-S'_a |\mathbf{p}|^2 \boldsymbol{\delta}$ au tenseur des contraintes actives (5.50e) par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses (5.50c). Dans la littérature [Mar+13, page 21], le tenseur des contraintes est souvent considéré à trace nulle en 3D, donc le tenseur des contraintes actives est plutôt de la forme $\boldsymbol{\sigma}_a = -S_a (\mathbf{p} \otimes \mathbf{p} - \frac{1}{3} |\mathbf{p}|^2 \boldsymbol{\delta})$. Ce n'est pas ce que nous proposons ici. L'idée est vraiment de reproduire la structure du tenseur des contraintes visqueuses dans celui des contraintes actives, et non d'en faire un tenseur à trace nulle. Nous distinguons les forces des contributions actives anisotropes et isotropes en leur associant deux paramètres, respectivement S_a et S'_a , a priori indépendants, pour rester général, mais le choix $S'_a = S_a$ nous semble le plus naturel au vu de la forme de $\boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}$. Le signe de S'_a n'étant pas fixé, comme celui de S_a , on pourrait de manière équivalente aussi bien considérer un tenseur de la forme $\boldsymbol{\sigma}_a = -S_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} + S'_a |\mathbf{p}|^2 \boldsymbol{\delta}$. L'introduction d'un tel terme sera aussi justifiée par l'estimation d'énergie continue proposée dans la section 7.2.4.

5.4. Conclusion

En exploitant la faible épaisseur du tissu par rapport à sa longueur, nous avons d'abord réalisé une approximation en couche mince du problème 3.3.2, permettant de le réduire à un système bidimensionnel compressible, donné par le problème 5.1.1. Dans le but de faciliter l'ajout d'ingrédients physiques au modèle bidimensionnel (comme la viscoélasticité ou un couplage plus avancé de la densité avec les autres variables) sans avoir à refaire toute l'analyse asymptotique depuis le début, nous avons en plus directement réalisé une approximation en couche mince des lois de conservation et de l'inégalité de Clausius-Duhem issues de la théorie développée dans la section 2.4 puis déterminé les équations constitutives générales associées qui permettent de faire automatiquement le second principe de la thermodynamique (théorème 5.2.3). Ce faisant, tout modèle bidimensionnel dans ce formalisme peut être rigoureusement obtenu uniquement en spécifiant une énergie libre et un potentiel de dissipation tridimensionnels puis en les moyennant dans l'épaisseur, ou plus simplement en les écrivant directement en deux dimensions, ce qui permet d'ajouter plus facilement des couplages avec la densité. La première approche a l'avantage de garantir que le système bidimensionnel obtenu dérive bien d'un modèle tridimensionnel. Ici, nous avons procédé à une légère modification du problème 5.1.1, ce qui a donné lieu au problème 5.3.2, dont nous avons également proposé une version incompressible, via le problème 5.3.1. Notre objectif est désormais de construire une méthode numérique robuste capable de résoudre ces deux problèmes.

Deuxième partie

Résolution numérique

Chapitre

Méthodes de Galerkine discontinues

6

Le problème 5.3.1 a été introduit dans le chapitre 3, à la section 5.3. Il se présente sous la forme d'un problème de Stokes, combinant les équations (5.47a) et (5.47b), couplé à une équation constitutive d'évolution de la polarité (5.47c). Le problème 5.3.2 a été introduit dans le chapitre 3, à la section 5.3. Il combine la loi de conservation de la quantité de mouvement (5.49a), la loi de conservation de la masse (5.49b) et l'équation constitutive d'évolution de la polarité (5.47c).

Dans les deux cas, l'équation d'évolution de la polarité a en quelque sorte une structure d'équation de diffusion-advection-réaction, avec un terme de « réaction » non-linéaire, dû au terme en double-puits ($|p|^2 - 1$) p . Elle combine en plus un terme de transport et un laplacien, hétérogène dans le cas compressible. Ces trois points couplés augmentent la difficulté de résolution de l'équation et il est donc nécessaire de proposer un schéma numérique qui soit capable de les gérer simultanément. En outre, le tenseur des contraintes, autant dans le cas incompressible que dans le cas compressible, contient des termes non-linéaires en la polarité, qui font en particulier intervenir son laplacien.

Nous faisons donc face à des problèmes non-linéaires dont les inconnues sont fortement couplées entre elles, avec une équation combinant advection et diffusion. Le problème 5.3.1 rajoute en plus une contrainte d'incompressibilité tandis que le problème 5.3.2 voit quasiment toutes ses équations pondérées par la densité. En particulier, les laplaciens y sont hétérogènes et le coefficient de diffusion associé n'est autre que la densité, à une constante près, qui peut s'annuler lorsque le calcul présente un front sec. Rappelons en effet que l'on souhaite en plus être capable de résoudre ces problèmes sur tout type de géométries bidimensionnelles, ce qui augmente encore la difficulté d'un cran. Le schéma numérique doit donc être assez robuste et assez général pour traiter toutes ces difficultés, mais doit aussi être capable de gérer les fronts secs (voir la section 1.4.1) et en particulier de garantir la positivité de la densité. Nous pensons que les méthodes de Galerkine discontinues proposent les outils nécessaires pour répondre à ces problématiques.

Dans ce chapitre, nous proposons une introduction aux méthodes de Galerkine discontinues (section 6.1) puis nous les appliquons aux problèmes élémentaires de transport (section 6.2), de diffusion hétérogène (section 6.3) et de diffusion hétérogène-advection-réaction (section 6.4). Chacun de ces trois cas d'étude se compose d'une formulation variationnelle, d'une formulation discrète, d'une estimation d'énergie continue et d'une

estimation d'énergie semi-discrète. Nous traitons la discrétisation spatiale des équations obtenues dans le chapitre 5 (problèmes 5.3.1 et 5.3.2) dans le chapitre 7.

Table des matières

6.1. Brève introduction aux méthodes de Galerkine discontinues	116
6.2. Équation de transport	121
6.3. Équation de diffusion hétérogène	128
6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction	138

6.1. Brève introduction aux méthodes de Galerkine discontinues

6.1.1. Motivation

Nous choisissons de discrétiser les problèmes 5.3.1 et 5.3.2 à l'aide de la méthode des éléments finis, qui consiste d'abord à écrire une formulation variationnelle (ou faible) des équations puis à transformer le problème faible en un problème discret, notamment par une discrétisation des espaces fonctionnels. Cette transformation est généralement réalisée à l'aide des méthodes de Galerkine, qui permettent de calculer une approximation continue polynomiale par morceaux d'une solution faible au problème.

Les méthodes de Galerkine discontinues (dG) [PE11 ; Sar20] forment une autre classe de méthodes d'éléments finis qui, au contraire, ne requièrent pas la continuité des solutions approchées aux interfaces des éléments. Elles ont l'avantage de proposer une généralisation du schéma de décentrage amont (*upwind* en anglais), utilisé pour éliminer les oscillations parasites qui émergent lorsque le terme de transport est dominant [Sar16, section 4.10]. En outre, en relaxant la contrainte de continuité globale, elles permettent le découplage des degrés de liberté de l'approximation entre les éléments et offre ainsi la possibilité de paralléliser plus efficacement les calculs.

6.1.2. Principe général

L'application des méthodes dG à une équation aux dérivées partielles suit toujours le même schéma.

1. Position du problème. L'équation aux dérivées partielles à résoudre est écrite dans le domaine Ω considéré, avec ses conditions aux limites et sa condition initiale si une

dérivée en temps est présente. Pour fixer les idées, on considère le problème linéaire

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } \varphi \in Y \text{ tel que } \lambda \frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(\varphi) = f, \text{ dans } \Omega \times]0, +\infty[, \end{array} \right. \quad (6.1)$$

où $\lambda \geq 0$ est un paramètre donné, A est un opérateur linéaire quelconque, pouvant faire intervenir des dérivées partielles spatiales, et f est le second membre, supposé aussi donné.

2. Formulation variationnelle ou faible. On multiplie ensuite cette même équation par une fonction χ définie dans Ω , vivant dans un espace fonctionnel X , voisin de celui de la fonction φ à trouver, noté Y , qui peuvent coïncider, et on intègre le résultat sur Ω . Une intégration par parties peut également être réalisée pour éventuellement faire apparaître une forme symétrique. On dit alors que l'on a testé l'équation avec la fonction test χ . Formellement, cette formulation variationnelle peut s'écrire sous la forme

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } \varphi \in Y \text{ tel que } \lambda \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \mid \chi \right) + a(\varphi, \chi) = (f \mid \chi), \forall \chi \in X. \end{array} \right. \quad (6.2)$$

où a est la forme bilinéaire (définition B.2.2) obtenue après les opérations décrites précédemment et $(\cdot \mid \cdot)$ représente le produit scalaire canonique dans $L^2(\Omega)$, soit

$$(\varphi \mid \chi) := \int_{\Omega} \varphi \chi \, dx.$$

On note $\|\cdot\|_2$ la norme associée. On sait alors d'après le théorème B.2.1 de Lax-Milgram que ce problème admet une unique solution si a est continue et coercive (définitions B.2.4 et B.2.5). Il est également possible d'utiliser le formalisme de Friedrichs, qui généralise en quelque sorte le théorème de Lax-Milgram aux systèmes symétriques définis positifs d'équations aux dérivées partielles du premier ordre, pas forcément linéaires [PE11, chapitre 7] [Sar16, section 4.8].

3. Discrétisation La première étape est de mailler le domaine Ω , c'est-à-dire le partitionner en un ensemble fini de polygones simples K (typiquement des triangles ou des carrés en 2D), appelés éléments. L'ensemble $\mathcal{T}_h := \{K\}$ ainsi construit est appelé maillage de Ω , où h désigne le pas d'espace, défini comme le plus grand diamètre des éléments. La seconde étape est de discréteriser la formulation variationnelle obtenue à l'étape précédente. Dans le contexte des méthodes dG, cela signifie

- approcher la solution φ par une fonction φ_h dont la restriction à chaque élément K du maillage est polynomiale, sans imposer de raccord continu entre les éléments ;

- (ii) remplacer les éventuelles dérivées partielles dans a par des dérivées partielles « cassées » (définition 6.1.4) : la solution approchée peut présenter des discontinuités aux arêtes des éléments, sur lesquelles la notion classique de dérivée partielle n'est pas définie.
- (iii) inclure faiblement les conditions aux limites dans la formulation variationnelle discrète, puisque l'on n'impose pas fortement les degrés de liberté de la solution approchée sur les bords des éléments ;
- (iv) s'assurer que la forme obtenue a a de « bonnes propriétés », quitte à appliquer quelques modifications. Par exemple, on pourrait lui imposer de conserver la coercivité (définition B.2.5) de a . On note a_h la forme possédant le plus de « bonnes propriétés » possible.

Formellement, la version discrète de (6.2) peut alors s'écrire

$$\boxed{\text{Trouver } \varphi_h \in X_h \text{ tel que } \lambda \left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t} \mid \chi_h \right) + a_h(\varphi_h, \chi_h) = l_h(\chi_h), \forall \chi_h \in X_h.} \quad (6.3)$$

où l_h est une forme linéaire (définition B.2.1) définie à partir de $(f \mid \chi_h)$ et des termes de bord inclus (cf. (iii)).

Dans le cadre de cette thèse, nous rajoutons également deux étapes supplémentaires.

4. Estimation d'énergie continue Cette étape consiste à déterminer l'équation vérifiée par la dérivée en temps de l'énergie du système $\mathcal{E}(\varphi)$, vue comme une fonctionnelle de la solution du problème faible (6.2). Les estimations d'énergie sont utiles pour établir des résultats d'existence des solutions ou pour construire des schémas numériques avec des bonnes propriétés. L'énergie la plus naturelle (et sans doute la plus courante) est définie à partir de la norme $L^2(\Omega)$ par $\mathcal{E}(\varphi) = \frac{1}{2} \|\varphi\|_2^2$.

5. Estimation d'énergie semi-discrète De manière analogue à l'étape précédente, celle-ci consiste à déterminer l'estimation d'énergie associée au problème faible semi-discret (6.3). Elle est dite semi-discrète car la discrétisation ne concerne que la partie spatiale du problème, mais pas celle en temps.

6.1.3. Définitions

Définitions relatives au maillage

Définition 6.1.1 – Faces du maillage

On dit qu'un sous-espace fermé S de $\bar{\Omega}_h$ est une face du maillage \mathcal{T}_h si l'une des deux conditions suivantes est satisfaite :

1. Il existe deux éléments distincts K^- et K^+ tels que $S = \partial K^- \cap \partial K^+$; auquel cas S est appelée interface.

2. Il existe un élément K tel que $S = \partial K \cap \partial \Omega$; auquel cas, on dit que S est une face de la frontière.

Les interfaces sont rassemblées dans l'ensemble \mathcal{S}_h^i et les faces de la frontière dans l'ensemble \mathcal{S}_h^b . On note $\mathcal{S}_h := \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^b$ l'ensemble des faces du maillage.

Définition 6.1.2 – Normales à une face du maillage

On fixe arbitrairement l'orientation de chacune des faces du maillage, ce qui revient à en choisir la normale n_S . Lorsque S est une face de la frontière, nous choisissons la normale sortante à Ω . Lorsque S est une interface, nous choisissons la normale sortante à l'élément adjacent K^- . Cette convention est illustrée sur la figure 6.1. Elle se traduit formellement par les relations (voir figure 6.1)

$$n_S := \begin{cases} n_{K^-} & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+ \\ n & \text{sinon.} \end{cases} \quad (6.4)$$

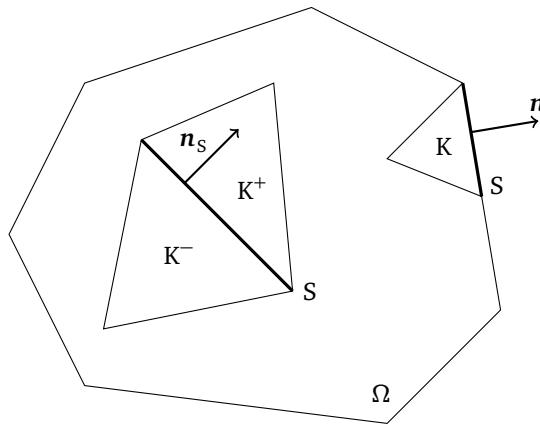


FIGURE 6.1. – Exemple d'un domaine Ω avec deux triangles voisins K^- et K^+ et leur interface S (arête commune), et un triangle K en contact avec la frontière, dont la face (l'arête) commune est encore notée S . Sont également représentées les conventions des normales aux éléments. En particulier, $n_S = n_{K^-} = -n_{K^+}$ pour l'interface et $n_S = n_K = n$ pour la frontière.

Gestion de la discontinuité

Soit \mathcal{P}^k l'espace des fonctions polynomiales à d variables et de degré au plus k , où d est la dimension de l'espace (dans cette thèse $d = 2$, le plus souvent). Suivant [PE11, section 1.2.4.1], on introduit la

Définition 6.1.3 – Espace cassé des fonctions polynomiales par morceaux

L'espace cassé $\mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h)$ des fonctions polynomiales par morceaux à d variables et de degré au plus k est défini par

$$\mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h) := \{\varphi \in L^2(\Omega) \mid \forall K \in \mathcal{T}_h, \varphi|_K \in \mathcal{P}^k\}. \quad (6.5)$$

Remarquons qu'une fonction de $\mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h)$ est a priori discontinue aux interfaces du maillage. En particulier, le gradient de telles fonctions n'est pas défini aux interfaces, d'où la

Définition 6.1.4 – Gradient cassé

Le gradient cassé ∇_h est défini de sorte que, pour toute fonction φ définie dans Ω et suffisamment régulière, l'on ait

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, (\nabla_h \varphi)|_K = \nabla(\varphi|_K). \quad (6.6)$$

On introduit également la notion de divergence cassée via la

Définition 6.1.5 – Divergence cassée

La divergence cassée div_h est défini de sorte que, pour toute fonction vectorielle \mathbf{c} définie dans Ω et suffisamment régulière, l'on ait

$$\forall K \in \mathcal{T}_h, (\text{div}_h \mathbf{c})|_K = \text{div}(\mathbf{c}|_K). \quad (6.7)$$

Si l'on utilise cette définition du gradient dans les formulations faibles discrètes, les termes de bord qui apparaîtront alors après intégration par parties, le cas échéant, s'exprimeront à l'aide d'opérateurs dits de saut et de moyenne, dont une représentation graphique unidimensionnelle est donnée par la figure 6.2.

Définition 6.1.6 – Sauts et moyennes à travers les interfaces

Soit $\varphi: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction suffisamment lisse pour admettre que sa trace est bivaluée sur toute interface $S = \partial K^- \cap \partial K^+$ du maillage. Alors, quelle que soit la face S du maillage, le *saut* de φ à travers S est défini par (voir figure 6.2)

$$[\varphi]_S := \begin{cases} \varphi|_{K^-} - \varphi|_{K^+} & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+, \\ \varphi|_K & \text{si } S = \partial K \cap \partial \Omega, \end{cases} \quad (6.8a)$$

sa *moyenne* par

$$\{\varphi\}_S := \begin{cases} \frac{1}{2}(\varphi|_{K^-} + \varphi|_{K^+}) & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+, \\ \varphi|_K & \text{si } S = \partial K \cap \partial \Omega, \end{cases} \quad (6.8b)$$

sa *moyenne pondérée* par

$$\{\varphi\}_{\omega, S} := \begin{cases} \omega_{K^-, S} \varphi|_{K^-} + \omega_{K^+, S} \varphi|_{K^+} & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+, \\ \varphi|_K & \text{si } S = \partial K \cap \partial \Omega, \end{cases} \quad (6.8c)$$

et sa moyenne harmonique par

$$\eta_{\varphi,S} := \begin{cases} \frac{2\varphi|_{K^-}\varphi|_{K^+}}{\varphi|_{K^-} + \varphi|_{K^+}} & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+, \\ \varphi|_K & \text{si } S = \partial K \cap \partial \Omega, \end{cases} \quad (6.8d)$$

où $\omega_{K^-,S}$ et $\omega_{K^+,S}$ sont deux fonctions positives sommant à 1. Remarquons que $\eta_{\varphi,S} = 0$ si $\varphi|_{K^-} = 0$ ou $\varphi|_{K^+} = 0$. Lorsque les deux quantités sont nulles simultanément, nous posons par analogie $\eta_{\varphi,S} = 0$.

La moyenne arithmétique (6.8b) est un cas particulier de la moyenne pondérée (6.8c) où $\omega_{K^-,S} = \omega_{K^+,S} = 1/2$. Dans la section 6.3, nous choisirons des poids relatifs à la diffusion.

Si le contexte ne présente pas d'ambiguïté, l'indice S peut être omis.

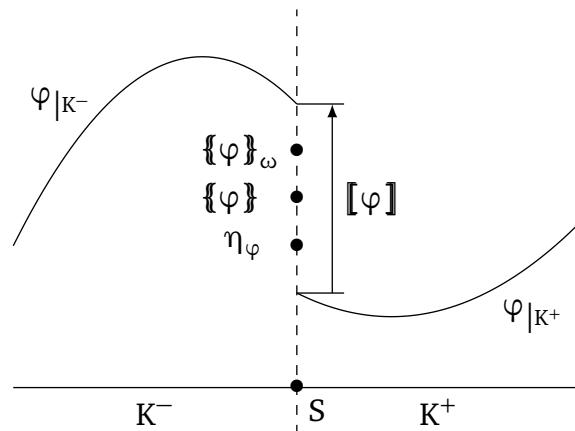


FIGURE 6.2. – Exemple unidimensionnel des opérateurs de saut $[\cdot]$, de moyenne $\{\cdot\}$, de moyenne pondérée $\{\cdot\}_\omega$ et de moyenne harmonique η . Les poids utilisés sont $\omega_{K^-} = 3/4$ et $\omega_{K^+} = 1/4$. La face est réduite au point commun aux deux segments adjacents. Adaptation de la figure 1.3 dans [PE11].

6.2. Équation de transport

Dans cette section, nous formalisons la discrétisation d'une équation de transport à l'aide d'une méthode dG avant de proposer des estimations d'énergie continue et semi-discrète, sous-entendu en espace mais pas en temps. Nous introduisons en particulier une version discrète de l'opérateur de transport ($\mathbf{v} \cdot \nabla$) par la méthode dG en considérant l'équation linéaire de transport, et proposons une extension lorsque le champ d'advection dépend d'un champ scalaire potentiellement discontinu aux interfaces du maillage.

6.2.1. Position du problème

On considère un problème de transport

Problème 6.2.1 – Transport. Trouver $\varphi : \Omega \times]0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi + \alpha \varphi = f & \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \\ \varphi(t=0) = \varphi_0 & \text{dans } \Omega, \\ \varphi(t) = g(t) \text{ sur } \partial\Omega_-(t), \forall t \in]0, +\infty[, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (6.9a) \\ (6.9b) \\ (6.9c) \end{array}$$

où \mathbf{v} est la vitesse d'advection, α est le coefficient de réaction, f est le second membre, φ_0 est la condition initiale et g est la condition entrante (*inflow boundary condition* en anglais) ; quantités supposées données. On suppose que la vitesse \mathbf{v} est donnée et que α , f et g peuvent dépendre du temps. L'ensemble $\partial\Omega_-$ désigne enfin la partie amont de la frontière (*upstream* en anglais), et est défini en tout instant $t > 0$ par

$$\partial\Omega_-(t) := \{ \mathbf{x} \in \partial\Omega \mid \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) < 0 \}. \quad (6.9d)$$

On suppose que $\tilde{\alpha} := \alpha - \frac{1}{2} \operatorname{div} \mathbf{v} \geq \alpha_0$ presque partout dans $\Omega \times]0, +\infty[$, où $\alpha_0 > 0$ est une constante que l'on retrouvera dans les estimations d'énergie (6.15) et (6.18).

6.2.2. Formulation variationnelle

Suivant [PE11, section 3.1.1.1], nous considérons, par abus de notation, les fonctions définies sur $\Omega \times]0, +\infty[$ comme des fonctions dépendant du temps et à valeurs dans un espace fonctionnel (typiquement de Hilbert). Autrement dit, si φ désigne une telle fonction, alors nous assimilons $\varphi(t)$ à une fonction de \mathbf{x} , dont on peut prendre la norme associée à l'espace fonctionnel choisi. De même, si E et X désignent deux espaces fonctionnels quelconques, nous notons par commodité $E(X) := E(]0, +\infty[; X)$, c'est-à-dire l'ensemble des fonctions dépendant du temps à valeurs dans X , vérifiant les propriétés décrites par E .

Soit $X := \{ \varphi \in L^2(\Omega) \mid (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi \in L^2(\Omega) \}$. D'après [PE11, sections 2.1.4 et 2.1.6], la formulation faible du problème 6.2.1 s'énonce comme suit.

Problème 6.2.2 – Formulation variationnelle. Étant donné la condition initiale (6.9b), trouver $\varphi \in \mathcal{C}^1(X)$ tel qu'en tout instant $t > 0$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t}(t) \chi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} [(\mathbf{v}(t) \cdot \nabla) \varphi(t) + \alpha(t) \varphi(t)] \chi \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi(t) \chi \, ds \\ = \int_{\Omega} f(t) \chi \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{n})^\Theta g(t) \chi \, ds, \end{aligned} \quad (6.10)$$

quel que soit $\chi \in X$. Dans cette équation, nous avons utilisé la notation $x^\Theta := \frac{1}{2}(|x| - x)$

qui désigne la partie négative de $x \in \mathbb{R}$. Nous noterons également $x^\oplus := \frac{1}{2}(|x| + x)$ sa partie positive.

Cette formulation variationnelle s'obtient donc en testant l'équation (6.9a) avec une fonction dite test χ , c'est-à-dire en la multipliant par cette dernière avant d'intégrer le résultat sur tout le domaine. La condition aux limites (6.9c) a été imposée faiblement, c'est-à-dire via la formulation variationnelle par l'ajout de termes de bord.

D'après le théorème 2.12 dans [PE11], toute solution du problème 6.2.2 est également solution du problème 6.2.1 presque partout, c'est-à-dire que qu'elle vérifie (6.9a) presque partout dans $\Omega \times]0, +\infty[$ et (6.9c) presque partout dans $\partial\Omega_- \times]0, +\infty[$; on dit que le problème est consistant.

6.2.3. Discrétisation

Suivant la procédure présentée à la section 6.1.2, nous introduisons $X_h := \mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h)$ la version discrète de l'espace fonctionnel X introduit précédemment. D'après [PE11, sections 2.2 et 2.3], une solution approchée du problème 6.2.2 peut être obtenue en résolvant le

Problème 6.2.3 – Discrétisation. Trouver $\varphi_h \in \mathcal{C}^1(X_h)$ tel qu'en tout instant $t > 0$,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t}(t) \Big| \chi_h \right) + a_h^{\text{upw}}(\varphi_h(t), \chi_h; \mathbf{v}_h(t)) &= (f(t) \Big| \chi_h) \\ &+ \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h(t) \cdot \mathbf{n})^\oplus g(t) \chi_h \, ds, \quad \forall \chi_h \in X_h, \end{aligned} \quad (6.11)$$

et satisfaisant la condition initiale $\varphi_h(t = 0) = \pi_h \varphi_0$. L'opérateur π_h désigne la projection orthogonale $L^2(\Omega)$ dans X_h , c'est-à-dire l'application $\pi_h: L^2(\Omega) \rightarrow X_h$ définie de sorte que pour tout $\varphi \in L^2(\Omega)$, $\pi_h \varphi$ est l'élément de X_h qui satisfait

$$(\pi_h \varphi \Big| \chi_h) = (\varphi \Big| \chi_h), \quad \forall \chi_h \in X_h. \quad (6.12)$$

La vitesse \mathbf{v} a été remplacée par sa version semi-discrète \mathbf{v}_h , que l'on suppose aussi donnée.

Dans cette formulation faible discrète a été introduite la

Définition 6.2.1 – Forme bilinéaire décentrée amont

La forme bilinéaire décentrée amont (*upwind* en anglais, *upw* en abrégé) est définie par

$$\begin{aligned} a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) &:= \int_{\Omega} \{ \alpha \varphi_h \chi_h + (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h \varphi_h) \chi_h \} \, dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\oplus \varphi_h \chi_h \, ds \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\chi_h] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \chi_h \} \right\} [\varphi_h] \, ds. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Remarquons que comme dans le cas continu, la condition aux limites (6.9c) a été imposée faiblement, ce qui fait écho au point (iii) de la section 6.1.2.

La forme a_h^{upw} se compose d'une forme bilinéaire dite centrée (*centered fluxes* en anglais) a_h^{cf} et d'un terme de stabilisation s_h^{upw} :

$$a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) := a_h^{\text{cf}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) + s_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h), \quad (6.14a)$$

$$\begin{aligned} a_h^{\text{cf}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) &:= \int_{\Omega} \{\alpha \varphi_h \chi_h + (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h \varphi_h) \chi_h\} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi_h \chi_h \, ds \\ &\quad - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\![\varphi_h]\!] [\!\{\chi_h\}\!] \, ds, \end{aligned} \quad (6.14b)$$

$$s_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) := \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\![\varphi_h]\!] [\!\{\chi_h\}\!] \, ds. \quad (6.14c)$$

La forme a_h^{cf} est quasiment celle que l'on s'attend à obtenir à partir de la formulation variationnelle (6.10) : l'ajout de la somme sur les interfaces permet de garantir sa coercivité au niveau discret, tout en maintenant sa consistance (voir [PE11, section 2.2.1] pour une explication plus détaillée). La forme s_h^{upw} , quant à elle, est un terme de pénalisation des sauts de la solution approchée à travers les interfaces, au sens des moindres carrés, et justifie l'appellation « décentrage amont » (*upwind* en anglais). L'étude de cas présentée dans la section 4.10 de [Sar16] permet de comprendre pourquoi ce terme de décentrage amont s'avère nécessaire pour la discrétisation des équations de transport : autrement, la solution peut présenter des oscillations parasites.

Remarque 6.2.1 – Champ d'advection discontinu aux interfaces : Dans le cas où le champ d'advection dépend d'un champ scalaire potentiellement discontinu aux interfaces du maillage, c'est-à-dire si l'on remplace \mathbf{v}_h par $\zeta_h \mathbf{v}_h$, avec $\zeta_h \in \mathcal{P}^l$, où l est un entier, nous proposons de remplacer \mathbf{v}_h dans les termes exprimés sur les faces du maillage de la forme bilinéaire a_h^{upw} par $\{\!\{\zeta_h\}\!\} \mathbf{v}_h$. Nous notons ainsi $\hat{a}_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h, \zeta_h)$ la forme qui résulte de cette substitution. On rencontrera ce cas lors de la discrétisation de l'équation d'évolution de la polarité dans le cas compressible (voir section 7.2), où le champ d'advection sera de la forme $\rho_h \mathbf{v}_h$.

6.2.4. Estimation d'énergie continue

Dans le cadre du problème de transport 6.2.1, on définit l'énergie $\mathcal{E}(\varphi) := \frac{1}{2} \|\varphi\|_2^2$. Il est alors possible d'obtenir une estimation de cette énergie à partir de la formulation variationnelle (6.10) :

Proposition 6.2.1 – Estimation d'énergie

Si φ est solution du problème 6.2.1, alors

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \alpha_0 \mathcal{E}(\varphi) + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{4} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| \varphi^2 ds \leq \frac{1}{2\alpha_0} \|f\|_2^2 + \int_{\partial\Omega} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| g^2 ds. \quad (6.15)$$

De plus, si $f = 0$ et $g = 0$, alors

$$\mathcal{E}(\varphi(t)) \leq \mathcal{E}(\varphi_0) e^{-\alpha_0 t}. \quad (6.16)$$

Autrement dit, l'énergie décroît exponentiellement. Elle est donc bornée et $\varphi \in L^\infty(L^2(\Omega))$.

Les termes du membre de gauche de l'inégalité, excepté celui faisant intervenir la dérivée en temps, définissent la dissipation du système

$$\mathcal{D}(\varphi) := \alpha_0 \mathcal{E}(\varphi) + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{4} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| \varphi^2 ds. \quad (6.17)$$

En effet, de par leur signe positif, ils contribuent à la décroissance de l'énergie.

Démonstration. Nous reprenons la méthodologie employée dans la section 3.1.1.3 de [PE11] pour la démonstration.

En prenant $\chi = \varphi$ dans (6.10), on obtient dans un premier temps

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \varphi dx + \int_{\Omega} [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi] \varphi dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi^2 ds \\ = \int_{\Omega} f \varphi dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta g \varphi ds. \quad (*.1) \end{aligned}$$

En remarquant que $\partial_t \varphi \varphi = \frac{1}{2} \partial_t (\varphi^2)$ et que $[(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi] \varphi = \frac{1}{2} (\mathbf{v} \cdot \nabla)(\varphi^2)$, on obtient ensuite

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \underbrace{\int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} (\mathbf{v} \cdot \nabla)(\varphi^2) + \alpha \varphi^2 \right) dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi^2 ds}_{A :=} \\ = \int_{\Omega} f \varphi dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta g \varphi ds. \quad (*.2) \end{aligned}$$

On utilise ensuite la relation $\operatorname{div}(\chi \mathbf{v}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \chi + \chi \operatorname{div} \mathbf{v}$ puis on intègre par parties, en

remarquant que $\frac{1}{2}x + x^\Theta = \frac{1}{2}|x|$, ce qui permet de transformer le terme A :

$$\begin{aligned} A &= \int_{\Omega} \tilde{\alpha} \varphi^2 d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\varphi^2 ds + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi^2 ds \\ &= \int_{\Omega} \tilde{\alpha} \varphi^2 d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2}|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|\varphi^2 ds. \end{aligned} \quad (*.3)$$

Ainsi,

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \int_{\Omega} \tilde{\alpha} \varphi^2 d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2}|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|\varphi^2 ds = \int_{\Omega} f \varphi d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta g \varphi ds. \quad (*.4)$$

Dans un second temps, on minore $\tilde{\alpha}$ par α_0 et on applique l'inégalité de Cauchy-Schwarz (B.1), ce qui donne

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + 2\alpha_0 \mathcal{E}(\varphi) + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2}|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|\varphi^2 ds &\leq \|f\|_2 \|\varphi\|_2 \\ &+ \left(\int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta g^2 ds \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (*.5)$$

On applique ensuite successivement deux fois l'inégalité de Young (B.2) en choisissant $\zeta = \alpha_0$ puis $\zeta = 1/2$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \alpha_0 \mathcal{E}(\varphi) + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{4}|\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|\varphi^2 ds &\leq \frac{1}{2\alpha_0} \|f\|_2^2 + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta g^2 ds \\ &\leq \frac{1}{2\alpha_0} \|f\|_2^2 + \int_{\partial\Omega} |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}|g^2 ds \end{aligned} \quad (*.6)$$

Nous avons choisi ici des coefficients ζ qui n'annulent pas les termes positifs dans le membre de gauche de l'inégalité, mais il était possible d'en trouver. Il est également toujours possible de minorer le membre de gauche uniquement par la dérivée en temps de l'énergie.

D'après (6.15), si $f = 0$ et $g = 0$, alors

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \alpha_0 \mathcal{E}(\varphi) \leq 0. \quad (*.7)$$

On conclut en appliquant le lemme B.1.3 de Gronwall. ■

6.2.5. Estimation d'énergie semi-discreté

Dans le cadre du problème de transport 6.2.1, de manière analogue au cas continu, la quantité $\mathcal{E}(\varphi_h) := \frac{1}{2} \|\varphi_h\|_2^2$ désigne aussi l'énergie dans le cas semi-discret. L'estimation d'énergie semi-discreté suivante est alors satisfaite.

Proposition 6.2.2 – Estimation d'énergie semi-discreté –

Si φ_h est solution du problème 6.2.3, alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi_h)) + \alpha_0 \mathcal{E}(\varphi_h) + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{4} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| \varphi_h^2 ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\varphi_h]^2 ds \\ \leq \frac{1}{2\alpha_0} \|f\|_2^2 + \int_{\partial\Omega} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| g^2 ds. \quad (6.18) \end{aligned}$$

En particulier, si $f = 0$ et $g = 0$, alors

$$\mathcal{E}(\varphi_h(t)) \leq \mathcal{E}(\pi_h \varphi_0) e^{-\alpha_0 t}. \quad (6.19)$$

Autrement dit, l'énergie décroît exponentiellement. Elle est donc bornée et $\varphi_h \in L^\infty(L^2(\Omega))$.

De manière analogue au cas continu, on obtient une dissipation discrète

$$\mathcal{D}_h(\varphi_h) := \mathcal{D}(\varphi_h) + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\varphi_h]^2 ds, \quad (6.20)$$

où $\mathcal{D}(\varphi_h)$ est défini par (6.17). Remarquons en particulier que le dernier terme est purement numérique ; il a d'ailleurs été introduit dans l'optique d'améliorer la stabilité du schéma.

Démonstration. La démonstration est fortement analogue à celle utilisée dans le cas continu, et nous nous permettrons donc quelques raccourcis par rapport à celle-ci.

En prenant $\chi_h = \varphi_h$ dans (6.11), on obtient dans un premier temps

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi_h)) + a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \varphi_h; \mathbf{v}_h) = \int_{\Omega} f \varphi_h dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus g \varphi_h ds. \quad (*.1)$$

Après application de la relation $[(\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \varphi] \varphi = \frac{1}{2} (\mathbf{v}_h \cdot \nabla)(\varphi^2)$, on intègre par parties à

l'aide de la proposition B.5.3 (avec les substitutions $\varphi_h \leftrightarrow \frac{1}{2}\varphi_h^2$ et $\chi_h = 1$), ce qui donne

$$\begin{aligned} a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \varphi_h; \mathbf{v}_h) &= \int_{\Omega} \tilde{\alpha} \varphi^2 dx + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \varphi_h^2 ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \frac{1}{2} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\varphi_h^2] ds \\ &+ \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi_h^2 ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\chi_h] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \chi_h \} \right\} [\varphi_h] ds. \quad (*.2) \end{aligned}$$

En remarquant que $\frac{1}{2}x + x^\Theta = \frac{1}{2}|x|$ et en appliquant le lemme B.5.1, on obtient ensuite

$$a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \varphi_h; \mathbf{v}_h) = \int_{\Omega} \tilde{\alpha} \varphi^2 dx + \int_{\partial\Omega} \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| \varphi_h^2 ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\chi_h]^2 ds. \quad (*.3)$$

On conclut de la même manière que dans la démonstration de l'estimation d'énergie continue, avec les inégalités de Cauchy-Schwarz et de Young. L'équation (6.19) s'obtient de manière similaire au cas continu. ■

6.3. Équation de diffusion hétérogène

Dans cette section, nous formalisons la discrétisation d'une équation de diffusion hétérogène à l'aide d'une méthode dG avant de proposer des estimations d'énergie continue et semi-discrète. Nous introduisons en particulier une version discrète d'un opérateur de diffusion hétérogène par la méthode dG en considérant l'équation linéaire de diffusion hétérogène.

6.3.1. Position du problème

On considère une équation de diffusion

Problème 6.3.1 – Diffusion hétérogène. Trouver $\varphi: \Omega \times]0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \text{div}(\rho \nabla \varphi) = f \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \\ \varphi(t=0) = \varphi_0 \quad \text{dans } \Omega, \end{array} \right. \quad (6.21a)$$

$$\varphi = g_D \quad \text{sur } \Gamma_D \times]0, +\infty[, \quad (6.21b)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = g_N \quad \text{sur } \Gamma_N \times]0, +\infty[, \quad (6.21c)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = g_N \quad \text{sur } \Gamma_N \times]0, +\infty[, \quad (6.21d)$$

où $\rho \in L^\infty(\Omega)$ est la densité, supposée donnée et uniformément minorée par la constante $\rho_c > 0$, que l'on retrouvera dans les estimations d'énergie (6.31) et (6.36), f est le second

membre, φ_0 est la condition initiale, g_D est la condition de Dirichlet et g_N est la condition de Neumann. On suppose par commodité que ρ , g_D et g_N ne dépendent pas du temps, contrairement à f . Dans ce contexte, Γ_D et Γ_N forment une partition de la frontière $\partial\Omega$.

6.3.2. Formulation variationnelle

Soit $X(g) := \{\chi \in H^1(\Omega) \mid \chi|_{\Gamma_D} = g\}$. La formulation faible du problème 6.3.1 s'énonce comme suit.

Problème 6.3.2 – Formulation variationnelle. Étant donné la condition initiale (6.21b), trouver $\varphi \in \mathcal{C}^1(X(g_D))$ tel qu'en tout instant $t > 0$,

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t}(t) \chi \, dx + \int_{\Omega} \rho \nabla \varphi(t) \cdot \nabla \chi \, dx = \int_{\Omega} f(t) \chi \, dx + \int_{\Gamma_N} \rho g_N \chi \, ds, \quad (6.22)$$

quel que soit $\chi \in X(0)$.

Remarquons que contrairement au cas du problème 6.2.2 de transport, la condition de Dirichlet (6.21c) a été imposée fortement.

Démonstration. Testons l'équation (6.21a) avec $\chi \in X(0)$, puis intégrons par parties :

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \chi \, dx + \int_{\Omega} \rho \nabla \varphi \cdot \nabla \chi \, dx - \int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial n} \chi \, ds = \int_{\Omega} f \chi \, dx. \quad (*.1)$$

En décomposant l'intégrale sur le bord et en utilisant la condition de Neumann (6.21d), on obtient (6.22) puisque $\chi = 0$ sur Γ_D . ■

6.3.3. Discrétisation

Suivant la procédure présentée à la section 6.1.2, nous introduisons $X_h := \mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h)$. D'après [PE11, sections 4.2 et 4.5], une solution approchée du problème 6.3.2 peut être obtenue en résolvant le

Problème 6.3.3 – Discrétisation. Trouver $\varphi_h \in \mathcal{C}^1(X_h)$ tel qu'en tout instant $t > 0$,

$$\left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t}(t) \Big| \chi_h \right) + a_h^{\text{swip}}(\varphi_h(t), \chi_h; \rho_h) = (f(t) \mid \chi_h) + l_h^{\text{swip}}(\chi_h; \rho_h), \quad \forall \chi_h \in X_h, \quad (6.23)$$

et satisfaisant la condition initiale $\varphi_h(t = 0) = \pi_h \varphi_0$. La densité ρ a été remplacée par sa version discrète ρ_h , que l'on suppose aussi donnée.

Dans cette formulation faible discrète ont été introduites la

Définition 6.3.1 – Forme bilinéaire symétrique pondérée de pénalité intérieure

La forme bilinéaire symétrique pondérée de pénalité intérieure (*symmetric weighted interior penalty* en anglais, *swip* en abrégé) est définie par

$$a_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h) := \int_{\Omega} \rho_h \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h \chi_h \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} C \varpi_S \int_S \eta_{\rho_h, S} [\![\varphi_h]\!] [\!\chi_h]\!] \, ds \\ - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left(\left\{ \left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\} \right\}_{\omega} [\!\chi_h]\!] + [\![\varphi_h]\!] \left\{ \left\{ \rho_h \frac{\partial \chi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\} \right\}_{\omega} \right) \, ds, \quad (6.24)$$

où l'on a noté $\mathcal{S}_h^D := \{S \in \mathcal{S}_h^b \mid \exists K \in \mathcal{T}_h, S = \partial K \cap \Gamma_D\}$ l'ensemble des faces de la frontière Γ_D . Suivant [Sar20, section 4.3.1], $C = (k+1)(k+d)/d$ est un paramètre de pénalité (on rappelle que d est la dimension) et ϖ_S est une échelle locale de longueur associée à la face S , définie par [Sha05]

$$\varpi_S := \begin{cases} \max\left(\frac{|\partial K^-|}{|K^-|}, \frac{|\partial K^+|}{|K^+|}\right) & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+, \\ \frac{|\partial K|}{|K|} & \text{si } S = \partial K \cap \partial \Omega. \end{cases} \quad (6.25)$$

Dans ce contexte, $|\cdot|$ désigne la mesure d'un ensemble. On rappelle enfin que $\eta_{\rho_h, S}$ est la moyenne harmonique de ρ_h sur S (cf. équation (6.8d)).

et la

Définition 6.3.2 – Forme linéaire symétrique pondérée de pénalité intérieure

La forme linéaire symétrique pondérée de pénalité intérieure (*symmetric weighted interior penalty* en anglais, *swip* en abrégé) est définie par

$$l_h^{\text{swip}}(\chi_h; \rho_h) := \int_{\Gamma_N} \rho_h g_N \chi_h \, ds - \int_{\Gamma_D} \rho_h g_D \nabla_h \chi_h \cdot \mathbf{n} \, ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^D} C \varpi_S \int_S \rho_h g_D \chi_h \, ds, \quad (6.26)$$

où C et ϖ_S ont été définis dans la définition 6.3.1.

Dans ce contexte, les poids ω , qui interviennent dans les moyennes pondérées $\{\cdot\}_{\omega}$ de (6.24), ont été choisis relativement au coefficient de diffusion, c'est-à-dire

$$\omega_{K^-, S} = \frac{\rho_h^+}{\rho_h^- + \rho_h^+} \text{ et } \omega_{K^+, S} = \frac{\rho_h^-}{\rho_h^- + \rho_h^+}, \quad (6.27)$$

où l'on a noté $\rho_h^- := \rho_h|_{K^-}$ et $\rho_h^+ := \rho_h|_{K^+}$. En particulier, le cas de la diffusion homogène donne la moyenne arithmétique habituelle (6.8b). Lorsque $\rho_h^- = \rho_h^+ = 0$, on pose $\omega_{K^-, S} = \omega_{K^+, S} = 0$. Notons finalement que les conditions aux limites ont été imposées faiblement, c'est-à-dire par pénalisation, comme dans le cas du transport (cf. section 6.2.3).

6.3. Équation de diffusion hétérogène

La forme a_h^{swip} se compose d'une forme bilinéaire consistante et symétrique a_h^{cs} et d'un terme de stabilisation s_h^{swip} :

$$a_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h) := a_h^{\text{cs}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h) + s_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h), \quad (6.28a)$$

$$a_h^{\text{cs}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h) = \int_{\Omega} \rho_h \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h \chi_h \, dx - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left(\left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_{\omega} [\chi_h] + [\varphi_h] \left\{ \rho_h \frac{\partial \chi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_{\omega} \right) ds, \quad (6.28b)$$

$$s_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h) := \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} C\varpi_S \int_S \eta_{\rho_h, S} [\varphi_h] [\chi_h] \, ds. \quad (6.28c)$$

La forme a_h^{cs} est presque celle que l'on s'attend à obtenir à partir de la formulation variationnelle (6.22) : l'ajout de la somme sur les interfaces permet de garantir sa consistance au niveau discret, tout en maintenant son caractère symétrique (voir [PE11, section 4.2.1] pour une explication plus détaillée). Elle n'est par contre pas coercive. Pour y remédier, la forme s_h^{swip} a été introduite comme terme de pénalisation des sauts de la solution approchée à travers les interfaces, au sens des moindres carrés, de manière similaire au cas du problème de transport (cf. section 6.2.3).

6.3.4. Estimation d'énergie continue

Nous proposons deux estimations d'énergie dans le cas continu. La première estimation, la plus classique (cf. [PE11, lemme 4.70]), consiste à utiliser la norme L^2 de la solution du problème variationnel comme énergie. La seconde approche définit une énergie qui fait intervenir la norme L^2 du gradient de la solution du problème variationnel.

Estimation d'énergie L^2

Proposition 6.3.1 – Estimation d'énergie L^2

Si φ est solution du problème 6.3.1, alors

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \mathcal{D}(\varphi) \leq \frac{C_{\Omega}^2}{\rho_c} \|f\|_2^2 + K_{\Omega}^2 (C_{\Omega} + 1) \frac{\|\rho\|_{\infty}^2}{\rho_c} \int_{\Gamma_N} g_N^2 \, ds, \quad (6.29)$$

où $\mathcal{E}(\varphi) = \frac{1}{2} \|\varphi\|_2^2$ est l'énergie, $\mathcal{D}(\varphi) := \frac{\rho_c}{2} \|\nabla \varphi\|_2^2$ est la dissipation, C_{Ω} est la constante provenant de l'inégalité de Poincaré (B.6), K_{Ω} est la constante provenant du théorème B.1.5 de la trace et $\|\cdot\|_{\infty}$ est la norme $L^{\infty}(\Omega)$.

En particulier, si $f = 0$ et $g_N = 0$, alors

$$\mathcal{E}(\varphi(t_2)) \leq \mathcal{E}(\varphi(t_1)) \leq \mathcal{E}(\varphi_0), \quad (6.30)$$

pour tous instants $t_1, t_2 \in]0, +\infty[$ tels que $t_1 < t_2$. Autrement dit, l'énergie libre décroît dans le temps, est bornée et $\varphi \in L^\infty(L^2(\Omega))$.

Démonstration. En prenant $\chi = \varphi$ dans (6.22), on obtient

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \int_{\Omega} \rho |\nabla \varphi|^2 dx = \int_{\Omega} f \varphi dx + \int_{\Gamma_N} \rho g_N \varphi ds. \quad (*.1)$$

On minore ensuite ρ par ρ_c et on applique l'inégalité de Cauchy-Schwarz (B.1) aux deux membres de droite, ce qui donne

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \int_{\Omega} \rho_c |\nabla \varphi|^2 dx \leq \|f\|_2 \|\varphi\|_2 + \|\rho\|_\infty \left(\int_{\Gamma_N} g_N^2 ds \right)^{1/2} \left(\int_{\Gamma_N} \varphi^2 ds \right)^{1/2}. \quad (*.2)$$

On applique ensuite l'inégalité de Poincaré (B.6) au premier terme du membre de droite et celle du théorème de la trace (B.7) au second terme du membre de droite

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) + \int_{\Omega} \rho_c |\nabla \varphi|^2 dx \leq C_\Omega \|f\|_2 \|\nabla \varphi\|_2 + K_\Omega \|\rho\|_\infty \left(\int_{\Gamma_N} g_N^2 ds \right)^{1/2} \sqrt{\|\varphi\|_2^2 + \|\nabla \varphi\|_2^2}$$

puis à nouveau l'inégalité de Poincaré au second terme

$$\leq C_\Omega \|f\|_2 \|\nabla \varphi\|_2 + K_\Omega \sqrt{C_\Omega + 1} \|\rho\|_\infty \left(\int_{\Gamma_N} g_N^2 ds \right)^{1/2} \|\nabla \varphi\|_2^2$$

et enfin l'inégalité de Young (B.2) deux fois de suite sur chaque terme du membre de droite, en choisissant $\varsigma = \rho_c/2$ dans les deux cas

$$\leq \frac{\rho_c}{2} \|\nabla \varphi\|_2 + \frac{C_\Omega^2}{\rho_c} \|f\|_2^2 + K_\Omega^2 (C_\Omega + 1) \frac{\|\rho\|_\infty^2}{\rho_c} \int_{\Gamma_N} g_N^2 ds, \quad (*.3)$$

d'où le résultat.

L'équation (6.30) s'obtient directement à l'aide d'une intégration en temps de l'équation

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\varphi)) \leq 0, \quad (*.4)$$

qui s'obtient lorsque $f = 0$ et $g_N = 0$. ■

Estimation d'énergie H^1

Pour la seconde approche, nous définissons l'énergie par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} |\nabla \varphi|^2 dx - \int_{\Gamma_D} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} ds + \int_{\Gamma_D} \rho g_D \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} ds - \int_{\Gamma_N} \rho g_N \varphi ds. \quad (6.31)$$

On a alors l'estimation d'énergie suivante.

Proposition 6.3.2 – Estimation d'énergie H^1

Si φ est solution du problème 6.3.1 et ρ ne dépend pas du temps, alors

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) + \frac{1}{2} \|\operatorname{div}(\rho \varphi)\|_2^2 \leq \frac{1}{2} \|f\|_2^2, \quad (6.32)$$

où l'énergie \mathcal{E} est définie par (6.31).

En particulier, si $f = 0$, alors

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi(t_2)) \leq \mathcal{E}(\rho, \varphi(t_1)) \leq \mathcal{E}(\rho, \varphi_0), \quad (6.33)$$

pour tous instants $t_1, t_2 \in]0, +\infty[$ tels que $t_1 < t_2$. Autrement dit, l'énergie libre décroît dans le temps et est bornée. De plus, si $g_D = 0$ et $g_N = 0$, alors $\varphi \in L^\infty(H^1(\Omega))$.

Remarquons que cette estimation, contrairement à celle de l'équation de transport (6.15) ou à celle obtenue avec la première méthode (6.29), ne fait pas explicitement intervenir les conditions aux limites g_D et g_N , qui ne contribuent donc pas aux variations temporelles de l'énergie. À notre connaissance, cette estimation d'énergie n'a jamais été considérée dans la littérature. Nous l'avons déterminée en nous inspirant des techniques générales de la thermodynamique développées dans la première partie de cette thèse, en particulier dans le chapitre 3, et des méthodes dG présentées plus haut.

Dans ce second cas, la dissipation est donnée par

$$\mathcal{D}(\varphi) := \frac{1}{2} \|\operatorname{div}(\rho \varphi)\|_2^2. \quad (6.34)$$

Démonstration. Dans un premier temps, on obtient

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi) = -\operatorname{div}(\rho \varphi) \quad (*.1)$$

directement à partir des propositions B.3.6, B.3.8 et B.3.9, en remarquant que les termes

$$\int_{\Gamma_D} \rho g_D \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} ds - \int_{\Gamma_N} \rho g_N \varphi ds \quad (*.2)$$

sont linéaires en φ .

Tester l'équation (6.21a) avec χ donne

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \chi \, dx + \int_{\Omega} -\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) \chi \, dx = \int_{\Omega} f \chi \, dx. \quad (*.3)$$

Nous prenons alors $\chi = -\operatorname{div}(\rho \varphi)$, de sorte que

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \mid -\operatorname{div}(\rho \varphi) \right) + \|\operatorname{div}(\rho \varphi)\|_2^2 = (f \mid -\operatorname{div}(\rho \varphi)). \quad (*.4)$$

Or par la formule de différentiation des fonctions composées (théorème B.3.2) et d'après (*.1),

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\rangle = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \mid -\operatorname{div}(\rho \varphi) \right), \quad (*.5)$$

donc

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) + \|\operatorname{div}(\rho \varphi)\|_2^2 = (f \mid -\operatorname{div}(\rho \varphi)). \quad (*.6)$$

On conclut avec l'inégalité de Cauchy-Schwarz (B.1) et celle de Young (B.2) en prenant $\varsigma = 1$.

L'équation (6.33) s'obtient directement à l'aide d'une intégration en temps de l'équation

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) \leq 0, \quad (*.7)$$

qui s'obtient lorsque $f = 0$. Ensuite, si $g_D = 0$ et $g_N = 0$, alors (6.31) devient

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) = \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} |\nabla \varphi|^2 \, dx, \quad (*.8)$$

puisque φ est solution du problème 6.3.1, donc vérifie la condition de Dirichlet (6.21c) fortement. D'où $\varphi \in L^{\infty}(H^1(\Omega))$. ■

6.3.5. Estimation d'énergie semi-discrète

Selon la méthode utilisée, nous obtenons donc deux couples énergie-dissipation possibles. Dans la suite, nous appliquerons uniquement la seconde méthode car elle permettra, pour notre problème, de compenser certains termes apparaissant dans le tenseur des contraintes.

Nous aurons besoin des définitions suivantes.

Définition 6.3.3 – Opérateur de diffusion discret

On note Z_h l'espace associé à ρ_h . On définit l'opérateur de diffusion (ou $-\operatorname{div}(\rho \nabla \square)$)

6.3. Équation de diffusion hétérogène

discret $\mathcal{L}_h^{\text{swip}}: \mathbf{Z}_h \times \mathbf{X}_h \rightarrow \mathbf{X}_h$ tel que, pour tous $\rho_h \in \mathbf{Z}_h$ et $\varphi_h, \chi_h \in \mathbf{X}_h$,

$$(\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h) \mid \chi_h) = a_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; z_h) - l_h^{\text{swip}}(\chi_h; z_h), \quad (6.35)$$

où a_h^{swip} et l_h^{swip} sont définies respectivement par (6.24) et (6.26).

Définition 6.3.4 – Énergie semi-discrète

L'énergie semi-discrète $\mathcal{E}_h^{\text{swip}}$ est définie par

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h) := & \int_{\Omega} \frac{\rho_h}{2} |\nabla_h \varphi_h|^2 \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \frac{C}{2} \varpi_S \eta_{\rho_h, S} [\![\varphi_h]\!]^2 \, ds \\ & - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left\{ \left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\} \right\}_{\omega} [\![\varphi_h]\!] \, ds - l_h^{\text{swip}}(\varphi_h; \rho_h), \end{aligned} \quad (6.36)$$

où l_h^{swip} est définie par (6.26).

Lemme 6.3.3 – Lien entre $\mathcal{E}_h^{\text{swip}}$ et $\mathcal{L}_h^{\text{swip}}$

L'énergie semi-discrète (6.36) vérifie pour tout $\chi_h \in \mathbf{X}_h$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{swip}}}{\partial \varphi_h}(\rho_h, \varphi_h), \chi_h \right\rangle = (\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h) \mid \chi_h), \quad (6.37)$$

où l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{swip}}$ est défini par (6.35). Par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz, on peut donc dire que $\frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{swip}}}{\partial \varphi_h} = \mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h)$.

Démonstration. On décompose l'énergie semi-discrète (6.36) en quatre parties :

$$\mathcal{E}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h) = \tilde{\mathcal{E}}_h(\varphi_h) + \mathcal{S}_h(\varphi_h) - \mathcal{E}_h^{\partial}(\varphi_h) - l_h^{\text{swip}}(\varphi_h) \quad (*.1a)$$

où

$$\tilde{\mathcal{E}}_h(\varphi_h) := \int_{\Omega} \frac{\rho_h}{2} |\nabla_h \varphi_h|^2 \, dx \quad (*.1b)$$

$$\mathcal{S}_h(\varphi_h) := \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \frac{C}{2} \varpi_S \eta_{\rho_h, S} [\![\varphi_h]\!]^2 \, ds \quad (*.1c)$$

et

$$\mathcal{E}_h^{\partial}(\varphi_h) := \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left\{ \left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\} \right\}_{\omega} [\![\varphi_h]\!] \, ds. \quad (*.1d)$$

Notre but est donc de calculer les différentielles de chacun de ces termes.

- On obtient directement à partir de la proposition B.3.8 sans réaliser l'intégration par parties

$$\langle \tilde{\mathcal{E}}'_h(\varphi_h), \chi_h \rangle = \int_{\Omega} \rho_h \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h \chi_h \, dx. \quad (*.2)$$

- On calcule par linéarité de l'opérateur de saut

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_h(\varphi_h + h\chi_h) - \mathcal{S}_h(\varphi_h) &= \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \frac{C}{2} \varpi_S \eta_{\rho_h, S} (\llbracket \varphi_h + h\chi_h \rrbracket^2 - \llbracket \varphi_h \rrbracket^2) \, ds \\ &= \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S C \varpi_S \eta_{\rho_h, S} \left(h \llbracket \varphi_h \rrbracket \llbracket h\chi_h \rrbracket + \frac{h^2}{2} \llbracket \chi_h \rrbracket^2 \right) \, ds \\ &= hs_h(\varphi_h, \chi_h) + h^2 \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \frac{C}{2} \varpi_S \eta_{\rho_h, S} \llbracket \chi_h \rrbracket^2 \, ds, \end{aligned} \quad (*.3)$$

d'après (6.28c). On conclut en divisant par h et en le faisant tendre vers 0 que

$$\langle \mathcal{S}'_h(\varphi_h), \chi_h \rangle = s_h(\varphi_h, \chi_h). \quad (*.4)$$

- On calcule par linéarité des opérateurs de saut et moyenne

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_h^\partial(\varphi_h + h\chi_h) - \mathcal{E}_h^\partial(\varphi_h) &= \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left\{ \left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} + h \rho_h \frac{\partial \chi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \right\} \llbracket \varphi_h + h\chi_h \rrbracket \, ds \\ &\quad - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left\{ \left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \right\} \llbracket \varphi_h \rrbracket \, ds \\ &= h \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left(\left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \llbracket \chi_h \rrbracket + \llbracket \varphi_h \rrbracket \left\{ \rho_h \frac{\partial \chi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \right) \, ds \\ &\quad - h^2 \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left\{ \rho_h \frac{\partial \chi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \llbracket \chi_h \rrbracket \, ds. \end{aligned} \quad (*.6)$$

On conclut en divisant par h et en le faisant tendre vers 0 que

$$\langle [\mathcal{E}_h^\partial]'(\varphi_h), \chi_h \rangle = \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left(\left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \llbracket \chi_h \rrbracket + \llbracket \varphi_h \rrbracket \left\{ \rho_h \frac{\partial \chi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_\omega \right) \, ds. \quad (*.7)$$

- Le dernier terme est linéaire, on peut donc appliquer la proposition B.3.6, d'où

$$\langle [l_h^{\text{swip}}]'(\varphi_h), \chi_h \rangle = l_h^{\text{swip}}(\chi_h). \quad (*.8)$$

On conclut en remarquant que la somme de (*.2), (*.4), (*.7) et (*.8) (en respectant les signes présents dans (*.1a)) donne $(\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\varphi_h) \mid \chi_h)$. ■

Proposition 6.3.4 – Estimation d'énergie semi-discrète –

Si φ_h est solution du problème 6.3.3 et ρ_h ne dépend pas du temps, alors

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h)) + \frac{1}{2} \|\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h)\|_2^2 \leq \frac{1}{2} \|f\|_2^2, \quad (6.38)$$

où l'énergie semi-discrète $\mathcal{E}_h^{\text{swip}}$ est définie par (6.36) et l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{swip}}$ par (6.35). En particulier, si $f = 0$, alors

$$\mathcal{E}_h(\rho_h, \varphi_h(t_2)) \leq \mathcal{E}_h(\rho_h, \varphi_h(t_1)) \leq \mathcal{E}_h(\rho_h, \pi_h \varphi_0), \quad (6.39)$$

pour tous instants $t_1, t_2 \in]0, +\infty[$ tels que $t_1 < t_2$. Autrement dit, l'énergie libre décroît dans le temps et est bornée.

La dissipation discrète obtenue s'écrit donc

$$\mathcal{D}_h(\varphi_h) := \frac{1}{2} \|\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h)\|_2^2. \quad (6.40)$$

Elle est similaire à celle du cas continu (6.34) dans la mesure où l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{swip}}$ est une version discrète de $-\text{div}(\rho \nabla \square)$.

Démonstration. On réécrit (6.23) en utilisant la définition du laplacien discret (6.35) :

$$\left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t} \mid \chi_h \right) + (\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h) \mid \chi_h) = (f \mid \chi_h). \quad (*.1)$$

On choisit alors $\chi_h = \mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\varphi_h)$ et on utilise le lemme 6.3.3 pour obtenir

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}_h^{\text{swip}}(\varphi_h)) + \|\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h)\|_2^2 = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{swip}}}{\partial \varphi_h}(\rho_h, \varphi_h), f \right\rangle. \quad (*.2)$$

On conclut avec l'inégalité de Cauchy-Schwarz (B.1) et celle de Young (B.2) en prenant $\zeta = 1$.

L'équation (6.39) s'obtient directement à l'aide d'une intégration en temps de l'équation

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}_h(\varphi_h)) \leq 0, \quad (*.3)$$

qui s'obtient lorsque $f = 0$. ■

6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction

L'équation d'évolution de la polarité (cf. (5.47c) pour le cas incompressible et (5.49c) pour le cas compressible) a une structure d'équation de diffusion-advection-réaction. Diffusion à cause du laplacien, advection à cause du terme de transport et réaction, en quelque sorte, à cause du terme en double puits. Nous rappelons ici comment appliquer la méthode de dG (cf. [PE11, section 4.6]) à ce type de problèmes et proposons une extension lorsque le champ d'advection dépend d'un champ scalaire potentiellement discontinu aux interfaces du maillage. Nous démontrons également quelques résultats utiles pour déterminer des estimations d'énergie dans les cas continu et semi-discret.

6.4.1. Position du problème

On considère une équation de diffusion-advection-réaction

Problème 6.4.1 – Diffusion hétérogène-advection-réaction. Trouver $\varphi: \Omega \times]0, +\infty[\rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi + \rho \varphi - \operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) = f \quad \text{dans } \Omega \times]0, +\infty[, \\ \varphi(t=0) = \varphi_0 \quad \text{dans } \Omega, \\ \varphi = g_D \quad \text{sur } \Gamma_D \times]0, +\infty[, \\ (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi + \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = g_N \quad \text{sur } \Gamma_N \times]0, +\infty[, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (6.41a) \\ (6.41b) \\ (6.41c) \\ (6.41d) \end{array}$$

où l'on a utilisé les mêmes notations que dans les sections 6.2 et 6.3. Nous supposons ici que \mathbf{v} est donnée, que g_D et g_N ne dépendent pas du temps, que f peut au contraire en dépendre, et finalement que ρ est solution de l'équation de continuité (2.1), soit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (6.42)$$

La condition (6.41d) est une condition de Robin dans la zone de flux entrant $\partial\Omega_-$ et une condition de Neumann classique partout ailleurs. Elle met en évidence le flux de diffusion-advection $\mathbf{j}(\varphi) := \varphi \mathbf{v} - \rho \nabla \varphi$ puisqu'elle impose $-\mathbf{j}(\varphi) \cdot \mathbf{n} = g_N$ sur le bord $\Gamma_N \cap \partial\Omega_-$ [PE11, section 7.1.2.2]. Nous verrons dans la section 6.4.4 que ce choix de conditions aux limites amène un terme supplémentaire difficile à interpréter dans l'estimation d'énergie continue, qu'une condition de type Neumann n'amènerait pas ; c'est d'ailleurs le choix que nous avons fait dans notre modèle. Nous considérons malgré tout cette condition pour justifier ce propos.

6.4.2. Formulation variationnelle

Soit $X(g) := \{\chi \in H^1(\Omega) \mid \chi|_{\Gamma_D} = g\}$. Une formulation variationnelle du problème 6.4.1 s'écrit

Problème 6.4.2 – Formulation variationnelle. Trouver $\varphi \in \mathcal{C}^1(X(g_D))$ tel qu'en tout instant $t > 0$,

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t}(t) \chi \, dx + \int_{\Omega} [(\boldsymbol{v}(t) \cdot \nabla) \varphi(t) + \rho(t) \varphi(t)] \chi \, dx + \int_{\Omega} \rho(t) \nabla \varphi(t) \cdot \nabla \chi \, dx \\ & + \int_{\Gamma_N} (\boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{n})^\Theta \varphi(t) \chi \, ds = \int_{\Omega} f(t) \chi \, dx + \int_{\partial\Omega} g_N \chi \, ds, \quad \forall \chi \in X(0), \end{aligned} \quad (6.43)$$

et satisfaisant la condition initiale (6.41b).

Démonstration. La démonstration est très similaire à celle du problème de diffusion 6.3.2. On multiplie l'équation (6.41a) par $\chi \in X(0)$, puis on intègre par parties le laplacien hétérogène :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \chi \, dx + \int_{\Omega} [(\boldsymbol{v} \cdot \nabla) \varphi + \rho \varphi] \chi \, dx + \int_{\Omega} \rho \nabla \varphi \cdot \nabla \chi \, dx \\ & - \int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{n}} \chi \, ds = \int_{\Omega} f \chi \, dx. \end{aligned} \quad (*.1)$$

En décomposant l'intégrale sur le bord et en utilisant la condition de Neumann (6.41d), on obtient

$$\int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{n}} \chi \, ds = - \int_{\Gamma_N} (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n})^\Theta \varphi \chi \, ds + \int_{\Gamma_N} g_N \chi \, ds, \quad (*.2)$$

puisque $\chi = 0$ sur Γ_D , d'où le résultat. ■

Remarquons que (6.43) se reformule de manière équivalente sous la forme

$$\int_{\Omega} (\rho - \operatorname{div} \boldsymbol{v}) \varphi \chi \, dx - \int_{\Omega} \boldsymbol{j}(\varphi) \cdot \nabla \chi \, dx + \int_{\Gamma_N} (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n})^\Theta \varphi \chi \, ds = \int_{\Omega} f \chi \, dx + \int_{\partial\Omega} g_N \chi \, ds. \quad (6.44)$$

Cette forme est dite conservative car elle met en évidence le flux de diffusion-advection $\boldsymbol{j}(\varphi) := \varphi \boldsymbol{v} - \rho \nabla \varphi$ évoqué plus haut.

6.4.3. Discréétisation

Dans cette section, nous notons \boldsymbol{v}_h une approximation en espace donnée de la vitesse \boldsymbol{v} . Nous supposons que l'approximation spatiale ρ_h de la densité est obtenue via une version

discrète de l'équation de continuité (6.42) faisant intervenir \mathbf{v}_h . Le choix de la discrétisation de (6.42) n'a pas d'importance dans cette section 6.4; nous en discutons plus en détail dans la section 7.2.3.

Pour la discrétisation du problème variationnel (6.43), suivant [PE11, section 4.6] et [Sar20, section 4.3.3], nous combinons les approches présentées dans les sections 6.2 et 6.3, ce qui donne la formulation discrète suivante :

Problème 6.4.3 – Discrétisation. Trouver $\varphi_h \in \mathcal{C}^1(\mathbf{X}_h)$ tel qu'en tout instant $t > 0$,

$$\left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t}(t) \Big| \chi_h \right) + (\rho_h(t) \varphi_h(t) | \chi_h) + a_h^{\text{dar}}(\varphi_h(t), \chi_h; \mathbf{v}_h(t), \rho_h(t)) = (f(t) | \chi_h) + l_h^{\text{dar}}(\chi_h; \mathbf{v}_h(t), \rho_h(t)), \quad \forall \chi_h \in \mathbf{X}_h, \quad (6.45)$$

et satisfaisant la condition initiale $\varphi_h(t = 0) = \pi_h \varphi_0$, où l'on rappelle que $\mathbf{X}_h := \mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h)$.

Comme annoncé, la forme utilisée ici est définie à partir des formes bilinéaires (6.13) et (6.24) :

$$a_h^{\text{dar}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h, \rho_h) := a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) + a_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h), \quad (6.46a)$$

où l'on a choisi $\alpha = 0$ dans a_h^{upw} . De manière analogue, la forme linéaire l_h^{dar} est définie par

$$l_h^{\text{dar}}(\chi_h; \mathbf{v}_h, \rho_h) := \int_{\Gamma_D} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta g_D \chi_h \, ds + l_h^{\text{swip}}(\chi_h; \rho_h). \quad (6.46b)$$

Remarque 6.4.I – Champ d'advection discontinu aux interfaces : Dans la continuité de la remarque 6.2.I, nous notons

$$\hat{a}_h^{\text{dar}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h, \rho_h) := \hat{a}_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h, \rho_h) + a_h^{\text{swip}}(\varphi_h, \chi_h; \rho_h) \quad (6.47)$$

lorsque le champ d'advection dépend d'un champ scalaire potentiellement discontinu aux interfaces du maillage.

6.4.4. Estimation d'énergie continue

Pour établir l'estimation d'énergie du problème 6.4.1 de diffusion-advection-réaction, nous souhaiterions utiliser une énergie similaire à celle employée dans la section 6.3.4, puis lui appliquer le théorème B.3.3. Malheureusement, ce théorème ne s'applique a priori pas si l'énergie contient des termes définis sur une partie de la frontière du domaine Ω , comme c'est le cas de l'énergie (6.31) associée au problème de diffusion 6.3.1. Ainsi, nous supposons que $\Gamma_D = \emptyset$, $\Gamma_N = \partial\Omega$ et $g_N = 0$. On considère donc un problème avec condition de Robin/Neumann homogène. Le cas général pourrait être envisagé dans une étude ultérieure.

Proposition 6.4.1 – Estimation d'énergie

Si φ est solution du problème 6.4.1 avec condition de Robin/Neumann homogène, c'est-à-dire

$$(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\ominus \varphi + \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ sur } \Gamma_N \times]0, +\infty[, \quad (6.48)$$

alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) + \int_{\partial\Omega} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})e(\varphi, \nabla \varphi) ds + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\ominus \varphi \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi) ds \\ + \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \varphi \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) : \nabla \mathbf{v} dx + \frac{1}{2} \left\| \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi) \right\|_2^2 \leq \frac{1}{2} \|f\|_2^2. \end{aligned} \quad (6.49)$$

où l'énergie \mathcal{E} est définie par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \rho e(\varphi, \nabla \varphi) dx, \quad (6.50a)$$

$$e(\varphi, \mathbf{y}) := \frac{1}{2} \varphi^2 + \frac{1}{2} |\mathbf{y}|^2 \quad (6.50b)$$

et sa différentielle par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \chi \right\rangle = (\rho \varphi - \operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) | \chi) + \int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \chi ds. \quad (6.51)$$

Remarque 6.4.II – Appellation « estimation d'énergie » : Le résultat obtenu ici n'est à proprement parler pas une estimation d'énergie, dans la mesure où les deuxième, troisième et quatrième termes dans le membre de gauche de (6.49) sont de signe arbitraire. Si l'on suppose $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$, on peut alors éliminer ces deuxième et troisième termes, mais le quatrième subsiste dans tous les cas. C'est un comportement attendu : le système en l'état n'est pas complet, et demande à ce que l'on rajoute une équation pour la variable \mathbf{v} qui pourrait être en mesure de compenser ce troisième terme. Les estimations d'énergie déterminées par la suite dans les sections 7.1 et 7.2 montrent précisément la procédure à suivre. Celles-ci se basent en particulier sur une condition de Neumann homogène pure (sans le terme $(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^\ominus \varphi$), permettant d'éliminer directement le troisième terme sans supposer que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$.

Démonstration. La différentielle de \mathcal{E} (6.51) s'obtient directement à partir de la proposition B.3.10 et de la condition de Neumann (6.48).

Testons maintenant l'équation (6.41a) avec χ en notant $\dot{\varphi} = \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi$:

$$\int_{\Omega} \dot{\varphi} \chi dx + \int_{\Omega} (\rho \varphi \chi - \operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) \chi) dx = \int_{\Omega} f \chi dx. \quad (*.1)$$

En utilisant la condition aux limites (6.48), on peut alors écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \dot{\varphi} \chi \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (\rho \varphi \chi - \operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) \chi) \, d\mathbf{x} \\ + \int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \chi \, ds + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^{\ominus} \varphi \chi \, ds = \int_{\Omega} f \chi \, d\mathbf{x}. \quad (*.2) \end{aligned}$$

On reconnaît alors l'expression de la différentielle de \mathcal{E} (6.51), d'où la reformulation

$$\int_{\Omega} \dot{\varphi} \chi \, d\mathbf{x} + \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \chi \right\rangle + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^{\ominus} \varphi \chi \, ds = \int_{\Omega} f \chi \, d\mathbf{x}. \quad (*.3)$$

À l'aide du théorème B.3.3 de représentation de Riesz, nous prenons maintenant $\chi = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi)$, de sorte que

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \dot{\varphi} \right\rangle + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^{\ominus} \varphi \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi) \, ds + \left\| \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi) \right\|_2^2 = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), f \right\rangle. \quad (*.4)$$

En utilisant ensuite le théorème B.3.12, on obtient finalement le résultat escompté, moyennant l'application habituelle des inégalités de Cauchy-Schwarz (B.1) et de Young (B.2) avec $\varsigma = 1$. ■

6.4.5. Estimation d'énergie semi-discrète

Cadre fonctionnel

Nous aurons besoin des définitions suivantes.

Définition 6.4.1 – Opérateur de dissipation discret

On définit l'opérateur de dissipation discret $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}: X_h \rightarrow X_h$ tel que pour tous $\rho_h \in Z_h$ et $\varphi_h, \chi_h \in X_h$,

$$(\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho_h, \varphi_h) \mid \varphi_h) = (\rho_h \varphi_h \mid \chi_h) + (\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h) \mid \chi_h), \quad (6.52)$$

où a_h^{swip} et l_h^{swip} sont définies dans la section 6.4.3.

Définition 6.4.2 – Énergie semi-discrète

L'énergie semi-discrète associée au problème 6.4.3 est définie par

$$\mathcal{E}_h^{\text{dar}}(\rho_h, \varphi_h) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho_h \varphi_h^2 \, d\mathbf{x} + \mathcal{E}_h^{\text{swip}}(\rho_h, \varphi_h), \quad (6.53)$$

où $\mathcal{E}_h^{\text{swip}}$ est l'énergie définie par (6.36).

6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction

Lemme 6.4.2 – Lien entre $\mathcal{E}_h^{\text{dar}}$ et $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}$

L'énergie semi-discrète (6.53) vérifie pour tout $\chi_h \in X_h$

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{dar}}}{\partial \varphi_h}(\rho_h, \varphi_h), \chi_h \right\rangle = (\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho_h, \varphi_h) \mid \chi_h), \quad (6.54)$$

où l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}$ est défini par (6.52). Par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz, on peut donc dire que $\frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{dar}}}{\partial \varphi_h}(\rho_h, \varphi_h) = \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho_h, \varphi_h)$.

Démonstration. Immédiat avec le lemme 6.3.3 et la proposition B.3.7. ■

Proposition 6.4.3 – Intégration par parties d'une fonctionnelle discrète abstraite

Soit \mathcal{E}_h la fonctionnelle définie pour tous $\rho_h \in Z_h$ et $\varphi_h \in X_h$ par

$$\mathcal{E}_h(\rho_h, \varphi_h) := \int_{\Omega} \rho_h e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) dx, \quad (6.55)$$

où $e: (\varphi, \mathbf{y}) \mapsto e(\varphi, \mathbf{y})$ est une fonction définie dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. Si \mathbf{v}_h est continue à travers les interfaces de \mathcal{T}_h , alors

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \operatorname{div}_h(\rho_h \mathbf{v}_h) dx &= \int_{\Omega} \rho_h \frac{\partial e}{\partial \varphi}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) \varphi_h dx \\ &+ \int_{\Omega} \rho_h \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \cdot \nabla_h [(\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) \varphi_h] dx - \int_{\Omega} \rho_h \left(\nabla_h \varphi_h \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \right) : \nabla \mathbf{v}_h dx \\ &- \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\rho_h e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] ds. \quad (6.56) \end{aligned}$$

Démonstration. Par intégration par parties (cf. la proposition B.5.3), on a

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \operatorname{div}_h(\rho_h \mathbf{v}_h) dx &= \int_{\Omega} \rho_h (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) [e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] dx - \int_{\partial \Omega} \rho_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) ds \\ &- \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) (\{\rho_h\} [e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] + [\rho_h] \{e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)\}) ds. \quad (*.1) \end{aligned}$$

On écrit ensuite

$$(\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) [e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] = \frac{\partial e}{\partial \varphi}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) \varphi_h + \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) [\nabla_h \varphi_h]. \quad (*.2)$$

Or $\nabla_h[(\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h)\varphi_h] = (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h)[\nabla_h \varphi_h] + \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla \mathbf{v}_h$, donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)(\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h)[\nabla_h \varphi_h] &= \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \cdot \nabla_h[(\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h)\varphi_h] \\ &\quad - \left(\nabla_h \varphi_h \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \right) : \nabla \mathbf{v}_h \quad (*.3) \end{aligned}$$

En combinant ce résultat, (*.1) et (*.2), on obtient finalement le résultat escompté. ■

Posons par commodité

$$\Theta_S(\rho_h, \varphi_h, \mathbf{y}_h) = \frac{C}{2} \varpi_S \eta_{\rho_h, S} [\varphi_h]^2 - \{\!\{ \rho_h \mathbf{y}_h \}\!\}_\omega \cdot \mathbf{n}_S [\varphi_h] \quad (6.57)$$

de sorte que l'énergie (6.36) se réécrive

$$\mathcal{E}_h^{\text{dar}}(\rho_h, \varphi_h) = \int_{\Omega} \frac{\rho_h}{2} |\nabla_h \varphi_h|^2 \, d\mathbf{x} + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \Theta_S(\rho_h, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds - l_h^{\text{swip}}(\varphi_h). \quad (6.58)$$

Corollaire 6.4.4 – Intégration par parties de $\mathcal{E}_h^{\text{dar}}$

Si ρ_h est uniforme en temps et en espace, alors l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}$ vérifie

$$\begin{aligned} (\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho_h, \varphi_h) \mid (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h)\varphi_h) &= - \int_{\Omega} e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \operatorname{div}_h(\rho_h \mathbf{v}_h) \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \rho_h (\nabla_h \varphi_h \otimes \nabla_h \varphi_h) : \nabla \mathbf{v}_h \, d\mathbf{x} - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S [\varphi_h] \{\rho_h \nabla_h \varphi_h\}_\omega \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\rho_h e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] \, ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho_h, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds, \end{aligned} \quad (6.59)$$

où $e(\varphi, \mathbf{y}) = \frac{1}{2}(\varphi^2 + |\mathbf{y}|^2)$ et Θ est défini par (6.57).

Démonstration. Notons $c_h = (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h)\varphi_h$ par commodité. D'une part, d'après le lemme 6.4.2 avec $\chi_h = c_h$, la définition 6.4.1 de l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}$ et la définition 6.3.3 de l'opérateur

6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction

$\mathcal{L}_h^{\text{swip}}$,

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{dar}}}{\partial \varphi_h}(\rho_h, \varphi_h), c_h \right\rangle &= (\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\varphi_h) \mid c_h) = (\rho_h \varphi_h \mid c_h) + (\mathcal{L}_h^{\text{swip}}(\varphi_h) \mid c_h) \\
&= \int_{\Omega} \rho_h (\varphi_h c_h + \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h c_h) \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} C\varpi_S \int_S \eta_{\rho_h, S} [\![\varphi_h]\!] [\![c_h]\!] \, ds \\
&\quad - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S \left(\left\{ \rho_h \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_{\omega} [\![c_h]\!] + [\![\varphi_h]\!] \left\{ \rho_h \frac{\partial c_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\}_{\omega} \right) \, ds. \tag{*1}
\end{aligned}$$

D'autre part, par définition de Θ (6.57), par uniformité de ρ_h et par linéarité des opérateurs de saut et de moyenne,

$$\begin{aligned}
(\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho_h, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) &= C\varpi_S \eta_{\rho_h, S} [\![\varphi_h]\!] [\![c_h]\!] - [\![\varphi_h]\!] \{ \rho_h (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) [\![\nabla_h \varphi_h]\!] \}_{\omega} \cdot \mathbf{n}_S \\
&\quad - \{ \rho_h \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \mathbf{n}_S [\![c_h]\!]. \tag{*2}
\end{aligned}$$

Or $\nabla_h c_h = (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) [\![\nabla_h \varphi_h]\!] + \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla \mathbf{v}_h$, donc

$$\begin{aligned}
(\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho_h, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) &= C\varpi_S \eta_{\rho_h, S} [\![\varphi_h]\!] [\![c_h]\!] + [\![\varphi_h]\!] \{ \rho_h \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \\
&\quad - [\![\varphi_h]\!] \{ \rho_h \nabla_h c_h \}_{\omega} \cdot \mathbf{n}_S - \{ \rho_h \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \mathbf{n}_S [\![c_h]\!]. \tag{*3}
\end{aligned}$$

En injectant ce résultat dans (*1), on obtient alors

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}_h^{\text{dar}}}{\partial \varphi_h}(\rho_h, \varphi_h), c_h \right\rangle &= \int_{\Omega} \rho_h (\varphi_h c_h + \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h c_h) \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho_h, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds \\
&\quad - \int_S [\![\varphi_h]\!] \{ \rho_h \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds. \tag{*4}
\end{aligned}$$

On conclut avec la proposition 6.4.3 en posant $e(\varphi, \mathbf{y}) = \frac{1}{2}(\varphi^2 + |\mathbf{y}|^2)$ et en remarquant que

$$\frac{\partial e}{\partial \varphi}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) = \varphi_h, \quad \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) = \nabla_h \varphi_h. \tag{*5}$$

■

Cas incompressible

Dans cette section, on suppose que ρ est uniforme en temps et en espace, de sorte (6.42) donne $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$. On ne note donc plus ρ_h pour désigner la densité dans le cas discret,

mais simplement ρ , pour insister sur son caractère constant. Selon la méthode adoptée pour discréteriser la vitesse, la contrainte $\operatorname{div} \mathbf{v}$ peut ne pas être respectée au niveau discret – c'est par exemple le cas lorsque \mathbf{v}_h est solution d'un problème de Stokes discréterisé par des éléments de Taylor-Hood (voir la section 7.1.3). Nous présentons donc l'estimation d'énergie semi-discrète sans supposer que $\operatorname{div} \mathbf{v}_h = 0$ dans $\Omega \times]0, +\infty[$. Nous discutons ce point plus en détail dans la remarque 6.4.V.

Proposition 6.4.5 – Estimation d'énergie semi-discrète

Si φ_h est solution du problème 6.4.3 avec condition de Neumann homogène, c'est-à-dire

$$(\rho \nabla \varphi_h - \varphi_h \mathbf{v}_h) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_N \times]0, +\infty[, \quad (6.60)$$

et ρ est uniforme en temps et en espace, alors

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} (\mathcal{E}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)) + \frac{1}{2} \|\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)\|_2^2 - \int_{\Omega} \rho e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) dx \\ & + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\rho e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) ds \\ & + \int_{\Omega} \rho (\nabla_h \varphi_h \otimes \nabla_h \varphi_h) : \nabla \mathbf{v}_h dx - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S [\varphi_h] \{ \rho \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} ds \\ & + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \} \right\} [\varphi_h] ds \leq \frac{1}{2} \|f\|_2^2, \end{aligned} \quad (6.61)$$

où l'énergie $\mathcal{E}_h^{\text{dar}}$ est définie par (6.53), l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}$ par (6.52), Θ par (6.57) et $e(\varphi, \mathbf{y}) = \frac{1}{2}(\varphi^2 + |\mathbf{y}|^2)$.

Démonstration. À partir de la formulation discrète (6.45) du problème 6.4.1, on peut faire apparaître l'opérateur $\mathcal{L}_h^{\text{dar}}$ défini par (6.52) :

$$\left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t} \Big| \chi_h \right) + (\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \Big| \chi_h) + a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) = (f \Big| \chi_h) + \int_{\Gamma_D} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^{\ominus} g_D \chi_h ds. \quad (*.1)$$

En prenant $\chi_h = \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)$, on obtient alors

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial \varphi_h}{\partial t} \Big| \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \right) + \|\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)\|_2^2 + a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h); \mathbf{v}_h) \\ & = (f \Big| \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)) + \int_{\Gamma_D} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^{\ominus} g_D \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) ds. \quad (*.2) \end{aligned}$$

6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction

Or, par définition 6.2.1 de a_h^{upw} , adaptée au contexte du problème 6.4.1,

$$\begin{aligned} a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h); \mathbf{v}_h) &= (\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \mid (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) \varphi_h) + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi_h \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \, ds \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \} \right\} [\varphi_h] \, ds, \quad (*.3) \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} a_h^{\text{upw}}(\varphi_h, \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h); \mathbf{v}_h) &= - \int_{\Omega} e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \operatorname{div}_h(\rho \mathbf{v}_h) \, dx \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\rho e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] \, ds \\ &+ \int_{\Omega} \rho (\nabla_h \varphi_h \otimes \nabla_h \varphi_h) : \nabla \mathbf{v}_h \, dx - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S [\varphi_h] \{ \rho \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^D} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \varphi_h \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \, ds \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \} \right\} [\varphi_h] \, ds \quad (*.4) \end{aligned}$$

d'après le corollaire 6.4.4. On conclut avec le lemme 6.4.2 et la formule de dérivation des fonctions composées (cf. théorème B.3.2). ■

Remarque 6.4.III – Appellation « estimation d'énergie semi-discret » : Comme dans le cas continu, le résultat obtenu ici n'est pas à proprement parler une estimation d'énergie, dans la mesure où tous les termes dans le membre de gauche (sans compter les deux premiers) de (6.61) sont de signe arbitraire. Remarquons la similitude entre le terme continu

$$\int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \left(\rho e(\varphi, \nabla \varphi) - \varphi \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi) \right) \, ds$$

apparaissant dans l'estimation d'énergie continue (6.49) et le terme discret

$$\begin{aligned} \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) ([\rho e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h)] - [\varphi_h] \{ \mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h) \}) \, ds \\ + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\varphi_h] [\mathcal{L}_h^{\text{dar}}(\rho, \varphi_h)] \right\} \, ds, \end{aligned}$$

comptant en plus le terme de décentrage amont provenant de la forme a_h^{upw} . À moins de supposer $\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$, il y a peu de chances que ce terme discret soit nul.

Remarque 6.4.IV – Vers une véritable estimation : Comme dans le cas continu, il est attendu que le terme

$$\int_{\Omega} \rho(\nabla_h \varphi_h \otimes \nabla_h \varphi_h) : \nabla \mathbf{v}_h \, dx \quad (6.62)$$

subsiste : le système en l'état n'est pas complet, et demande à ce que l'on rajoute une équation pour la variable \mathbf{v}_h qui pourrait être en mesure de compenser ce troisième terme. Notons la présence d'un terme similaire

$$\sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S [\![\varphi_h]\!] \{ \rho \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds, \quad (6.63)$$

mais seulement défini sur les interfaces du maillage. Si celui-ci n'apparaît pas naturellement lors de la discrétisation de l'équation sur \mathbf{v}_h , il conviendra donc de le rajouter manuellement si on compte le compenser dans l'estimation d'énergie semi-discrète.

On pourrait adopter une stratégie équivalente pour compenser les termes évoqués dans la précédente remarque, mais décider dans quelle équation les faire apparaître en anticipation de l'estimation est moins évident, même si l'équation sur \mathbf{v}_h semble être aussi un bon candidat.

Remarque 6.4.V – Autour de la propriété $\operatorname{div} \mathbf{v}_h = 0$: Lorsque $\operatorname{div} \mathbf{v}_h = 0$, le terme

$$- \int_{\Omega} \rho e(\varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) \, dx \quad (6.64)$$

est nul. Pour obtenir un tel résultat, une possibilité est de considérer des éléments finis dits de Scott-Vogelius [Sar20, page 229]. Ce faisant, le champ de vecteurs \mathbf{v}_h est assuré de satisfaire la condition de divergence nulle localement, c'est-à-dire à l'intérieur de chaque élément. En pratique, cela demande malgré tout de diviser chaque triangle du maillage en trois sous-triangles issus du barycentre du triangle considéré [Sar20, page 229].

Comme évoqué plus haut, la contrainte d'incompressibilité n'est pas toujours vérifiée au niveau discret. Dans ce cas, il est malgré tout possible d'éliminer le terme (6.64) de l'estimation d'énergie semi-discrète (6.61). En effet, dans la continuité de la remarque précédente, et motivé par l'application d'une méthode similaire pour l'équation de Navier-Stokes (voir [Sar20, section 4.5]), appelée « astuce » de Temam, il suffirait par exemple d'ajouter ce terme dans l'équation d'évolution du champ d'advection \mathbf{v}_h pour l'en éliminer.

Remarque 6.4.VI – Intégration par parties sur un contour : Le terme

$$\sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds \quad (6.65)$$

6.4. Équation de diffusion hétérogène-advection-réaction

devrait pouvoir être éliminé à l'aide d'une formule similaire à celle obtenue dans la proposition 6.4.3. La difficulté vient du fait qu'une intégrer par parties cette intégrale, définie sur un contour, n'est pas évident. Il existe malgré tout la formule (cf. [Sar20, annexe A.1.3])

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div} \boldsymbol{v}_h \, ds = \int_{\Gamma} \left((\boldsymbol{v}_h \cdot \mathbf{n}) \operatorname{div} \mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial \mathbf{n}} \right) \, ds, \quad (6.66)$$

valable pour tout contour Γ fermé et orientable, de normale unitaire \mathbf{n} . Dans notre cas, si l'on choisit $\Gamma = \partial K$ pour un élément $K \in \mathcal{T}_h$, on remarque que l'on a $\operatorname{div} \mathbf{n} = 0$, d'où

$$\begin{aligned} \int_{\partial K} (\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds &= \int_{\partial K} \operatorname{div}(\Theta_S \boldsymbol{v}_h) \, ds - \int_{\partial K} \Theta_S \operatorname{div}(\boldsymbol{v}_h) \, ds \\ &= \int_{\partial K} \Theta_S \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial \mathbf{n}} \, ds - \int_{\partial K} \Theta_S \operatorname{div}(\boldsymbol{v}_h) \, ds. \end{aligned}$$

En particulier, si $\operatorname{div} \boldsymbol{v}_h = 0$, quelle que soit la raison (voir la remarque précédente), alors

$$\int_{\partial K} (\boldsymbol{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\rho, \varphi_h, \nabla_h \varphi_h) \, ds = \int_{\partial K} \Theta_S \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{v}_h}{\partial \mathbf{n}} \, ds, \quad (6.67)$$

terme que l'on peut encore une fois envisager de compenser en l'ajoutant dans l'équation d'évolution de \boldsymbol{v}_h .

Chapitre Discrétisation spatiale et estimations d'énergie

7

Comme expliqué en introduction du chapitre 6, nous décidons d'approcher en espace les équations obtenues dans le chapitre 5 (problèmes 5.3.1 et 5.3.2) à l'aide des méthodes de Galerkine discontinues, que nous avons introduites dans ce même chapitre. Dans le présent chapitre, nous réalisons donc cette discrétisation, d'abord pour le modèle incompressible (section 7.1) puis pour le modèle compressible (section 7.2), et obtenons des estimations d'énergie continue et semi-discrète, sous-entendu en espace mais pas en temps, en suivant la même méthodologie que celle appliquée aux problèmes élémentaires du chapitre 6.

Table des matières

7.1. Application au système d'équations : cas incompressible	151
7.2. Application au système d'équations : cas compressible	164
7.3. Conclusion	170

7.1. Application au système d'équations : cas incompressible

Cette section a pour objectif la discrétisation du problème 5.3.1, avec contrainte d'incompressibilité. Nous en obtenons également des estimations d'énergie continue et semi-discrète.

7.1.1. Position du problème

Le problème 5.3.1 a été introduit dans le chapitre 3, à la section 5.3. Il se présente sous la forme d'un problème de Stokes, combinant les équations (5.47a) et (5.47b), couplé à une équation constitutive d'évolution de la polarité (5.47c). Celle-ci a une structure d'équation de diffusion-advection-réaction vectorielle, avec un terme de « réaction » non-linéaire, dû au terme en double-puits. Le problème 5.3.1 est fermé par les conditions aux limites (5.45).

7.1.2. Formulation variationnelle

Nous introduisons les espaces fonctionnels suivants :

$$V(y) := \{ \mathbf{w} \in H^1(\Omega)^2 \mid \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_0, \mathbf{w} \cdot \mathbf{t} = 0 \text{ sur } \Gamma' \text{ et } \mathbf{w} = \mathbf{y} \text{ sur } \Gamma_D^y \}, \quad (7.1a)$$

$$L_0^2(\Omega) := \left\{ \xi \in L^2(\Omega) \mid \int_{\Omega} \xi \, dx = 0 \right\}, \quad (7.1b)$$

$$\Xi := \begin{cases} L^2(\Omega) & \text{si } \Gamma_N^y \neq \emptyset \text{ ou } \Gamma' \neq \emptyset, \\ L_0^2(\Omega) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (7.1c)$$

$$Q(y) := L^4(\Omega)^2 \cap \{ \mathbf{q} \in H^1(\Omega)^2 \mid \mathbf{q} = \mathbf{y} \text{ sur } \Gamma_D^p \}. \quad (7.1d)$$

La pression est toujours définie à une constante additive près. Cette constante est fixée si les conditions aux limites (5.45b) (condition de Neumann) ou (5.45c) sont imposées [Sar16, remarque 1.3]. Autrement, il est nécessaire de fixer cette constante à l'aide d'une contrainte de moyenne nulle par exemple [Sar16, page 33]. Auquel cas, la pression est unique.

Définition 7.1.1 – Opérateur de dissipation polaire

On définit l'opérateur de dissipation $\mathcal{L} : H^1(\Omega) \rightarrow H^1(\Omega)$ tel que, pour tous $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in H^1(\Omega)^2$,

$$(\mathcal{L}(\mathbf{p}) | \mathbf{q}) = \int_{\Omega} B(|\mathbf{p}|^2 - 1) \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} \, dx + \int_{\Omega} B \frac{\kappa^2}{2} \nabla \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{q} \, dx. \quad (7.2)$$

Lemme 7.1.1 – Lien entre \mathcal{L} , la différentielle de l'énergie libre et ℓ —

L'opérateur \mathcal{L} vérifie

$$(\mathcal{L}(\mathbf{p}) | \mathbf{q}) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{h}, \mathbf{p}), \mathbf{q} \right\rangle, \quad (7.3)$$

quel que soit $\mathbf{q} \in H^1(\Omega)^2$, où \mathcal{F} est définie par (5.31) et (5.38). On rappelle que \mathbf{h} représente le tenseur de Hencky (cf. le théorème 2.2.2 et la section 5.2.4) et que, dans le cas incompressible, il vérifie $\text{tr } \mathbf{h} = 0$, d'après la section 5.2.4.

De plus, si \mathbf{p} est solution du problème 5.3.1 et $\mathbf{q} \in Q(\mathbf{0})$, alors

$$(\mathcal{L}(\mathbf{p}) | \mathbf{q}) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{h}, \mathbf{p}), \mathbf{q} \right\rangle = (\ell(\mathbf{p}) | \mathbf{q}), \quad (7.4)$$

où ℓ est défini par (5.34). Nous omettons sa dépendance vis-à-vis de \mathbf{h} dans le cas incompressible puisqu'elle n'est pas effective.

Démonstration. La première relation est immédiate par définition de la dérivée de Gâteaux (définition B.3.2), sans intégration par parties.

7.1. Application au système d'équations : cas incompressible

Pour la seconde, on remarque que pour tout $\mathbf{q} \in \mathbf{Q}(\mathbf{0})$,

$$(\ell(\mathbf{p}) | \mathbf{q}) + \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \gamma}(\mathbf{h}, \mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n} \, ds = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \mathbf{q} \right\rangle, \quad (*.1)$$

d'après la définition de ℓ (5.34) et la proposition B.3.13. On applique alors la décomposition de la frontière $\partial\Omega = \Gamma_D^p \sqcup \Gamma_N^p$ (voir la section 5.3.3) et on utilise le fait que $\mathbf{q}|_{\Gamma_D^p} = \mathbf{0}$ et la condition aux limites (5.45f) pour annuler l'intégrale de « surface ». ■

Une formulation variationnelle du problème 5.3.1 s'écrit

Problème 7.1.1 – Formulation variationnelle. Étant donné la polarité initiale \mathbf{p}_0 , trouver $\mathbf{v} \in \mathbf{V}(\mathbf{v}_D)$, $\Pi \in \Xi$ et $\mathbf{p} \in \mathbf{Q}(\mathbf{p}_D)$ telles que

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}, \mathbf{w}) + b(\mathbf{w}, \Pi) &= T_a(\mathbf{p} | \mathbf{w}) \\ &\quad - \omega(\mathbf{p}, \ell(\mathbf{p}), \mathbf{w}) - a\delta(\mathbf{p}, \ell(\mathbf{p}), \mathbf{w}) \\ &\quad + \kappa^2 Bc(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}) + S_a \delta(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}), \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{V}(\mathbf{0}), \end{aligned} \quad (7.5a)$$

$$b(\mathbf{v}, \xi) = 0, \quad \forall \xi \in \Xi, \quad (7.5b)$$

$$Pe(\dot{\mathbf{p}} | \mathbf{q}) - Pe(\omega(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{v}) + a\delta(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{v})) + \frac{1}{B}(\mathcal{L}(\mathbf{p}) | \mathbf{q}) = 0, \quad \forall \mathbf{q} \in \mathbf{Q}(\mathbf{0}), \quad (7.5c)$$

où ℓ est défini par (5.34) et où l'on a noté

$$k(\mathbf{v}, \mathbf{w}) := 2(\mathbf{D}(\mathbf{v}) | \mathbf{D}(\mathbf{w})) + \mathbf{C}_F(\mathbf{v} | \mathbf{w}), \quad (7.6a)$$

$$b(\mathbf{w}, \xi) := \int_{\Omega} -\xi \operatorname{div} \mathbf{w} \, dx, \quad (7.6b)$$

$$\omega(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{w}) := \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{W}(\mathbf{w}) \cdot \mathbf{p} \, dx, \quad (7.6c)$$

$$\delta(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{w}) := \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{w}) \cdot \mathbf{p} \, dx, \quad (7.6d)$$

$$c(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{w}) := \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{q}) : \mathbf{D}(\mathbf{w}) \, dx, \quad (7.6e)$$

quels que soient $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{H}^1(\Omega)^2$, $\xi \in \Xi$ et $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbf{H}^1(\Omega)^2$.

Remarque 7.1.I: En pratique, pour éviter d'avoir à d'abord calculer $\mathcal{L}(\mathbf{p})$ à partir de (7.2), on peut exprimer les applications ω (7.6c) et δ (7.6d) dans (7.5a) sous la forme

$$\omega(\mathbf{p}, \ell(\mathbf{p}), \mathbf{w}) = (\ell(\mathbf{p}) | \mathbf{W}(\mathbf{w}) \cdot \mathbf{p}), \quad (7.7a)$$

$$\delta(\mathbf{p}, \ell(\mathbf{p}), \mathbf{w}) = (\ell(\mathbf{p}) | \mathbf{D}(\mathbf{w}) \cdot \mathbf{p}), \quad (7.7b)$$

puis utiliser la définition 7.1.1.

Démonstration. La condition d'incompressibilité (7.5b) s'obtient directement. Pour l'équation (7.5a), on remarque d'abord que pour tout $\mathbf{w} \in \mathbf{V}(\mathbf{0})$,

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T) \cdot \mathbf{w} \, dx = \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T : \nabla \mathbf{w} \, dx - \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{w} \, ds \quad (*.1)$$

Nous transformons ensuite les deux intégrales l'une à la suite de l'autre. En premier lieu, la décomposition (5.48a) permet d'écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T : \nabla \mathbf{w} \, dx &= \int_{\Omega} -\Pi \operatorname{div} \mathbf{w} \, dx + \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{visc}}(\mathbf{v}) : \mathbf{D}(\mathbf{w}) \, dx + \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p})^T : \nabla \mathbf{w} \, dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_a(\mathbf{p}) : \mathbf{D}(\mathbf{w}) \, dx. \end{aligned} \quad (*.2)$$

Or le tenseur $\boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p})$ (5.48c) se réécrit

$$\boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p}) = \mathbf{skw}(\mathbf{p} \otimes \boldsymbol{\ell}(\mathbf{p})) + a \mathbf{sym}(\mathbf{p} \otimes \boldsymbol{\ell}(\mathbf{p})) - \kappa^2 \mathbf{B} \nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{p}. \quad (*.3)$$

Donc

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p})^T : \nabla \mathbf{w} \, dx &= \int_{\Omega} \mathbf{skw}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) : \mathbf{W}(\mathbf{w}) \, dx \\ &\quad + a \int_{\Omega} \mathbf{sym}(\boldsymbol{\ell}(\mathbf{p}) \otimes \mathbf{p}) : \mathbf{D}(\mathbf{w}) \, dx \\ &\quad - \kappa^2 \mathbf{B} \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{p}) : \mathbf{D}(\mathbf{w}) \, dx \end{aligned} \quad (*.4)$$

puis

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{extra}}(\mathbf{p})^T : \nabla \mathbf{w} \, dx = \omega(\mathbf{p}, \boldsymbol{\ell}(\mathbf{p}), \mathbf{w}) + a\delta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\ell}(\mathbf{p}), \mathbf{w}) - \kappa^2 \mathbf{B} \mathbf{c}(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}) \quad (*.5)$$

par définition des formes (7.6). Ainsi, (*.2) se réécrit à l'aide de (7.6)

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T : \nabla \mathbf{w} \, dx &= b(\mathbf{w}, \Pi) + 2(\mathbf{D}(\mathbf{v}) \mid \mathbf{D}(\mathbf{w})) + \omega(\mathbf{p}, \boldsymbol{\ell}(\mathbf{p}), \mathbf{w}) + a\delta(\mathbf{p}, \boldsymbol{\ell}(\mathbf{p}), \mathbf{w}) \\ &\quad - \kappa^2 \mathbf{B} \mathbf{c}(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}) - S_a \delta(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}) \end{aligned} \quad (*.6)$$

En second lieu, en utilisant la décomposition de la frontière $\partial\Omega = \Gamma_D^\nu \sqcup \Gamma_N^\nu \sqcup \Gamma' \sqcup \Gamma_0$ donnée

dans la section 5.3.3, les conditions aux limites (5.45) et le fait que $\mathbf{w} \in \mathbf{V}(\mathbf{0})$, on obtient

$$\begin{aligned} \int_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{w} \, ds &= \int_{\Gamma_D^v} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{w} \, ds + \int_{\Gamma_N^v} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{w} \, ds \\ &\quad + \int_{\Gamma'} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{w} \, ds + \int_{\Gamma_0} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}} \cdot \mathbf{w} \, ds \\ &= \int_{\Gamma'} (\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}^T)_{nt} \cdot \mathbf{w}_t \, ds + \int_{\Gamma_0} \boldsymbol{\sigma}_{\text{tot},nn}(\mathbf{w} \cdot \mathbf{n}) \, ds = 0. \end{aligned} \quad (*.7)$$

En combinant ce résultat avec le précédent (*.6), l'équation (5.47a) et la définition de la forme k (7.6a), on obtient (7.5a).

L'équation (7.5c) est finalement le résultat de la combinaison de l'équation (5.47c), de la définition de la dérivée de Gordon-Schowalter (2.7a), des définitions des formes ω (7.6c) et δ (7.6d) et du lemme 7.1.1. ■

7.1.3. Discréétisation

Espaces discrets

Commençons par déterminer le degré d'approximation polynomiale à utiliser pour chacune des inconnues. Les équations (5.47a) et (5.47b) forment un problème de Stokes : un choix classique consiste à utiliser les éléments finis de Taylor-Hood [Sar16, page 39 et section 1.10] [Sar20, section 2.1.4], pour lesquels une approximation parabolique par morceaux pour la vitesse et une approximation linéaire par morceaux sont considérées. La figure 7.1 donne l'emplacement des degrés de liberté correspondants. Pour rester général, nous notons $k \geq 1$ le degré d'approximation associé à la pression, de sorte que celui associé à la vitesse soit $k + 1$.

Pour choisir celui de la polarité, nous nous basons sur l'observation suivante. Soient $(\mathbf{v}, \Pi, \mathbf{p})$ une solution du problème 5.3.1 et $(\mathbf{v}_h, \Pi_h, \mathbf{p}_h)$ la solution du problème approché en espace associé, donné un peu plus loin. Suivant le paragraphe précédent, nous approchons la vitesse et la pression par des polynômes de degrés respectivement $k + 1$ et k . Nous supposons que le schéma numérique proposé permet d'obtenir une estimation d'erreur optimale [PE11, corollaire 4.26] : si $\mathbf{v} \in \mathbf{H}^{k+1}(\Omega)^2$ et $\mathbf{p} \in \mathbf{H}^q(\Omega)^2$, alors

$$\|\mathbf{v} - \mathbf{v}_h\|_2 = \mathcal{O}(h^{k+1}), \quad \|\mathbf{p} - \mathbf{p}_h\|_2 = \mathcal{O}(h^q). \quad (7.8)$$

Notre but est alors de trouver le degré d'approximation q de la polarité qui garantisse cette estimation d'erreur pour la vitesse. On remarque que si $\mathbf{v}_h \in \mathbf{H}^{k+1}(\Omega)^2$, alors $\mathbf{D}(\mathbf{v}) \in \mathbf{H}^k(\Omega)^{2 \times 2}$. Dans l'idée de prolonger cette propriété à $\boldsymbol{\sigma}_{\text{tot}}$ (5.48), nous souhaitons donc choisir q tel que $\mathbf{p} \otimes \Delta \mathbf{p}$, et donc $\Delta \mathbf{p}$, soit au moins de régularité \mathbf{H}^k . Cela demande donc que $\mathbf{p} \in \mathbf{H}^{k+2}(\Omega)^2$, soit $q = k + 2$, d'où notre choix.

Nous introduisons donc les espaces discrets suivants :

$$V_h(y) := \mathcal{P}^{k+1}(\mathcal{T}_h)^2 \cap V(y), \quad (7.9a)$$

$$\Xi_h := \mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h) \cap \mathcal{C}^0(\Omega), \quad (7.9b)$$

$$Q_h := \mathcal{P}^{k+2}(\mathcal{T}_h)^2, \quad (7.9c)$$

où $k \geq 1$ et $V(y)$ est défini par (7.1a). Remarquons que la condition de Dirichlet sur la polarité n'est pas imposée fortement dans l'espace Q_h . Les emplacements des degrés de liberté dans le cas $k = 1$ sont représentés sur la figure 7.1.

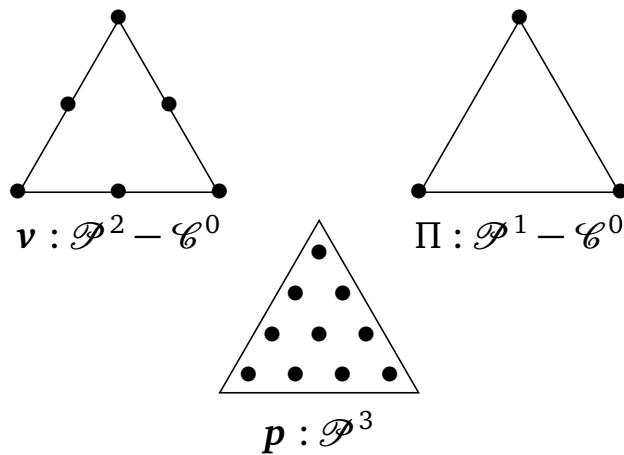


FIGURE 7.1. – Éléments finis choisis pour discrétiser le problème 5.3.1. Cas $k = 1$.

Discrétisation de l'équation d'évolution de la polarité

Comme expliqué en introduction de la section 6.4, l'équation d'évolution de la polarité a une structure d'équation de diffusion-advection-réaction, et peut donc être discrétisée à l'aide d'une méthode dG. Ainsi, de manière analogue au problème abstrait présenté dans cette même section, nous introduisons la

Définition 7.1.2 – Opérateur de dissipation discret

On définit l'opérateur de dissipation discret $\mathcal{L}_h: Q_h \rightarrow Q_h$ tel que, pour tout $(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h) \in Q_h^2$,

$$(\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) | \mathbf{q}_h) = \int_{\Omega} B(|\mathbf{p}_h| - 1)^2 \mathbf{p}_h \cdot \mathbf{q}_h \, dx + \kappa^2 B(a_h^{\text{swip}}(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h; 1) - l_h^{\text{swip}}(\mathbf{q}_h; 1)). \quad (7.10)$$

Les applications a_h^{swip} et l_h^{swip} sont définies respectivement par (6.24) et (6.26), où l'on a choisi $\Gamma_D = \Gamma_D^p$ et $g_D = \mathbf{p}_D$. Elles ont été généralisées au cas vectoriel en remplaçant les produits entre champs par des produits scalaires. Dans le cas incompressible, les poids ω définis par (6.27) se réduisent chacun à $1/2$. Autrement dit, les moyennes pondérées

$\{\cdot\}_\omega$ qui interviennent dans a_h^{swip} deviennent simplement des moyennes ici. Dans la suite, on note enfin $\mathcal{S}_h^{\mathcal{D},p}$ l'ensemble des faces de la frontière $\Gamma_{\mathcal{D}}^p$.

Une formule discrète associée s'écrit

$$\begin{aligned} \text{Pe} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} \Big| \mathbf{q}_h \right) + a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h) - (\omega(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h) + a\delta(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h)) \right] \\ + \frac{1}{B} (\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \Big| \mathbf{q}_h) = \text{Pe} \int_{\Gamma_{\mathcal{D}}^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_{\mathcal{D}} \cdot \mathbf{q}_h \, ds, \quad \forall \mathbf{q}_h \in \mathbf{Q}_h, \end{aligned}$$

où, dans ce contexte, a_h^{upw} est définie de manière similaire à (6.13), en prenant $\alpha = 0$, en remplaçant $\partial\Omega$ dans l'intégrale de « surface » par $\Gamma_{\mathcal{D}}^p$ et en substituant les produits entre fonctions essais et fonctions tests par des produits scalaires entre vecteurs.

Équations semi-discrètes

Une fois la discrétisation de l'équation d'évolution de la polarité effectuée, la formulation variationnelle discrète s'obtient directement à partir de la formulation variationnelle (7.5).

Problème 7.1.2. Trouver $\mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_h(\mathbf{v}_{\mathcal{D}})$, $\Pi_h \in \Xi_h$ et $\mathbf{p}_h \in \mathbf{Q}_h$ telles que

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) + b(\mathbf{w}_h, \Pi_h) &= T_a(\mathbf{p}_h \Big| \mathbf{w}_h) \\ &\quad - \omega(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{w}_h) - a\delta(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{w}_h) \\ &\quad + \kappa^2 B c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{w}_h) + S_a \delta(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{w}_h), \quad \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_h(\mathbf{0}), \end{aligned} \tag{7.11a}$$

$$b(\mathbf{v}_h, \xi_h) = 0, \quad \forall \xi_h \in \Xi_h, \tag{7.11b}$$

$$\begin{aligned} \text{Pe} \left(\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} \Big| \mathbf{q}_h \right) + \text{Pe} a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h) \\ - \text{Pe} (\omega(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h) + a\delta(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h)) \\ + \frac{1}{B} (\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \Big| \mathbf{q}_h) = \text{Pe} \int_{\Gamma_{\mathcal{D}}^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_{\mathcal{D}} \cdot \mathbf{q}_h \, ds, \quad \forall \mathbf{q}_h \in \mathbf{Q}_h, \end{aligned} \tag{7.11c}$$

où k , b , ω et δ sont respectivement définies par (7.6a), (7.6b), (7.6c) et (7.6d). La forme c_h est obtenue en remplaçant les gradients ∇ dans la forme c (7.6e) par des gradients cassés ∇_h (voir la définition 6.1.4).

7.1.4. Estimation d'énergie continue

Pour les mêmes raisons que celles soulevées dans la section 6.4.4, nous établissons l'estimation d'énergie dans le cas où la polarité vérifie une condition de Neumann homogène

sur $\partial\Omega$.

Théorème 7.1.2 – Estimation d'énergie

Si \mathbf{v} , Π et \mathbf{p} sont solution du problème 5.3.1 avec condition de Neumann homogène sur la polarité, c'est-à-dire $\Gamma_N^p = \partial\Omega$ dans (5.45f), alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{p})) + \frac{C_F}{2}\|\mathbf{v}\|_2^2 + \|\mathbf{D}(\mathbf{v})\|_2^2 + \frac{1}{PeB}\|\mathcal{L}(\mathbf{p})\|_2^2 \\ + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds \leq \frac{T_a^2}{2C_F}\|\mathbf{p}\|_2^2 + \frac{S_a^2}{4}\|\mathbf{p}\|_4^4, \end{aligned} \quad (7.12)$$

où \mathcal{F} est l'énergie libre, Ψ son intégrande définie par (5.38) et \mathcal{L} est défini par (7.2). En particulier, en l'absence d'activité ($T_a = S_a = 0$) dans un espace confiné ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$ ou $\partial\Omega = \emptyset$), la relation

$$\mathcal{F}(\mathbf{p}(t_2)) \leq \mathcal{F}(\mathbf{p}(t_1)) \leq \mathcal{F}(\mathbf{p}_0), \quad (7.13)$$

est vérifiée en tous instants $t_1, t_2 \in]0, +\infty[$ tels que $t_1 < t_2$. Autrement dit, l'énergie libre décroît en temps et est bornée.

Remarque 7.1.II – Entrée et sortie d'énergie : Remarquons la présence du terme

$$\int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds,$$

dans l'estimation d'énergie (7.12), qui est de signe arbitraire. Celui-ci apparaissait déjà dans le théorème 5.2.3, dans lequel nous avions supposé que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$ pour pouvoir déterminer les équations constitutives. Ce terme traduit le transport d'énergie à travers la frontière du domaine, dans la direction de la vitesse. Une rentrée de matière dans le domaine ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} < 0$) correspond donc à une injection d'énergie, tandis qu'une sortie de matière du domaine ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$) produira l'effet contraire, via de la dissipation. Aussi, dans un espace confiné ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$), ce phénomène n'a pas lieu. Remarquons que les estimations (6.15) et (6.32) ne contiennent pas de terme similaire.

Démonstration. Si \mathbf{v} , Π et \mathbf{p} sont solution du problème 5.3.1, alors elles vérifient aussi la formulation variationnelle (7.5).

D'après le théorème B.3.15, par hypothèse sur les conditions aux limites et puisque \mathcal{F} ne dépend pas de \mathbf{h} , l'énergie libre \mathcal{F} vérifie

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{p})) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}}, \dot{\mathbf{p}} \right\rangle - \int_{\Omega} \left(\nabla \mathbf{p}^T \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \nabla \mathbf{v} \, dx \\ - \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds, \end{aligned} \quad (*.1)$$

7.1. Application au système d'équations : cas incompressible

où l'on rappelle que Ψ est l'intégrande de \mathcal{F} . La présence de l'intégrale de « surface » se justifie de la même manière que dans la démonstration de la proposition 5.2.2. On peut alors utiliser le lemme 7.1.1 et développer l'expression $\frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{r}}$ pour obtenir

$$(\mathcal{L}(\mathbf{p}) | \dot{\mathbf{p}}) = \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{p})) + \kappa^2 Bc(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{v}) + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds, \quad (*.2)$$

où la forme c est définie par (7.6e). Ainsi, en prenant $\mathbf{q} = \mathcal{L}(\mathbf{p})$ dans la forme faible de l'équation d'évolution de la polarité (7.5c), on trouve après division par Pe

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{p})) + \kappa^2 Bc(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{v}) - [\omega(\mathbf{p}, \mathcal{L}(\mathbf{p}), \mathbf{v}) + a\delta(\mathbf{p}, \mathcal{L}(\mathbf{p}), \mathbf{v})] + \frac{1}{PeB} \|\mathcal{L}(\mathbf{p})\|_2^2 \\ + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds = 0. \quad (*.3) \end{aligned}$$

Ensuite, en tenant compte de la remarque 7.1.I et de la définition 7.1.1, on obtient

$$\omega(\mathbf{p}, \ell(\mathbf{p}), \mathbf{w}) = \omega(\mathbf{p}, \mathcal{L}(\mathbf{p}), \mathbf{w}), \quad \delta(\mathbf{p}, \ell(\mathbf{p}), \mathbf{w}) = \delta(\mathbf{p}, \mathcal{L}(\mathbf{p}), \mathbf{w}), \quad (*.4)$$

Ainsi, en additionnant l'équation (*.3) et (7.5a) avec $\mathbf{w} = \mathbf{v}$, on obtient finalement

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{p})) + k(\mathbf{v}, \mathbf{v}) + \frac{1}{PeB} \|\mathcal{L}(\mathbf{p})\|_2^2 \\ + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds = T_a(\mathbf{p} | \mathbf{v}) + S_a \delta(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{v}), \quad (*.5) \end{aligned}$$

en prenant en compte l'équation (7.5b) avec $\xi = \Pi$.

On développe ensuite l'expression de k (7.6a) et de δ (7.6d), et on applique l'inégalité de Cauchy-Schwarz (B.1), ce qui donne

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\mathbf{p})) + C_F \|\mathbf{v}\|_2^2 + 2\|\mathbf{D}(\mathbf{v})\|_2^2 + \frac{1}{PeB} \|\mathcal{L}(\mathbf{p})\|_2^2 \\ + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds \leq T_a \|\mathbf{p}\|_2 \|\mathbf{v}\|_2 + S_a \|\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}\|_2 \|\mathbf{D}(\mathbf{v})\|_2. \quad (*.6) \end{aligned}$$

On applique alors successivement deux fois l'inégalité de Young (B.2) en prenant $\zeta = C_F$ pour le premier terme du membre de droite de l'égalité et $\zeta = 2$ dans le second. En remarquant que $\|\mathbf{p} \otimes \mathbf{p}\|_2^2 = \|\mathbf{p}\|_4^4$, on obtient le résultat attendu.

En l'absence d'activité ($T_a = S_a = 0$) dans un espace confiné ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$ ou $\partial\Omega = \emptyset$), la dérivée de l'énergie est alors négative, d'où le résultat (7.13). ■

7.1.5. Estimation d'énergie semi-discrète

Dans cette section, nous appliquons la méthode vue dans la section 6.4.5 au problème 7.1.2. Par analogie à la définition 6.4.2, nous définissons l'énergie libre discrète par

Définition 7.1.3 – Énergie libre semi-discrète

L'énergie libre semi-discrète $\mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h)$ est définie par

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h) := & \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^{D,p}} \kappa^2 B \frac{C}{2} \varpi_S \int_S |\llbracket \mathbf{p}_h \rrbracket|^2 \, ds \\ & - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^{D,p}} \int_S \kappa^2 B \left\{ \left\{ \frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \right\} \cdot \llbracket \mathbf{p}_h \rrbracket \right\} \, ds - Bl_h^{\text{swip}}(\mathbf{p}_h), \end{aligned} \quad (7.14)$$

où, dans ce contexte, l_h^{swip} est définie dans la définition 7.1.2.

Lemme 7.1.3 – Lien entre \mathcal{F}_h et \mathcal{L}_h

L'énergie libre semi-discrète (7.14) vérifie

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}_h}{\partial \mathbf{p}_h}, \mathbf{q}_h \right\rangle = (\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) | \mathbf{q}_h), \quad (7.15)$$

où l'opérateur \mathcal{L}_h est défini par (7.10). Par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz, on peut donc dire que $\frac{\partial \mathcal{F}_h}{\partial \mathbf{p}_h} = \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)$.

Démonstration. Immédiat avec le lemme 6.3.3 et la propriété $W(\mathbf{q}) = (|\mathbf{q}|^2 - 1)\mathbf{q}$. ■

Comme dans la section 6.4.5, nous introduisons par commodité

$$\Theta_S(\mathbf{p}_h, \boldsymbol{\gamma}_h) = \kappa^2 \frac{C}{2} \varpi_S |\llbracket \mathbf{p}_h \rrbracket|^2 - \kappa^2 (\{\{\boldsymbol{\gamma}_h\} \cdot \mathbf{n}_S\} \cdot \llbracket \mathbf{p}_h \rrbracket) \quad (7.16)$$

de sorte que l'énergie libre (7.14) se réécrive

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h) := & \int_{\Omega} \frac{B}{4} (|\mathbf{p}_h|^2 - 1)^2 \, dx + \int_{\Omega} B \frac{\kappa^2}{2} |\nabla_h \mathbf{p}_h|^2 \, dx \\ & + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^{D,p}} B \int_S \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \, ds - Bl_h^{\text{swip}}(\mathbf{p}_h), \end{aligned} \quad (7.17)$$

Théorème 7.1.4 – Estimation d'énergie semi-discrète

Si \mathbf{v}_h , Π_h et \mathbf{p}_h sont solution du problème 7.1.2 avec condition de Neumann homogène sur la polarité, c'est-à-dire $\Gamma_N^p = \partial\Omega$, alors

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dt}(\mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h)) + \frac{C_F}{2} \|\mathbf{v}_h\|_2^2 + \|\mathbf{D}(\mathbf{v}_h)\|_2^2 + \frac{1}{BPe} \|\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\|_2^2 \\
 & + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h)] ds - \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) dx \\
 & + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} B \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) ds - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \kappa^2 B \int_S [\mathbf{p}_h] \cdot \{\nabla_h \mathbf{p}_h\} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} ds \\
 & + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\} \right\} \cdot [\mathbf{p}_h] ds \\
 & \leq \frac{T_a^2}{2C_F} \|\mathbf{p}_h\|_2^2 + \frac{S_a^2}{4} \|\mathbf{p}_h\|_4^4, \quad (7.18)
 \end{aligned}$$

où \mathcal{F}_h est l'énergie libre semi-discrète définie par (7.14) et \mathcal{L}_h est défini par (7.10).

Remarque 7.1.III – Vers une véritable estimation d'énergie semi-discrète : Remarquons l'analogie entre cette estimation d'énergie semi-discrète en espace et l'estimation d'énergie continue (7.12). Mais contrairement à cette dernière, celle proposée dans le théorème possède en plus les quatre derniers termes du membre de gauche de (7.18), qui sont de signe arbitraire. Une estimation d'énergie semi-discrète plus satisfaisante préserverait la structure de son pendant continu (7.12), et n'aurait donc pas ces termes en plus. On ne considère pas le cinquième terme comme faisant partie de ces derniers dans la mesure où il est analogue au terme de bord

$$\int_{\partial\Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds$$

que l'on retrouve dans l'estimation d'énergie continue (7.12), avec la pénalisation des sauts d'énergie aux interfaces en plus. (voir la remarque 7.1.II). Ce cinquième terme peut donc être vu comme une condition de continuité faible de l'énergie libre Ψ à travers les interfaces. Passons maintenant en revue chacun de ces termes et voyons comment les éliminer.

Idéalement, le sixième terme serait automatiquement nul, si la condition d'incompressibilité était respectée localement, à l'intérieur de chaque élément, ce qui n'est a priori pas le cas avec le choix qui a été fait de considérer des éléments finis de Taylor-Hood, pour lesquels on a seulement (7.11b). Ce sujet a déjà été abordé dans la remarque 6.4.V.

Comme détaillé dans la remarque 6.4.VI, le septième terme devrait pouvoir être réarrangé

à l'aide d'une intégration par parties d'intégrale de « surface », ce qui donnerait

$$\int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \, ds = \int_S \Theta_S \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}} \, ds, \quad (7.19)$$

en imaginant que $\operatorname{div} \mathbf{v}_h = 0$ sur toute interface $S \in \mathcal{S}_h^i$ du maillage.

Enfin, comme cela a déjà été évoqué dans la remarque 6.4.IV, les huitième et neuvième termes et, le cas échéant, (7.19) doivent être compensés. Cela suggère l'introduction d'une nouvelle version discrète \tilde{c}_h de c_h (voir problème 7.1.2), donnée par

$$\tilde{c}_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{w}_h) := c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{w}_h) + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S [\mathbf{p}_h] \cdot \{ \nabla_h \mathbf{p}_h \} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds \quad (7.20)$$

et l'ajout de la forme trilinéaire

$$\begin{aligned} y_h(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{w}_h) := & - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} B \int_S \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \mathbf{n} \cdot \frac{\partial \mathbf{w}_h}{\partial \mathbf{n}} \, ds \\ & - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{w}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)] - (\mathbf{w}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \} \right\} \cdot [\mathbf{p}_h] \, ds \end{aligned} \quad (7.21)$$

dans l'équation (7.11a), par exemple.

En prenant en compte tous ces changements, l'estimation d'énergie semi-discrète s'écrierait

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} (\mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h)) + \frac{C_F}{2} \|\mathbf{v}_h\|_2^2 + \|\mathbf{D}(\mathbf{v}_h)\|_2^2 + \frac{1}{BPe} \|\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\|_2^2 \\ + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h)] \, ds \leq \frac{T_a^2}{2C_F} \|\mathbf{p}_h\|_2^2 + \frac{S_a^2}{4} \|\mathbf{p}_h\|_4^4, \end{aligned} \quad (7.22)$$

et la structure de son pendant continu (7.12) serait respectée.

Démonstration. Cette démonstration rassemble les idées déployées dans les démonstrations de la proposition 6.4.5 et du théorème 7.1.2.

En prenant $\mathbf{q}_h = \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)$, défini par (7.10), dans la formulation discrète (7.11c) de l'équation d'évolution de la polarité, on obtient

$$\begin{aligned} Pe \left[\left(\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} \Big| \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \right) + a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h); \mathbf{v}_h) - (\omega(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{v}_h) + a\delta(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{v}_h)) \right] \\ + \frac{1}{B} \|\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\|_2^2 = Pe \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_D \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \, ds. \quad (*.1) \end{aligned}$$

7.1. Application au système d'équations : cas incompressible

Or, par définition 6.2.1 de a_h^{upw} , adaptée à notre contexte (cf. section 7.1.3),

$$\begin{aligned} a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h); \mathbf{v}_h) &= (\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \mid (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) \mathbf{p}_h) + \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus \mathbf{p}_h \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \, ds \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \} \right\} \cdot [\mathbf{p}_h] \, ds, \quad (*.2) \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h); \mathbf{v}_h) &= - \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \operatorname{div}_h(\mathbf{v}_h) \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h)] \, ds \\ &\quad + \kappa^2 B c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{v}_h) - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \kappa^2 B \int_S [\mathbf{p}_h] \cdot \{ \nabla_h \mathbf{p}_h \} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^{D,p}} B \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \, ds + \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus \mathbf{p}_h \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \, ds \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \} \right\} \cdot [\mathbf{p}_h] \, ds \quad (*.3) \end{aligned}$$

d'après le corollaire 6.4.4, généralisé au cas vectoriel, où la forme c_h est définie dans le problème 7.1.2. En remarquant à l'aide de la formule de dérivation des fonctions composées (cf. théorème B.3.2) et du lemme 7.1.3 que

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h)) = \left(\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \mid \frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} \right), \quad (*.4)$$

et en combinant les équations (*.1) et (*.3), on obtient finalement après division par Pe

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h)) &- \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \operatorname{div}_h(\mathbf{v}_h) \, dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h)] \, ds \\ &\quad + \kappa^2 B c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{v}_h) - (\omega(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{v}_h) + a\delta(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h), \mathbf{v}_h)) \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^{D,p}} B \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \, ds - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \kappa^2 B \int_S [\mathbf{p}_h] \cdot \{ \nabla_h \mathbf{p}_h \} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} \, ds \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{ \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \} \right\} \cdot [\mathbf{p}_h] \, ds \\ &\quad + \frac{1}{BPe} \|\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\|_2^2 + \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus \mathbf{p}_h \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \, ds = \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus \mathbf{p}_D \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) \, ds. \quad (*.5) \end{aligned}$$

Additionner cette équation et (7.11a) avec $\mathbf{w}_h = \mathbf{v}_h$ donne ensuite

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{dt}(\mathcal{F}_h(\mathbf{p}_h)) + k(\mathbf{v}_h, \mathbf{v}_h) \\
 & \quad - \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) \operatorname{div}_h(\mathbf{v}_h) dx + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) [\Psi(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h)] ds \\
 & \quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i \cup \mathcal{S}_h^{D,p}} B \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \nabla) \Theta_S(\mathbf{p}_h, \nabla_h \mathbf{p}_h) ds - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \kappa^2 B \int_S [\mathbf{p}_h] \cdot \{\nabla_h \mathbf{p}_h\} \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_h}{\partial \mathbf{n}_S} ds \\
 & \quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left\{ \frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)] - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\} \right\} \cdot [\mathbf{p}_h] ds \\
 & \quad + \frac{1}{BPe} \|\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)\|_2^2 + \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_h \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) ds \\
 & = T_a(\mathbf{p}_h | \mathbf{v}_h) + S_a \delta(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{v}_h) + \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_D \cdot \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h) ds, \quad (*.6)
 \end{aligned}$$

puisque $b(\mathbf{v}_h, \Pi_h) = 0$, d'après (7.11b).

On conclut de la même manière que dans la démonstration du théorème 7.1.2, en prenant en compte le fait que $\Gamma_D^p = \emptyset$. ■

7.2. Application au système d'équations : cas compressible

Cette section a pour objectif la discrétisation du problème 5.3.2, sans contrainte d'incompressibilité. Nous en obtenons également une estimation d'énergie continue. Nous ne proposons pas pour ce problème d'estimation d'énergie semi-discrète, que nous préférions laisser pour un travail ultérieur.

7.2.1. Position du problème

Le problème 5.3.2 a été introduit dans le chapitre 3, à la section 5.3. Il combine la loi de conservation de la quantité de mouvement (5.49a), la loi de conservation de la masse (5.49b) et l'équation constitutive d'évolution de la polarité (5.47c). Celle-ci a une structure d'équation de diffusion-advection-réaction vectorielle, avec un terme de « réaction » non-linéaire, dû au terme en double-puits, et un coefficient de diffusion non-homogène, incarné par la quantité $\kappa^2 \rho$. Le problème 5.3.2 est fermé par les conditions aux limites (5.45).

7.2.2. Formulation variationnelle

Nous introduisons les espaces fonctionnels suivants :

$$V(y) := \{w \in H^1(\Omega)^2 \mid w \cdot n = 0 \text{ sur } \partial\Omega_0, w \cdot t = 0 \text{ sur } \Gamma' \text{ et } w = y \text{ sur } \Gamma_D^y\}, \quad (7.23a)$$

$$Z := L^\infty(\Omega) \quad (7.23b)$$

$$Q(y) := L^4(\Omega)^2 \cap \{q \in H^1(\Omega)^2 \mid q = y \text{ sur } \Gamma_D^p\}. \quad (7.23c)$$

Les espaces pour la vitesse et la polarité sont identiques à ceux proposés pour le problème incompressible, discuté dans la section 7.1 précédente.

Définition 7.2.1 – Opérateur de dissipation polaire

On définit l'opérateur de dissipation $\mathcal{L} : L^\infty(\Omega) \times H^1(\Omega) \rightarrow H^1(\Omega)$ tel que, pour tous $p, q \in H^1(\Omega)^2$,

$$(\mathcal{L}(\rho, p) | q) = \int_{\Omega} B\rho(|p|^2 - 1)p \cdot q \, dx + \int_{\Omega} B \frac{\kappa^2}{2} \rho \nabla p \cdot \nabla q \, dx. \quad (7.24)$$

Par principe d'économie, nous gardons la même notation que celle introduite dans la définition 7.1.1 ; nous ajoutons seulement la dépendance en ρ .

Lemme 7.2.1 – Lien entre \mathcal{L} , la différentielle de l'énergie libre et ℓ

L'opérateur \mathcal{L} vérifie

$$(\mathcal{L}(\rho, p) | q) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial p}(\rho, p), q \right\rangle, \quad (7.25)$$

quel que soit $q \in H^1(\Omega)^2$, où \mathcal{F} est définie par (5.31) et (5.39). Nous préférons noter la dépendance de \mathcal{F} par rapport à la densité ρ , plutôt qu'au tenseur de Hencky (cf. le théorème 2.2.2 et la section 5.2.4), au vu de sa définition. Rappelons que dans le cas compressible, on a la relation $\rho = \rho_0 \exp(-\text{tr } h)$, d'après la section 5.2.4, où ρ_0 représente la densité initiale.

De plus, si p est solution du problème 5.3.2 et $q \in Q(\mathbf{0})$, alors

$$(\mathcal{L}(\rho, p) | q) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial p}(\rho, p), q \right\rangle = (\ell(\rho, p) | q), \quad (7.26)$$

où ℓ est défini par (5.34). Comme pour l'énergie libre \mathcal{F} , nous préférons noter la dépendance de ℓ par rapport à ρ plutôt que par rapport à h .

Démonstration. La démonstration est identique à celle du lemme 7.1.1. ■

Une formulation variationnelle du problème 5.3.2 s'écrit

— **Problème 7.2.1 – Formulation variationnelle.** Étant donné la polarité initiale \mathbf{p}_0 et la densité initiale ρ_0 , trouver $\mathbf{v} \in \mathbf{V}(\mathbf{v}_D)$, $\rho \in \mathbf{Z}$ et $\mathbf{p} \in \mathbf{Q}(\mathbf{p}_D)$ telles que

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}, \mathbf{w}; \rho) &= T_a(\mathbf{p} \mid \mathbf{w}) - b(\mathbf{w}, \Pi(\rho, \mathbf{p})) \\ &\quad - \omega(\mathbf{p}, \ell(\rho, \mathbf{p}), \mathbf{w}) - a\delta(\mathbf{p}, \ell(\rho, \mathbf{p}), \mathbf{w}) + \kappa^2 Bc(\mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}; \rho) \\ &\quad + S_a \delta(\rho \mathbf{p}, \mathbf{p}, \mathbf{w}) - S'_a b(\mathbf{w}, \rho |\mathbf{p}|^2), \quad \forall \mathbf{w} \in \mathbf{V}(\mathbf{0}), \end{aligned} \quad (7.27a)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \Big| z \right) - (\rho \mid (\mathbf{v} \cdot \nabla) z) + \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \rho z \, ds = 0, \quad \forall z \in \mathbf{Z}, \quad (7.27b)$$

$$\begin{aligned} Pe(\dot{\mathbf{p}} \mid \rho \mathbf{q}) - Pe(\omega(\mathbf{p}, \rho \mathbf{q}, \mathbf{v}) + a\delta(\mathbf{p}, \rho \mathbf{q}, \mathbf{v})) \\ + \frac{1}{B} (\mathcal{L}(\rho, \mathbf{p}) \mid \mathbf{q}) = 0, \quad \forall \mathbf{q} \in \mathbf{Q}(\mathbf{0}), \end{aligned} \quad (7.27c)$$

où l'on a repris les définitions des formes (7.6) du cas incompressible et introduit

$$k(\mathbf{v}, \mathbf{w}; z) := 2(z \mathbf{D}(\mathbf{v}) \mid \mathbf{D}(\mathbf{w})) + 2(z \operatorname{div} \mathbf{v} \mid \operatorname{div} \mathbf{w}) + C_F(\mathbf{v} \mid \mathbf{w}), \quad (7.28a)$$

$$c(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{w}; z) := \int_{\Omega} z (\nabla \mathbf{p}^T \cdot \nabla \mathbf{q}) : \mathbf{D}(\mathbf{w}) \, dx, \quad (7.28b)$$

quels que soient $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in H^1(\Omega)^2$, $z \in \mathbf{Z}$ et $\mathbf{p}, \mathbf{q} \in H^1(\Omega)^2$. Enfin, on rappelle que le terme de pression $\Pi(\rho, \mathbf{p})$ est défini par (5.41).

Remarque 7.2.1: La remarque 7.1.I est ici encore valide, à l'adaptation des notations près.

Démonstration. L'équation (7.27b) s'obtient directement par intégration par parties dans (5.49b).

Les autres équations s'obtiennent de la même façon que dans la démonstration du problème 7.1.1. ■

7.2.3. Discrétisation

Espaces discrets

Commençons par déterminer le degré d'approximation polynomiale à utiliser pour chacune des inconnues. Contrairement au problème 7.1.1, le problème 7.2.1 ne se présente pas comme un problème de Stokes : la vitesse et la densité peuvent être approchées ici par des polynômes de même degré, noté $k \geq 0$. Un raisonnement similaire à celui réalisé dans la section 7.1.3 nous amène alors à approcher la polarité par des polynômes de degré $k + 1$. Nous introduisons donc les espaces d'énergie discrets suivants :

$$\mathbf{V}_h(\mathbf{y}) := \mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h)^2 \cap \mathbf{V}(\mathbf{y}), \quad (7.29a)$$

$$\mathbf{Z}_h := \mathcal{P}^k(\mathcal{T}_h), \quad (7.29b)$$

$$\mathbf{Q}_h := \mathcal{P}^{k+1}(\mathcal{T}_h)^2, \quad (7.29c)$$

où $k \geq 0$. Remarquons d'ailleurs que ce sont les mêmes espaces que ceux définis dans le cas incompressible, au degré d'approximation polynomiale près. Les emplacements des degrés de liberté dans le cas $k = 1$ sont représentés sur la figure 7.2.

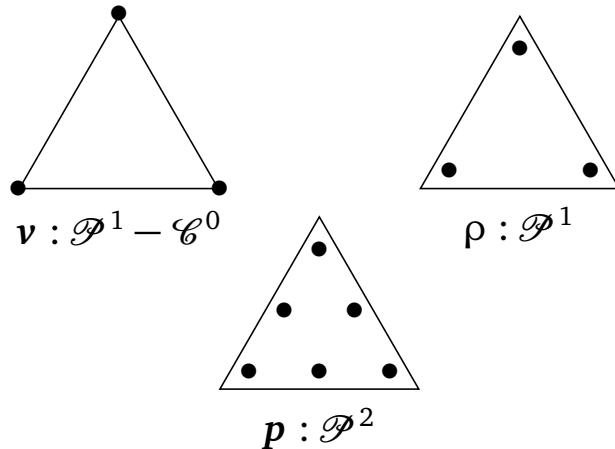


FIGURE 7.2. – Éléments finis choisis pour discréteriser le problème 5.3.2. Cas $k = 1$.

Discréétisation de la loi de conservation de la masse

La conservation de la masse a une structure d'équation de transport, et peut donc être discréétisée à l'aide d'une méthode dG. Contrairement à ce que nous avons présenté dans la section 6.2, nous proposons ici de tirer partie de la structure conservative de cette équation, pour simplifier l'écriture du schéma numérique. On peut montrer, à l'aide d'une intégration par parties [PE11], que la forme bilinéaire (6.14b) se réécrit

$$a_h^{\text{cf}}(\varphi_h, \chi_h; \mathbf{v}_h) = \int_{\Omega} (\alpha - \operatorname{div} \mathbf{v}_h) \varphi_h \chi_h \, dx - \int_{\Omega} \varphi_h (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) \chi_h \, dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\oplus \varphi_h \chi_h \, ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{\varphi_h\} \llbracket \chi_h \rrbracket \, ds. \quad (7.30)$$

En prenant $\alpha = \operatorname{div} \mathbf{v}_h$ et en remplaçant les occurrences de g_D par ρ_{in} , selon la condition aux limites (5.45g), on obtient alors une discréétisation de la conservation de la masse sous la forme

$$\left(\frac{\partial \rho_h}{\partial t} \Big| z_h \right) + a_h^{\text{mass}}(\rho_h, z_h; \mathbf{v}_h) = l_h^{\text{mass}}(z_h; \mathbf{v}_h), \quad (7.31)$$

avec

$$a_h^{\text{mass}}(\rho_h, z_h; \mathbf{v}_h) := - \int_{\Omega} \rho_h (\mathbf{v}_h \cdot \nabla_h) z_h \, dx + \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \rho_h z_h \, ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left(\frac{1}{2} |\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}| [\rho_h] + (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n}) \{\rho_h\} \right) [z_h] \, ds, \quad (7.32a)$$

$$l_h^{\text{mass}}(z_h; \mathbf{v}_h) := \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \rho_{\text{in}} z_h \, ds. \quad (7.32b)$$

Discrétisation de l'équation d'évolution de la polarité

À la différence du cas incompressible, l'équation d'évolution de la polarité dans le cas compressible présente une diffusion et une advection hétérogènes, proportionnelles à la densité. La forme bilinéaire \hat{a}_h^{dar} , introduite dans la remarque 6.4.I, convient donc à ce contexte. Par commodité, nous n'utiliserons pas directement la forme bilinéaire \hat{a}_h^{dar} , mais plutôt chacune des formes qui la composent indépendamment, à savoir \hat{a}_h^{upw} et a_h^{swip} .

Les autres modifications, listées dans le cas incompressible, s'appliquent également. De manière analogue, nous introduisons donc la

Définition 7.2.2 – Opérateur de dissipation discret

On définit l'opérateur de dissipation discret $\mathcal{L}_h: Z_h \times Q_h \rightarrow Q_h$ tel que, pour tous $\rho_h \in Z_h$ et $\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h \in Q_h$,

$$(\mathcal{L}_h(\rho_h, \mathbf{p}_h) \mid \mathbf{q}_h) = \int_{\Omega} B \rho_h (|\mathbf{p}_h| - 1)^2 \mathbf{p}_h \cdot \mathbf{q}_h \, dx + \kappa^2 B (a_h^{\text{swip}}(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h; \rho_h) - l_h^{\text{swip}}(\mathbf{q}_h; \rho_h)). \quad (7.33)$$

Les applications a_h^{swip} et l_h^{swip} sont définies respectivement par (6.24) et (6.26), où l'on a choisi $\Gamma_D = \Gamma_D^p$ et $g_D = \mathbf{p}_D$. Elles ont été généralisées au cas vectoriel en remplaçant les produits entre champs par des produits scalaires. Nous avons également ajouté explicitement leur dépendance vis-à-vis de ρ_h . Rappelons que la forme a_h^{swip} fait intervenir des moyennes pondérées $\{\cdot\}_{\omega}$ qui s'expriment en fonction de poids ω définis par (6.27), qui dépendent de l'approximation de la densité ρ_h . Comme dans le cas incompressible, on note enfin $\mathcal{S}_h^{D,p}$ l'ensemble des faces de la frontière Γ_D^p .

Une formule discrète associée s'écrit alors

$$\begin{aligned} \text{Pe} \left[\left(\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} \mid \rho_h \mathbf{q}_h \right) + \hat{a}_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h, \rho_h) - (\omega(\mathbf{p}_h, \rho_h \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h) + \alpha \delta(\mathbf{p}_h, \rho_h \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h)) \right] \\ + \frac{1}{B} (\mathcal{L}_h(\rho_h, \mathbf{p}_h) \mid \mathbf{q}_h) = \text{Pe} \int_{\Gamma_D^p} \rho_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\Theta \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds, \quad \forall \mathbf{q}_h \in Q_h, \end{aligned}$$

Équations semi-discrètes

Une fois la discrétisation des équations d'évolution de la densité et de la polarité effectuée, la formulation variationnelle discrète s'obtient directement à partir de la formulation variationnelle (7.27).

Problème 7.2.2. Trouver $\mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_h(\mathbf{v}_D)$, $\rho_h \in \mathbf{Z}_h$ et $\mathbf{p}_h \in \mathbf{Q}_h$ telles que

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h; \rho_h) &= T_a(\mathbf{p}_h \mid \mathbf{w}_h) - b(\mathbf{w}_h, \Pi(\rho_h, \mathbf{p}_h)) \\ &- \omega(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\rho_h, \mathbf{p}_h), \mathbf{w}_h) - a\delta(\mathbf{p}_h, \mathcal{L}_h(\rho_h, \mathbf{p}_h), \mathbf{w}_h) + \kappa^2 B c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{w}_h; \rho_h) \\ &+ S_a \delta(\rho_h \mathbf{p}_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{w}_h) - S'_a b(\mathbf{w}_h, \rho_h \mid \mathbf{p}_h \mid^2), \forall \mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_h(\mathbf{0}), \end{aligned} \quad (7.34a)$$

$$\left(\frac{\partial \rho_h}{\partial t} \mid z_h \right) + a_h^{\text{mass}}(\rho_h, z_h; \mathbf{v}_h) = l_h^{\text{mass}}(z_h; \mathbf{v}_h), \quad \forall z_h \in \mathbf{Z}_h, \quad (7.34b)$$

$$\begin{aligned} Pe \left(\frac{\partial \mathbf{p}_h}{\partial t} \mid \rho_h \mathbf{q}_h \right) + Pe \hat{a}_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h, \rho_h) \\ - Pe(\omega(\mathbf{p}_h, \rho_h \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h) + a\delta(\mathbf{p}_h, \rho_h \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h)) + \frac{1}{B} (\mathcal{L}_h(\rho_h, \mathbf{p}_h) \mid \mathbf{q}_h) \\ = Pe \int_{\Gamma_D^p} \rho_h (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds, \quad \forall \mathbf{q}_h \in \mathbf{Q}_h, \end{aligned} \quad (7.34c)$$

où k , b , ω et δ ont été introduites dans le problème 7.2.1 et la pression Π par (5.41). Comme dans le cas incompressible (cf. le problème 7.1.2), la forme c_h est obtenue en remplaçant les gradients ∇ dans la forme c (7.28b) par des gradients cassés ∇_h .

7.2.4. Estimation d'énergie continue

Pour les mêmes raisons que celles soulevées dans la section 6.4.4, et comme dans le cas incompressible (section 7.1.4), nous établissons l'estimation d'énergie dans le cas où la polarité vérifie une condition de Neumann homogène sur $\partial\Omega$.

Théorème 7.2.2 – Estimation d'énergie

Si \mathbf{v} , ρ et \mathbf{p} sont solution du problème 5.3.2 avec condition de Neumann homogène sur la polarité, c'est-à-dire $\Gamma_N^p = \partial\Omega$ dans (5.45f), et si ρ est uniformément strictement

positive, alors

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{F}(\rho, \mathbf{p})) + \frac{C_F}{2} \|\mathbf{v}\|_2^2 + \|\rho^{1/2} \mathbf{D}(\mathbf{v})\|_2^2 + \|\rho^{1/2} \operatorname{div} \mathbf{v}\|_2^2 + \frac{1}{PeB} \|\rho^{-1/2} \mathcal{L}(\rho, \mathbf{p})\|_2^2 \\ + \int_{\partial\Omega} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds \leq \frac{T_a^2}{2C_F} \|\mathbf{p}\|_2^2 + \frac{S_a^2 + S_a'^2}{4} \|\rho^{1/4} \mathbf{p}\|_4^4, \end{aligned} \quad (7.35)$$

où \mathcal{F} est l'énergie libre, Ψ son intégrande définie par (5.39) et \mathcal{L} est défini par (7.24). En particulier, en l'absence d'activité ($T_a = S_a = 0$) dans un espace confiné ($\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ sur $\partial\Omega$ ou $\partial\Omega = \emptyset$), la relation

$$\mathcal{F}(\rho(t_2), \mathbf{p}(t_2)) \leq \mathcal{F}(\rho(t_1), \mathbf{p}(t_1)) \leq \mathcal{F}(\rho_0, \mathbf{p}_0), \quad (7.36)$$

est vérifiée en tous instants $t_1, t_2 \in]0, +\infty[$ tels que $t_1 < t_2$. Autrement dit, l'énergie libre décroît en temps et est bornée.

Remarque 7.2.II – Entrée et sortie d'énergie : Nous renvoyons à la remarque 7.1.II qui donne une interprétation toujours valable ici, au terme

$$\int_{\partial\Omega} \rho(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \Psi(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds.$$

Démonstration. La démonstration est quasiment identique à celle du théorème 7.1.2. La première différence vient de la dérivée en temps de l'énergie libre qui amène en plus le produit scalaire $\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{h}}(\mathbf{h}, \mathbf{p}), \mathbf{D}(\mathbf{v}) \rangle$. Or d'après (5.40) et (5.41),

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{h}}(\mathbf{h}, \mathbf{p}), \mathbf{D}(\mathbf{v}) \right\rangle = -(\Pi(\rho, \mathbf{p}) \delta \mid \mathbf{D}(\mathbf{v})) = -(\Pi(\rho, \mathbf{p}) \mid \operatorname{div} \mathbf{v}) = b(\mathbf{v}, \Pi(\rho, \mathbf{p})), \quad (*.1)$$

par définition de b (7.6b). Ce terme viendra donc compenser celui qui apparaît dans (7.27a) : la pression reste énergétiquement neutre.

La deuxième différence réside dans le choix du vecteur test dans l'équation d'évolution de la polarité (7.27c), qui est ici $\mathbf{q} = \mathcal{L}(\rho, \mathbf{p})/\rho$.

La dernière différence provient du terme actif supplémentaire $-S_a' |\mathbf{p}|^2 \delta$, qui se traite de la même manière que l'autre terme. ■

7.3. Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre deux méthodes de Galerkin discontinues dans le but de discrétiser en espace respectivement le modèle en incompressible (problème 7.1.2) et le modèle en compressible (problème 7.2.2). Pour le premier modèle, nous avons

déterminé deux estimations d'énergie, une continue (théorème 7.1.2) et l'autre semi-discrete (théorème 7.1.4), tandis que pour le second, nous avons seulement déterminé une estimation d'énergie continue (théorème 7.2.2). Ces estimations mettent bien en évidence les termes de dissipation (la friction et la viscosité en particulier), qui tendent à stabiliser le système, et les termes actifs (la force active et la contrainte active), qui tendent à mettre le système hors-équilibre.

Nous proposons une discrétisation en temps des problèmes 7.1.2 et 7.2.2 dans le chapitre suivant, puis une validation numérique dans celui d'encore après.

Chapitre

8

Discrétisation temporelle

Ce chapitre est consacré à la discrétisation en temps des systèmes discrets en espace obtenus au chapitre 6 – cf. sections 7.1 et 7.2. Bien qu'un choix populaire pour la discrétisation en temps des problèmes approchés par les méthodes dG se trouve du côté des méthodes de Runge-Kutta [PE11, chapitre 3], nous préférons ici suivre [Sar20] et utiliser les méthodes dites BDF, pour *Backward Differentiation Formula*.

Après avoir rappelé les formules BDF (section 8.1), nous présentons une stratégie pour garantir au niveau discret la positivité de la densité en tout instant (section 8.2), combinant les approches développées dans [Fre98], [Zha17] et [Bal+22]. Nous appliquons ensuite ces outils aux problèmes définis dans les sections 7.1 et 7.2 avant de finalement formuler une méthode de point fixe capable de gérer les non-linéarités présentes dans le système (section 8.3).

Table des matières

8.1. <i>Backward Differentiation Formula (BDF)</i>	173
8.2. Préserver la positivité de la densité	182
8.3. Schéma numérique	188

8.1. *Backward Differentiation Formula (BDF)*

8.1.1. Position du problème

Soient I un intervalle fermé borné de \mathbb{R}_+ et $t_0 \in I$. Considérons le problème à valeur initiale

Problème 8.1.1 – de Cauchy. Trouver la fonction $y \in \mathcal{C}^1(I, \mathbb{R})$ telle que

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), \forall t \in I \\ y(t_0) = y_0, \end{cases} \quad (8.1)$$

$$(8.2)$$

où $f : I \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction continue et lipschitzienne par rapport à sa seconde variable, uniformément en sa première, et $y_0 \in \mathbb{R}$ est la condition initiale.

Dans cette section, nous présentons le cas réel, mais cette théorie se généralise naturellement au cas vectoriel, c'est-à-dire en considérant non pas des fonctions y et f à valeurs réelles, mais des fonctions vectorielles y et f . Le lecteur intéressé peut se référer aux livres *Solving Ordinary Differential Equations I* [HWN93] et *An Introduction to Numerical Analysis* [SM03], évoqués plus haut.

8.1.2. Méthodes linéaires à pas multiples

Définition

Les formules BDF appartiennent à une classe plus large de méthodes dites linéaires à pas multiples (*linear multistep methods*, LMMs). Une méthode linéaire à $b \geq 1$ pas associée au problème 8.1.1 adopte, à l'étape $n = b, \dots, n_{\max}$, la forme générale

$$\sum_{i=0}^b \alpha_{b,i} y^{n-i} - \Delta t \sum_{i=0}^b \beta_{b,i} f^{n-i} = 0, \quad (8.3)$$

où Δt est le pas de la méthode, y^j est une approximation de $y(t_j)$ à l'étape j et $f^j = f(t_j, y^j)$, avec $t_j := t_0 + j\Delta t \in I$, quel que soit $j \in \mathbb{N}$. En particulier, $y^0 = y_0$ est la condition initiale. En pratique, nous utilisons toujours un schéma à $b_n := \min(b, n)$ pas, où n est l'étape en cours, les premières étapes ne disposant pas d'assez d'itérés pour construire le schéma complet.

Les coefficients $(\alpha_{b,i})_{0 \leq i \leq b}$ et $(\beta_{b,i})_{0 \leq i \leq b}$, quant à eux, doivent être choisis de sorte que $\alpha_{b,0} \neq 0$ et $|\alpha_{b,b}| + |\beta_{b,b}| > 0$. On dira que la méthode est explicite si $\beta_{b,0} = 0$, implicite autrement.

Nous citons deux exemples de LMMs, la bien connue méthode implicite à un pas d'Euler

$$y^n - y^{n-1} - \Delta t f^n = 0 \quad (8.4a)$$

et la méthode explicite à quatre pas d'Adams–Bashforth

$$y^n - y^{n-1} - \frac{\Delta t}{24} (55f^{n-1} - 59f^{n-2} + 37f^{n-3} - 9f^{n-4}) = 0, \quad (8.4b)$$

sans doute l'une des premières méthodes à pas multiples à avoir été employée pour la résolution d'une équation différentielle ordinaire.

Quelques propriétés des méthodes linéaires à pas multiples

De manière générale, pour analyser la pertinence d'un schéma numérique, il convient de s'assurer (i) que celui-ci résout bien le problème qu'il prétend résoudre, (ii) qu'il n'amplifie

pas trop les erreurs numériques au cours des itérations successives et (iii) que la solution calculée converge vers la solution exacte lorsque Δt tend vers 0. Ces trois conditions sont respectivement appelées *consistance*, *stabilité* et *convergence*. Le résultat fondamental de l'analyse numérique tient alors en une phrase : un schéma numérique consistant et stable est convergent. Nous proposons ici de rappeler la définition de ces trois propriétés dans le contexte des méthodes linéaires à pas multiples. Pour cela, nous nous appuyons principalement sur les livres *Solving Ordinary Differential Equations I* [HWN93] et *An Introduction to Numerical Analysis* [SM03].

(i) Nous commençons par définir la *consistance* d'une méthode LMM.

Définition 8.1.1 – Consistance d'une méthode linéaire à pas multiples

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est dite *consistante d'ordre p* si pour toute fonction y suffisamment régulière,

$$e(y, t, \Delta t) = O(\Delta t^{p+1}) \quad (8.5)$$

où $e(y, t, \Delta t)$ représente l'erreur de troncature ou de *consistance* de la méthode (8.3), que l'on définit par

$$e(y, t, \Delta t) := \sum_{i=0}^b \alpha_{b,i} y(t + (n-i)\Delta t) - \Delta t \sum_{i=0}^b \beta_{b,i} y'(t + (n-i)\Delta t).$$

On dira en particulier qu'une méthode LMM est *consistante* si elle est consistante d'ordre 1.

Cette définition dit simplement que toute solution du problème 8.1.1 est solution de (8.3) à $O(\Delta t^{p+1})$ près.

(ii) Dans le contexte des LMMs, on parle de *zéro-stabilité* plutôt que de *stabilité* tout court.

Définition 8.1.2 – Zéro-stabilité d'une méthode linéaire à pas multiples

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est dite *zéro-stable* s'il existe une constante $C > 0$ telle que, quelles que soient les deux suites (y^n) et (z^n) générées à partir de la même formule (8.3) mais de conditions initiales y^0, \dots, y^{b-1} et z^0, \dots, z^{b-1} différentes,

$$|y^n - z^n| \leq C \max_{i=0, \dots, b-1} |y^i - z^i|, \quad (8.6)$$

pour Δt suffisamment petit.

Cette définition dit essentiellement qu'une méthode stable génère à un temps t_n , une solution approchée y^n qui reste bornée lorsque $n \rightarrow +\infty$ (ou $\Delta t \rightarrow 0$) : toute perturbation numérique initiale est ainsi contrôlée au fil des itérations et il est impossible à la solution de croître exponentiellement.

(iii) Finalement, nous pouvons énoncer le théorème fondamental après avoir défini la notion de *convergence*.

Définition 8.1.3 – Convergence d'une méthode linéaire à pas multiples

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est dite convergente d'ordre p si l'erreur de convergence vérifie

$$|y(t_n) - y^n| \underset{\Delta t \rightarrow 0}{\mathcal{O}}(\Delta t^p), \quad (8.7)$$

pour tout choix consistant de conditions initiales y^0, \dots, y^{b-1} , c'est-à-dire telles que $|y(t_i) - y^i| \underset{\Delta t \rightarrow 0}{\mathcal{O}}(\Delta t^p)$ quel que soit $i = 0, \dots, b-1$.

Théorème 8.1.1 – Théorème d'équivalence de Dahlquist

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est convergente d'ordre p si, et seulement si, elle est consistante d'ordre p et zéro-stable.

On retiendra qu'une méthode LLM est convergente si, et seulement si, elle est consistante (d'ordre 1) et zéro-stable.

Il est bien sûr possible de raffiner ou d'élargir ces définitions, notamment à l'aide des bien connus polynômes générateurs. Notons qu'il existe aussi de nombreuses autres définitions de la stabilité ; deux d'entre elles, la stabilité absolue et la A-stabilité sont évoquées dans la section suivante.

8.1.3. BDF

Motivation

Nous reprenons ici la section 12.11 de [SM03], qui donne les raisons principales de la popularité des méthodes BDF.

Une autre propriété que l'on peut souhaiter pour une méthode linéaire à pas multiples, outre sa consistante, sa zéro-stabilité et sa convergence, c'est son bon comportement vis-à-vis des problèmes dit raides, dont l'équation type est donnée par

$$y' = \lambda y, \quad y(0) = y_0, \quad (8.8)$$

dont la solution est évidemment $y(t) = y_0 \exp(\lambda t)$. Pour mieux comprendre ce qui est entendu par « bon comportement », comparons les solutions numériques $(y_n^{(e)})_n$ et $(y_n^{(i)})_n$ obtenues respectivement à partir des méthodes d'Euler explicite et implicite appliquées à ce problème :

$$y_n^{(e)} = (1 + \lambda \Delta t)^n y_0 \quad (8.9a)$$

$$y_n^{(i)} = (1 - \lambda \Delta t)^{-n} y_0. \quad (8.9b)$$

Dans le cas où $\lambda < 0$, la solution exacte décroît exponentiellement vers 0, donc le même comportement est attendu des solutions approchées. La suite $(y_n^{(i)})_n$ est strictement décroissante puisque $1 - \lambda \Delta t > 1$, tandis que $(y_n^{(e)})_n$ ne le sera aussi que si $|1 + \lambda \Delta t| < 1$,

ce qui impose la restriction $\lambda\Delta t > -2$ sur le pas de temps. Dans certaines applications, λ est suffisamment grand pour rendre les calculs à l'aide d'une méthode conditionnellement stable trop coûteux, comme c'est le cas pour la méthode d'Euler explicite [SM03, page 346].

La généralisation de ce cas d'étude aux méthodes linéaires à pas multiples quelconques vient de l'observation suivante : $(1+\lambda\Delta t)$ et $(1-\lambda\Delta t)^{-1}$ représentent les racines respectives des polynômes caractéristiques des suites récurrentes linéaires d'ordre 1 issues des méthodes d'Euler explicite et implicite appliquées au problème (8.8). Ainsi, si l'on applique la méthode LLM (8.3) à cette équation, on obtient une suite récurrente linéaire d'ordre b , de la forme

$$\sum_{i=0}^b (\alpha_{b,i} - \lambda\Delta t \beta_{b,i}) y^{n-i} = 0. \quad (8.10)$$

Le polynôme caractéristique associé, appelé polynôme de stabilité, est alors

$$\pi_b(\zeta; \lambda\Delta t) := \sum_{i=0}^b (\alpha_{b,i} - \lambda\Delta t \beta_{b,i}) \zeta^{n-i}. \quad (8.11)$$

Résoudre (8.10) revient donc à trouver les racines du polynôme $\pi_b(\zeta; \lambda\Delta t)$. Connaissant celles-ci, nous pouvons donner une expression explicite de la solution numérique y^n et ainsi en étudier le comportement lorsque $n \rightarrow +\infty$. Dans le cas plus général où $\lambda \in \mathbb{C}$ est tel que $\Re(\lambda) < 0$, la solution exacte converge toujours vers 0 en décroissant, ce que l'on aimerait également observer du côté de la suite y^n . On montre alors que ce n'est le cas que lorsque les racines de $\pi_b(\zeta; \lambda\Delta t)$ sont toutes de module strictement inférieur à 1, ce qui amène à définir la stabilité absolue en ces termes.

Définition 8.1.4 – Stabilité absolue d'une méthode linéaire à pas multiples

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est dite absolument stable pour une valeur de $\lambda\Delta t$ donnée, si les racines du polynôme de stabilité $\pi_b(\zeta; \lambda\Delta t)$ (8.11) sont toutes de module strictement inférieur à 1. L'ensemble des valeurs $\lambda\Delta t$ pour lesquelles la méthode est absolument stable est appelé région de stabilité absolue.

Pour éviter toute restriction sur le pas de temps à utiliser pour garantir la stabilité de la méthode, la méthode LLM doit donc être absolument stable quel que soit $\lambda \in \mathbb{C}$, avec $\Re(\lambda) < 0$, ce qui amène à définir enfin la A-stabilité en ces termes.

Définition 8.1.5 – A-stabilité d'une méthode linéaire à pas multiples

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est dite A-stable si elle est absolument stable pour toutes valeurs de $\lambda\Delta t$ dont la partie réelle est strictement négative, autrement dit si la région de stabilité absolue contient la moitié gauche du plan complexe.

Il s'avère que cette condition n'est vérifiée par aucune méthode LLM explicite ou d'ordre strictement supérieur à 2. S'il est ainsi difficile de garantir la A-stabilité d'un schéma, il devrait être plus facile d'assurer son A_0 -stabilité, définie ci-après.

Définition 8.1.6 – A_0 -stabilité d'une méthode linéaire à pas multiples

La méthode linéaire à pas multiples (8.3) est dite A_0 -stable si sa région d'absolue stabilité contient $]-\infty, 0[$, l'ensemble des réels strictement négatifs.

Les méthodes de type BDF (*Backward Differentiation Formula*) sont parmi les méthodes linéaires à pas multiples qui s'approchent le mieux de la A-stabilité – en étant au moins A_0 stables – tout en proposant des ordres élevés et en étant faciles à implémenter. Les méthodes de Runge-Kutta implicites partagent à notre connaissance des propriétés similaires et constituent au moins un aussi bon choix. Dans le contexte de cette thèse, où l'on cherche à discrétiser en temps les problèmes 7.1.2 et 7.2.2, et en l'absence d'analyse théorique plus poussée de ces équations, nous choisissons d'utiliser les formules BDF pour leurs bonnes propriétés et parce qu'elles ne font que peu appel à la fonction f , contrairement aux méthodes de Runge-Kutta.

Principe de construction

Supposons que les valeurs approchées y^{n-b}, \dots, y^{n-1} de la solution y au problème 8.1.1 aux temps t_{n-b}, \dots, t_{n-1} sont connues. Nous cherchons donc à déterminer la valeur approchée y^n de la solution y au temps t_n . Pour cela, nous cherchons y^n tel que le polynôme interpolateur de Lagrange de y en les points $(t_{n-b}, y^{n-b}), \dots, (t_n, y^n)$, soit solution du problème 8.1.1 en au moins un instant t_i , $i = 0, \dots, n$ [HWN93, page 364]. L'idée est donc de construire un polynôme interpolateur de la solution aux temps présent et passés dont la dérivée coïncide avec celle de la solution en au moins un de ces instants.

Définition des méthodes BDF explicites

D'après [Fre98], si l'on décide de construire un tel polynôme interpolant la dérivée solution au temps t_{n-1} , alors on obtient une méthode BDF explicite, dont une expression est donnée par

$$\text{BDF}_{b,n}^{(e)} := \sum_{i=1}^{b-1} \frac{1}{i} \nabla^i y^{n-1} + \frac{1}{b} \nabla^b y^n - \Delta t f^{n-1} = 0, \quad (8.12)$$

où $\nabla^l y^j$ représente la différence « à rebours » (*backward difference*, d'où le nom de la méthode) d'ordre l de y^j . Les différences « à rebours » sont définies par la relation de récurrence

$$\nabla^l y^j := \nabla^{l-1} y^j - \nabla^{l-1} y^{j-1}, \quad \nabla^0 y^j := y^j. \quad (8.13)$$

Par cohérence avec la forme générale d'une méthode linéaire à pas multiples (8.3) et pour simplifier la description concrète de ces méthodes aux différents ordres, nous notons (8.12) de manière équivalence sous la forme

$$\text{BDF}_{b,n}^{(e)} := \sum_{i=0}^b \alpha_{b,i}^{(e)} y^{n-i} - \Delta t f^{n-1} = 0. \quad (8.14)$$

Les coefficients de cette formule sont listés dans le tableau 8.1 jusqu'à l'ordre 7. Ils peuvent être générés à partir de la formule de récurrence suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{b+1,0}^{(e)} = \alpha_{b,0}^{(e)} - \frac{1}{b(b+1)}, \\ \alpha_{b+1,i}^{(e)} = \alpha_{b,i}^{(e)} - \frac{(-1)^i}{b(b+1)} \binom{b+1}{i}, \forall i = 1, \dots, b, \\ \alpha_{b+1,b+1}^{(e)} = \frac{(-1)^b}{b(b+1)}, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (8.15a) \\ (8.15b) \\ (8.15c) \end{array}$$

en choisissant $\alpha_{1,0}^{(e)} = 1$ et $\alpha_{1,1}^{(e)} = -1$. Notons que par construction, ce schéma coïncide avec la méthode d'Euler explicite pour $b = 1$.

$b \backslash i$	0	1	2	3	4	5	6	7
1	1	-1						
2	1/2	0	-1/2					
3	1/3	1/2	-1	1/6				
4	1/4	5/6	-3/2	1/2	-1/12			
5	1/5	13/12	-2	1	-1/3	1/20		
6	1/6	77/60	-5/2	5/3	-5/6	1/4	-1/30	
7	1/7	87/60	-3	15/6	-5/3	3/4	-1/5	1/42

TABLE 8.1. – Coefficients $(\alpha_{b,i}^{(e)})_{0 \leq i \leq b}$ des schémas BDF explicites d'ordre au plus 7.

Les méthodes BDF explicites sont seulement conditionnellement absolument stables, donc peu utilisées en pratique, mais seront utiles pour la définition d'une autre famille de méthodes dans la section 8.2.2. Comme évoqué dans la partie « Motivation », pour le cas $b = 1$ de la méthode d'Euler explicite, la condition de stabilité est donnée par la relation $|1 + \lambda \Delta t| < 1$, ce qui permet de définir la région de stabilité du schéma, dont une représentation graphique est donnée par la figure 8.1, c'est-à-dire un cercle de centre -1 et de rayon 1 .

Définition des méthodes BDF implicites

Toujours d'après [Fre98], si l'on décide maintenant de construire un polynôme interpolant la dérivée solution au temps t_n , alors on obtient une méthode BDF implicite, dont une expression est donnée par

$$\text{BDF}_{b,n}^{(i)} := \sum_{i=1}^b \frac{1}{i} \nabla^i y^n - \Delta t f^n = 0, \quad (8.16)$$

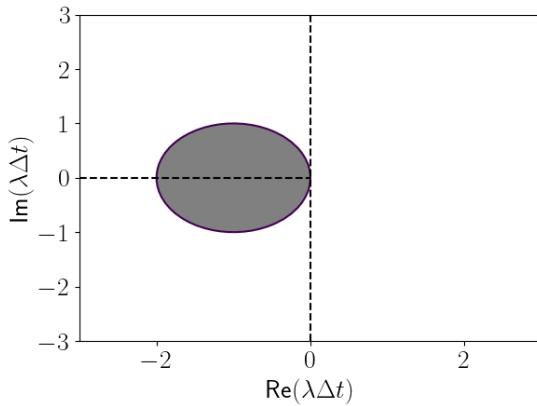


FIGURE 8.1. – En gris, région de stabilité absolue de la méthode d’Euler explicite. L’ensemble des complexes à partie réelle négative n’y est pas entièrement inclus : la méthode n’est pas A_0 -stable, et *a fortiori* ni A -stable.

expression qui fait encore intervenir les différences « à rebours » (*backward differences*).

Pour les mêmes raisons que celles évoquées dans la section précédente sur les méthodes BDF explicites, nous notons (8.16) de manière équivalence sous la forme

$$BDF_{b,n}^{(i)} := \sum_{i=0}^b \alpha_{b,i}^{(i)} y^{n-i} - \Delta t f^n = 0. \quad (8.17)$$

Les coefficients de cette formule sont listés dans le tableau 8.2 jusqu’à l’ordre 7. Ils peuvent être générés à partir de la formule de récurrence suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{b+1,0}^{(i)} = \alpha_{b,0}^{(i)} + \frac{1}{b+1}, \end{array} \right. \quad (8.18a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{b+1,i}^{(i)} = \alpha_{b,i}^{(i)} + \frac{(-1)^i}{b+1} \binom{b+1}{i}, \quad \forall i = 1, \dots, b, \end{array} \right. \quad (8.18b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_{b+1,b+1}^{(i)} = \frac{(-1)^{b+1}}{b+1}, \end{array} \right. \quad (8.18c)$$

en choisissant cette fois $\alpha_{0,0}^{(i)} = 0$. Notons que par construction, ce schéma coïncide avec la méthode d’Euler implicite pour $b = 1$.

Contrairement aux méthodes BDF explicites, les implicites sont A_0 -stables et présentent une région de stabilité absolue contenant une part importante de la moitié gauche du plan complexe, dont la taille décroît avec $b = 1, \dots, 6$, comme le montre la figure 8.2. Au contraire, pour $b \geq 7$, ces schémas ne sont même pas A_0 -stables, comme illustré par la figure 8.5. Elles ne sont enfin A -stable que lorsque $b \in \{1, 2\}$.

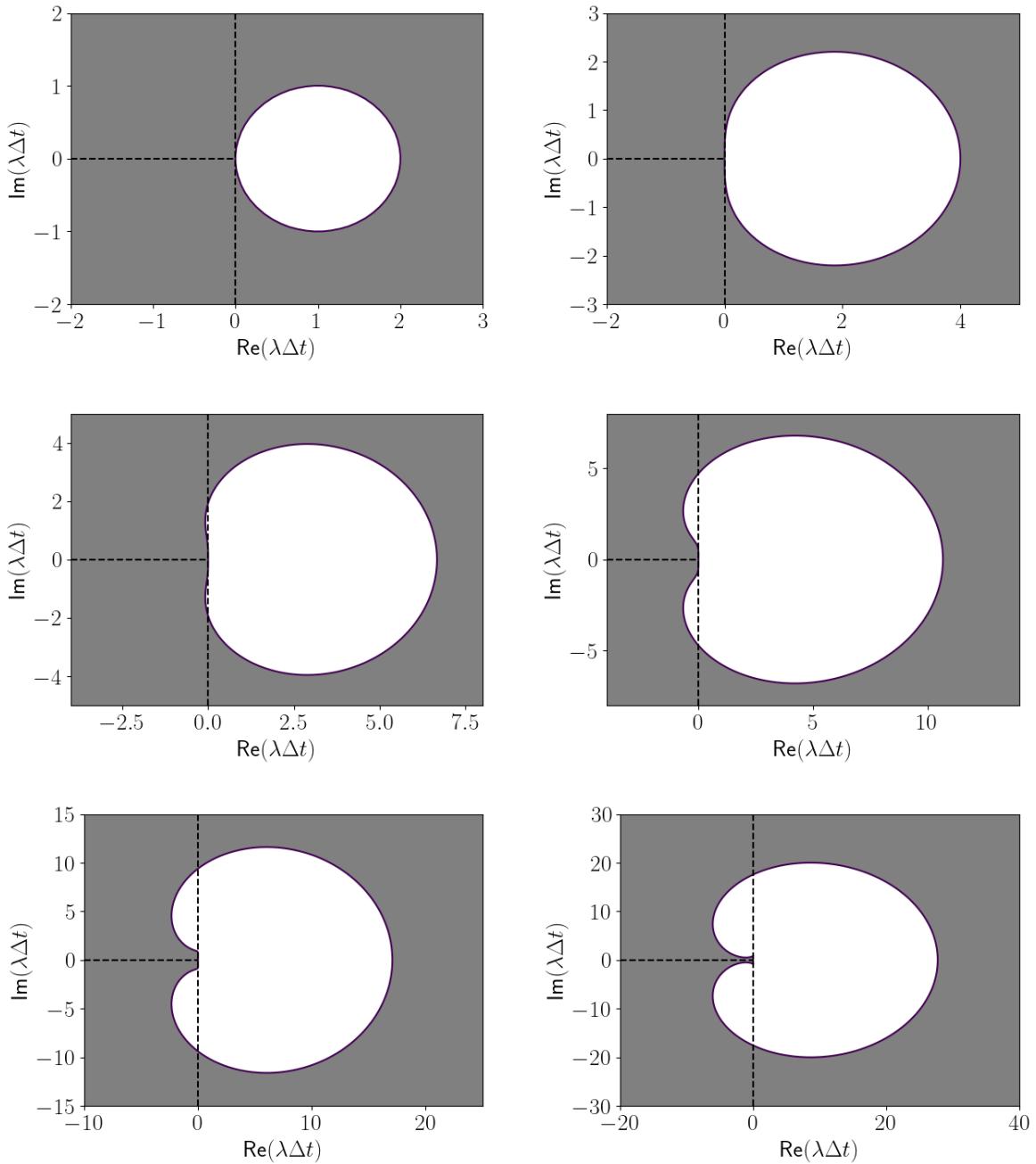


FIGURE 8.2. – En gris, régions de stabilité absolue des méthodes BDF implicites jusqu'à l'ordre 6, triées par ordre croissant par rapport à b , de gauche à droite puis de haut en bas. Pour chacune d'entre elles, l'ensemble des complexes à partie réelle négative y est entièrement inclus : les méthodes sont au moins A_0 -stables. Notons que les régions de stabilité absolue décroissent avec l'ordre b . Pour $b \in \{1, 2\}$, ces régions contiennent même la totalité de la moitié gauche du plan complexe : les méthodes sont donc A -stables.

$b \backslash i$	0	1	2	3	4	5	6	7
1	1	-1						
2	3/2	-2	1/2					
3	11/6	-3	3/2	-1/3				
4	25/12	-4	3	-4/3	1/4			
5	137/60	-5	5	-10/3	5/4	-1/5		
6	147/60	-6	15/2	-20/3	15/4	-6/5	1/6	
7	363/140	-7	21/2	-35/3	35/4	-21/5	7/6	-1/7

 TABLE 8.2. – Coefficients $(\alpha_{b,i}^{(i)})_{0 \leq i \leq b}$ des schémas BDF implicites d'ordre au plus 7.

8.2. Préserver la positivité de la densité

8.2.1. Motivation

La densité ρ , en plus de satisfaire à l'équation de continuité (5.49b), est une quantité positive, propriété préservée au niveau continu par cette même équation. Dans des régions à fort gradient de vitesse, cette propriété peut être menacée si le schéma numérique employé ne la garantit pas au niveau discret. Dans notre cas, il est donc impératif que les schémas dG et de discrétisation en temps préservent simultanément la positivité. En effet, si l'on note A_h^{mass} l'opérateur discret tel que pour tout $(\rho_h, z_h) \in Z_h^2$,

$$\langle A_h^{\text{mass}} \rho_h, z_h \rangle_{L^2(\Omega)} = a_h^{\text{mass}}(\rho_h, z_h; \mathbf{v}_h) - l_h^{\text{mass}}(z_h; \mathbf{v}_h), \quad (8.19)$$

où a_h^{mass} et l_h^{mass} sont définis par (7.32), alors la version discrète de la formulation variationnelle de l'équation de conservation de la masse (5.49b) peut se mettre sous la forme d'un problème de Cauchy, du type de l'équation (8.1) :

$$\frac{d\rho_h}{dt} = -A_h^{\text{mass}} \rho_h. \quad (8.20)$$

Sous cette forme canonique, il est possible d'appliquer une méthode LLM (8.3) pour discrétiser cette équation en temps, ce qui donne

$$\left(\text{id} + \frac{\beta_{b,0}}{\alpha_{b,0}} A_h^{\text{mass},n} \right) \rho_h^n = - \sum_{i=1}^b \frac{\alpha_{b,i}}{\alpha_{b,0}} \rho_h^{n-i} - \Delta t \sum_{i=1}^b \frac{\beta_{b,i}}{\alpha_{b,0}} A_h^{\text{mass},n-i} \rho_h^{n-i}, \quad (8.21)$$

où id désigne l'opérateur identité et $A_h^{\text{mass},n-i}$ est une version discrète en temps de l'opérateur A_h^{mass} au temps t_{n-i} , dans lequel les instances de la vitesse \mathbf{v}_h ont été remplacées par une approximation \mathbf{v}_h^{n-i} , $i = 0, \dots, b$. Ainsi, si l'on suppose que les ρ_h^{n-i} , $i = 1, \dots, b$, sont connus et positifs, alors la positivité de ρ_h^n est garantie à condition, par exemple, que

- (i) $A_h^{\text{mass},n-i}$ préserve la positivité pour tout $i = 0, \dots, b$, c'est-à-dire $A_h^{\text{mass},n-i} \rho_h^{n-i} \geq 0$;
- (ii) $\alpha_{b,0} > 0$ et $\alpha_{b,i} < 0$ quel que soit $i = 1, \dots, b$;
- (iii) $\beta_{b,0} > 0$ et $\beta_{b,i} < 0$ quel que soit $i = 1, \dots, b$.

La section 8.2.2 introduit une méthode LLM garantissant les conditions (ii) et (iii) ainsi que les bonnes propriétés propres aux méthodes BDF implicites, introduites précédemment. La section 8.2.3, quant à elle, traite de la condition (i) via l'introduction d'un limiteur proposé par ZHANG dans [Zha17].

8.2.2. *Adaptative-Backward Differentiation Formula (A-BDF)*

Les méthodes BDF implicites introduites à la section 8.1.3 ne remplissent pas les conditions (ii) et (iii). Dans [Zha17, section 5.2], ZHANG utilise une méthode Runge-Kutta dite SSP (pour *Strong Stability Preserving*), qui satisfait à des conditions analogues, une fois transposées dans le cadre des méthodes de Runge-Kutta. Ici, nous préférerons utiliser une méthode LLM qui préserve la positivité et qui possède, si possible, au moins les mêmes propriétés que les méthodes BDF implicites – et ce pour les mêmes raisons qui nous ont incité à considérer ces dernières plutôt que les méthodes de Runge-Kutta dans la section précédente. Les méthodes A-BDF (pour *Adaptative-BDF*) répondent à ces critères.

La méthode A-BDF d'ordre b est définie pour tout $\theta \in \mathbb{R} \setminus \{1, \alpha_{b,0}^{(i)} / \alpha_{b,0}^{(e)}\}$ et pour tout $n = b, \dots, n_{\max}$ par [Fre98]

$$\text{A-BDF}_{b,n}(\theta) := \text{BDF}_{b,n}^{(i)} - \theta \text{BDF}_{b,n}^{(e)} = 0. \quad (8.22)$$

Elle est consistante d'ordre b si $\theta \neq -b$ et d'ordre $b+1$ autrement.

Suivant [Bal+22], nous choisissons une formulation équivalente de (8.22) en divisant $\text{BDF}_{b,n}^{(e)}$ (resp. $\text{BDF}_{b,n}^{(i)}$) par $\alpha_{b,0}^{(e)}$ (resp. $\alpha_{b,0}^{(i)}$) puis la formule $\text{BDF}_{b,n}^{(i)} / \alpha_{b,0}^{(i)} - \theta \text{BDF}_{b,n}^{(e)} / \alpha_{b,0}^{(e)}$ par $(1 - \theta)$, pour finalement obtenir

$$y^n = \sum_{i=1}^b \tilde{\alpha}_{b,i}(\theta) y^{n-i} + \Delta t (\tilde{\beta}_{b,0}(\theta) f^n + \tilde{\beta}_{b,1}(\theta) f^{n-1}), \quad (8.23a)$$

où

$$\tilde{\alpha}_{b,i}(\theta) := -\frac{1}{1-\theta} \left(\frac{\alpha_{b,i}^{(i)}}{\alpha_{b,0}^{(i)}} - \theta \frac{\alpha_{b,i}^{(e)}}{\alpha_{b,0}^{(e)}} \right), \quad 1 \leq i \leq b, \quad (8.23b)$$

$$\tilde{\beta}_{b,0}(\theta) := \frac{1}{\alpha_{b,0}^{(i)}(1-\theta)}, \quad (8.23c)$$

$$\tilde{\beta}_{b,1}(\theta) := -\frac{\theta}{\alpha_{b,0}^{(e)}(1-\theta)}. \quad (8.23d)$$

$b \setminus i$	1	2	3
1	1		
2	$\frac{4}{3(1-\theta)}$	$-\frac{1+3\theta}{3(1-\theta)}$	
3	$\frac{36+33\theta}{22(1-\theta)}$	$-\frac{9+33\theta}{11(1-\theta)}$	$\frac{4+11\theta}{22(1-\theta)}$

 TABLE 8.3. – Coefficients $(\tilde{\alpha}_{b,i}^{(i)}(\theta))_{1 \leq i \leq b}$ des schémas A-BDF d'ordre au plus 3.

$b \setminus i$	0	1
1	$\frac{1}{1-\theta}$	$\frac{-\theta}{1-\theta}$
2	$\frac{2}{3(1-\theta)}$	$\frac{-2\theta}{1-\theta}$
3	$\frac{6}{11(1-\theta)}$	$\frac{-3\theta}{1-\theta}$

 TABLE 8.4. – Coefficients $(\tilde{\beta}_{b,i}(\theta))_{0 \leq i \leq 1}$ des schémas A-BDF d'ordre au plus 3.

Les coefficients sont listés dans les tableaux 8.3 et 8.4 jusqu'à l'ordre 3.

Nous rappelons les principaux théorèmes établis par FREDEBEUL dans [Fre98] (voir théorèmes 2.8 et 2.14 à 2.16).

Théorème 8.2.1

Les méthodes A-BDF sont zéro-stables lorsque $b = 1, \dots, 6$ si, et seulement si, $\theta \in I_b$, où I_b est un certain intervalle de \mathbb{R} , donné dans le tableau ci-dessous. La méthode A-BDF d'ordre $b = 7$ est zéro-stable si $\theta \in I_7$, où I_7 est également un intervalle donné dans le tableau ci-dessous. La réciproque n'est pas vraie.

b	1	2	3	4	5	6	7
I_b	$\mathbb{R} \setminus \{1\}$	$]-\infty, 1[$	$]-5, 1[$	$]-5, 1[$	$]-4, 1[$	$]-\frac{13}{3}, 1[$	$]-\frac{151}{31}, 1[\setminus [-\frac{62}{15}, \frac{2}{13}]$

Théorème 8.2.2

- Les méthodes A-BDF sont A-stables si, et seulement si, $b \in \{1, 2\}$ et $\theta \in [-1, 1[$.
- Lorsque $b \in \{3, 4, 5\}$, elles sont A_0 -stables si, et seulement si, $\theta \in [-1, 1[$.
- La méthode A-BDF d'ordre $b = 6$ est A_0 -stable si, et seulement si, $\theta \in [-\epsilon_6, 1[$

pour un certain $\epsilon_6 > 0.166$.

- La méthode A-BDF d'ordre $b = 7$ est A_0 -stable si, et seulement si, $\theta \in [1 - \epsilon_7, 1[$ pour un certain $\epsilon_7 > 0.17$.

Les méthodes A-BDF ne sont pas A_0 -stables dès que $b \geq 8$.

Ces méthodes présentent également une région de stabilité absolue contenant une part importante de la moitié gauche du plan complexe, dont la taille décroît avec $b = 1, \dots, 6$, comme le montre la figure 8.3 pour $\theta = -0.35$. Remarquons qu'avec ce choix de θ , la méthode A-BDF d'ordre 6 est censée ne pas être A_0 -stable, mais la figure 8.4 montre le contraire. Aussi, les tailles des régions d'absolue stabilité sont moindres que celles des méthodes BDF implicites, mais ce n'est pas forcément vrai pour tout θ .

D'après [Bal+22] ou d'après les tableaux 8.3 et 8.4, les coefficients sont tous strictement positifs lorsque $\theta \in [-\infty, 0]$ pour $b = 1$, lorsque $\theta \in [-\infty, -1/3[$ pour $b = 2$ et lorsque $\theta \in]-4/11, -3/11[$ pour $b = 3$. Pour $b \in \{1, 2, 3\}$, il est donc possible de n'avoir que des coefficients strictement positifs, tout en maintenant la zéro-stabilité et l' A_0 -stabilité, si l'on choisit par exemple $\theta = \theta^* := -35/100$. Avec ce choix, il est clair que le schéma A-BDF n'est pas A_0 -stable pour $b = 7$, ce qui est confirmé par la figure 8.5.

8.2.3. Limiteur

L'opérateur discret A_h^{mass} ne préserve pas la positivité au sens défini par (i), mais seulement celle de la densité moyenne locale (au niveau des éléments du maillage), et, qui plus est, sous une condition CFL [PS96 ; Zha17]¹. Plus précisément, si l'on choisit de tester (8.20) avec $z_h = \mathbb{1}_K$, la fonction indicatrice de $K \in \mathcal{T}_h$, on obtient

$$\frac{d}{dt} \langle \rho_h \rangle_K + a_h^{\text{mass}}(\rho_h, \mathbb{1}_K; \mathbf{v}_h) - l_h^{\text{mass}}(\mathbb{1}_K; \mathbf{v}_h) = 0,$$

que l'on peut aussi réécrire sous la forme [PE11, section 3.2.2]

$$\frac{d}{dt} \langle \rho_h \rangle_K + \sum_{S \in \mathcal{S}_h} \frac{\mathbf{n}_K \cdot \mathbf{n}_S}{|K|} \int_S \Phi_h^{\text{upw}}(\mathbf{n}_S, \rho_S^-, \rho_S^+) ds = 0, \quad (8.24a)$$

où

$$\langle \rho_h \rangle_K := \frac{1}{|K|} \int_K \rho_h \, dx \quad (8.24b)$$

est la moyenne locale de ρ_h sur K ,

$$\Phi_h^{\text{upw}}(\mathbf{n}, \rho^-, \rho^+) := (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\oplus \rho^- - (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})^\ominus \rho^+ \quad (8.24c)$$

1. Pour une revue des méthodes dG préservant la positivité, cf. [Zha17]

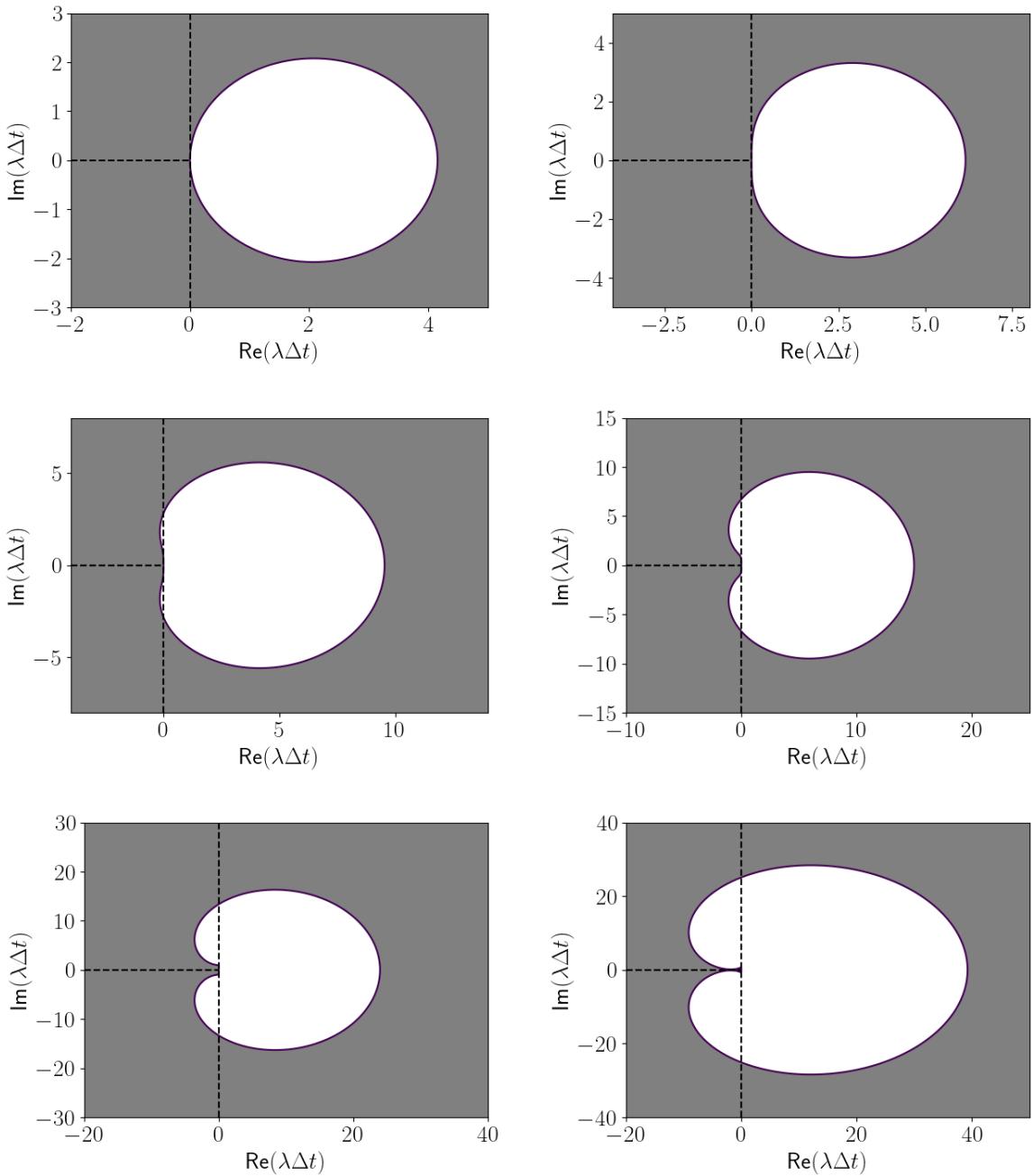


FIGURE 8.3. – En gris, régions de stabilité absolue des méthodes A-BDF jusqu’à l’ordre 6 avec $\theta = -0.35$, triées par ordre croissant par rapport à b , de gauche à droite puis de haut en bas. Pour chacune d’entre elles, l’ensemble des complexes à partie réelle négative y est entièrement inclus : les méthodes sont au moins A_0 -stables (voir figure 8.4 pour un zoom de la dernière figure). Notons que les régions de stabilité absolue décroissent avec l’ordre b . Pour $b \in \{1, 2\}$, ces régions contiennent même la totalité de la moitié gauche du plan complexe : les méthodes sont donc A-stables.

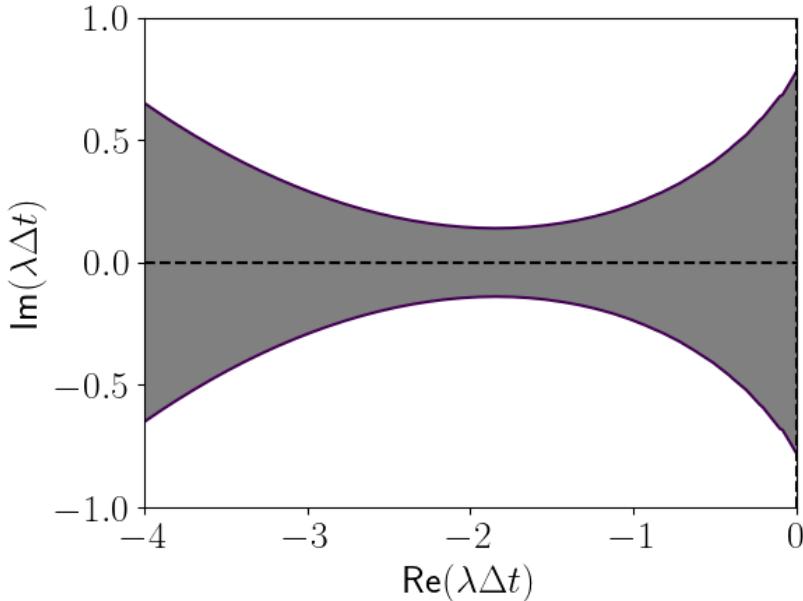


FIGURE 8.4. – Zoom sur l’axe \mathbb{R}^- , où le complémentaire (en blanc) de la région de stabilité absolue (en gris) de la méthodes A-BDF d’ordre 6 avec $\theta = -0.35$ passe près.

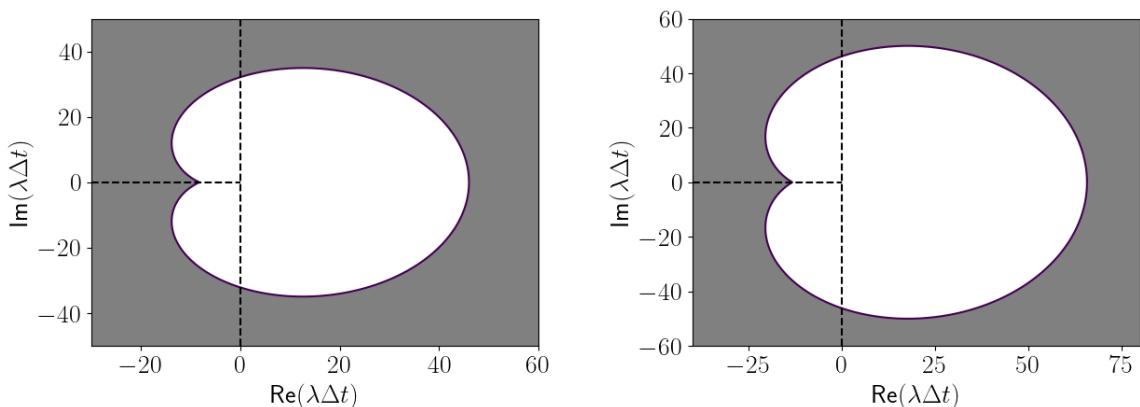


FIGURE 8.5. – En gris, régions de stabilité absolue pour les méthodes BDF implicite d’ordre $b = 7$ (gauche) et A-BDF d’ordre 7 avec $\theta = -0.35$ (droite). Pour chacune d’elles, l’ensemble \mathbb{R}^- n’est pas entièrement inclus : ces méthodes ne sont donc pas A_0 -stables.

est le flux numérique dit *upwind* [PE11, section 3.2.2] et

$$\rho_S^- := \begin{cases} \rho_h|_{K^-} & \text{si } S \in \mathcal{S}_h^i, \\ \rho_h|_K & \text{si } S \in \mathcal{S}_h^b, \end{cases} \quad \rho_S^+ := \begin{cases} \rho_h|_{K^+} & \text{si } S \in \mathcal{S}_h^i, \\ \rho^{\text{in}} & \text{si } S \in \mathcal{S}_h^b \end{cases} \quad (8.24d)$$

sont les états à gauche et à droite de ρ_h . L'équation (8.24a) s'interprète comme un équilibre entre les variations temporelles de la moyenne locale de la densité et les flux numériques passant à travers la frontière de l'élément K. Le flux Φ_h^{upw} est un flux de Lax-Friedrichs [PE11] et, d'après [PS96], préserve alors la positivité de l'approximation au temps t_n de la moyenne locale de la densité, si le pas de temps Δt est choisi suffisamment petit, en supposant que (8.24a) ait été approchée par la méthode A-BDF introduite précédemment.

L'idée du limiteur proposé dans [Zha17] est une stratégie pour éviter d'avoir à choisir un pas de temps trop petit, d'avoir à le diminuer de trop nombreuses fois ou même de devoir l'estimer, ce qui pourrait amener à des temps de calcul rédhibitoires [Zha17, section 5.2]. En effet, si la densité est négative en certains noeuds du maillage mais reste de moyenne locale positive dans tous les éléments, plutôt que de diminuer le pas de temps, il est préférable de modifier la valeur de la densité en ces noeuds, de sorte que sa moyenne locale soit conservée. *A contrario*, s'il existe un élément dans lequel la moyenne locale de la densité est négative, alors on estime que la condition CFL n'est pas remplie et qu'il faut diminuer le pas de temps (de moitié par exemple, cf. section 9.1).

Plus formellement, ce limiteur consiste à remplacer $\rho_h^n|_K$ par une transformation linéaire $\tilde{\rho}_h^n|_K$ autour de la moyenne de la densité dans l'élément $K \in \mathcal{T}_h$ considéré :

$$\tilde{\rho}_h^n|_K(x) = \theta_K^n(\rho_h^n|_K(x) - \langle \rho_h^n \rangle_K) + \langle \rho_h^n \rangle_K, \quad (8.25)$$

avec $\theta_K^n \in [0, 1]$ défini par

$$\theta_K^n := \min_{i \in \{1, \dots, 3k\}} \min \left(1, \frac{\langle \rho_h^n \rangle_K}{\langle \rho_h^n \rangle_K - \rho_h^n|_K(s_{K,i})} \right), \quad (8.26)$$

où $s_{K,i}$ représente le i -ème noeud de K, $i \in \{1, \dots, 3k\}$. Ce limiteur

- est conservatif: $\langle \tilde{\rho}_h^n \rangle_K = \langle \rho_h^n \rangle_K$;
- et préserve la positivité de la hauteur: $\tilde{\rho}_h^n \geq 0$.

8.3. Schéma numérique

Dans cette section, nous discrétisons en temps les équations des problèmes 7.1.2 et 7.2.2 à l'aide des méthodes BDF présentées précédemment. Nous utilisons spécifiquement les méthodes A-BDF pour discrétiser l'équation de conservation de la masse (7.34b), dans le but de garantir la positivité de la densité discrète.

Les systèmes d'équations obtenus sont totalement implicites en temps: ils sont non-linéaires et leur résolution est donc difficile. Nous mettons alors en place une stratégie de point fixe. À l'avenir, la méthode de Newton pourra s'avérer avantageuse pour améliorer la vitesse de convergence vers le point fixe.

8.3.1. Discréétisation en temps du problème incompressible

Le schéma numérique entièrement discret associé au problème 5.3.1 s'obtient directement à partir de l'application de la méthode BDF implicite à l'équation d'évolution de l'approximation spatiale de la polarité dans le problème discret 7.1.2.

Problème 8.3.1. En supposant $(\mathbf{v}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$ et $(\mathbf{p}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$ connues, trouver $\mathbf{v}_h^n \in V_h(\mathbf{v}_D)$, $\Pi_h^n \in \Xi_h$ et $\mathbf{p}_h^n \in Q_h$ telles que

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}_h^n, \mathbf{w}_h) + b(\mathbf{w}_h, \Pi_h^n) &= T_a(\mathbf{p}_h^n | \mathbf{w}_h) \\ &\quad - \omega(\mathbf{p}_h^n, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^n), \mathbf{w}_h) - a\delta(\mathbf{p}_h^n, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^n), \mathbf{w}_h) \\ &\quad + \kappa^2 Bc_h(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{p}_h^n, \mathbf{w}_h) + S_a \delta(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{p}_h^n, \mathbf{w}_h), \forall \mathbf{w}_h \in V_h(\mathbf{0}), \end{aligned} \quad (8.27a)$$

$$b(\mathbf{v}_h^n, \xi_h) = 0, \quad \forall \xi_h \in \Xi_h, \quad (8.27b)$$

$$\begin{aligned} Pe \frac{\alpha_{b_n,0}^{(i)}}{\Delta t} (\mathbf{p}_h^n | \mathbf{q}_h) + Pe a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h^n) \\ - Pe (\omega(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^n) + a\delta(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^n)) + \frac{1}{B} (\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^n) | \mathbf{q}_h) \\ = -Pe \sum_{i=1}^{b_n} \frac{\alpha_{b_n,i}^{(i)}}{\Delta t} (\mathbf{p}_h^{n-i} | \mathbf{q}_h) + Pe \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h^n \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds, \forall \mathbf{q}_h \in Q_h, \end{aligned} \quad (8.27c)$$

où k , b , ω et δ sont respectivement définies par (7.6a), (7.6b), (7.6c) et (7.6d):

$$k(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) := 2(\mathbf{D}(\mathbf{v}_h) | \mathbf{D}(\mathbf{w}_h)) + C_F(\mathbf{v}_h | \mathbf{w}_h), \quad (8.28a)$$

$$b(\mathbf{w}_h, \xi_h) := \int_{\Omega} -\xi_h \operatorname{div} \mathbf{w}_h \, dx, \quad (8.28b)$$

$$\omega(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{w}_h) := \int_{\Omega} \mathbf{q}_h \cdot \mathbf{W}(\mathbf{w}_h) \cdot \mathbf{p}_h \, dx, \quad (8.28c)$$

$$\delta(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{w}_h) := \int_{\Omega} \mathbf{q}_h \cdot \mathbf{D}(\mathbf{w}_h) \cdot \mathbf{p}_h \, dx. \quad (8.28d)$$

La forme c_h est obtenue en remplaçant les gradients ∇ dans la forme c (7.6e) par des gradients cassés ∇_h , ce qui donne

$$c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{w}_h) := \int_{\Omega} (\nabla_h \mathbf{p}_h^\top \cdot \nabla_h \mathbf{q}_h) : \mathbf{D}(\mathbf{w}_h) \, dx. \quad (8.28e)$$

Enfin, $\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^n)$ dans (8.27a) est obtenu en résolvant le problème de la définition 7.1.2.

8.3.2. Discrétisation en temps du problème compressible

Le schéma numérique entièrement discret associé au problème 5.3.2 s'obtient directement à partir de l'application de la méthode A-BDF à l'équation (7.34b) et celle de la méthode BDF implicite à l'équation (7.34c) dans le problème discret 7.2.2. Pour la méthode A-BDF, nous choisissons $\theta = \theta^* := -0.35$, valeur qui permet d'obtenir des coefficients positifs, comme expliqué dans la section 8.2.2.

Problème 8.3.2. En supposant $(\mathbf{v}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$, $(\rho^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$ et $(\mathbf{p}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$ connues, trouver $\mathbf{v}_h^n \in V_h(\mathbf{v}_D)$, $\rho_h^n \in Z_h$ et $\mathbf{p}_h^n \in Q_h$ telles que

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}_h^n, \mathbf{w}_h; \rho_h^n) &= T_a(\mathbf{p}_h^n \mid \mathbf{w}_h) - b(\mathbf{w}_h, \Pi_h(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n)) \\ &- \omega(\mathbf{p}_h^n, \mathcal{L}_h(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n), \mathbf{w}_h) - a\delta(\mathbf{p}_h^n, \mathcal{L}_h(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n), \mathbf{w}_h) + \kappa^2 B c_h(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{p}_h^n, \mathbf{w}_h; \rho_h^n) \\ &+ S_a \delta(\rho_h^n \mathbf{p}_h^n, \mathbf{p}_h^n, \mathbf{w}_h) - S'_a b(\mathbf{w}_h, \rho_h^n \mid \mathbf{p}_h^n)^2, \quad \forall \mathbf{w}_h \in V_h(\mathbf{0}), \end{aligned} \quad (8.29a)$$

$$\begin{aligned} (\rho_h^n \mid z_h) + \Delta t \tilde{\beta}_{b,0}(\theta^*) a_h^{\text{mass}}(\rho_h^n, z_h; \mathbf{v}_h^n) &= \sum_{i=1}^b \tilde{\alpha}_{b,i}(\theta^*)(\rho_h^{n-i} \mid z_h) \\ &- \Delta t \tilde{\beta}_{b,1}(\theta^*) a_h^{\text{mass}}(\rho_h^{n-1}, z_h; \mathbf{v}_h^{n-1}) \\ &+ \Delta t (\tilde{\beta}_{b,0}(\theta^*) l_h^{\text{mass}}(z_h; \mathbf{v}_h^n) + \tilde{\beta}_{b,1}(\theta^*) l_h^{\text{mass}}(z_h; \mathbf{v}_h^{n-1})), \quad \forall z_h \in Z_h, \end{aligned} \quad (8.29b)$$

$$\begin{aligned} Pe \frac{\alpha_{b_n,0}^{(i)}}{\Delta t} (\mathbf{p}_h^n \mid \rho_h^n \mathbf{q}_h) + Pe \hat{a}_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h^n, \rho_h^n) \\ - Pe (\omega(\mathbf{p}_h^n, \rho_h^n \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^n) + a\delta(\mathbf{p}_h^n, \rho_h^n \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^n)) + \frac{1}{B} (\mathcal{L}_h(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n) \mid \mathbf{q}_h) \\ = -Pe \sum_{i=1}^{b_n} \frac{\alpha_{b_n,i}^{(i)}}{\Delta t} (\mathbf{p}_h^{n-i} \mid \rho_h^n \mathbf{q}_h) + Pe \int_{\Gamma_D^p} \rho_h^n (\mathbf{v}_h^n \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds, \quad \forall \mathbf{q}_h \in Q_h, \end{aligned} \quad (8.29c)$$

où b , ω et δ sont respectivement définies par (8.28b), (8.28c) et (8.28d). Les formes k et c_h sont quant à elles respectivement définies par (7.28a) et (7.28b), en remplaçant

les gradients ∇ par des gradients cassés ∇_h dans cette dernière :

$$k(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h; z_h) := 2(z_h \mathbf{D}(\mathbf{v}_h) \mid \mathbf{D}(\mathbf{w}_h)) + 2(z \operatorname{div} \mathbf{v} \mid \operatorname{div} \mathbf{w}) + C_F(\mathbf{v}_h \mid \mathbf{w}_h), \quad (8.30a)$$

$$c_h(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h, \mathbf{w}_h; z_h) := \int_{\Omega} z_h (\nabla_h \mathbf{p}_h^T \cdot \nabla_h \mathbf{q}_h) : \mathbf{D}(\mathbf{w}_h) \, dx. \quad (8.30b)$$

Enfin, $\mathcal{L}_h(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n)$ dans (8.29a) est obtenu en résolvant le problème de la définition 7.2.2.

8.3.3. Point fixe pour le problème incompressible

Nous mettons en place une méthode de point fixe pour le problème incompressible 8.3.1 en préservant la structure du problème de Stokes pour le couple (\mathbf{v}, Π) . Nous explicitons d'abord la polarité dans (8.27a), et calculons la vitesse et la pression simultanément. Nous calculons ensuite la polarité en résolvant (8.27c) avec la vitesse précédemment obtenue.

Au pas de temps n , nous notons $\mathbf{v}_h^{n,k}$, $\Pi_h^{n,k}$ et $\mathbf{p}_h^{n,k}$ les k -ème itérés respectivement de la vitesse, de la pression et de la polarité dans la boucle de point fixe. Ces itérés sont initialisés à partir des valeurs prises par les inconnues au pas de temps précédent, c'est-à-dire

$$\mathbf{v}_h^{n,0} := \mathbf{v}_h^{n-1}, \quad \Pi_h^{n,0} := \Pi_h^{n-1}, \quad \mathbf{p}_h^{n,0} := \mathbf{p}_h^{n-1}. \quad (8.31)$$

En cas de convergence de la méthode de point fixe, nous définissons formellement

$$(\mathbf{v}_h^n, \Pi_h^n, \mathbf{p}_h^n) := \lim_{k \rightarrow +\infty} (\mathbf{v}_h^{n,k}, \Pi_h^{n,k}, \mathbf{p}_h^{n,k}). \quad (8.32)$$

En pratique, nous utilisons les derniers itérés dans la boucle de point fixe, si la méthode a convergé.

À un pas de temps n et une itération de point fixe k fixés, en supposant $(\mathbf{v}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$, $\mathbf{v}_h^{n,k-1}$, $(\mathbf{p}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$ et $\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ connues, nous proposons les étapes suivantes.

- ▷ **Étape 1.** Calculer $\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^{n,k-1})$ à partir de la formulation variationnelle de la définition 7.1.2. En pratique, nous nous contentons de calculer le laplacien discret de $\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ et insérons directement le terme $(|\mathbf{p}_h^{n,k-1}|^2 - 1)\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ dans la formulation variationnelle (8.33) ci-dessous.
- ▷ **Étape 2.** Trouver $\mathbf{v}_h^{n,k} \in V_h(\mathbf{v}_D)$ et $\Pi_h^{n,k} \in \Xi_h$ telles que pour tout $(\mathbf{w}_h, \xi_h) \in V_h(\mathbf{0}) \times \Xi_h$,

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}_h^{n,k}, \mathbf{w}_h) + b(\mathbf{w}_h, \Pi_h^{n,k}) &= T_a(\mathbf{p}_h^{n,k-1} \mid \mathbf{w}_h) \\ &\quad - \omega(\mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^{n,k-1}), \mathbf{w}_h) - a\delta(\mathbf{p}_h^n, \mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^{n,k-1}), \mathbf{w}_h) \\ &\quad + \kappa^2 Bc_h(\mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{w}_h) + S_a \delta(\mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{w}_h), \end{aligned} \quad (8.33)$$

et

$$b(\mathbf{v}_h^{n,k}, \xi_h) = 0. \quad (8.34)$$

▷ **Étape 3.** Trouver $\mathbf{p}_h^{n,k} \in \mathbf{Q}_h$ telle que pour tout $\mathbf{q}_h \in \mathbf{Q}_h$,

$$\begin{aligned} & \left(\left\{ \text{Pe} \frac{\alpha_{b_n,0}^{(i)}}{\Delta t} + |\mathbf{p}_h^{n,k-1}|^2 \right\} \mathbf{p}_h^{n,k} \mid \mathbf{q}_h \right) + \text{Pe} a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h^{n,k}, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h^{n,k}) + \kappa^2 a_h^{\text{swip}}(\mathbf{p}_h^{n,k}, \mathbf{q}_h; 1) \\ &= -\text{Pe} \sum_{i=1}^{b_n} \frac{\alpha_{b_n,i}^{(i)}}{\Delta t} (\mathbf{p}_h^{n-i} \mid \mathbf{q}_h) + \mathbf{p}_h^{n,k-1} + \text{Pe} (\omega(\mathbf{p}_h^{n,k}, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^{n,k}) + a\delta(\mathbf{p}_h^{n,k}, \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^{n,k})) \\ & \quad + \kappa^2 l_h^{\text{swip}}(\mathbf{q}_h; 1) + \text{Pe} \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h^{n,k} \cdot \mathbf{n})^\Theta \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds. \quad (8.35) \end{aligned}$$

8.3.4. Point fixe pour le problème compressible

Pour le problème compressible 8.3.2, nous explicitons de même la polarité dans (8.29a), ainsi que la densité, pour pouvoir dans un premier temps déterminer la vitesse. Nous déduisons alors la densité à partir de (8.29b), puis la polarité en résolvant (8.29c).

Nous conservons les notations de la section précédente, utilisées pour le problème incompressible. À un pas de temps n et une itération de point fixe k fixés, en supposant $(\mathbf{v}^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$, $\mathbf{v}_h^{n,k-1}$, $(\rho^{n-i})_{1 \leq i \leq b_n}$, $\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ et $\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ connues, nous proposons les étapes suivantes.

▷ **Étape 1.** Calculer $\mathcal{L}_h(\rho_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1})$ à partir de la formulation variationnelle de la définition 7.2.2. En pratique, comme dans le cas incompressible, nous nous contentons de calculer la version discrète du laplacien non-homogène de $\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ et insérons directement le terme $\rho_h^{n,k-1}(|\mathbf{p}_h^{n,k-1}|^2 - 1)\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ dans la formulation variationnelle (8.36) ci-dessous.

▷ **Étape 2.** Trouver $\mathbf{v}_h^{n,k} \in \mathbf{V}_h(\mathbf{V}_D)$ telle que pour tout $\mathbf{w}_h \in \mathbf{V}_h(\mathbf{0})$,

$$\begin{aligned} k(\mathbf{v}_h^{n,k}, \mathbf{w}_h; \rho_h^{n,k-1}) &= \mathbf{T}_a(\mathbf{p}_h^{n,k-1} \mid \mathbf{w}_h) - b(\mathbf{w}_h, \Pi_h(\rho_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1})) \\ & \quad - \omega(\mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathcal{L}_h(\rho_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1}), \mathbf{w}_h) - a\delta(\mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathcal{L}_h(\rho_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1}), \mathbf{w}_h) \\ & \quad + \kappa^2 \mathbf{Bc}_h(\mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{w}_h; \rho_h^{n,k-1}) \\ & \quad + S_a \delta(\rho_h^{n,k-1} \mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{p}_h^{n,k-1}, \mathbf{w}_h) - S'_a b(\mathbf{w}_h, \rho_h^{n,k-1} |\mathbf{p}_h^{n,k-1}|^2). \quad (8.36) \end{aligned}$$

▷ **Étape 3.** Trouver $\rho_h^{n,k} \in \mathbf{Z}_h$ telle que pour tout $\mathbf{z}_h \in \mathbf{Z}_h$,

$$\begin{aligned} (\rho_h^{n,k} \mid \mathbf{z}_h) + \Delta t \tilde{\beta}_{b,0}(\theta^*) a_h^{\text{mass},n,k}(\rho_h^{n,k}, \mathbf{z}_h) &= \sum_{i=1}^b \tilde{\alpha}_{b,i}(\theta^*) (\rho_h^{n-i} \mid \mathbf{z}_h) \\ & \quad - \Delta t \tilde{\beta}_{b,1}(\theta^*) a_h^{\text{mass},n-1,k}(\rho_h^{n-1,k}, \mathbf{z}_h) \\ & \quad + \Delta t (\tilde{\beta}_{b,0}(\theta^*) l_h^{\text{mass},n,k}(\mathbf{z}_h) + \tilde{\beta}_{b,1}(\theta^*) l_h^{\text{mass},n-1,k}(\mathbf{z}_h)). \quad (8.37) \end{aligned}$$

▷ **Étape 4.** Appliquer le limiteur décrit dans la section 8.2.3 à la densité $\rho_h^{n,k}$.

▷ **Étape 5.** Trouver $\mathbf{p}_h^{n,k} \in \mathbf{Q}_h$ telle que pour tout $\mathbf{q}_h \in \mathbf{Q}_h$,

$$\begin{aligned}
 & \left(\rho_h^{n,k} \left\{ \text{Pe} \frac{\alpha_{b_n,0}^{(i)}}{\Delta t} + |\mathbf{p}_h^{n,k-1}|^2 \right\} \mathbf{p}_h^{n,k} \mid \mathbf{q}_h \right) + \rho_{\min}(\mathbf{p}_h^{n,k} \mid \mathbf{q}_h) + \text{Pe} a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h^{n,k}, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h^{n,k}, \rho_h^{n,k}) \\
 & + a_h^{\text{swip}}(\mathbf{p}_h^{n,k}, \mathbf{q}_h; \rho_h^{n,k}) = -\text{Pe} \sum_{i=1}^{b_n} \frac{\alpha_{b_n,i}^{(i)}}{\Delta t} (\mathbf{p}_h^{n-i} \mid \mathbf{q}_h) + (\mathbf{p}_h^{n,k-1} \mid \rho_h^{n,k} \mathbf{q}_h) \\
 & + \text{Pe} (\omega(\mathbf{p}_h^{n,k}, \rho_h^{n,k} \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^{n,k}) + a\delta(\mathbf{p}_h^{n,k}, \rho_h^{n,k} \mathbf{q}_h, \mathbf{v}_h^{n,k})) \\
 & + l_h^{\text{swip}}(\mathbf{q}_h; \rho_h^{n,k}) + \text{Pe} \int_{\Gamma_D^P} \rho_h^{n,k} (\mathbf{v}_h^{n,k} \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds. \quad (8.38)
 \end{aligned}$$

Chapitre

Implémentation et validation

numérique

9

Dans ce chapitre, nous détaillons l'implémentation pratique de l'algorithme de résolution des schémas numériques introduits dans les sections 8.3.3 et 8.3.4 (section 9.1) et en proposons une validation numérique (section 9.2).

Table des matières

9.1. Implémentation	195
9.2. Validation numérique	200

9.1. Implémentation

Motivés par le besoin de garantir la positivité de la densité discrète $\rho_h^{n,k}$ (voir la section 8.3 pour les notations), comme expliqué dans la section 8.2, nous mettons en place dans cette section une stratégie d'adaptation de pas de temps. De manière plus générale, notre objectif est de construire un algorithme efficace pour les régimes les moins contraints, et robuste pour les régimes les plus difficiles, par exemple dans lesquels des gradients de vitesses importants pourraient amener à des densités localement négatives, sans le limiteur de positivité. En pratique, cela revient à implémenter une stratégie de compromis entre la vitesse de convergence de la méthode de point fixe, son critère d'arrêt et le nombre d'itérations en temps : un pas de temps suffisamment petit garantit la convergence du schéma numérique, au détriment du nombre d'itérations, tandis qu'un pas de temps trop élevé peut amener à une convergence très lente du point fixe, voire à son échec.

Nous commençons par préciser le critère d'arrêt utilisé pour la méthode de point fixe. Nous discutons ensuite de la stratégie d'adaptation de pas de temps et spécifions les critères d'arrêt du calcul, ce qui nous amène à définir les résidus des équations stationnaires. Nous écrivons finalement l'algorithme final.

9.1.1. Critère d'arrêt pour la méthode de point fixe

À une étape en temps n et une étape de point fixe k données, nous choisissons d'arrêter les itérations de point fixe lorsque l'erreur absolue $e_h^{n,k}$ entre deux itérés successifs descend en-deçà d'un seuil de tolérance δ_{fp} fixé par l'utilisateur, soit

$$e_h^{n,k} := (\|\boldsymbol{v}_h^{n,k} - \boldsymbol{v}_h^{n,k-1}\|_2 + \|\boldsymbol{\Pi}_h^{n,k} - \boldsymbol{\Pi}_h^{n,k-1}\|_2 + \|\boldsymbol{p}_h^{n,k} - \boldsymbol{p}_h^{n,k-1}\|_2)^{1/2} < \delta_{fp}, \quad (9.1)$$

dans le cas incompressible. Dans le cas compressible, l'erreur est définie de la même manière, en remplaçant la pression par la densité. En pratique, si le nombre maximal k_{\max} d'itérations de point fixe, précisé par l'utilisateur, est atteint avant que le critère d'arrêt défini ci-dessus n'ait été satisfait, nous acceptons la convergence de la méthode de point fixe si $e_h^{n,k} < \sqrt{\delta_{fp}}$, dans le but d'éviter à avoir à recommencer le calcul avec un k_{\max} plus petit alors que la méthode était potentiellement proche de converger. Dans le cas contraire, nous considérons que l'algorithme a échoué. De manière plus générale, nous faisons aussi cette conclusion dès lors que l'erreur $e_h^{n,k}$ dépasse un certain seuil, que nous fixons à 10^4 , admettant ainsi que la méthode ne pourra jamais suffisamment diminuer l'erreur avant d'avoir atteint le nombre maximal d'itérations.

Maintenant, qu'en est-il de la qualité d'un tel critère d'arrêt ? Soit $\mathcal{U}_h^{n,k} := (\boldsymbol{v}_h^{n,k}, \boldsymbol{\Pi}_h^{n,k}, \boldsymbol{p}_h^{n,k})$ le vecteur des solutions obtenues par résolution du schéma numérique de la section 8.3.3. Dans le cas compressible, on garde la même notation en remplaçant simplement la pression par la densité, et en résolvant le schéma numérique de la section 8.3.4. Une itération de point fixe peut formellement être vue comme la résolution d'une équation de la forme

$$\mathcal{U}_h^{n,k} = \mathcal{G}(\mathcal{U}_h^{n,k}), \quad (9.2)$$

où \mathcal{G} représente la fonction dont on cherche le point fixe. Il est bien connu que la qualité de ce critère d'arrêt dépend fortement de la dérivée de \mathcal{G} évaluée en le point fixe recherché (voir par exemple [QSS07, section 6.5]). Dans certains cas (en théorie), l'erreur $e_h^{n,k}$ peut être très faible alors même que la distance de l'itéré courant au point fixe recherché est grande, ce qui n'est pas satisfaisant. Une autre possibilité que nous n'avons pas considérée, est au contraire d'utiliser les normes des résidus des équations comme critère d'arrêt. Dans notre contexte de résolution d'équations, ce critère pourrait s'avérer plus pertinent, et pourrait faire l'objet d'un travail plus approfondi.

Nous définissons enfin le taux de convergence

$$\eta_h^{n,k} := -\log_{10}(e_h^{n,k} / e_h^{n,1}), \quad (9.3)$$

c'est-à-dire l'unique réel qui vérifie $e_h^{n,k} = 10^{-\eta_h^{n,k}} e_h^{n,1}$. Cette quantité représente donc en quelque sorte le nombre de décimales gagnées à l'itération k par rapport à la première itération. Nous considérons que ce taux de convergence est satisfaisant s'il vaut au moins 0.55, ce qui correspond au gain d'un peu plus d'une décimale toutes les deux itérations de point fixe.

9.1.2. Stratégie d'adaptation de pas de temps

Nous présentons ici la procédure d'adaptation du pas de temps Δt que nous avons adoptée. Elle consiste à

- augmenter le pas de temps de 25% si la méthode de point fixe a convergé, au sens défini dans la section précédente, suffisamment vite (on considère que c'est le cas si le taux de convergence est supérieur à 0.55, comme évoqué précédemment) et si le nombre d'itérations en temps n'ayant pas nécessité une diminution du pas de temps, noté n^* , a dépassé un seuil que nous donnons juste après ;
- diminuer le pas de temps de 50% si la méthode de point fixe a échoué, au sens défini dans la section précédente, ou s'il existe un élément dans lequel la moyenne locale de la densité est négative, comme expliqué dans la section 8.2.3.

En pratique, nous ne souhaitons pas augmenter le pas de temps dès que la méthode de point fixe a convergé suffisamment vite, pour éviter d'avoir à le diminuer trop rapidement derrière. Souvent, sa diminution survient lorsque les solutions présentent des gradients importants à l'itération en temps courante. Attendre un certain nombre d'itérations n^* avant d'augmenter le pas de temps permet d'assurer que la dynamique des solutions en cours permet bien cette augmentation. En quelque sorte, cela revient à estimer la condition CFL sans la calculer. En pratique, nous considérons que cette attente arrive à son terme si

$$n^* \geq \left\lceil \frac{50\Delta t_0}{\Delta t_n} \right\rceil, \quad (9.4)$$

où Δt_0 désigne le pas de temps souhaité par l'utilisateur et Δt_n le pas de temps à l'itération en temps n . Cette condition s'écrit encore $n^* \Delta t_n \geq 50\Delta t_0$, ce qui correspond à la comparaison de deux temps, décomposés avec des pas différents. Autrement dit, nous attendons qu'un temps d'au moins $50\Delta t_0$ se soit écoulé, sans nouvelle diminution du pas de temps, avant d'augmenter ce dernier.

Remarque 9.1.I: La stratégie d'adaptation de pas de temps que nous avons mise en place dans cette section est purement empirique. Elle pourrait être améliorée à l'aide par exemple de la théorie développée dans [HWN93, section III.5].

9.1.3. Critères d'arrêt du calcul

Liste des critères

La stratégie d'adaptation du pas de temps décrite dans la section précédente peut être amenée à diminuer le pas de temps indéfiniment. Pour éviter ce phénomène, nous arrêtons le calcul si le pas de temps courant devient plus petit que le pas de temps minimal Δt_{\min} , fixé par l'utilisateur.

Dans les situations contraires, l'utilisateur peut également choisir parmi deux critères pour arrêter le calcul : soit les solutions sont stationnaires (voir le chapitre 10), soit l'énergie libre \mathcal{F} , définie par (5.31) et (5.38) dans le cas incompressible (ou (5.39) dans le cas compressible) est stationnaire. Quel que soit le critère retenu, la stationnarité est considérée comme atteinte si la norme du résidu des équations stationnaires r_h^n , défini par (9.10), dans le premier cas, ou si l'approximation au premier ordre de la dérivée en temps de l'énergie $[\mathcal{F}(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n) - \mathcal{F}(\rho_h^{n-1}, \mathbf{p}_h^{n-1})]/\Delta t_n$ dans le second cas, passe en-dessous d'un seuil de tolérance δ_{stop} , fixé par l'utilisateur. Le calcul prend fin dans tous les cas lorsque $n = n_{\text{max}}$.

Remarque 9.1.II : Ici, nous utilisons bien l'énergie continue \mathcal{F} dans le critère d'arrêt, et non sa version semi-discrète \mathcal{F}_h , introduite dans la définition 7.1.3. Le code pourrait donc être amélioré en considérant la définition semi-discrète, voire totalement discrète (aussi en temps), de l'énergie libre.

Résidus des équations stationnaires

Nous commençons par donner une représentation matricielle aux différentes formes intervenant dans les équations à résoudre de la section 8.3.3. Nous n'écrivons ici que les matrices et les résidus dans le cas incompressible, le cas compressible étant totalement similaire. Nous notons pour cela $\bar{\mathbf{v}}_h^n$, $\bar{\Pi}_h^n$, $\bar{\mathbf{p}}_h^n$ et $\bar{\mathcal{L}}_h^n$ les vecteurs des degrés de liberté associés respectivement aux variables \mathbf{v}_h^n , Π_h^n , \mathbf{p}_h^n et $\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h^n)$. Soient donc \mathbf{M}_v , \mathbf{M}_Π et \mathbf{M}_p les matrices de masses associées respectivement aux espaces $V_h(\mathbf{c})$, Ξ_h et Q_h . Aux formes k et b , nous associons naturellement les matrices \mathbf{K} et \mathbf{B} respectivement. Nous définissons ensuite \mathbb{C}_h le tenseur d'ordre 3 défini pour tout $\mathbf{w}_h \in V_h(\mathbf{0})$ par

$$(\bar{\mathbf{p}}_h^n \cdot \mathbb{C}_h \cdot \bar{\mathbf{p}}_h^n) \cdot \bar{\mathbf{w}}_h = c_h(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{p}_h^n, \mathbf{w}_h). \quad (9.5)$$

Nous notons $\mathbf{A}_h^{\text{upw}}(\mathbf{v}_h^n)$ la matrice définie pour tout $\mathbf{q}_h \in Q_h$

$$\bar{\mathbf{q}}_h \cdot \mathbf{A}_h^{\text{upw}}(\mathbf{v}_h^n) \cdot \bar{\mathbf{p}}_h^n = a_h^{\text{upw}}(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h; \mathbf{v}_h^n) - \int_{\Gamma_D^p} (\mathbf{v}_h^n \cdot \mathbf{n})^\top \mathbf{p}_D \cdot \mathbf{q}_h \, ds. \quad (9.6)$$

Nous notons enfin $\mathbf{A}(\mathbf{p}_h^n)$ et $\mathbf{S}(\mathbf{p}_h^n)$ les matrices définies pour tous $\mathbf{w}_h \in V_h(\mathbf{0})$ et $\mathbf{q}_h \in Q_h$ par

$$\bar{\mathbf{w}}_h \cdot \mathbf{A}(\mathbf{p}_h^n) \cdot \bar{\mathbf{q}}_h = \omega(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h, \mathbf{w}_h), \quad (9.7a)$$

$$\bar{\mathbf{w}}_h \cdot \mathbf{S}(\mathbf{p}_h^n) \cdot \bar{\mathbf{q}}_h = \delta(\mathbf{p}_h^n, \mathbf{q}_h, \mathbf{w}_h). \quad (9.7b)$$

Dans le cas incompressible, les résidus des équations stationnaires sont alors définis par

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_h^{v,n} := & \mathbf{M}_v^{-1} \cdot [\mathbf{K} \cdot \bar{\mathbf{v}}_h^n + \mathbf{B} \cdot \bar{\Pi}_h^n - \mathbf{T}_a \mathbf{M}_h^v \cdot \bar{\mathbf{p}}_h^n + \mathbf{A}(\mathbf{p}_h^n) \cdot \bar{\mathcal{L}}_h^n + a \cdot \mathbf{S}(\mathbf{p}_h^n) \cdot \bar{\mathcal{L}}_h^n \\ & - \kappa^2 \mathbf{B} \bar{\mathbf{p}}_h^n \cdot \mathbb{C}_h \cdot \bar{\mathbf{p}}_h^n - S_a \cdot \mathbf{S}(\mathbf{p}_h^n) \cdot \bar{\mathbf{p}}_h^n], \end{aligned} \quad (9.8a)$$

$$\mathbf{r}_h^{\Pi,n} := \mathbf{M}_\Pi^{-1} \cdot \mathbf{B}^\top \cdot \bar{\mathbf{v}}_h^n, \quad (9.8b)$$

$$\mathbf{r}_h^{p,n} := \mathbf{M}_p^{-1} \cdot [\text{Pe} \mathbf{A}_h^{\text{upw}}(\mathbf{v}_h^n) \cdot \bar{\mathbf{p}}_h^n - \text{Pe} \mathbf{A}(\mathbf{p}_h^n)^\top \cdot \bar{\mathbf{v}}_h^n - a \text{Pe} \mathbf{S}(\mathbf{p}_h^n)^\top \cdot \bar{\mathbf{v}}_h^n + \mathbf{M}_p \cdot \bar{\mathcal{L}}_h^n]. \quad (9.8c)$$

En pratique, les résidus (9.8a) et (9.8b) ne sont pas obtenus par une inversion directe de la matrice de masse, contrairement au résidu (9.8c), dont la matrice de masse est diagonale par blocs et peut donc être inversée facilement.

Nous prenons la norme L² de chacun de ces résidus, ce qui définit trois nouvelles quantités

$$r_h^{v,n} := \left[\frac{1}{|\Omega|} (\mathbf{M}_v \cdot \mathbf{r}_h^{v,n} \mid \mathbf{r}_h^{v,n}) \right]^{1/2}, \quad (9.9a)$$

$$r_h^{\Pi,n} := \left[\frac{1}{|\Omega|} (\mathbf{M}_{\Pi} \cdot \mathbf{r}_h^{\Pi,n} \mid \mathbf{r}_h^{\Pi,n}) \right]^{1/2}, \quad (9.9b)$$

$$r_h^{p,n} := \left[\frac{1}{|\Omega|} (\mathbf{M}_p \cdot \mathbf{r}_h^{p,n} \mid \mathbf{r}_h^{p,n}) \right]^{1/2}. \quad (9.9c)$$

Le résidu total est alors défini par

$$r_h^n := \left[(r_h^{v,n})^2 + (r_h^{\Pi,n})^2 + (r_h^{p,n})^2 \right]^{1/2}. \quad (9.10)$$

9.1.4. Algorithme

Nous sommes maintenant en capacité d'écrire l'algorithme final, qui combine les méthodes de point fixe des sections 8.3.3 et 8.3.4, avec comme critère d'arrêt (9.1), la stratégie d'adaptation du pas de temps de la section 9.1.2 et les critères d'arrêt du calcul décrits dans la section 9.1.3.

Algorithme 1 Algorithme utilisé en pratique pour la résolution des problèmes 5.3.1 et 5.3.2

Données : conditions initiales ρ_0 (si calcul compressible) et \mathbf{p}_0

```

1:  $n \leftarrow 0, n^* \leftarrow 0$ 
2:  $\Delta t \leftarrow \Delta t_0$ 
3: Calcul de  $\mathbf{v}_0$ , et de  $\Pi_0$  le cas échéant, en résolvant la deuxième étape de la section 8.3.3
   pour le cas incompressible, ou de la section 8.3.4 pour le cas compressible
4: faire
5:    $n \leftarrow n + 1$ 
6:    $\mathcal{U}_h^{n,0} \leftarrow \mathcal{U}_h^{n-1}$ 
7:   pour  $k = 1, \dots, k_{\max}$  faire
8:     Calcul de  $\mathcal{U}_h^{n,k}$  en fonction des  $(\mathcal{U}_h^{n-i})_{i=1, \dots, b_n}$  et de  $\mathcal{U}_h^{n,k-1}$ , en suivant les étapes
       de la section 8.3.3 pour le cas incompressible, ou de la section 8.3.4 pour le cas
       compressible
9:     Calcul de l'erreur  $e_h^{n,k}$  défini par (9.1)
10:    Calcul du taux de convergence  $\eta_h^{n,k}$  défini par (9.3)
11:    si le point fixe a convergé ou a échoué alors
12:       $\mathcal{U}_h^n \leftarrow \mathcal{U}_h^{n,k}$ 
13:      Sortir de la boucle de point fixe
14:    si le point fixe a convergé et  $\eta_h^{n,k} > 0.55$  alors
15:       $n^* \leftarrow n^* + 1$ 
16:      si  $n^* \geq \left\lceil \frac{50\Delta t_0}{\Delta t} \right\rceil$  alors
17:         $n^* \leftarrow 0$ 
18:         $\Delta t \leftarrow \min(1.25\Delta t, \Delta t_0)$ 
19:      si le point fixe a échoué ou  $\exists K \in \mathcal{T}_h$  tel que  $\langle \rho_h^{n,k} \rangle_K < 0$  (dans le cas compressible),
        où la moyenne  $\langle \cdot \rangle_K$  est définie par (8.24b) alors
20:         $n^* \leftarrow 0$ 
21:         $\Delta t \leftarrow \Delta t/2$ 
22:        si  $\Delta t < \Delta t_{\min}$  alors
23:          Fin du calcul
24:        sinon
25:          Recommencer l'itération en temps courante
26: tant que  $n \leq n_{\max}$  et, au choix,  $r_h^n > \delta_{\text{stop}}$  ou  $\mathcal{F}(\rho_h^n, \mathbf{p}_h^n) - \mathcal{F}(\rho_h^{n-1}, \mathbf{p}_h^{n-1}) > \Delta t \delta_{\text{stop}}$ 

```

9.2. Validation numérique

Dans cette section, nous présentons deux exemples numériques (incompressible et compressible) pour démontrer la convergence et la précision de notre schéma numérique. Dans chacun des cas, nous fixons le plus petit degré polynomial des solutions numériques à $k = 1$

et l'ordre du schéma en temps à $b = 2$. On s'attend donc à retrouver une convergence d'ordre 2 en espace et en temps, c'est-à-dire à obtenir

$$\|\mathbf{v}_h - \mathbf{v}\|_{L^p(L^p)} = O(h^2 + \Delta t^2), \quad (9.11a)$$

$$\begin{cases} \|\Pi_h - \Pi\|_{L^p(L^p)} = O(h^2 + \Delta t^2) & \text{dans le cas incompressible,} \\ \|\rho_h - \rho\|_{L^p(L^p)} = O(h^2 + \Delta t^2) & \text{dans le cas compressible,} \end{cases} \quad (9.11b)$$

$$\|\mathbf{p}_h - \mathbf{p}\|_{L^p(L^p)} = O(h^2 + \Delta t^2), \quad (9.11c)$$

où $\mathcal{U}_h = (\mathbf{v}_h, \Pi_h \text{ ou } \rho_h, \mathbf{p}_h)$ est le vecteur des solutions obtenues par résolution du schéma numérique et $\mathcal{U} = (\mathbf{v}, \Pi \text{ ou } \rho, \mathbf{p})$ est le vecteur des solutions exactes. La norme $L^p(L^p)$, $p \in [1, +\infty]$, utilisée ici pour mesurer l'erreur, est définie par

$$\|\mathbb{A}_h - \mathbb{A}\|_{L^p(L^p)} := \begin{cases} \left(\sum_{n=1}^{n_{\max}} \|\mathbb{A}_h^n - \mathbb{A}(t_n)\|_p^p \Delta t \right)^{1/p} & \text{si } p < +\infty, \\ \max_{n \in \{0, \dots, n_{\max}\}} \|\mathbb{A}_h^n - \mathbb{A}(t_n)\|_{\infty} & \text{si } p = +\infty. \end{cases} \quad (9.12)$$

où $\|\cdot\|_p$ est la norme L^p usuelle sur Ω . En pratique, on choisira $p = 2$ et $p = +\infty$. La somme sur n provient d'une approximation de l'intégrale en temps sur l'intervalle $[0, T]$ par la méthode des rectangles à droite. La norme L^p est quant à elle calculée par la méthode de quadrature de Gauss d'ordre $2q + 1$, où q est le degré des polynômes utilisés pour approcher les solutions.

En plus des approximations numériques \mathbf{v}_h , Π_h ou ρ_h et \mathbf{p}_h , notre schéma numérique doit être capable de calculer en post-traitement une approximation du laplacien de la polarité, que l'on écrit par abus de notation $\Delta_h \mathbf{p}_h$, autant dans le cas incompressible que compressible. Son calcul remplace celui de $\mathcal{L}_h(\mathbf{p}_h)$ (respectivement $\mathcal{L}_h(\rho_h, \mathbf{p}_h)$) dans le cas incompressible (respectivement compressible), comme expliqué dans les sections 8.3.3 et 8.3.4. Comme pour les autres variables, on s'attend à obtenir pour ce laplacien discret une convergence d'ordre 2 aussi bien en espace qu'en temps.

9.2.1. Protocole

Détermination des solutions exactes

Puisque nous ne connaissons pas de solution exacte au système d'équations que nous cherchons à résoudre, nous ajoutons un second membre à chaque équation, excepté à la condition d'incompressibilité. Ce faisant, la solution exacte peut être choisie arbitrairement, indépendamment des équations, en veillant toutefois au respect des conditions aux limites et à la condition d'incompressibilité le cas échéant. Que l'on soit dans le cas incompressible ou le cas compressible, le système d'équations peut être formellement écrit sous la forme

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{M}(\mathcal{U}) = 0. \quad (9.13)$$

Ce que nous proposons est donc de plutôt résoudre

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{M}(\mathcal{U}) = \mathcal{F}, \quad (9.14)$$

où \mathcal{F} est un vecteur de seconds membres indépendants des inconnues, choisi de sorte que les champs sélectionnés auparavant soient solutions de ce système.

Géométrie et condition aux limites

D'un point de vue pratique, nous calculerons les erreurs de convergence sur un carré unité $\Omega := [0, 1]^2$ dans l'intervalle de temps $I := [0, 1]$, en imposant une condition de glissement sur les bords du domaine pour la vitesse – soit $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ et $(\boldsymbol{\sigma}^\top)_{nt} = \mathbf{0}$ sur $\partial\Omega$ – et une condition de Neumann homogène pour la polarité – soit $\partial \mathbf{p} / \partial \mathbf{n} = \mathbf{0}$. Sur le carré, ces conditions aux limites s'écrivent spécifiquement

$$v_1(x_1 = 0 \text{ ou } 1) = 0, \quad v_2(x_2 = 0 \text{ ou } 1) = 0, \quad (9.15a)$$

$$\sigma_{12}(x_1 = 0 \text{ ou } 1) = 0, \quad \sigma_{21}(x_2 = 0 \text{ ou } 1) = 0, \quad (9.15b)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial x_1}(x_1 = 0 \text{ ou } 1) = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial x_2}(x_2 = 0 \text{ ou } 1) = \mathbf{0}. \quad (9.15c)$$

Maillages et pas de temps

Le carré est maillé uniformément avec des triangles, dont le nombre le long de chaque côté du carré est noté N , ce qui donne $2N^2$ triangles. Le pas du maillage le long d'un côté est alors donné par $1/N$, et le plus grand pas du maillage vaut $h = \sqrt{2}/N$. Pour valider notre algorithme, nous mesurons l'erreur sur quatre maillages au total, en prenant successivement N dans $\{8, 16, 32, 64\}$. Autrement dit, nous divisons successivement le pas du maillage par 2. Puisque l'erreur optimale est en $O(h^2 + \Delta t^2)$, nous adoptons le même protocole pour le pas de temps, c'est-à-dire que nous le divisons aussi par 2 à chaque fois que l'on augmente le nombre de triangles, en commençons par $\Delta t = 1/24$ (voir le tableau 9.1). Dans ce cas, les pas du maillage et de temps sont proportionnels et l'erreur est donc théoriquement, simplement en $O(h^2)$. Nous nous contenterons donc de tracer les courbes de convergence en fonction de h uniquement.

$h/\sqrt{2}$	1/8	1/16	1/32	1/64
Δt	1/24	1/48	1/96	1/192

TABLE 9.1. – Pas d'espace h et de temps Δt utilisés pour la validation numérique de l'algorithme 1.

Paramètres

Les calculs ont été lancés en prenant tous les paramètres à 1, sauf c_0 , que nous avons pris à 0. Le nombre maximal d'itérations de la méthode de point fixe a été fixé à $k_{\max} = 50$ et le seuil de tolérance à $\delta_{\text{fp}} = 10^{-8}$.

Environnement de calcul

Imposer des seconds membres aux équations n'est pas anodin et rend la résolution des équations beaucoup plus difficiles. En pratique, cela se traduit par un grand nombre d'itérations (à cause d'adaptations du pas de temps) et des temps de calculs élevés. Pour discuter de ces considérations, nous détaillons l'environnement dans lequel les calculs ont été réalisés.

L'algorithme 1 a été implémenté en C++ à l'aide de la bibliothèque *Rheolef* [Sar20]. Les calculs ont été lancés sur un ordinateur fixe muni d'une RAM de 62.5 Go et d'un processeur 64 bit *Intel Core i7-10700* disposant d'une fréquence de 2.9 GHz et de 16 cœurs.

9.2.2. Cas incompressible

Solutions exactes imposées

Dans le cas incompressible, nous ne forçons pas un second membre pour la condition d'incompressibilité, donc la solution exacte choisie doit vérifier $\text{div } \mathbf{v} = 0$. Dans ce cas, le champ de vitesse peut s'écrire comme le rotationnel d'un champ scalaire ψ , appelé fonction de courant. Par définition, on a donc

$$\mathbf{v} = \text{rot } \psi = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \\ -\frac{\partial \psi}{\partial x_1} \end{pmatrix}. \quad (9.16)$$

Nous imposons les solutions exactes suivantes définies dans $\Omega \times I$:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\pi} \log_2(1 + t) \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2), \quad (9.17a)$$

$$\Pi(\mathbf{x}, t) = \arctan \left[t \left(x_1 - \frac{1}{2} \right) \left(x_2 - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (9.17b)$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{x}, t) = \begin{pmatrix} \tan \left(\frac{\pi}{4} t \right) (1 - \cos(2\pi x_1)) \cos(\pi x_2) \\ \frac{4}{\pi} \arctan(t) \cos(\pi x_1) (1 - \cos(2\pi x_2)) \end{pmatrix}. \quad (9.17c)$$

Avec la définition (9.17a) de la fonction de courant, le champ de vitesse s'écrit

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \log_2(1 + t) \begin{pmatrix} \sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \\ -\cos(\pi x_1) \sin(\pi x_2) \end{pmatrix} \quad (9.17d)$$

Ces champs ont été choisis pour être non polynomiaux en temps et en espace ; ils présentent ainsi des variations spatio-temporelles non triviales, que la méthode des éléments finis ne peut pas capturer de manière exacte. Ils sont représentés au temps $t = 1/4$ sur la figure 9.1. Notons que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$, $(\boldsymbol{\sigma}^\top)_{nt} = \mathbf{0}$ et $\partial \mathbf{p} / \partial \mathbf{n} = \mathbf{0}$ sur $\partial \Omega$ (équations (9.15a) à (9.15c)), et que $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$ par construction.

Convergence

La figure 9.3 montre les courbes d'erreurs de convergence en normes $L^2(L^2)$ et $L^\infty(L^\infty)$ des champs \mathbf{v}_h , Π_h , \mathbf{p}_h et $\Delta_h \mathbf{p}_h$ en fonction de h , comme expliqué en introduction de la section et dans le protocole (section 9.2.1). On observe que la convergence n'est pas optimale, elle est plutôt de l'ordre de $O(h^{3/2})$ pour la norme $L^2(L^2)$ et de l'ordre $O(h^{1/2})$ pour la norme $L^\infty(L^\infty)$. Cet écart entre les ordres optimaux et numériques nécessitera par la suite de revoir l'implémentation de notre algorithme afin de retrouver les résultats optimaux attendus. Les cartes des erreurs montrées sur la figure 9.2 ne permettent pas d'identifier la source possible de cet écart sur ce calcul (avec $N = 16$) : les conditions aux limites n'ont pas l'air de faire défaut par exemple. La résolution des équations a par contre requis jusqu'à cinq diminutions consécutives du pas de temps, qui au minimum a donc valu $\Delta t = \Delta t_0 / 2^5$ dans ce cas, où $\Delta t_0 = 1/48$ est le pas de temps initial, d'après le tableau 9.1. Il est donc possible que l'adaptation du pas de temps entraîne une dégradation des taux de convergence. Comme évoqué dans la remarque 9.1.I, cette adaptation pourrait être améliorée et la non-optimalité des ordres numériques pourrait donc être la conséquence de notre approche empirique. Une façon de vérifier cette hypothèse serait d'imposer des solutions exactes qui ne nécessitent pas d'adaptation du pas du temps, adaptation qui intervient en réaction à une difficulté de convergence de la méthode du point fixe. Et en effet, d'après le tableau 9.2, les temps de calculs traduisent cette difficulté, environ 1 h36 min pour le maillage généré avec $N = 16$ et pour 48 itérations en temps (mais 1696 itérations au total, en comptant celles du point fixe), ce qui n'est pas représentatif des performances du code sur des maillages avec si peu d'éléments et des conditions aux limites si peu contraignantes. Notons quand même que la validité de nos résultats n'est pas affectée par ces taux de convergence, puisque la convergence reste assurée. Il est enfin important de noter que le laplacien discret de la polarité converge bien vers la solution analytique, sans quoi le calcul du tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ aurait été impossible.

Comportement de l'algorithme

Le tableau 9.2 illustre la difficulté à valider le code numériquement en forçant des second membres pour obtenir des solutions exactes imposées. Cela se traduit par un temps de calcul assez important et de nombreuses adaptations du pas de temps, adaptations qui pourraient dégrader les taux de convergence, comme discuté dans la section précédente.

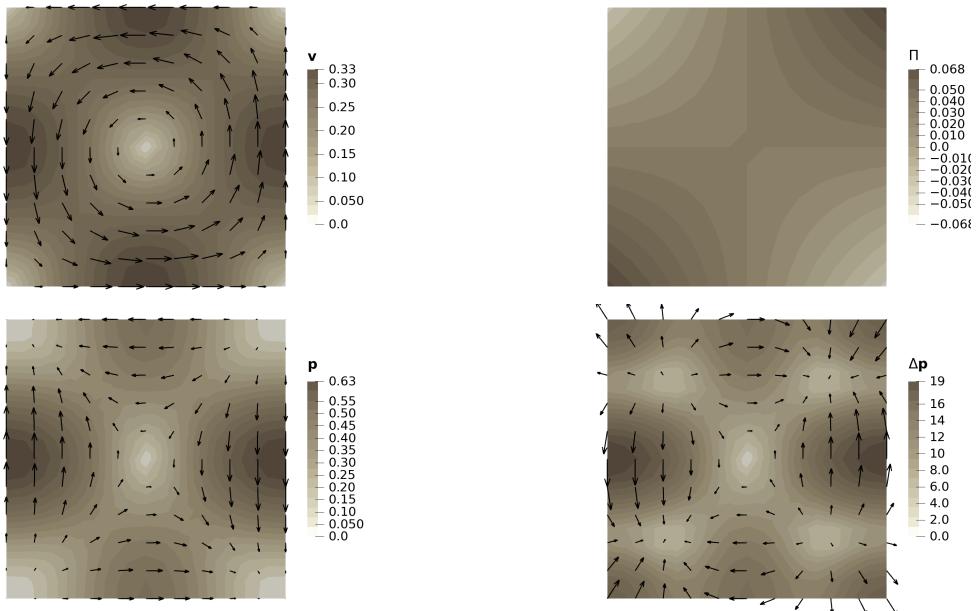


FIGURE 9.1. – Cas incompressible – Cartes des solutions exactes au temps $t = 1/4$ sur un maillage de taille 16×16 .

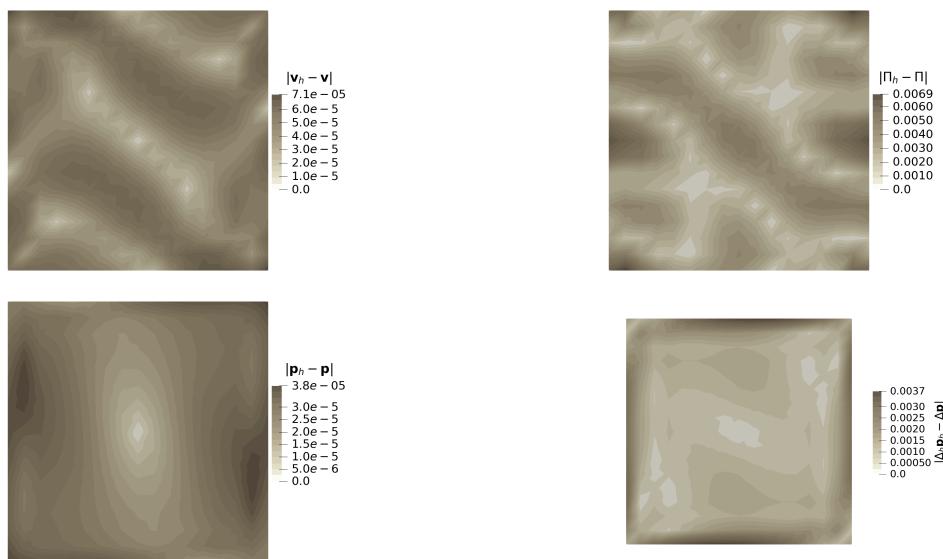


FIGURE 9.2. – Cas incompressible – Cartes des erreurs au temps $t = 1/4$ sur un maillage de taille 16×16 .

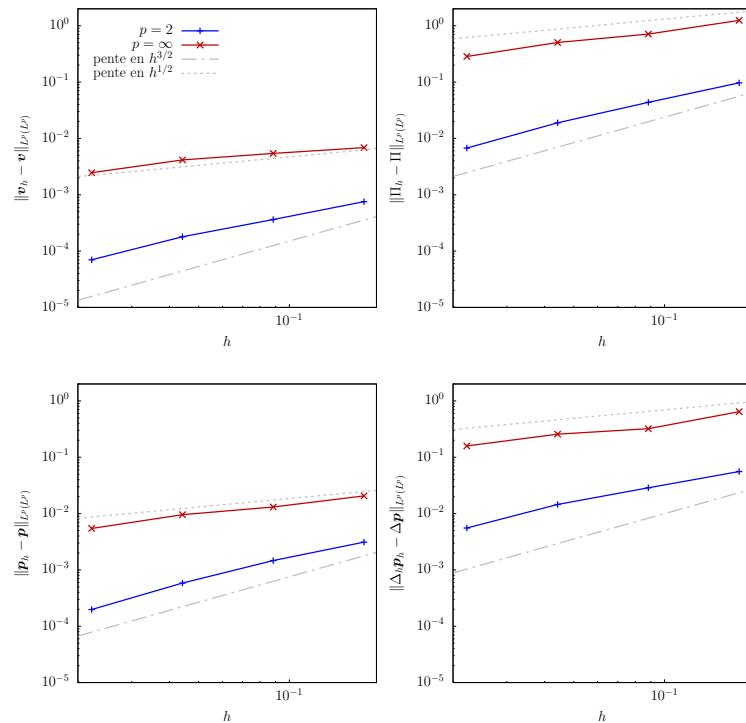


FIGURE 9.3. – Cas incompressible – Erreurs de convergence en normes $L^2(L^2)$ et $L^\infty(L^\infty)$ en fonction de h .

N	8	16	32	64
temps cpu	14 min	1 h36	11 h48	1 d18 h40
nombre total d'itérations	848	1696	3327	2864
n_{\max}	24	48	96	192
Δt minimal	2.6×10^{-3}	6.5×10^{-4}	1.6×10^{-4}	4.1×10^{-5}
Δt moyen	2.2×10^{-2}	10^{-2}	4.7×10^{-3}	2.3×10^{-3}
Δt maximal	1/24	1/48	1/96	1/192
k_{last} minimal	7	6	5	5
k_{last} moyen	35	35	35	15
$\eta_h^{n,k}$ minimal	-0.14	0	0	0
$\eta_h^{n,k}$ moyen	0.31	0.36	0.43	0.78
$\eta_h^{n,k}$ maximal	1.3	1.5	1.9	2.3

TABLE 9.2. – Quelques statistiques associées à la validation numérique dans le cas incompressible. Le nombre k_{last} désigne la dernière itération de point fixe réalisée (qui vaut toujours $k_{\max} = 50$ au maximum) et la quantité $\eta_h^{n,k}$ le taux de convergence de la méthode de point fixe. Les quantités sont données avec deux chiffres significatifs.

9.2.3. Cas compressible

Solutions exactes imposées

Dans le cas compressible, nous imposons les solutions exactes suivantes définies dans $\Omega \times I$:

$$\mathbf{v}(x, t) = \begin{pmatrix} \log_2(1+t) \sin(\pi x_1) \cos(\pi x_2) \\ \frac{1}{2} \frac{e^t - 1}{e - 1} (3x_1^2 - 2x_1^3) x_2 (1 - x_2) \end{pmatrix}, \quad (9.18a)$$

$$\rho(x, t) = \frac{1}{3} \{ \cos[2\pi(x_1 + x_2 - 2t)] + 2 \}, \quad (9.18b)$$

$$p(x, t) = \begin{pmatrix} \tan\left(\frac{\pi}{4}t\right) (1 - \cos(2\pi x_1)) \cos(\pi x_2) \\ \frac{4}{\pi} \arctan(t) \cos(\pi x_1) (1 - \cos(2\pi x_2)) \end{pmatrix}. \quad (9.18c)$$

Comme pour le cas incompressible, ces champs ont été choisis pour être non polynomiaux en temps et en espace. Ils sont représentés au temps $t = 1/2$ sur la figure 9.4. Notons que $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$, $(\boldsymbol{\sigma}^\top)_{nt} = \mathbf{0}$ et $\partial \mathbf{p} / \partial \mathbf{n} = \mathbf{0}$ sur $\partial \Omega$ (équations (9.15a) à (9.15c)).

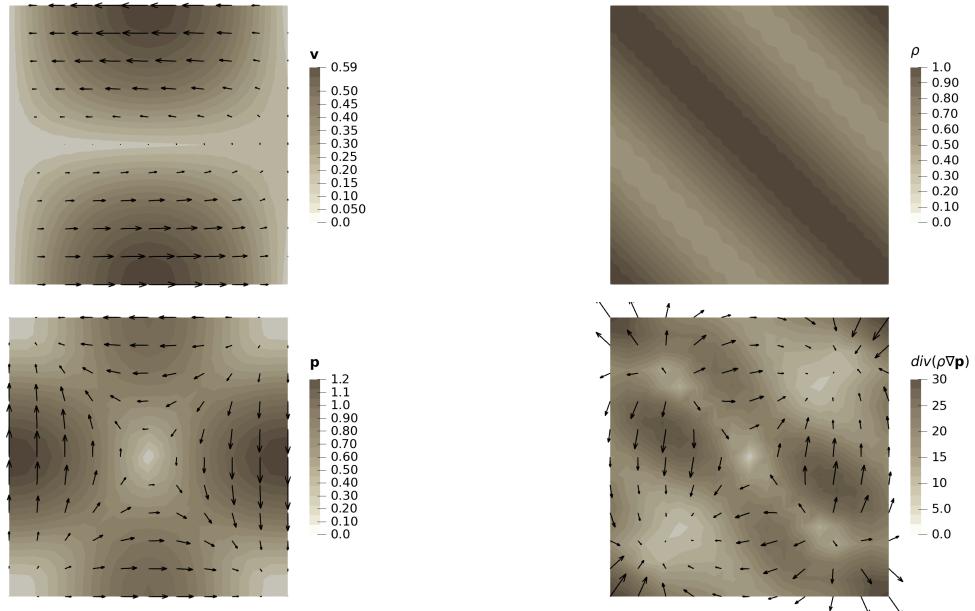


FIGURE 9.4. – Cas compressible – Cartes des solutions exactes au temps $t = 1/2$ sur un maillage de taille 16×16 .

Convergence

La figure 9.6 montre les courbes d'erreurs de convergence en normes $L^2(L^2)$ et $L^\infty(L^\infty)$ des champs \mathbf{v}_h , Π_h , \mathbf{p}_h et $\Delta_h \mathbf{p}_h$ en fonction de h , comme expliqué en introduction de la section et dans le protocole (section 9.2.1). Comme dans le cas incompressible, on observe que la convergence n'est pas optimale – elle est même encore moins bonne –, et est plutôt de l'ordre de $O(h^{3/2})$ voire $O(h)$ pour la norme $L^2(L^2)$ et tend à stagner pour la norme $L^\infty(L^\infty)$. Les cartes des erreurs montrées sur la figure 9.5 ne permettent pas non plus d'identifier la source possible de cet écart sur ce calcul (avec $N = 16$). Remarquons quand même l'erreur maximale commise par le laplacien discret, qui est de 0.3, peut paraître élevée comparé à celle obtenue dans le cas incompressible (environ 0.0037) ou comparé aux autres champs (environ 0.060 pour la densité par exemple). Pourtant, ramenée à la valeur maximale de la solution exacte, qui est de 30, cette erreur compte uniquement pour 1%, ce qui est satisfaisant au vu de la finesse du maillage ($h = \sqrt{2}/16 \approx 0.088$). Les autres commentaires discutés dans le cas incompressible restent encore valables pour le cas présent. Quoi qu'il en soit, cet écart entre les ordres optimaux et numériques nécessitera également par la suite de revoir l'implémentation de notre algorithme afin de retrouver les résultats optimaux attendus. Notons malgré tout que la convergence du schéma numérique dans le cas compressible n'est pas essentielle pour la suite, puisque tous les calculs que nous montrerons auront été menés dans le cas incompressible.

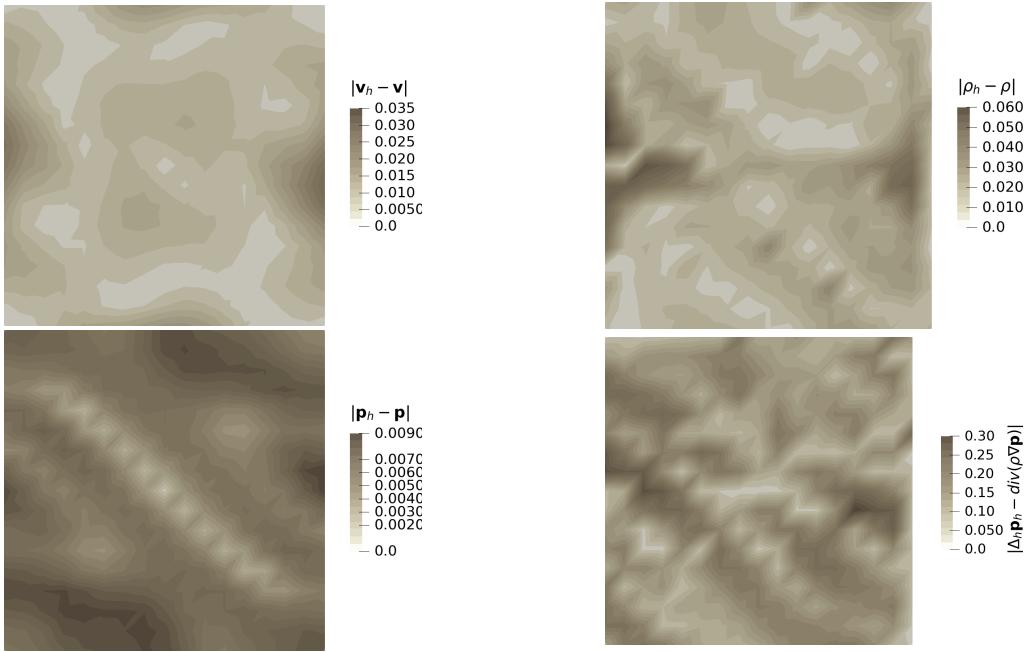


FIGURE 9.5. – Cas compressible – Cartes des erreurs au temps $t = 1/2$ sur un maillage de taille 16×16 .

Comportement de l'algorithme

Comme dans le cas incompressible, le tableau 9.3 illustre la difficulté à valider le code numériquement en forçant des seconds membres pour obtenir des solutions exactes imposées. Cela se traduit par un temps de calcul assez important et de nombreuses adaptations du pas de temps, adaptations qui pourraient dégrader les taux de convergence, comme discuté dans les sections sur la convergence (en particulier la section 9.2.2 du cas incompressible).

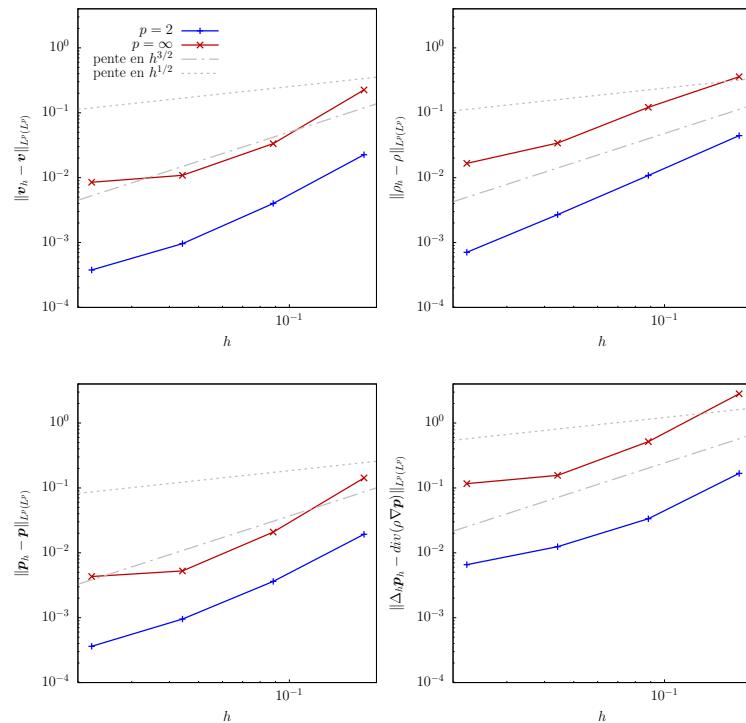


FIGURE 9.6. – Cas compressible – Erreurs de convergence en normes $L^2(L^2)$ et $L^\infty(L^\infty)$ en fonction de h .

N	8	16	32	64
temps cpu	17 min	2 h10	15 h51	2 d22 h31
nombre total d'itérations	726	1598	3276	3560
n_{\max}	24	48	96	192
Δt minimal	5.2×10^{-3}	1.3×10^{-3}	6.5×10^{-4}	1.6×10^{-4}
Δt moyen	2.9×10^{-2}	1.3×10^{-2}	5.6×10^{-3}	2.5×10^{-3}
Δt maximal	1/24	1/48	1/96	1/192
k_{last} minimal	6	5	5	4
k_{last} moyen	30	33	34	19
$\eta_h^{n,k}$ minimal	-0.058	0	0	0
$\eta_h^{n,k}$ moyen	0.27	0.32	0.38	0.64
$\eta_h^{n,k}$ maximal	1.5	1.7	1.9	2.1

TABLE 9.3. – Quelques statistiques associées à la validation numérique dans le cas compressible. Le nombre k_{last} désigne la dernière itération de point fixe réalisée (qui vaut toujours $k_{\max} = 50$ au maximum) et la quantité $\eta_h^{n,k}$ le taux de convergence de la méthode de point fixe. Les quantités sont données avec deux chiffres significatifs.

Troisième partie

Migration autour d'un obstacle

Chapitre 10

Exploration du modèle

Comme discuté en introduction de la section 5.3, le modèle compressible 5.3.2 obtenu dans le chapitre 3 ne contient pas nécessairement tous les ingrédients physiques nécessaires pour décrire les migrations fortement dépendantes de la densité. Par exemple, pour une migration autour d'un obstacle, la densité approchée peut tendre vers $+\infty$ en amont de l'obstacle, et tendre vers 0 en aval (voire devenir négative, d'où l'importance du limiteur), ce qui n'est pas physique. Nous avons justement ajouté un terme de pénalisation de la forme $c_0\rho^\gamma$ dans le problème 5.3.2 (équation (5.50b)) pour pallier ce problème, qui ne suffit malheureusement pas dans toutes les situations et qui peut significativement augmenter le coût de résolution du modèle si c_0 est pris trop grand. Face à cette limite, et même si tous les outils mathématiques et numériques sont en place pour résoudre un tel modèle, nous préférons étudier dans ce chapitre et le suivant, le comportement du modèle incompressible 5.3.1, qui présente déjà un grand nombre de difficultés (non-linéarités, tenseur non symétrique, nombreux paramètres).

Dans ce chapitre, nous explorons le comportement du modèle incompressible 5.3.1, dont la discrétisation est donnée dans la section 8.3.3, sur une bande rectangulaire dans laquelle des cellules migrent autour d'un obstacle circulaire. Nous forçons la migration en entrée via les conditions aux limites dans la partie aval du domaine, en imposant une vitesse constante, l'objectif étant d'avoir un flot bien établi avant la rencontre avec l'obstacle.

Cette exploration est réalisée en anticipation du chapitre suivant sur les comparaisons entre les calculs et les expériences qui ont été menées sur cette géométrie et que l'on a brièvement présentées dans la section 1.4.1. Nous commençons par donner la géométrie exacte de la bande avec obstacle, les conditions aux limites et initiales et discutons de la représentation des données (section 10.1). Nous étudions ensuite l'influence du maillage sur les solutions numériques (section 10.2) avant d'explorer les rôles des paramètres à proprement parler (section 10.3). Nous montrons notamment que notre modèle exhibe des comportements complexes tels qu'une dissymétrie haut/bas importante de la vitesse et de la polarité et un léger sursaut de la vitesse derrière l'obstacle.

Nous réalisons enfin une étude de l'influence du coefficient de contrainte active S_a sur le disque unité (section 10.4). Cette étude montre que notre modèle est capable de créer du mouvement collectif spontanément, qui plus est en présentant des structures complexes, semblables à des défauts topologiques de cristaux liquides, et de l'entretenir.

Table des matières

10.1. Mise en œuvre des calculs	216
10.2. Étude de sensibilité au maillage	220
10.3. Exploration des paramètres	227
10.4. Étude de l'influence de la contrainte active dans le disque unité	252
10.5. Bilan	259

10.1. Mise en œuvre des calculs

10.1.1. Domaine de calcul et conditions aux limites

Nous résolvons le problème de point fixe de la section 8.3.3 sur le domaine $\Omega :=]-3L/8, 5L/8[\times]-W/2, W/2[\setminus \{|x| \leq 1\}$ défini figure 10.1, avec les conditions aux limites

$$\nu = \frac{T_a}{C_F} \delta_1 \quad \text{sur } \Gamma_D^v := \left\{ \left(-\frac{3L}{8}, x_2 \right) \middle| x_2 \in \left] -\frac{W}{2}, \frac{W}{2} \right[\right\}, \quad (10.1a)$$

$$\sigma^\top \cdot n = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^v := \left\{ \left(\frac{5L}{8}, x_2 \right) \middle| x_2 \in \left] -\frac{W}{2}, \frac{W}{2} \right[\right\}, \quad (10.1b)$$

$$\nu \cdot n = 0 \quad \text{et } (\sigma^\top)_{nt} = 0 \text{ sur } \Gamma_0 := \left\{ \left(x_1, \pm \frac{W}{2} \right) \middle| x_1 \in \left] -\frac{3L}{8}, \frac{5L}{8} \right[\right\} \cup \{|x| = 1\}, \quad (10.1c)$$

$$p = \delta_1 \quad \text{sur } \Gamma_D^p := \Gamma_D^v \cup \Gamma_N^v, \quad (10.1d)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^p := \Gamma_0, \quad (10.1e)$$

où l'on rappelle que $\delta_1 = (1, 0)$ est le premier vecteur unitaire de la base cartésienne canonique. En choisissant comme longueur caractéristique le rayon de l'obstacle (voir la section 3.3.2), nous prenons $L = 80$ c'est-à-dire un domaine très allongé (encore plus que dans les expériences) pour assurer un flot bien établi de part et d'autre de l'obstacle et minimiser l'influence des conditions aux limites sur la migration au voisinage de l'obstacle. La largeur est quant à elle fixée à $W = 10$, du même ordre de grandeur (voire un peu plus grande) que celles utilisées pour les expériences [Tli+20].

Toujours dans le but d'avoir un flot bien établi en aval de l'obstacle, nous forçons la migration en imposant une vitesse constante en entrée du domaine (équations (10.1a) et (10.1d)). La conservation de la quantité de mouvement (5.47a) se ramène alors à $C_F \nu =$

$T_a \mathbf{p}$. Comme $\mathbf{p} = \delta_1$ est une solution stationnaire particulière de l'équation d'évolution de la polarité (5.47c), la paire $(\mathbf{v}, \mathbf{p}) = (\frac{T_a}{C_F} \delta_1, \delta_1)$ correspond à une solution stationnaire des équations, c'est pourquoi nous la choisissons comme condition à gauche du domaine. Remarquons que le choix $T_a = C_F$ permet d'obtenir une vitesse redimensionnée de l'ordre de la vitesse caractéristique, celle des expériences qui nous intéressent par exemple, puisque la condition (10.1a) se réduit alors à $\mathbf{v} = \delta_1$. Nous adoptons donc ce choix dans la suite.

En sortie du domaine, par contre, nous voulons laisser la migration libre ; nous ne voulons pas imposer la vitesse, en particulier pour éviter d'imposer des flots symétriques haut/bas. Ainsi, nous utilisons une condition de Neumann pour la vitesse (équation (10.1b)). Nous imposons au contraire la polarité (équation (10.1d)) pour éviter l'apparition d'un gradient de vitesse à droite du domaine, puisque dans ce cas, le tenseur σ_{extra} (5.48c) est nul et le tenseur σ_a (5.48d) est uniforme. Enfin, nous utilisons des conditions de non-pénétration sur les bords latéraux et l'obstacle pour la vitesse (équation (10.1c)) et des conditions de Neumann homogènes pour la polarité (équation (10.1e)).

10.1.2. Approximation de l'obstacle

En pratique, la frontière de l'obstacle est remplacée par une approximation polygonale, notée Γ_{obs} . Nous notons N le nombre de côtés du polygone utilisé pour l'approcher. Suivant [Sar20, section 2.3], nous utilisons la normale exacte à la frontière de l'obstacle, qui est connue, dans la formulation variationnelle discrète, et non la normale au polygone servant à la discréteriser.

La contrainte de glissement $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ (10.1c) sur la frontière $\{|\mathbf{x}| = 1\}$ de l'obstacle est difficile à imposer en pratique. Plusieurs approches existent pour l'imposer, et suivant [Sar20, section 2.3], nous retenons une méthode de régularisation, qui consiste à pénaliser la composante normale de la vitesse. Pour ce faire, la condition $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0$ (10.1c) est remplacée par une condition de Robin de la forme

$$\sigma_{nn} + \frac{1}{\epsilon_r} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_{\text{obs}}, \quad (10.2)$$

où dans ce contexte, \mathbf{n} est la normale à l'ensemble $\{|\mathbf{x}| = 1\}$ et non à Γ_{obs} , et $\epsilon_r > 0$ est le paramètre de régularisation. Dans ce cas, on montre par un raisonnement similaire à celui de la démonstration du problème 7.1.1 que la forme k définie par (8.28a) est remplacée par

$$k_{\text{obs}}(\mathbf{v}_h, \mathbf{w}_h) := 2(\mathbf{D}(\mathbf{v}_h) | \mathbf{D}(\mathbf{w}_h)) + C_F(\mathbf{v}_h | \mathbf{w}_h) + \frac{1}{\epsilon_r} \int_{\Gamma_{\text{obs}}} (\mathbf{v}_h \cdot \mathbf{n})(\mathbf{w}_h \cdot \mathbf{n}) \, ds. \quad (10.3)$$

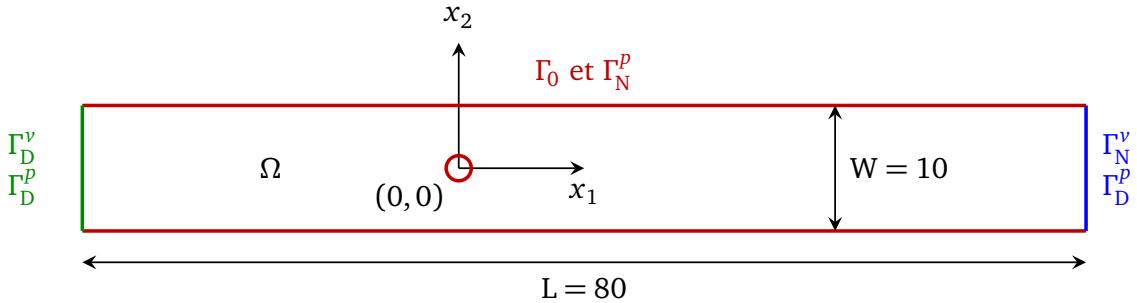


FIGURE 10.1. – Domaine de calcul. Les longueurs ont été adimensionnées par le rayon de l'obstacle, qui est donc ici égal à 1. Le bord de gauche correspond à l'entrée de la bande, sur laquelle nous imposons des conditions de Dirichlet pour la vitesse et la polarité. Le bord de droite correspond à la sortie de la bande, sur laquelle nous imposons une condition de Neumann pour la vitesse et une condition de Dirichlet pour la polarité. Partout ailleurs, nous imposons une condition de glissement pour la vitesse et une condition de Neumann homogène pour la polarité.

10.1.3. Condition initiale

La polarité initiale est choisie comme le champ de vecteurs \mathbf{p}_0 défini dans Ω tel que

$$\mathbf{p}_0 - L^2 \Delta \mathbf{p}_0 = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (10.4a)$$

$$\mathbf{p}_0 = \delta_1 \text{ sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_{\text{obs}}, \quad (10.4b)$$

$$\mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{\text{obs}}, \quad (10.4c)$$

où L est la longueur de la bande. L'idée derrière ce choix est d'avoir une polarité uniformément égale à δ_1 sur presque tout le domaine, mais dont la direction et la magnitude sont légèrement perturbées au voisinage de l'obstacle, pour en épouser la courbe.

Ce problème est complètement standard, et en tenant compte de la section 10.1.2 précédente, peut être approché par le problème discret suivant :

$$\left| \begin{array}{l} \text{Trouver } \mathbf{p}_{0,h} \in X_h(\delta_1) \text{ telle que} \\ (\mathbf{p}_{0,h} \mid \mathbf{q}_h) + L(\nabla \mathbf{p}_{0,h} \mid \nabla \mathbf{q}_h) + \frac{1}{\epsilon_r} \int_{\Gamma_{\text{obs}}} (\mathbf{p}_{0,h} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) \, ds = 0, \quad \forall \mathbf{q}_h \in X_h(\mathbf{0}), \end{array} \right. \quad (10.5)$$

où

$$X_h(\mathbf{c}) := \mathcal{P}^2(\mathcal{T}_h)^2 \cap \{ \mathbf{q} \in H^1(\Omega)^2 \mid \mathbf{q}_{|\partial\Omega \setminus \{|\mathbf{x}|=1\}} = \mathbf{c} \}. \quad (10.6)$$

La vitesse et la pression initiales sont finalement obtenues en résolvant la première étape de la méthode de point fixe pour le cas incompressible (voir section 8.3.3) en remplaçant $\mathbf{p}_h^{n,k-1}$ par $\mathbf{p}_{0,h}$.

10.1.4. Représentation des données

Après résolution du modèle, nous obtenons les champs vectoriels de vitesse et de polarité, et le champ scalaire de pression. Nous les représentons de deux façons standards, à l'aide de cartes bidimensionnelles et de coupes unidimensionnelles. Nous nous inspirons en particulier des modes de représentation adoptés dans [Che10, section 6.2.4] et dans [Dur20, section 2.1].

Cartes bidimensionnelles

Les cartes bidimensionnelles donnent un aperçu qualitatif des champs, autrement dit de leur comportement. Nous traçons indépendamment la vitesse, la polarité et la pression. Chacune de ces variables possède une valeur centrale (T_a/C_F pour la vitesse, 1 pour la polarité et 0 pour la pression, qui peut être négative) dont nous tirons profit en utilisant une palette de couleurs divergente [CSH20]. Nous gardons la palette proposée par défaut par ParaView, connue sous le nom de « cool to warm » (du froid vers le chaud), qui possède de nombreux avantages : une esthétique plaisante, un ordre des couleurs naturel, une variation linéaire des couleurs, des couleurs discernables par les personnes daltoniennes, une luminosité ni trop faible ni trop forte, etc. [Mor09]. Pour les vecteurs, nous superposons en plus à la carte des flèches noires indiquant leur direction et leur magnitude.

Nous traçons également la carte bidimensionnelle de la vitesse $v - T_a \delta_1/C_F$ dans le référentiel de l'obstacle. À cette carte, nous ajoutons des flèches et des lignes de courant. Les lignes de courant sont les lignes de niveau de la fonction de courant ψ , dont le calcul est détaillé dans l'annexe B.6. Puisque le fluide est incompressible, la vitesse est en tout point tangente à ces lignes de courant, qui représentent alors dans l'état stationnaire les trajectoires des cellules, dans le référentiel du tissu, où l'obstacle est mobile et entraîne le mouvement des cellules.

Contrairement aux autres champs, la vitesse dans ce référentiel ne possède pas de valeur centrale. Suivant [CSH20], nous représentons donc la carte en niveaux de gris, du blanc vers le noir. Nous utilisons la palette de couleurs YG3, du site [SciVisColor](https://sciviscolor.org/)¹, qui a l'avantage de ne pas avoir des couleurs trop claires ou trop sombres, comparé à une palette en niveaux de gris classique.

Coupes unidimensionnelles

Les coupes unidimensionnelles (le long d'axes choisis, à une coordonnée fixée) donnent quant à elles un aperçu quantitatif des champs, c'est-à-dire permettent de comparer l'allure et les ordres de grandeur des champs le long d'axes donnés. Nous traçons les composantes de la vitesse et de la polarité, ainsi que la pression, le long de six axes dans un voisinage de l'obstacle, trois horizontaux et trois verticaux, définis figure 10.2. Suivant [Dur20, section 2.1], aucune symétrie par rapport à l'axe horizontal $x_2 = 0$ n'est présupposée. Nous

1. <https://sciviscolor.org/>

utiliserons encore ces axes pour comparer les données expérimentales aux résultats de notre modèle.

10.2. Étude de sensibilité au maillage

10.2.1. Paramètres

Nous préférons au coefficient de friction C_F le paramètre $\beta = C_F/(C_F + 1)$ (voir la section 3.3.2), dont la manipulation nous semble plus intuitive. Il caractérise la part de friction dans la dissipation totale, définie comme la somme des contributions de la friction et de la viscosité. Rappelons que dans la section 10.1.1, nous avons choisi $T_a = C_F$.

L'étude de sensibilité au maillage a été menée en régime incompressible avec le jeu de paramètres de référence donné dans le tableau 10.1. Nous justifions ce choix dans la section 10.3.1.

$$\beta = 0.75 \quad S_a = 0 \quad Pe = 0.5 \quad \kappa = 0.1 \quad B = 0.4 \quad a = 1$$

TABLE 10.1. – Paramètres retenus pour les calculs menés sur bande avec obstacle circulaire, en régime incompressible.

Enfin, nous avons mené nos calculs dans le but d'atteindre l'état stationnaire le plus rapidement possible, sans chercher à capturer le régime transitoire avec précision, pour faciliter les comparaisons. Le nombre maximal d'itérations de la méthode de point fixe a donc été fixé à $k_{\max} = 5$ et le seuil de tolérance à $\delta_{fp} = 10^{-3}$. Ces calculs n'ont pas nécessité d'adaptation du pas de temps (voir la section 9.1.2).

10.2.2. Maillages

Pour étudier la sensibilité au maillage du modèle résolu avec les paramètres du tableau 10.1, nous considérons trois maillages anisotropes \mathcal{T}_{h_a} , \mathcal{T}_{h_b} et \mathcal{T}_{h_c} , dont la construction est détaillée figure 10.3 (voir la figure 10.4 pour un agrandissement au voisinage de l'obstacle). Nous les avons construits à l'aide du logiciel BAMG [Hec98], en lui indiquant les pas souhaités localement autour de certains points clés (voir la figure 10.3). À chacun de ces maillages, nous associons respectivement les pas de temps $\Delta t_a := 0.14$, $\Delta t_b := 0.1$ et $\Delta t_c := 0.07$, de manière à suivre l'évolution du pas d'espace.

10.2.3. Résultats

Résidus

La figure 10.5 montre la décroissance linéaire en temps des normes L^2 des résidus des équations stationnaires, définies par (9.9), pour les trois maillages considérés. Cette

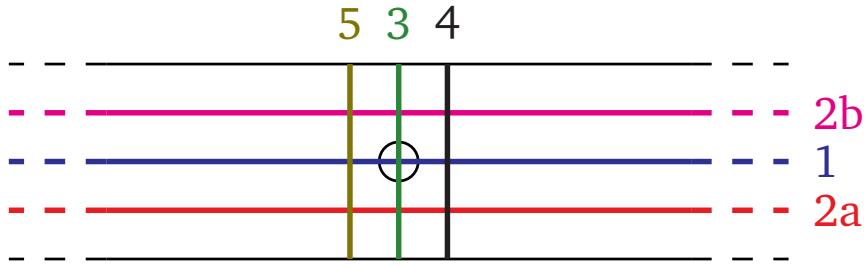


FIGURE 10.2. – Axes dans un voisinage de l’obstacle, utilisés pour tracer les coupes des différents champs en jeu. Ces axes ont été définis dans [Dur20, section 2.1]. Spécifiquement, l’axe 1 correspond au segment $x_2 = 0$ et l’axe 3 au segment $x_1 = 0$, tandis que les autres axes sont positionnés à une distance de 1.66 fois le rayon de l’obstacle (ce schéma n’est pas à l’échelle).

décroissance survient à partir de $t = 400$ environ.

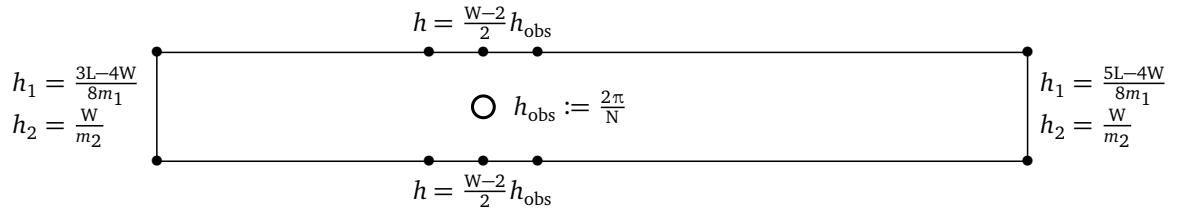
Cartes

La figure 10.6 montre que les champs de vitesse obtenus avec les différents maillages sont qualitativement très proches. Les champs de polarité le sont aussi pour les deux maillages les plus fins \mathcal{T}_{h_b} et \mathcal{T}_{h_c} , mais celui obtenu avec le maillage \mathcal{T}_{h_a} a une norme surévaluée en aval de l’obstacle. Contrairement à ce que nous avons annoncé dans la section 10.1.4, nous ne représentons pas ici les flèches des vecteurs, la pression ou encore la vitesse dans le référentiel de l’obstacle. En effet, il s’agit simplement ici d’étudier la sensibilité des solutions au maillage, et nous pensons que les cartes que nous montrons suffisent amplement.

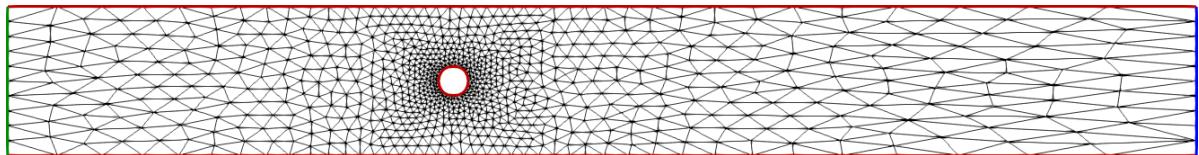
Remarquons la dissymétrie haut/bas très marquée dans ce calcul et le changement de symétrie avec le maillage \mathcal{T}_{h_b} , qui montre que notre problème résolu avec les paramètres donnés par le tableau 10.1, admet deux solutions possibles, l’une symétrique de l’autre relativement à l’axe horizontal $x_2 = 0$.

Coupes

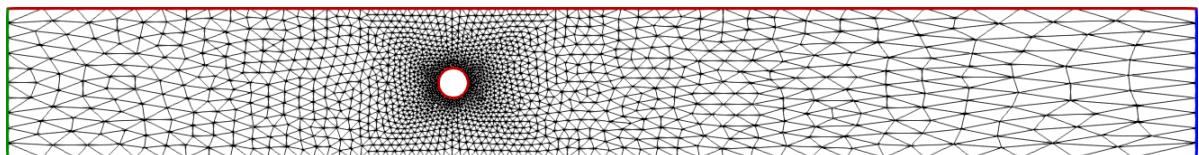
La figure 10.7 montre la bonne correspondance des champs obtenus avec les différents maillages, en particulier pour la vitesse, où les courbes se confondent à la précision du maillage près. Pour la première composante de $\kappa^2 \Delta_h \mathbf{p}_h$ le long d’un cercle de centre $(0, 0)$ et de rayon 1.05, on observe également une diminution de l’écart des courbes d’autant plus grande que le maillage est fin. Nous avons sciemment choisi cet axe car ce champ ne prend des valeurs pas trop petites (relativement au pas local du maillage) que dans un voisinage très restreint autour de l’obstacle, comme l’illustre la figure 10.8. Le fait que l’on observe bien une diminution de l’écart évoqué pour ce champ spécifiquement et le long de cet axe, montre la robustesse du schéma numérique mis en place, d’autant plus que la



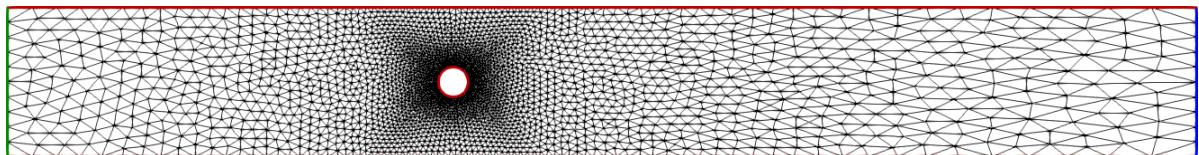
- (a) Pas d'espace indiqués à BAMG pour générer les maillages ci-dessous. N représente le nombre de côtés du polygone approchant l'obstacle, m_1 le nombre de segments souhaités le long de l'axe Ox_1 dans le voisinage des coins de la bande et m_2 le nombre de segments souhaités sur les bords verticaux. Les pas h_1 et h_2 se réfèrent aux quatre points mis en évidence sur les bords verticaux et caractérisent l'anisotropie du maillage dans les zones où ils sont indiqués. Au contraire, le maillage est isotrope dans le voisinage de l'obstacle, où nous avons indiqué un pas proportionnel à celui de l'obstacle aux points $(\pm W/2, \pm W/2)$ et $(0, \pm W/2)$.



- (b) Maillage \mathcal{T}_{h_a} présentant 1652 éléments, où $h_a \in [0.186415, 8.08585]$. Ici, $N = 30$, $m_1 = 7$ et $m_2 = 10$.



- (c) Maillage \mathcal{T}_{h_b} présentant 3038 éléments, où $h_b \in [0.134401, 5.46436]$. Ici, $N = 42$, $m_1 = 10$ et $m_2 = 10$.



- (d) Maillage \mathcal{T}_{h_c} présentant 5768 éléments, où $h_c \in [0.0902825, 4.02767]$. Ici, $N = 60$, $m_1 = 14$ et $m_2 = 10$.

FIGURE 10.3. – Maillages retenus pour l'étude de sensibilité au maillage.

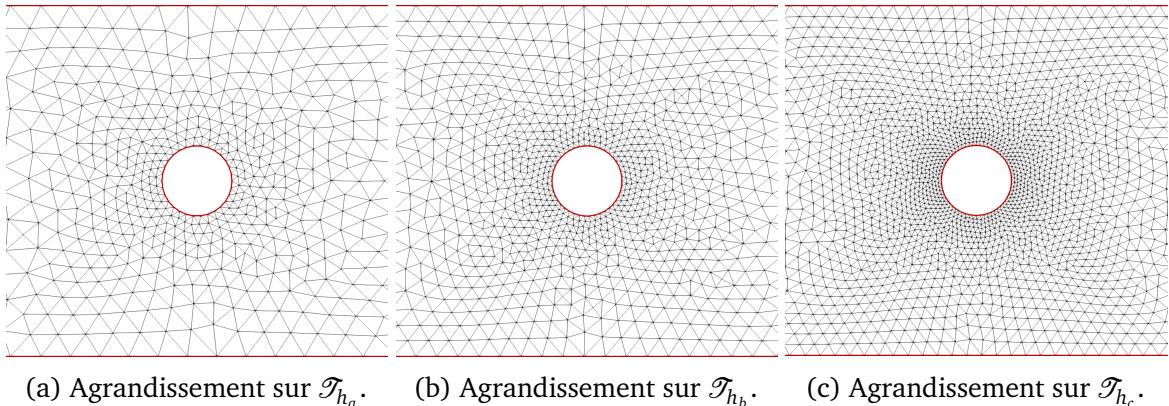


FIGURE 10.4. – Agrandissements sur les maillages retenus pour l'étude de sensibilité au maillage.

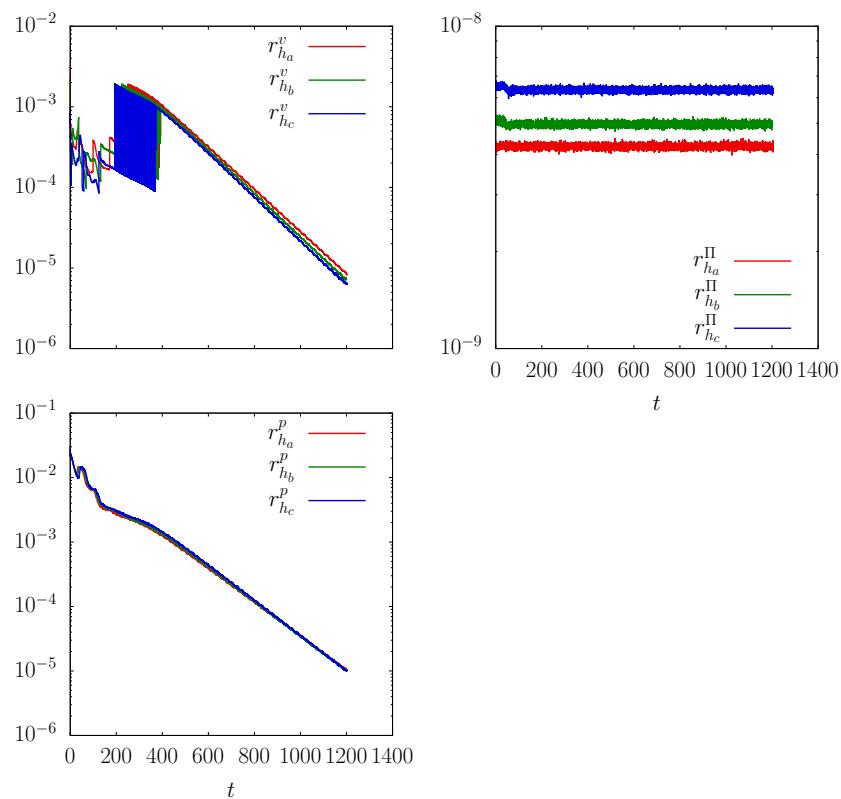


FIGURE 10.5. – Normes L^2 des résidus des équations stationnaires en fonction du temps t , définies par (9.9), avec les trois maillages \mathcal{T}_{h_a} , \mathcal{T}_{h_b} et \mathcal{T}_{h_c} .

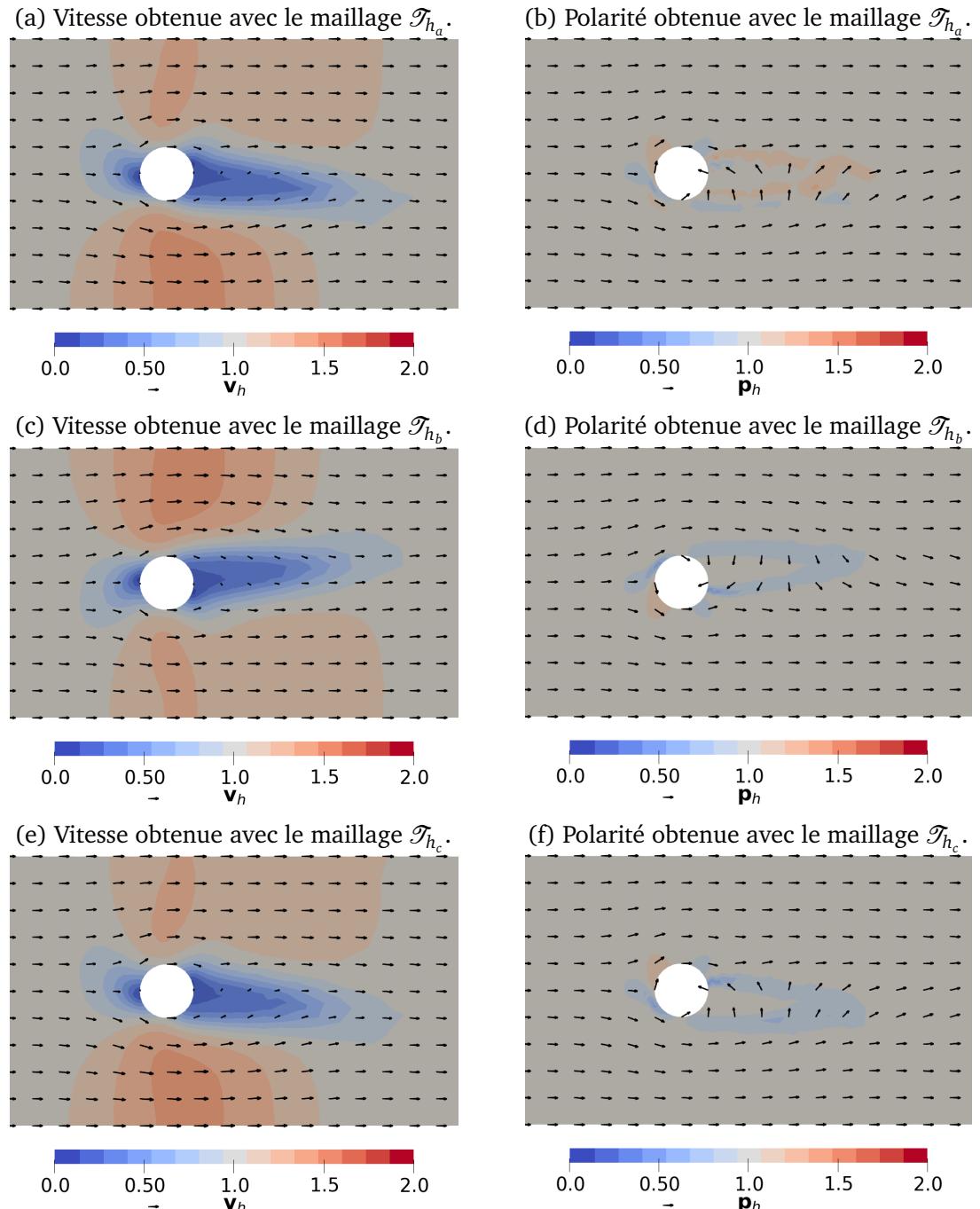


FIGURE 10.6. – Comparaison des cartes de la vitesse et de la polarité obtenues avec les trois maillages \mathcal{T}_{h_a} , \mathcal{T}_{h_b} et \mathcal{T}_{h_c} .

solution obtenue est loin d'être triviale.

Discussion

Au vu des comparaisons qui viennent d'être faites, le maillage intermédiaire \mathcal{T}_{h_b} semble suffisant pour la résolution du modèle. Dans la suite, nous utilisons ce maillage pour explorer les paramètres du modèle et comparer les résultats numériques aux données expérimentales disponibles sur cette géométrie de bande avec obstacle circulaire [Tli+20].

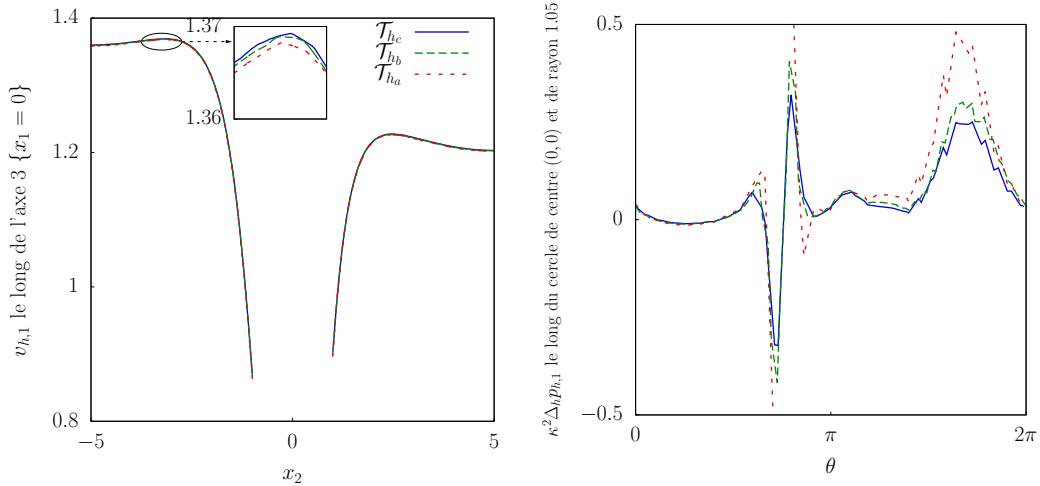


FIGURE 10.7. – Comparaison semi-quantitative de l'influence des trois maillages \mathcal{T}_{h_a} , \mathcal{T}_{h_b} et \mathcal{T}_{h_c} . À gauche : première composante de la vitesse le long de l'axe 3 défini figure 10.2. À droite : première composante de la version discrète de $\kappa^2 \Delta_h \mathbf{p}_h$ le long d'un cercle de centre $(0,0)$ et de rayon 1.05. Les courbes issues du maillage \mathcal{T}_{h_b} ont été tracées en miroir par rapport à l'axe horizontal $1 \{x_2 = 0\}$ pour permettre leur comparaison avec celles issues des deux autres maillages.

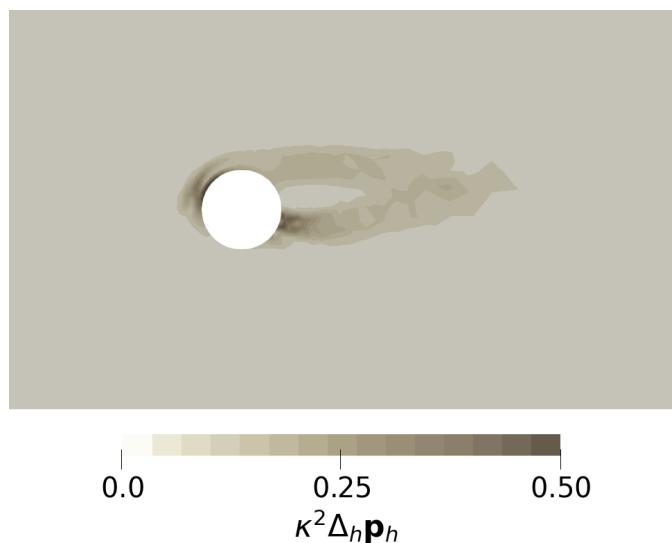


FIGURE 10.8. – Carte de $\kappa^2 \Delta_h \mathbf{p}_h$ obtenue avec le maillage \mathcal{T}_{h_b} .

10.3. Exploration des paramètres

10.3.1. Paramètres

L'exploration des paramètres est menée autour du jeu de paramètres de référence donné dans le tableau 10.2. Comme pour l'étude de sensibilité au maillage (section 10.2), nous avons mené nos calculs dans le but d'atteindre l'état stationnaire le plus rapidement possible, sans chercher à capturer le régime transitoire avec précision. Le nombre maximal d'itérations de la méthode de point fixe a donc été fixé à $k_{\max} = 5$ et le seuil de tolérance à $\delta_{fp} = 10^{-3}$. Le cas de référence a été lancé avec un pas de temps initial $\Delta t_0 = 0.01$, tandis que les autres calculs l'ont été avec un pas de temps initial $\Delta t_0 = 0.1$.

$$\beta = 0.75 \quad S_a = 0 \quad Pe = 2 \quad \kappa = 0.1 \quad B = 0.4 \quad a = 1$$

TABLE 10.2. – Paramètres retenus pour les calculs menés sur bande avec obstacle circulaire, en régime incompressible.

Le choix $\beta = 0.75$ est empirique. Nous le prenons suffisamment loin de 1, qui nous semble être un régime limite, donc peu approprié pour une première exploration des paramètres, mais au-dessus de 0.5 pour éviter les régimes à viscosité dominante, dans lesquels la force active pourrait jouer un rôle mineur, puisque $T_a = C_F = \beta/(1 - \beta)$. Ce raisonnement reste à confirmer par une exploration du modèle dans ces régimes.

Le coefficient de contrainte active tend à déstabiliser le système et à rendre l'accès à une solution stationnaire plus difficile. Nous réservons son exploration à la section 10.4.

Au vu des résultats obtenus dans la section 10.2 avec le jeu de paramètres donné par le tableau 10.1, et comme nous le verrons par la suite, prendre un nombre de Péclet plus élevé diminue la dissymétrie haut/bas des solutions. Dans un objectif d'exploration des paramètres, il nous semble plus opportun de choisir un cas de référence relativement symétrique, selon l'axe horizontal central, dans la mesure où c'est une propriété vérifiée par la majorité des fluides connus, au moins en régime laminaire.

Le choix du paramètre κ est le résultat d'un compromis pratique. D'une part, nous ne le voulons pas trop grand pour éviter d'avoir une distribution de la polarité trop uniforme, qui présenterait un profil de migration proche d'un écoulement visqueux laminaire. D'autre part, nous ne le voulons pas trop petit pour éviter des temps de calculs prohibitifs, puisqu'une diminution de κ doit s'accompagner d'un raffinement du maillage pour correctement capturer les variations pouvant survenir à l'échelle de κ . Cela dit, la valeur $\kappa = 0.1$ reste relativement petite, comparée aux dimensions du domaine, et on aurait tout aussi bien pu choisir $\kappa = 0.5, 1, 2$ par exemple, sans forcément obtenir un système rigide.

Comme nous le verrons plus loin, le schéma numérique est d'autant plus difficile à résoudre que B est grand. Dans le but de réaliser une exploration de ce paramètre autour d'une configuration de référence, nous le prenons à 0.4, une valeur numériquement attrapable.

Enfin, dans la volonté de se rapprocher du modèle d’Oldroyd pour les fluides visco-élastiques, nous utilisons comme dérivée objective pour la polarité la dérivée convectée supérieure, définie pour $a = 1$.

10.3.2. Effet de C_F

Choix des paramètres

Nous commençons par étudier l’effet du coefficient de friction C_F et du coefficient de force active T_a . Nous rappelons que nous prenons $T_a = C_F$ pour obtenir une vitesse de norme 1 en amont et en aval de l’obstacle.

Pour cette étude, nous prenons successivement les valeurs 0.25, 1, 3 (le cas de référence), 9 et 99. À chacune de ces valeurs, on peut associer un $\beta = C_F/(C_F + 1)$, qui prend alors respectivement les valeurs 0.2, 0.5, 0.75 (le cas de référence), 0.9 et 0.99. Le cas $\beta = 0.2$ correspond a priori à un régime à dominante visqueuse, le cas $\beta = 1$ à un régime où la viscosité et la friction sont à contributions égales et les autres cas à des régimes à dominante frictionnelle. En particulier, le cas $\beta = 0.99$ donne un aperçu de la limite $\beta \rightarrow 1$, qu’un travail ultérieur pourrait approfondir.

Rappelons que C_F peut être interprété comme le ratio R/ℓ_v , de deux longueurs R et $\ell_v := \eta/k$, où η la viscosité, k le coefficient de friction (voir la section 3.3.2) et R le rayon de l’obstacle. Ainsi, un régime où la friction domine correspond à une grande valeur de ℓ_v (et donc une petite valeur de C_F), tandis qu’un régime où la friction domine correspond à une petite valeur de cette longueur (et donc une grande valeur de C_F). Dans les tissus, on trouve toujours une échelle de taille qui sépare ces deux régimes, donc on ne peut pas imposer ce coefficient a priori, ou se contenter d’étudier uniquement un seul des deux [Bon+12]. Comme expliqué dans la section 10.3.1, nous privilégions quand même le régime où la friction domine, dans lequel la force active a plus d’importance, puisque $T_a = C_F$.

Nous comparons d’abord le cas de référence aux régimes à friction non dominante ($\beta \in \{0.2, 0.5\}$) avant de ne traiter que les régimes à friction dominante.

Premier cas : C_F (ou β) faible

Lorsque $\beta \in \{0.2, 0.5, 0.75\}$, la figure 10.9 montre que les champs de vitesse et de polarité sont qualitativement proches. Nous remarquons malgré tout un effet du paramètre sur l’influence de l’obstacle. En effet, plus β (ou C_F) est grand, plus les zones latérales d’accélération (au-dessus et en-dessous de l’obstacle) et centrale de décélération (directement autour de l’obstacle) sont réduites. Ainsi, la longueur ℓ_v peut alors être interprétée comme la longueur de cohérence de la vitesse : plus elle est grande, c’est-à-dire plus C_F est petit, plus la portée de l’obstacle est importante.

Notons enfin la faible dissymétrie haut/bas du champ de polarité dès $\beta = 0.2$ ($C_F = 0.25$), dans deux zones très localisées directement en amont et en aval de l’obstacle, ainsi que celle du champ de vitesse dès $\beta = 0.75$ ($C_F = 3$), dans la zone centrale de décélération.

Les coupes de la figure 10.10 confirment la proximité qualitative des premières composantes $v_{h,1}$ des vitesses obtenues dans les trois cas, les profils étant similaires. Notons le léger sursaut de la vitesse derrière l'obstacle sur la coupe le long de l'axe (1) horizontal $x_2 = 0$ dans les cas $C_F \in \{1, 3\}$, d'autant plus important que C_F l'est. Dans les deux cas, le sursaut reste faible, de l'ordre de quelques pourcents en plus par rapport à la vitesse imposée en aval du domaine. Le long des axes horizontaux (2a) et (2b), les extrema de $v_{h,1}$ augmentent avec C_F et leur position reste identique. Le long des axes verticaux (3), (4) et (5), la norme vitesse est négativement corrélée à C_F près du bord, et positivement corrélée à C_F près de l'obstacle. Tout cela vient donc confirmer ce que nous avons écrit plus haut, à savoir que la zone d'influence de l'obstacle rétrécit lorsque β augmente.

Second cas : C_F (ou β) élevé

Au contraire, lorsque $\beta \in \{0.75, 0.9, 0.99\}$, la figure 10.11 montre un réel changement de dynamique, tant pour la vitesse que pour la polarité, changement qui ne s'inscrit d'ailleurs pas dans l'observation faite pour des valeurs de β plus faibles : la taille de la zone d'influence ne semble pas devenir de plus en petite. La perte de symétrie haut/bas est en particulier remarquable.

Le cas $\beta = 0.99$ ($C_F = 99$) est sans doute le plus étonnant. Outre la perte de symétrie évidente, nous notons un léger sursaut de la vitesse et un sursaut important de la polarité derrière l'obstacle (en aval). Par ailleurs, les champs de vitesse et de polarité tournent autour de l'obstacle : ils ne le contournent pas contrairement à ce que l'on observe dans les autres cas. Ces observations se confirment sur les figures 10.12 et 10.13 :

- les coupes de $v_{h,1}$ et de $p_{h,1}$ le long de l'axe (1) montrent bien les sursauts ;
- les coupes de $v_{h,2}$ et de $p_{h,2}$ le long du même axe soulignent les changements de signe de ces composantes, signe d'une rotation des champs.

Remarquons que le profil de la vitesse horizontale le long de l'axe (1) ne présente par contre pas de différence en aval de l'obstacle par rapport au cas $C_F = 9$. Autrement dit, le cas $C_F = 9$ présente le même sursaut de vitesse, chose qui n'était pas visible sur la carte, sans doute à cause du nombre d'isovaleurs utilisé dans la palette de couleurs : le sursaut doit se situer autour de la frontière entre deux cases de la palette. (figure 10.11).

Notons enfin que le sursaut de la polarité derrière l'obstacle diminue significativement lorsque $C_F = 99$, passant d'environ 25-45% à moins de 10% sans doute parce que l'alignement de la vitesse et de la polarité domine.

Comportement de l'algorithme

Nous rappelons que l'environnement de calcul a été décrit dans la section 9.2.1.

Le tableau 10.3 donne un aperçu des statistiques associées aux calculs effectués pour les différents C_F . Le cas de référence a été lancé avec un pas de temps initial dix fois plus

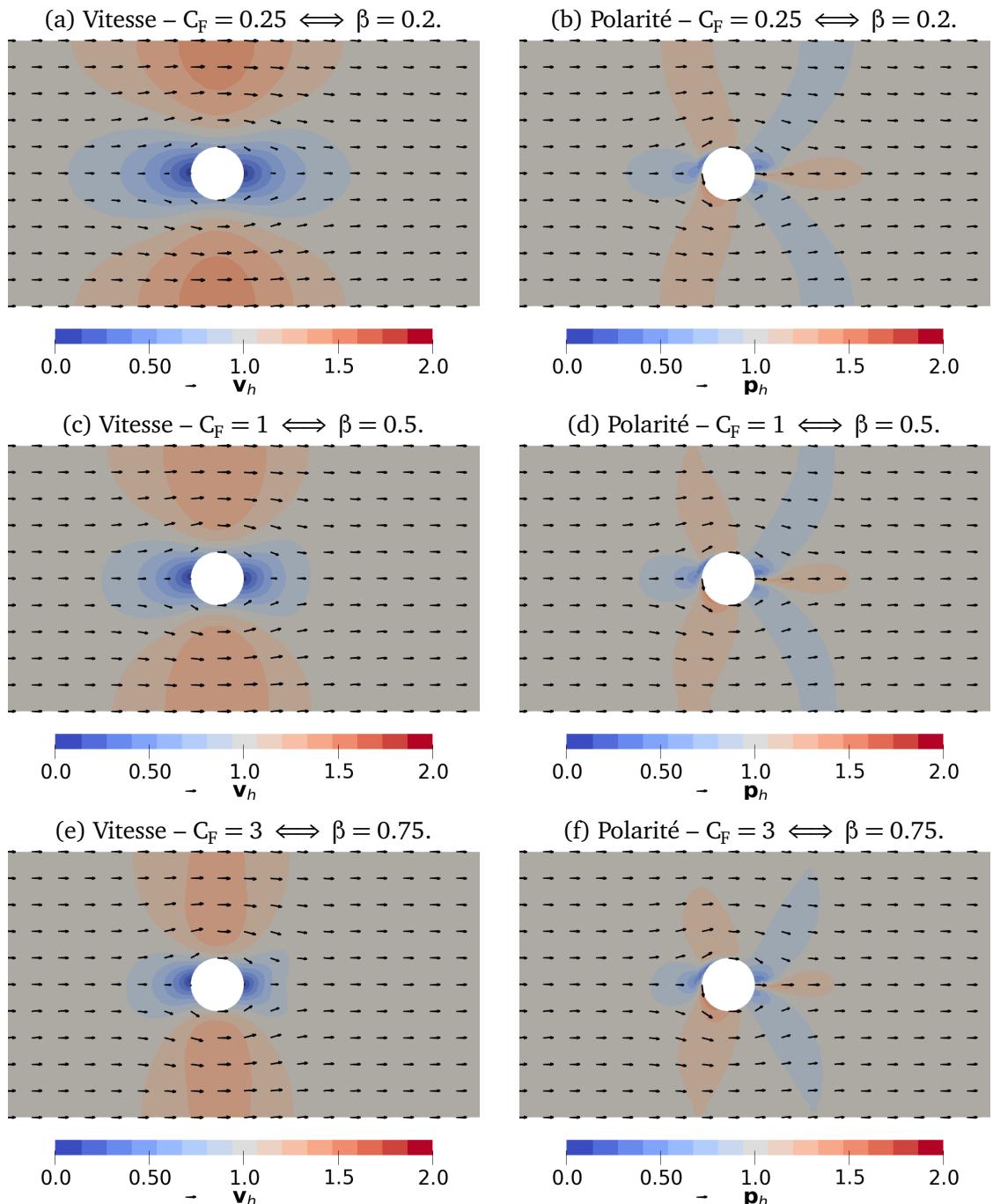


FIGURE 10.9. – Effet de $C_F = T_a$ sur la vitesse et la polarité. Premier cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse et à la polarité d'entrée, c'est-à-dire un vecteur de norme 1.

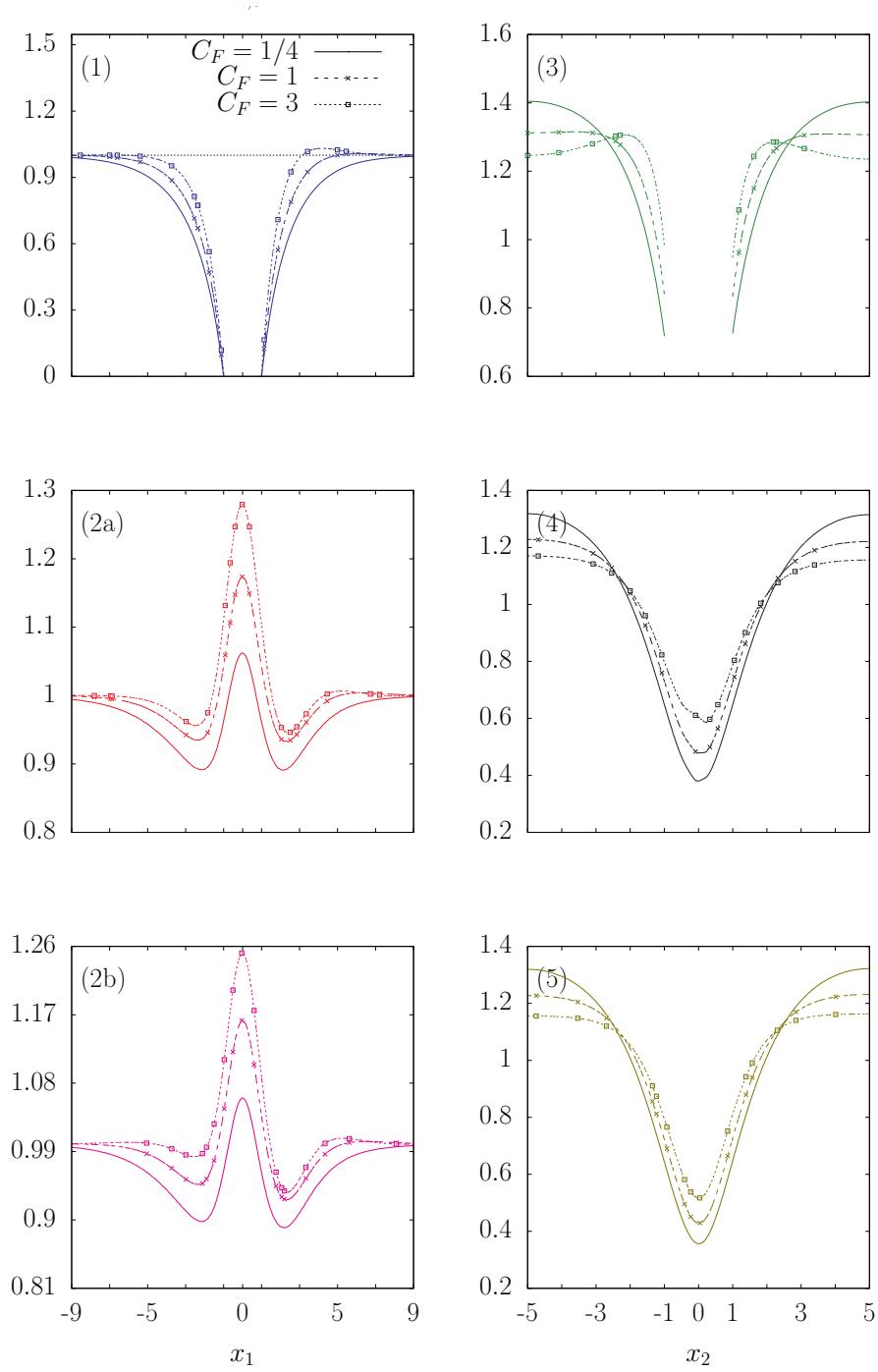


FIGURE 10.10. – Coupes de la première composante de la vitesse $v_{h,1}$ selon les axes définis figure 10.2, en fonction de $C_F = T_a$. Premier cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

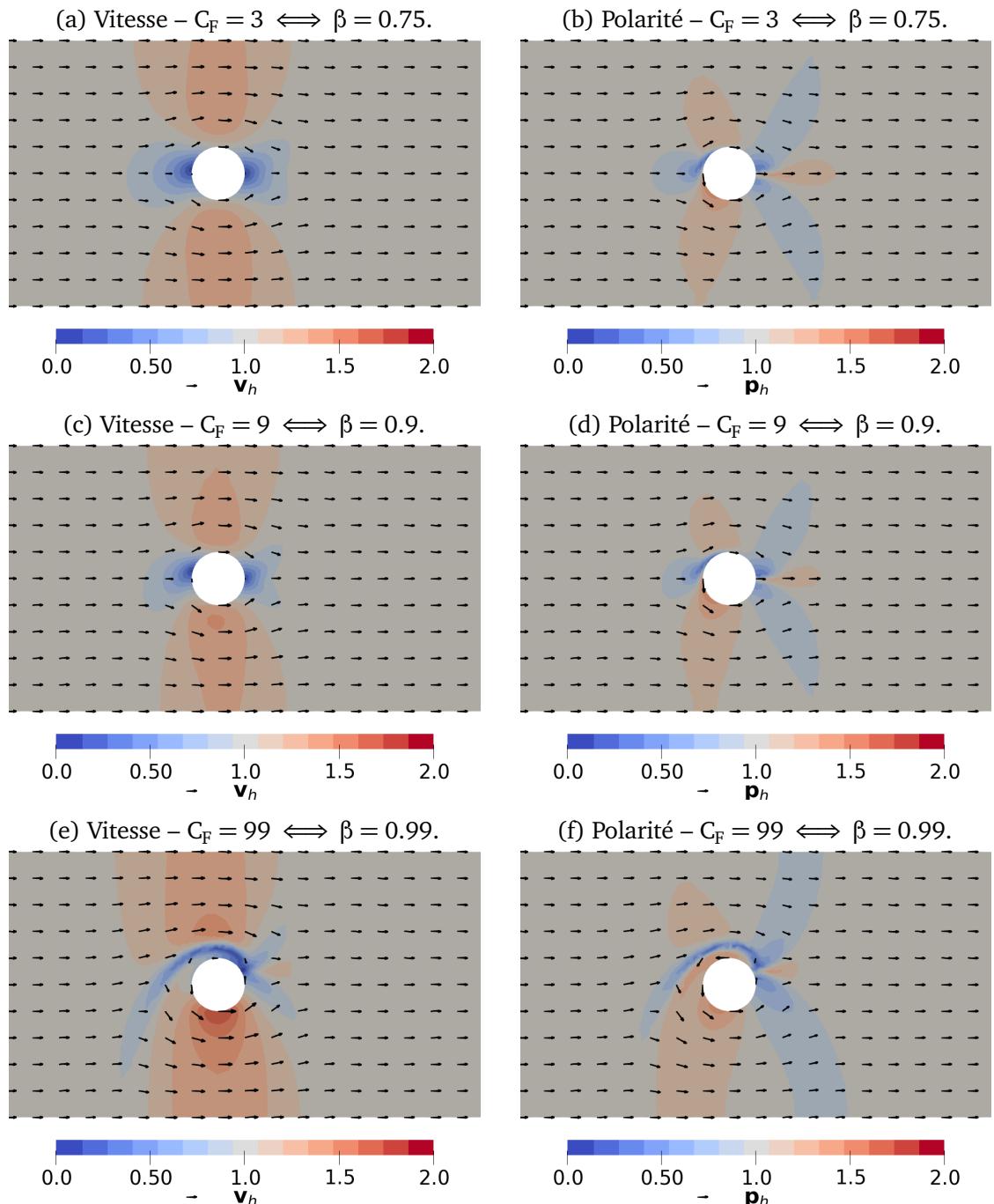


FIGURE 10.11. – Effet qualitatif de $C_F = T_a$ sur la vitesse et la polarité. Second cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse et à la polarité d'entrée, c'est-à-dire un vecteur de norme 1.

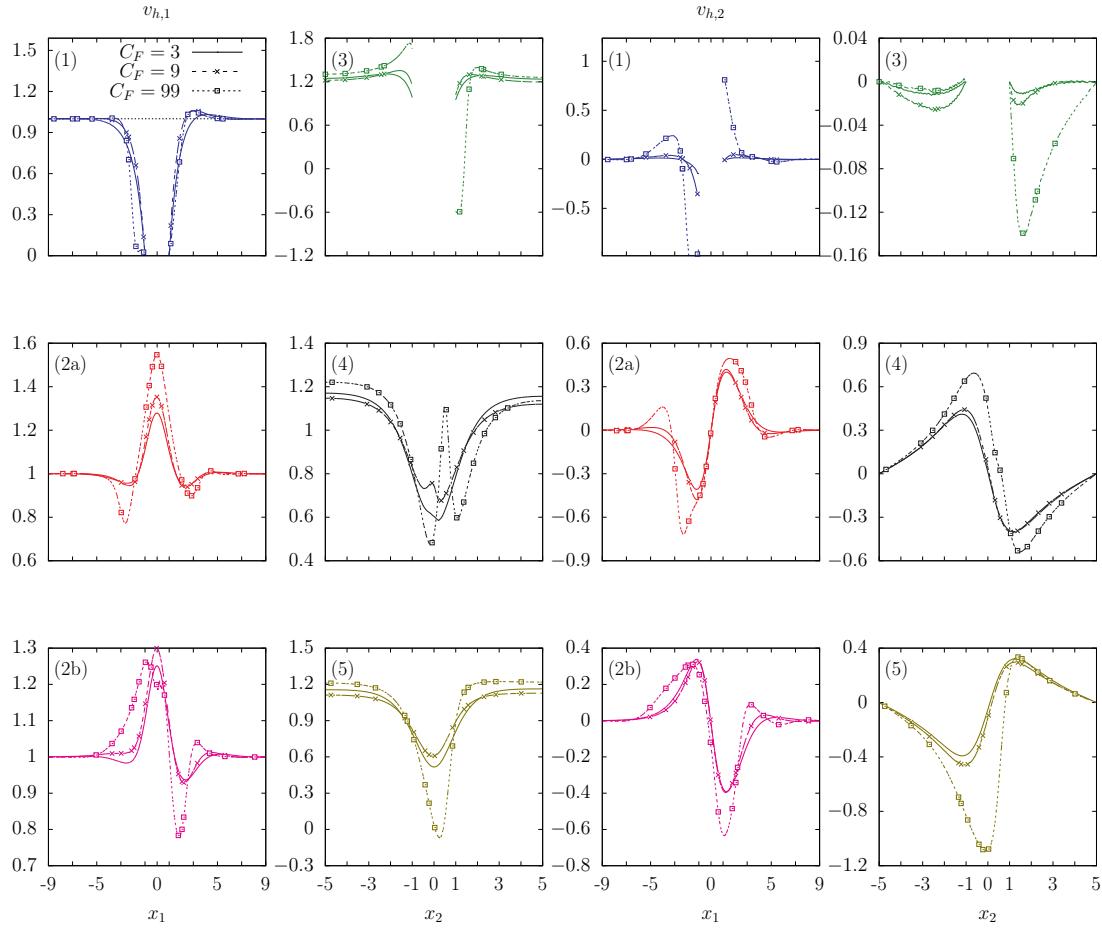


FIGURE 10.12. – Coupes des composantes de la vitesse selon les axes définis figure 10.2, en fonction de $C_F = T_a$. Second cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

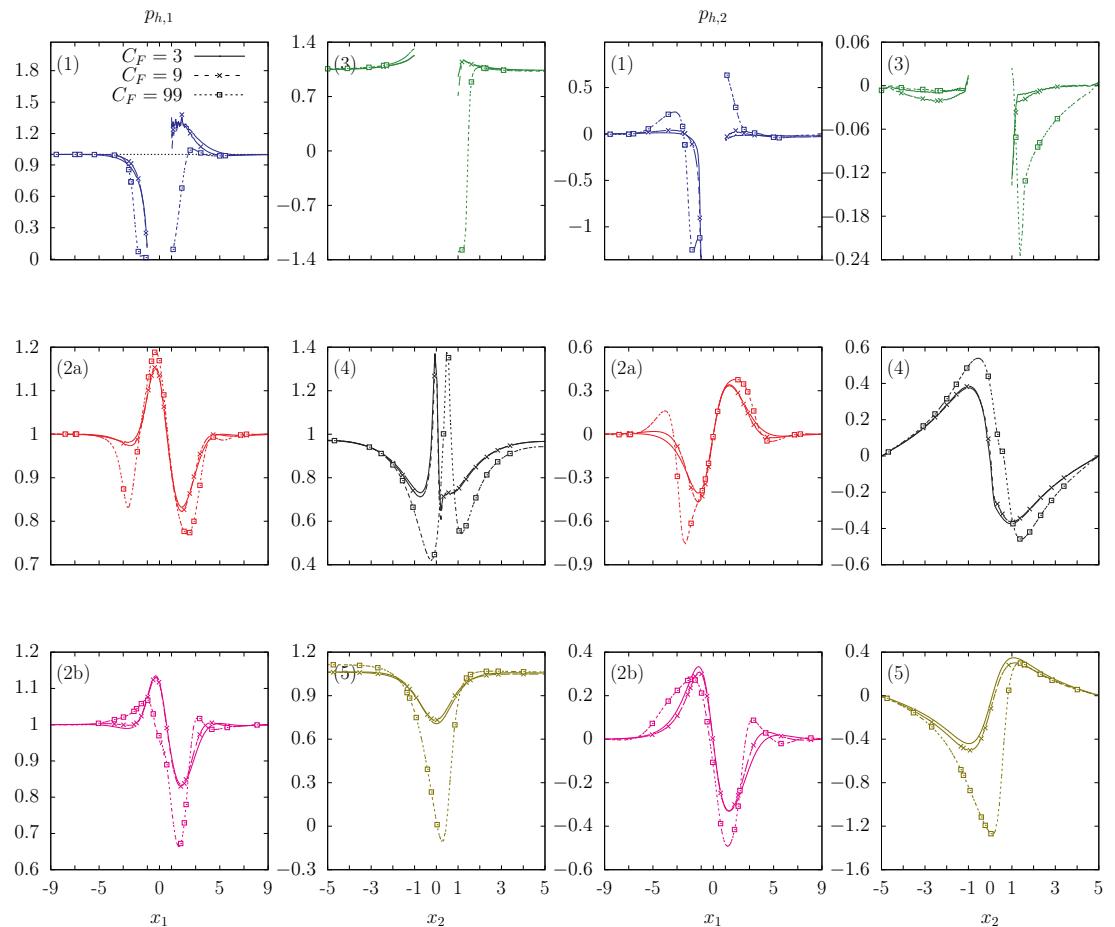


FIGURE 10.13. – Coupes des composantes de la polarité selon les axes définis figure 10.2, en fonction de $C_F = T_a$. Second cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

petit que dans les autres cas, donc le temps de calcul et le nombre d’itérations obtenus ne sont pas comparables. Les temps de calcul restent raisonnables (quelques heures). En effet, notre but était d’atteindre l’état stationnaire le plus rapidement possible, nous n’avons donc pas cherché à capturer le régime transitoire avec précision. Le cas qui a nécessité le plus de temps de calcul et le plus d’itérations est le cas $C_F = 99$. Seul celui-ci a présenté une diminution du pas de temps, passant au moins une fois à 0.05.

C_F	0.25	1	3 (référence)	9	99
β	0.2	0.5	0.75	0.9	0.99
temps cpu	1 h34	2 h20	14 h30	3 h50	9 h33
nombre total d’itérations	3694	5362	30934	8983	19946
n_{\max}	2307	3366	20000	5247	12815
k_{last} moyen	1.6	1.59	1.55	1.71	1.56
$\eta_h^{n,k}$ minimal	-0.18	-0.18	0	-0.16	-0.58
$\eta_h^{n,k}$ moyen	0.41	0.38	0.5	0.4	0.24
$\eta_h^{n,k}$ maximal	1.79	1.58	1.82	1.5	1.5

TABLE 10.3. – Quelques statistiques en fonction de $C_F = T_a$ (ou de $\beta = C_F/(C_F + 1)$) pour les calculs menés sur bande avec obstacle circulaire, en régime incompressible. Le nombre k_{last} désigne la dernière itération de point fixe réalisée et la quantité $\eta_h^{n,k}$ le taux de convergence de la méthode point fixe. Celle-ci comprend toujours entre une et cinq itérations au total. Les quantités sont données avec deux chiffres significatifs.

10.3.3. Effet de Pe

Choix des paramètres

Nous étudions maintenant l’effet de Pe. Nous comparons pour cela le cas de référence ($Pe = 2$) à quatre autres configurations, toutes choses égales par ailleurs : $Pe = 0.25$, $Pe = 0.5$, $Pe = 1$ et $Pe = 4$. Nous divisons l’étude de sensibilité au paramètre en deux parties : la première concerne les deux configurations à faible Pe et la seconde les deux dernières, mais toujours par rapport au cas de référence. Dans le premier cas, on tend vers un régime où le temps de relaxation de la polarité devient négligeable ; ce sont alors les forces polaires de rappel élastique qui tendent à dominer, forçant une uniformité spatiale de la polarité, au moins sur des distances de l’ordre de κ . Dans le second cas, on tend vers un régime où le transport de la polarité par la vitesse domine.

Premier cas : $Pe \in \{0.25, 0.5, 2\}$

Qualitativement, la figure 10.14 montre que les cas $Pe = 0.25$ et $Pe = 0.5$ sont similaires, mais tranchent complètement avec le cas de référence $Pe = 2$. La dissymétrie haut/bas sur la vitesse est beaucoup plus marquée dans ces deux cas et les zones d'accélération et de décélération sont beaucoup plus étendues en aval de l'obstacle. Cette dissymétrie est aussi visible sur les coupes de la figure 10.15 (en comparant les axes (2a) et (2b) ou directement sur les axes (3), (4) (5)), qui montrent aussi effectivement les similitudes entre les cas $Pe = 0.25$ et $Pe = 0.5$.

Comme anticipé plus haut, à Pe faible, la norme de la polarité est plus uniforme, proche de 1, conséquence de la prééminence des forces polaires de rappel (figures 10.14 et 10.16). Étonnamment, dans ces régimes, la polarité tend à se retourner contre le sens du mouvement en aval de l'obstacle (figure 10.14). Ce phénomène est particulièrement visible sur l'axe horizontal (1) et l'axe vertical (4), le long desquels la polarité change de signe (figure 10.16).

Second cas : $Pe \in \{1, 2, 4\}$

Clairement, la figure 10.17 montre que le cas $Pe = 1$ est un cas intermédiaire entre les cas $Pe = 0.5$ et $Pe = 2$, avec une dissymétrie haut/bas et une zone de décélération en aval qui commencent à être marquées, et un retournement de la polarité en aval de l'obstacle. Au contraire, le cas $Pe = 4$ renforce la symétrie haut/bas, aussi bien celle de la vitesse que celle de la polarité, et étend les zones de variations en norme de cette dernière.

On observe même, comme dans le cas $C_F = 99$, un léger sursaut de la vitesse très localisé derrière l'obstacle, chose confirmée par la coupe de la première composante de la vitesse le long de l'axe (1) (figure 10.18). Cela dit, la figure 10.18 montre plus généralement qu'au-delà d'une certaine valeur, le nombre Pe a une influence minime sur la dynamique de la vitesse. Au contraire, d'après la figure 10.19, la norme de la première composante $p_{h,1}$ de la polarité semble évoluer linéairement en Pe sur les axes (2), (3) et (5), tandis que la seconde composante ne semble que peu affectée, sauf pour $Pe = 1$ sur l'axe horizontal central (1), le long duquel on observe bien une composante non nulle.

Comportement de l'algorithme

Nous rappelons que l'environnement de calcul a été décrit dans la section 9.2.1.

Le tableau 10.4 donne un aperçu des statistiques associées aux calculs effectués pour les différents Pe . Le cas de référence a été lancé avec un pas de temps initial dix fois plus petit que dans les autres cas, donc le temps de calcul et le nombre d'itérations obtenus ne sont pas comparables. Les temps de calcul restent raisonnables (quelques heures). En effet, notre but était d'atteindre l'état stationnaire le plus rapidement possible, nous n'avons donc pas cherché à capturer le régime transitoire avec précision. Étonnamment, c'est le cas $Pe = 1$ qui a demandé le plus de temps de calcul, et non $Pe = 0.25$, qui présente la plus forte dissymétrie haut/bas (et un temps de calcul important, relativement aux autres cas).

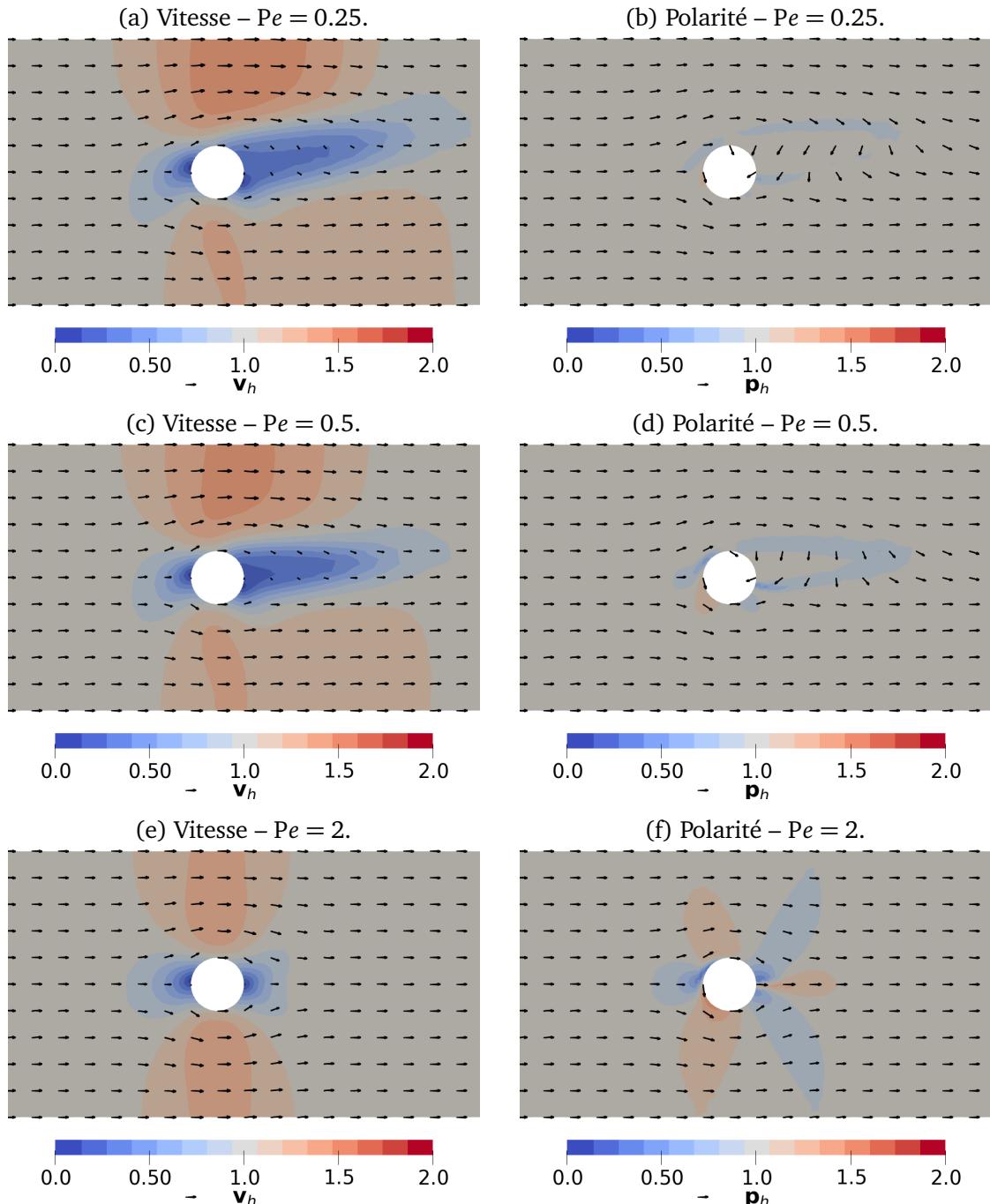


FIGURE 10.14. – Effet de Pe sur la vitesse et la polarité. Premier cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse et à la polarité d'entrée, c'est-à-dire un vecteur de norme 1.

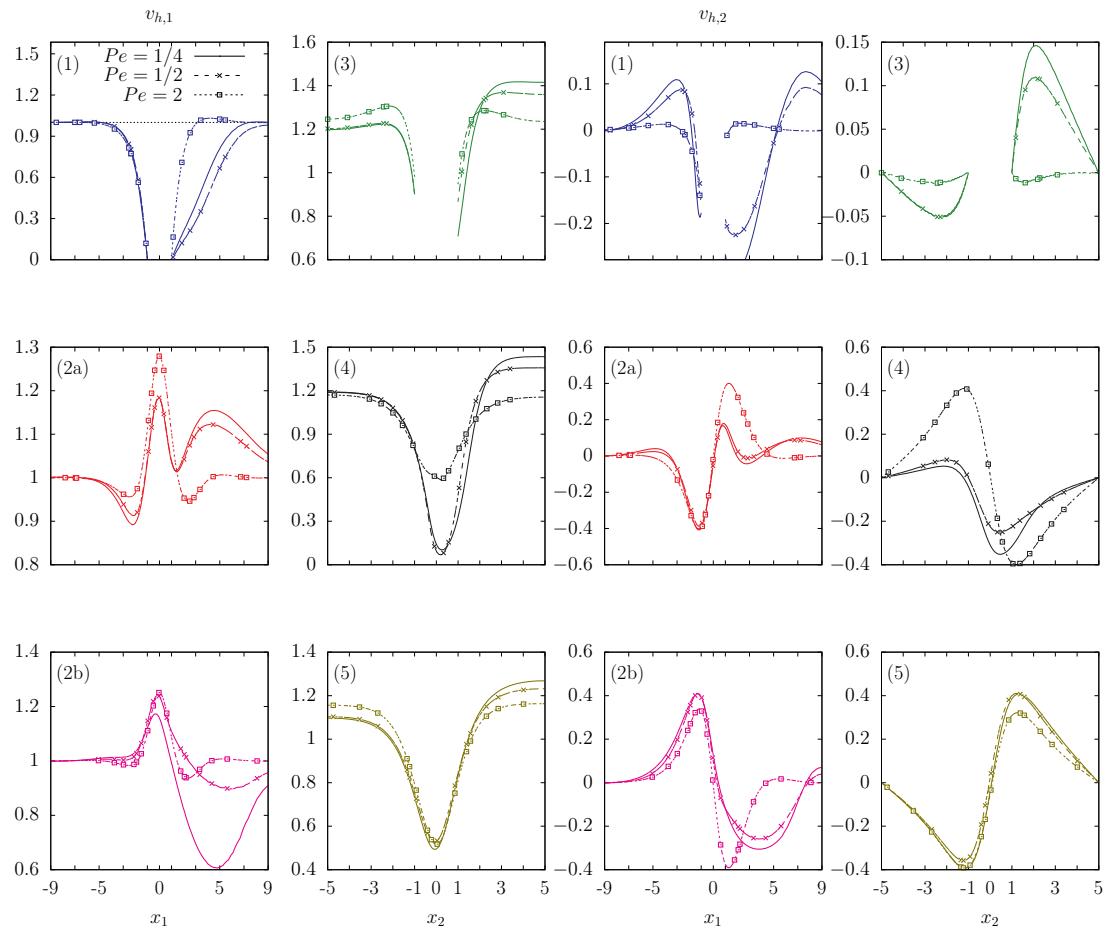


FIGURE 10.15. – Coupes des composantes de la vitesse selon les axes définis figure 10.2, en fonction de Pe . Premier cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

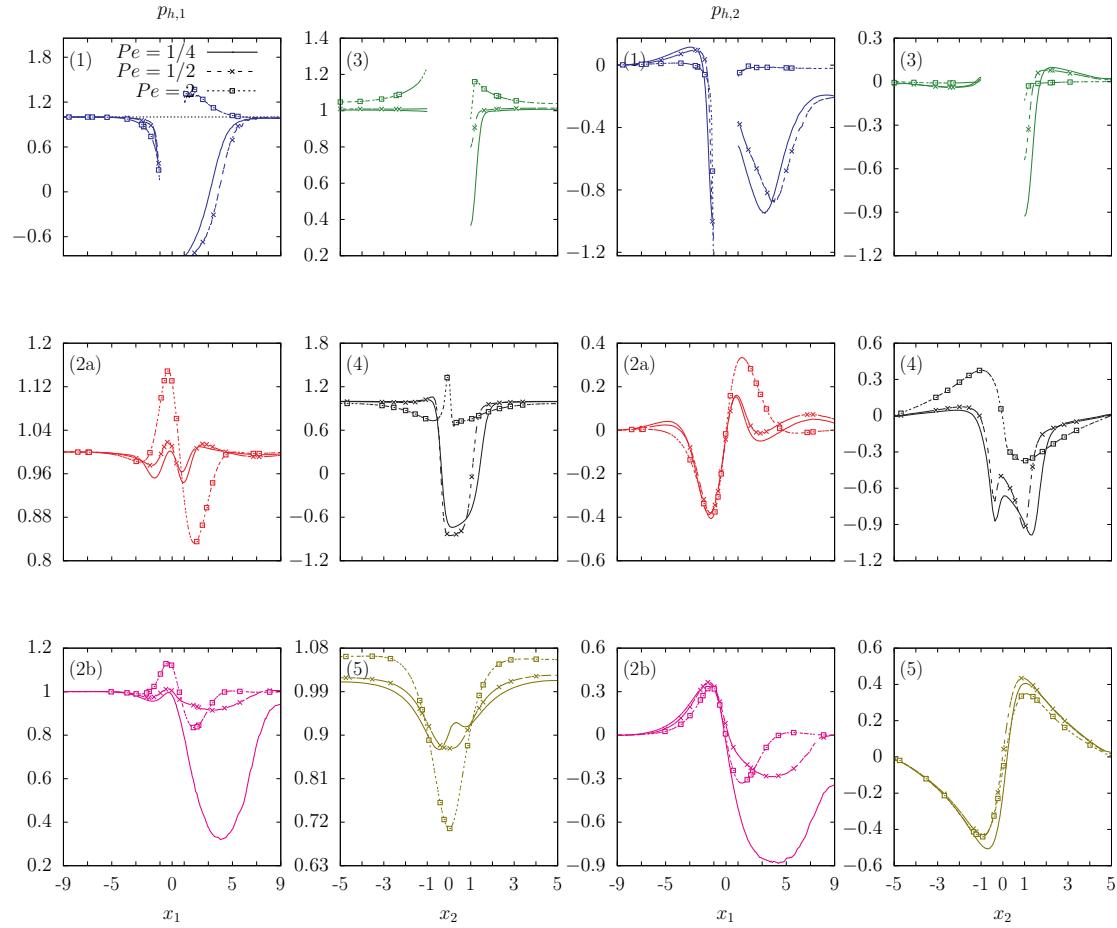


FIGURE 10.16. – Coupes des composantes de la polarité selon les axes définis figure 10.2, en fonction de Pe . Premier cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

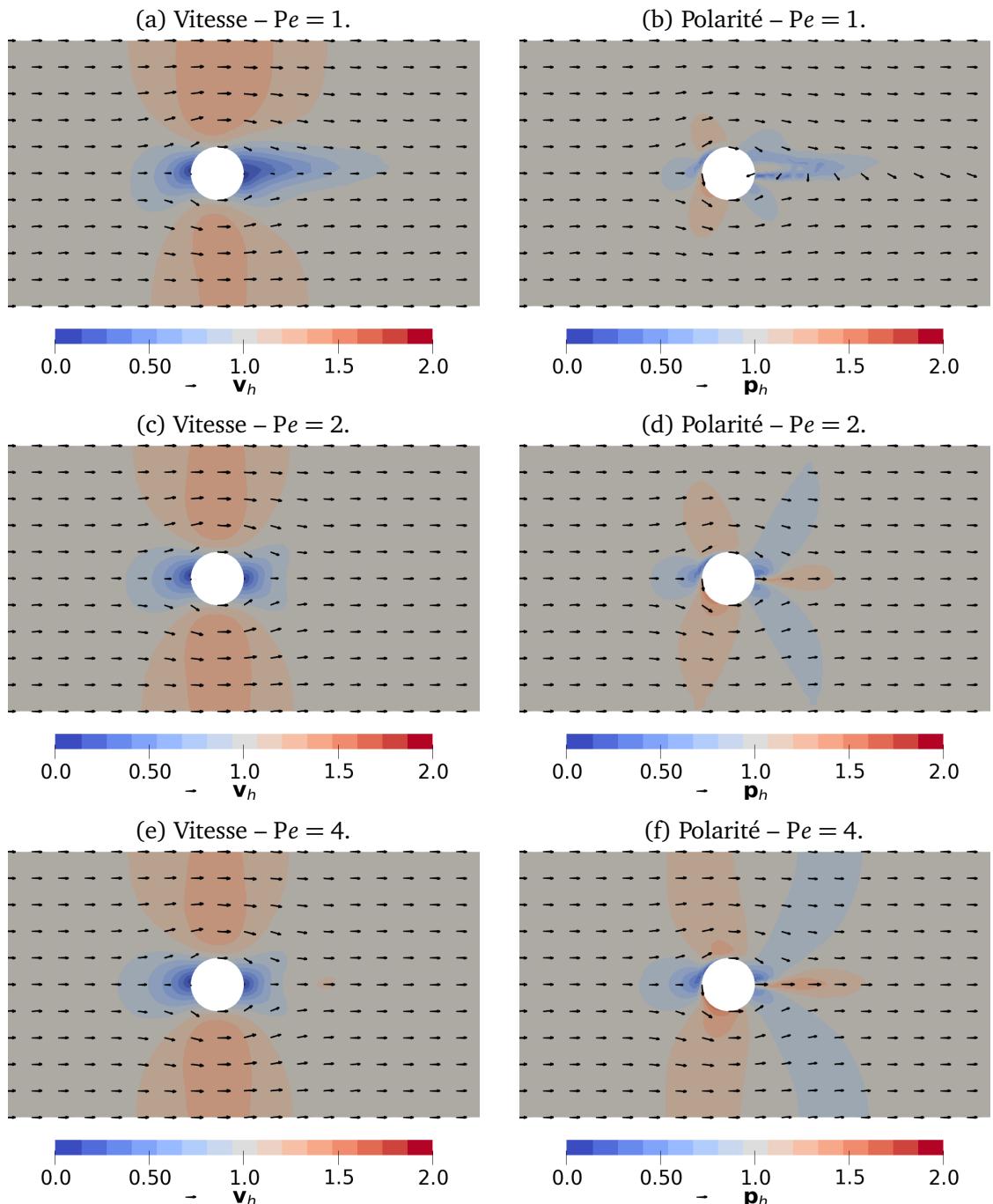


FIGURE 10.17. – Effet qualitatif de Pe sur la vitesse et la polarité. Second cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse et à la polarité d'entrée, c'est-à-dire un vecteur de norme 1.

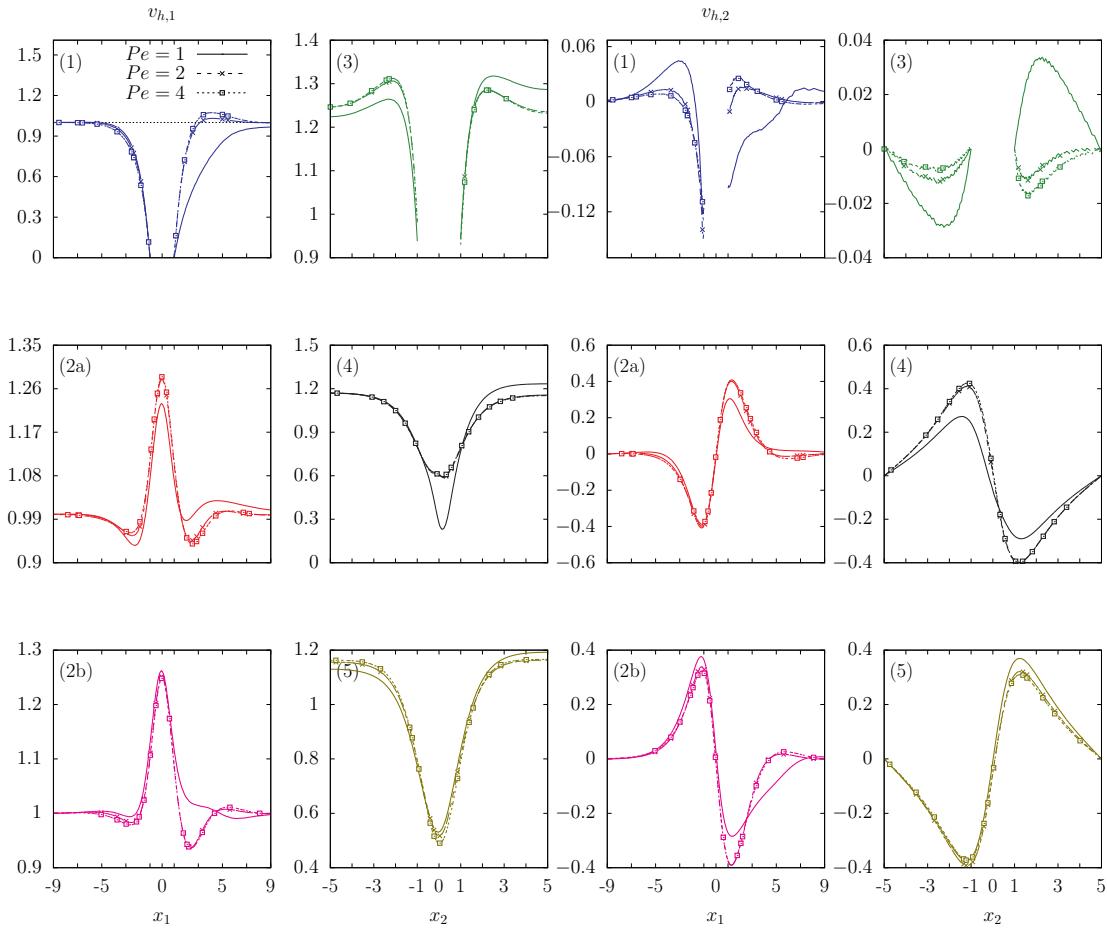


FIGURE 10.18. – Coupes des composantes de la vitesse selon les axes définis figure 10.2, en fonction de Pe . Second cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

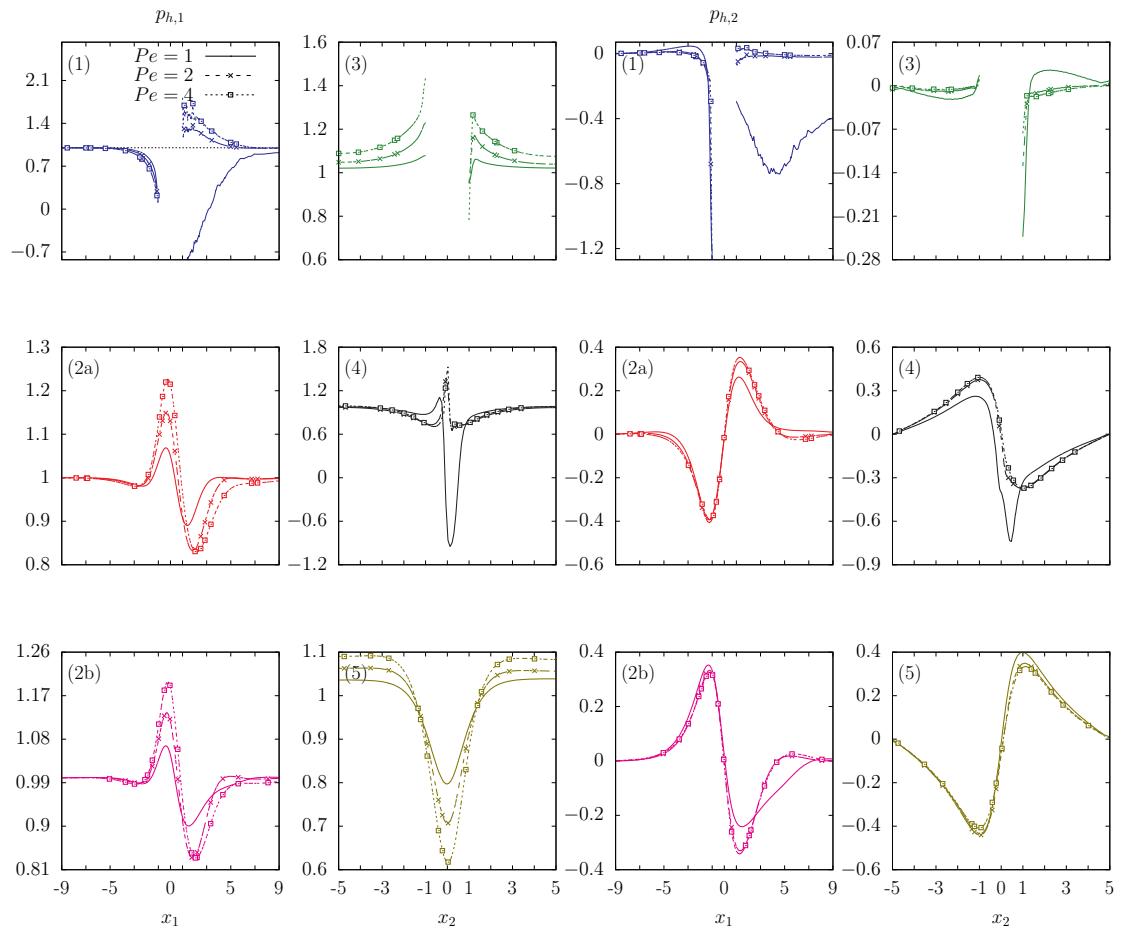


FIGURE 10.19. – Coupes des composantes de la polarité selon les axes définis figure 10.2, en fonction de Pe . Second cas. Le cas de référence est donné par le tableau 10.2. La ligne horizontale en pointillés sur la figure (1) correspond à la droite d'équation $y = 1$.

Seul le cas $Pe = 4$ a présenté une diminution du pas de temps (passant au moins une fois à 0.025, ce qui correspond à deux diminutions successives), mais ce n'est pas pour autant qu'il ait demandé plus de temps de calcul que les autres cas.

Pe	0.25	0.5	1	2 (référence)	4
temps cpu	13 h47	8 h57	16 h15	14 h30	2 h46
nombre total d'itérations	27880	19855	37378	30934	6239
n_{\max}	18339	12005	20000	20000	12815
k_{last} moyen	1.5	1.7	1.9	1.5	1.7
$\eta_h^{n,k}$ minimal	-0.092	-0.13	-0.15	0	-0.18
$\eta_h^{n,k}$ moyen	0.3	0.37	0.45	0.5	0.42
$\eta_h^{n,k}$ maximal	1.5	1.5	1.5	1.8	1.6

TABLE 10.4. – Quelques statistiques en fonction de Pe pour les calculs menés sur bande avec obstacle circulaire, en régime incompressible. Le nombre k_{last} désigne la dernière itération de point fixe réalisée et la quantité $\eta_h^{n,k}$ le taux de convergence de la méthode point fixe. Celle-ci comprend toujours entre une et cinq itérations au total. Les quantités sont données avec deux chiffres significatifs.

10.3.4. Discussion

Dans cette exploration, nous ne montrons ni le rôle de B , ni celui de κ . Pour le cas de B , nous en expliquons la raison un peu plus bas. Quant à κ , les solutions ne semblent pas évoluer quand celui-ci diminue (nous avons essayé $\kappa = 0.05$ et $\kappa = 0.01$).

Influence des conditions aux limites sur la dynamique dans un voisinage de l'obstacle

La figure 10.20 montre que l'effet de la condition aux limites (10.1b) n'est pas neutre sur la vitesse, mais nous vérifions que le canal est suffisamment long pour que cela n'ait pas d'impact au voisinage de l'obstacle. De manière plus spectaculaire, la figure 10.20 (c), qui représente notamment les lignes de courant de la vitesse dans le référentiel du tissu, met en évidence l'effet de longue portée de l'obstacle. Cela dit, cette vitesse est négligeable en dehors du voisinage de l'obstacle clairement délimité sur la figure 10.20 (a,b), et ces lignes de courant pourraient alors être le résultat d'artefacts numériques. Une étude plus approfondie pourrait permettre de trancher, en calculant la fonction de courant ψ ou en relançant le calcul sur un maillage plus fin. S'il s'avère que l'obstacle a effectivement une si longue portée, alors la taille du domaine en aval est complètement justifiée par ce calcul.

Dissymétrie haut/bas

La dissymétrie haut/bas est un phénomène rare dans les écoulements ou migrations laminaires, où l'inertie est négligeable. On l'observe plus souvent pour les écoulements ou migrations turbulents, ou chez les fluides viscoélastiques décrits par le modèle d'Oldroyd-B, où le nombre de Weissenberg est élevé.

Nous avons vu précédemment que la dissymétrie était d'autant plus importante que C_F était important ou que Pe était faible. Pour quantifier cette observation, nous définissons l'intensité de dissymétrie haut/bas d'un champ de vecteurs \mathbf{c} par la quantité

$$\left(\int_{\Omega} [c_1(x_1, x_2) - c_1(x_1, -x_2)]^2 dx + \int_{\Omega} [c_2(x_1, x_2) + c_2(x_1, -x_2)]^2 dx \right)^{1/2}. \quad (10.7)$$

Cette mesure de la dissymétrie vaut exactement 0 si, et seulement si, \mathbf{c} est un champ de vecteurs symétriques par rapport à l'axe $x_2 = 0$.

La figure 10.21 montre que l'intensité de dissymétrie de la vitesse suit une loi puissance en C_F . Au contraire, celle de la polarité ne semble pas suivre une loi particulière, voire semble relativement indépendante du paramètre dans la plage $\beta \in]0, 0.75]$. Nous pensons qu'il existe une valeur critique de C_F (ou de β) à partir de laquelle le système subit une importante brisure spontanée de symétrie haut/bas : chaque solution est asymétrique. Et ce, même si bien sûr l'ensemble des solutions respecte globalement la symétrie, conformément au principe de Curie.

Cette même figure montre également que l'intensité de dissymétrie de la vitesse semble inversement proportionnelle à Pe sur l'intervalle $[0.25, 2]$, avant de plafonner à partir

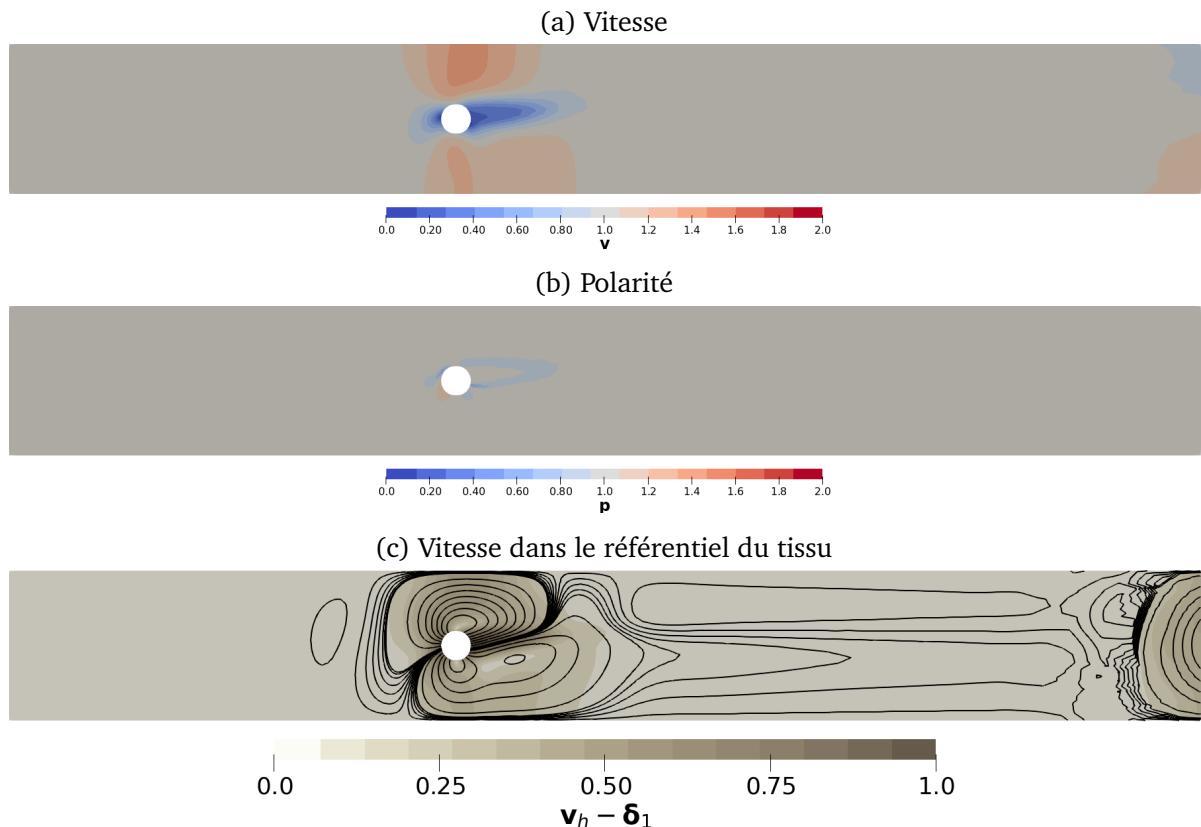


FIGURE 10.20. – Mise en évidence de la distance suffisante entre les bords verticaux et l’obstacle: les conditions aux limites sur ces bords n’influent pas sur la migration autour de l’obstacle. Paramètres issus du tableau 10.1. Par rapport au cas de référence décrit par le tableau 10.2, le nombre sans dimension Pe vaut ici 0.5.

de $Pe = 2$. Des calculs supplémentaires permettraient en premier lieu de confirmer cette relation linéaire, en deuxième lieu de confirmer ou d'infirmer la présence d'un plateau au-delà d'un certain Pe et en troisième lieu de déterminer avec plus de précision la valeur du Pe critique, séparant le régime linéaire du plateau. La dissymétrie de la polarité ne dépend par contre pas linéairement de Pe .

Sursaut

Nous avons également observé un sursaut de la vitesse derrière l'obstacle à $C_F \in \{3, 9, 99\}$ et à $Pe \in \{2, 4\}$. Cette propriété est également remarquable, et est par exemple une des caractéristiques du modèle visco-élasto-plastique étudié dans [Che+11, figure 2] ou de modèles viscoélastiques à extension finie comme le modèle FENE-CR ou celui de Phan-Thien et Tanner [DP03 ; Sar24], qui limitent la trace de la déformation élastique en-dessous d'un seuil, contrairement au modèle de viscoélasticité d'Oldroyd-B par exemple, où cette trace est potentiellement non bornée et pour lequel on n'observe pas de sursaut [DP03, tableau 6] [Che+11, section 4.1]. Dans notre cas, le sursaut se rapproche plus de celui observé pour les modèles viscoélastiques à extension finie : quand il correspond à une augmentation d'environ 5% avec notre modèle, dans les plages de paramètres étudiés (et jusqu'à 7.3% quand $Pe = 4$ d'après le tableau 10.5), le modèle visco-élasto-plastique exhibe au contraire des augmentations pouvant atteindre les 20%.

Pe	2	4	\parallel	C_F	1	3	9	99
sursaut vitesse (%)	3.1	7.3		0.78	3.1	5.9	5.9	
sursaut polarité (%)	37	82		32	37	38	5	

TABLE 10.5. – Valeurs des dépassements de la vitesse et de la polarité par rapport à 1 en aval de l'obstacle, le long de l'axe horizontal central (1) et en fonction de Pe et de C_F pour les calculs menés sur bande avec obstacle circulaire, en régime incompressible. Les quantités sont données avec deux chiffres significatifs.

Quoi qu'il en soit, on peut s'interroger sur l'origine de ce sursaut. Toujours d'après [Che+11, section 4.1], il semble qu'un sursaut de la vitesse apparaît quand la déformation élastique ne relaxe plus exponentiellement vers le taux de déformation, ce qui est par exemple le cas lorsque celle-ci reste bornée. Chez les fluides visco-élasto-plastiques, cela est imposé par le seuil de plasticité, dont la valeur est positivement corrélée à la hauteur du sursaut ; chez les fluides viscoélastiques à extension finie, par la présence d'un terme non-linéaire dans l'équation constitutive du tenseur des contraintes élastiques qui borne les déformations élastiques [DP03 ; Sar24]. Dans notre modèle, l'absence de déformation élastique rend l'argument caduque. Pourtant, on observe des similitudes. Le terme en double-puits agit un peu comme un seuil : il tend à borner la polarité autour d'un voisinage de 1. Or, plus Pe est grand, moins ce terme a une influence sur la dynamique de la polarité, donc moins

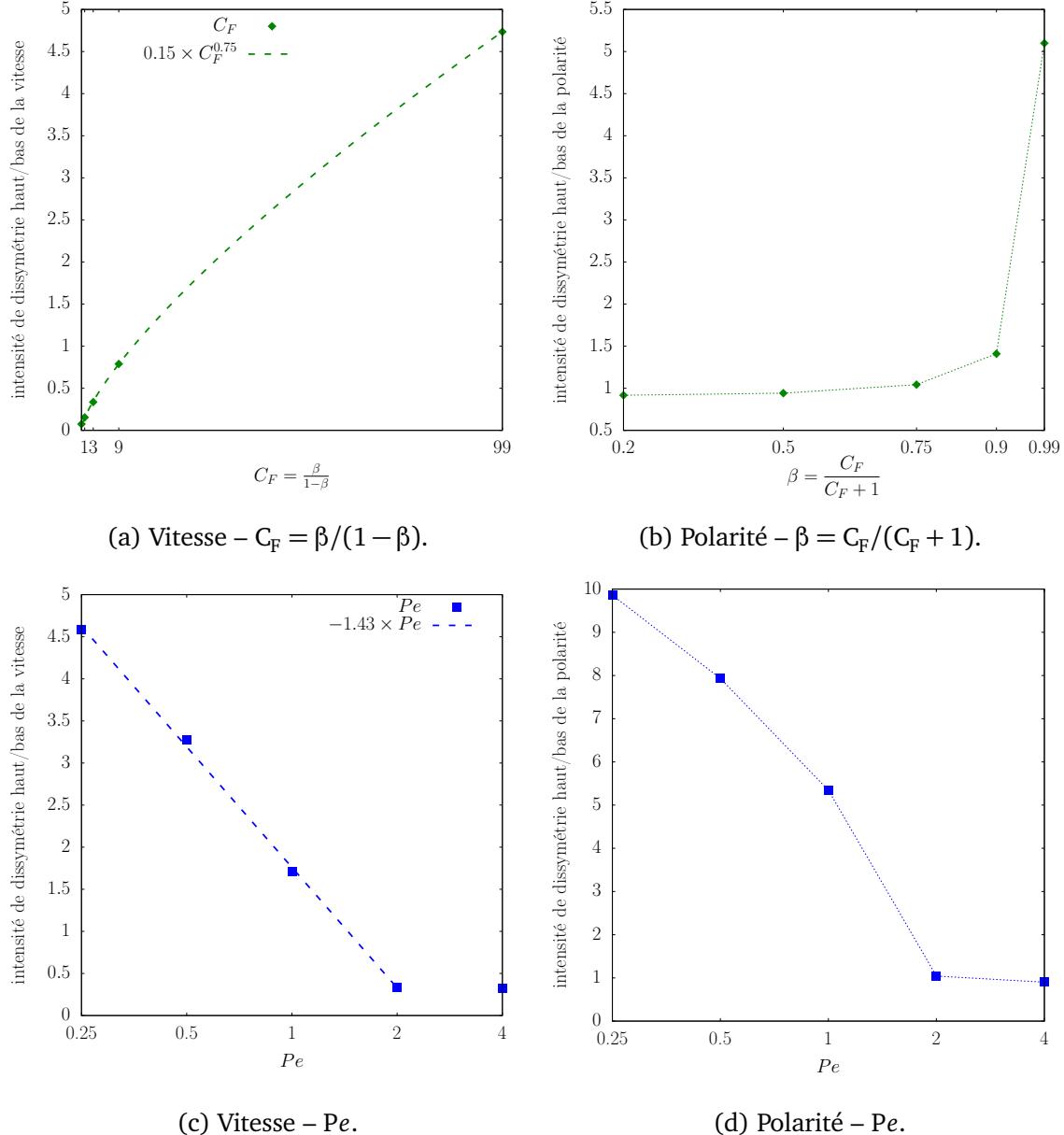


FIGURE 10.21. – Mesure du niveau de dissymétrie haut/bas de la vitesse et de la polarité en fonction des paramètres C_F et Pe . Colonne de gauche : mesures concernant la vitesse. Colonne de droite : mesures concernant la polarité. L'intensité de dissymétrie haut/bas de la polarité est tracée en fonction de β et non de C_F pour des raisons de lisibilité, mais cela reste équivalent.

celle-ci est contrainte autour de 1, ce qui par analogie, reviendrait en quelque sorte à augmenter le seuil de plasticité. Cela expliquerait donc le sursaut de la polarité. Mais qu'en est-il de la vitesse ? Nous pensons que si le couplage d'alignement de la polarité et de la vitesse dans la loi de conservation de la quantité de mouvement (5.47a) est suffisamment important (autrement dit, si C_F , ou β , n'est pas trop petit, chose qui reste encore à quantifier précisément), alors la vitesse tend à suivre la polarité et donc peut également présenter un sursaut en aval de l'obstacle. L'effet de Pe est alors similaire à celui du nombre de Deborah [DP03, équation (24)] dans les modèles viscoélastiques à extension finie, qui représente le temps de relaxation viscoélastique adimensionné : dans les deux cas, le sursaut de la vitesse augmente avec ce temps de relaxation adimensionné.

Signalons enfin qu'un sursaut de la vitesse derrière l'obstacle se manifeste par des zones dites de recirculation de la vitesse dans le référentiel du tissu. Nous montrons sur la figure 10.22 quelques cartes de la vitesse dans le référentiel du tissu exhibant ces recirculations.

Rôle de B

Dans cette exploration, nous n'avons pas montré le rôle de B . Comme pour κ , lorsque $B \in \{0, 0.4, 0.8\}$, le comportement des différents champs n'est pas affecté outre mesure. Mais lorsque $B \in \{1.6, 3.2, 6.4\}$, l'étude devient plus délicate. En effet, d'après le tableau 10.6, les calculs avec ces paramètres ont nécessité plus de quatre (pour $B = 1.6$) à sept (pour $B = 6.4$) diminutions consécutives du pas de temps. En conséquence, l'état stationnaire avec ces valeurs de B est plus difficile à atteindre ; nous ne l'avons d'ailleurs pas atteint, ce qui ne signifie pas qu'il est inaccessible. Pire, avec $B = 1.6$, le résidu de la vitesse oscille en temps, comme illustré par la figure 10.23. Cette même figure semble montrer que le cas $B = 3.2$ se comporte de manière similaire. Nous voyons deux explications possibles. Soit le système présente effectivement des oscillations pour ces valeurs de B , et l'état stationnaire n'existe pas, soit ces régimes demandent une résolution en temps plus précise, et donc de capturer le transitoire avec plus de précision. Remarquons que le cas $B = 6.4$ n'a pas été résolu assez loin en temps pour que se dessinent clairement des oscillations ou un début de convergence.

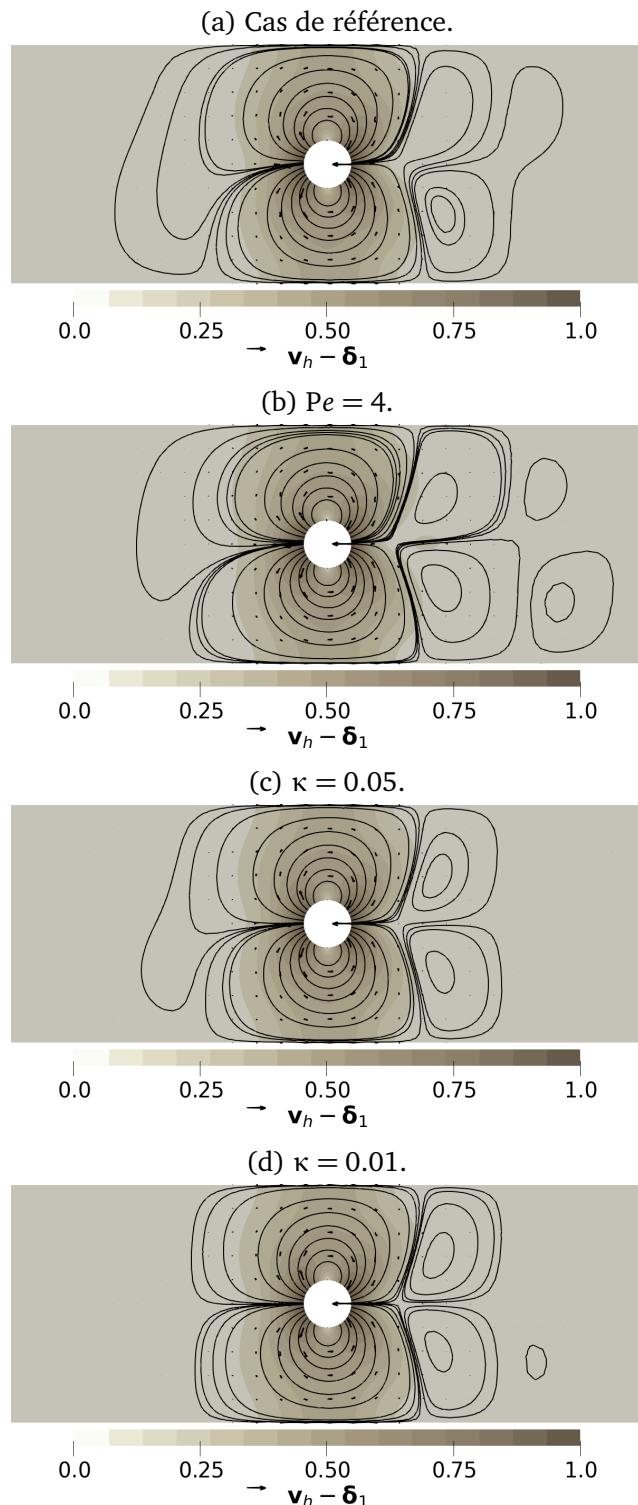


FIGURE 10.22. – Recirculations comme manifestations de la présence d'un sursaut de la vitesse derrière l'obstacle, dans différentes configurations. Légende : la flèche noire à gauche du titre de la barre de couleur correspond à la vitesse d'entrée, c'est-à-dire une vitesse de norme 1.

B	0.4 (référence)	1.6	3.2	6.4
temps cpu	14 h30	18 h47	1 d5 h28	17 h59
nombre total d'itérations	30934	46552	70908	43261
n_{\max}	20000	20000	30000	20000
temps final T	200	470	147	18
Δt minimal	0.01	6.3×10^{-3}	1.6×10^{-3}	7.8×10^{-4}
Δt moyen	0.01	2.4×10^{-2}	4.9×10^{-3}	8.9×10^{-4}
Δt maximal	0.01	0.1	0.1	0.1

TABLE 10.6. – Quelques statistiques en fonction de B pour les calculs menés sur bande avec obstacle circulaire, en régime incompressible. Le nombre k_{last} désigne la dernière itération de point fixe réalisée. La méthode de point fixe comprend toujours entre une et cinq itérations au total. Les quantités sont données avec deux chiffres significatifs.

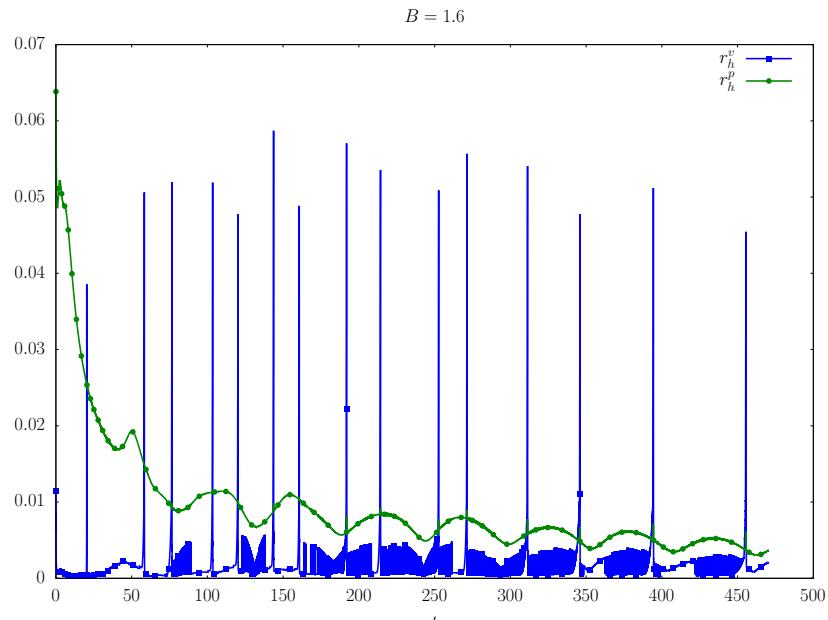
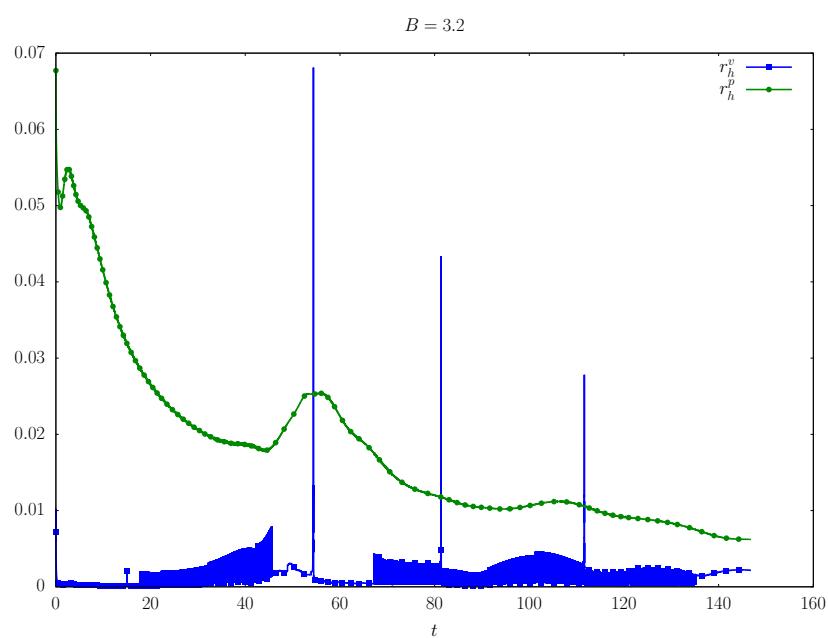

 (a) $B = 1.6$

 (b) $B = 3.2$

FIGURE 10.23. – Normes L^2 des résidus, définies par l'équation (9.9), des équations stationnaires de la vitesse et de la polarité pour deux valeurs de B , prises par rapport au cas de référence décrit par le tableau 10.2.

10.4. Étude de l'influence de la contrainte active dans le disque unité

Dans les sections précédentes, notre attention s'est portée sur l'étude de la bande avec obstacle circulaire. Sur cette géométrie, nous avons réalisé une première exploration du rôle des différents paramètres du modèle, sauf de celui du coefficient de contrainte active S_a . Le rôle de ce paramètre est entre autres d'injecter de l'énergie dans le modèle, autrement dit de déstabiliser le système en le menant, voire en l'entretenant, hors-équilibre [LMR23].

Cependant, le problème de la section 10.3 est très contraint, via les conditions de Dirichlet en entrée et en sortie du domaine, et sa résolution n'a été réalisée que dans le but d'atteindre un état stationnaire. Ces deux caractéristiques sont d'une certaine façon antinomiques avec le rôle du coefficient de contrainte active S_a , dont l'exploration est préférable sur des systèmes moins contraints (sans condition de Dirichlet donc) et fluctuants temporellement. En conséquence, nous proposons dans cette section d'explorer l'influence du paramètre de contrainte active S_a sur un disque fermé, duquel aucune cellule n'entre ou ne sort. Mieux encore, nous montrons que notre modèle est capable de créer du mouvement collectif spontanément.

10.4.1. Maillage et condition initiale

Nous résolvons maintenant le problème de point fixe de la section 8.3.3 sur le disque unité $\Omega := \{x \in \mathbb{R}^2 \mid |x| \leq 1\}$, avec les conditions aux limites

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ et } (\boldsymbol{\sigma}^T)_{nt} = 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad (10.8a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{0} \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (10.8b)$$

Comme la frontière $\partial\Omega$ est courbe, la condition de non pénétration (10.8a) est en pratique approchée de la même manière que celle sur l'obstacle, dont la méthode a été décrite dans la section 10.1.2.

10.4.2. Paramètres

Pour cette étude, nous retenons le jeu de paramètres donné dans le tableau 10.7.

$$\beta = 0.95 \iff C_F = T_a = 19 \quad Pe = 0.5 \quad \kappa = 0.03 \quad B = 0.1 \quad a = 1$$

TABLE 10.7. – Paramètres retenus pour les calculs menés sur le disque unité, en régime incompressible.

Le choix de ces paramètres est le résultat d'une part de ce que nous savons de leur influence sur la bande avec obstacle, et d'autre part d'une méthode essai-erreur menée

sur le disque unité, sur le carré unité et sur un anneau de rayon intérieur 0.5 et de rayon extérieur 1. Nous avons en particulier pris $\beta = 0.95$ et $\kappa = 0.03$ pour créer des effets de taille importants. En effet, d'après la section 10.3.2, plus β est proche de 1, soit $C_F \rightarrow +\infty$, plus la longueur de cohérence de la vitesse est petite, ce qui correspond à un cas où la taille du domaine domine celle des structures de la vitesse. De même, d'après la section 3.3.2, κ représente le ratio de la longueur de cohérence polaire et de la longueur caractéristique du domaine (ici le rayon du disque), donc $\kappa \rightarrow 0$ correspond aussi à un régime où la taille du domaine domine celle des structures polaires, cette fois-ci. D'un certain point de vue, nous cherchons par ce biais à modéliser les mouvements collectifs d'un grand nombre de cellules confinées sur un disque, si l'on interprète les longueurs de cohérence comme des distances effectives d'interaction entre cellules.

Nous étudions l'influence du coefficient de contrainte active S_a en le prenant successivement égal à 0, 1 puis 3.

10.4.3. Maillage et paramètres numériques

Pour capturer fidèlement la taille effective des structures représentées par $1 - \beta$ et κ , nous devons mailler le disque unité Ω suffisamment finement. Dans l'idéal, ces longueurs parcourront 3 à 4 éléments du maillage, ce qui revient à imposer une relation de la forme

$$h \leq \frac{1}{3} \min(1 - \beta, \kappa). \quad (10.9)$$

Pour une première étude et pour éviter des maillages trop fins, nous relaxons légèrement cette contrainte en demandant seulement

$$h \approx \min(1 - \beta, \kappa). \quad (10.10)$$

De manière similaire à l'obstacle de la bande des sections précédents (voir la section 10.2.2), nous construisons le maillage du disque unité en discrétilisant sa frontière par un polygone à N côtés à l'aide de BAMG. Le pas du maillage est donc de l'ordre de $2\pi/N$. Dans notre cas (voir le tableau 10.7), la relation (10.10) donne alors $N \approx 2\pi/\kappa$, soit $N = 210$. Le résultat est montré sur la figure 10.24.

Nous fixons enfin le pas de temps initial à $\Delta t_0 = 10^{-2}$, le nombre maximal d'itérations de la méthode de point fixe à $k_{\max} = 10$ et le seuil de tolérance à $\delta_{fp} = 10^{-5}$.

10.4.4. Condition initiale

Dans le but de montrer que notre modèle est capable de créer du mouvement collectif spontanément, nous partons d'une condition initiale aléatoire, proche de zéro. Spécifiquement, nous construisons la polarité initiale comme un vecteur unitaire d'angle tiré uniformément entre 0 et 2π , et de norme pondérée par un nombre suivant une loi normale de moyenne nulle et d'écart-type égal à 0.1. Cette polarité initiale est d'abord interpolée sur

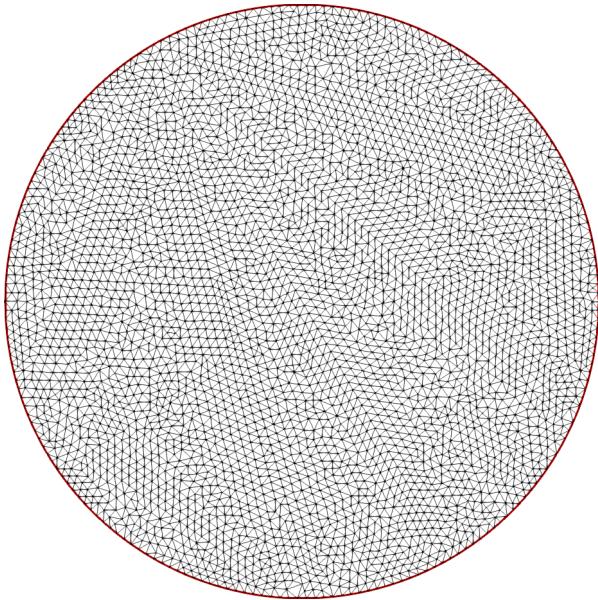


FIGURE 10.24. – Maillage du disque unité construit comme un polygone de $N = 210$ côtés.
Il comporte 7554 triangles.

le maillage grossier défini figure 10.25 avant d'être à nouveau interpolée sur le maillage plus fin défini figure 10.24. Ainsi, la polarité présente initialement de plus grandes structures que si on l'avait directement interpolée sur le maillage fin.

10.4.5. Résultats

Comparaisons qualitatives des champs de vitesse et de polarité

L'absence de contraintes actives ($S_a = 0$) ne signifie pas l'absence totale d'activité : rappelons que la force active $T_a \mathbf{p}$ est toujours présente. Pourtant, sans contraintes actives, si le système crée un semblant de mouvement spontané, celui-ci ne dure pas et la vitesse tend vers 0 (figure 10.26, colonne de gauche). En effet, si l'on regarde la structure de l'estimation d'énergie (7.12), on remarque que le terme issu de la force active est « seulement » en $|\mathbf{p}|^2$ – alors que le terme issu des contraintes actives est en $|\mathbf{p}|^4$ – d'où sans doute sa moins grande capacité à pousser le système hors-équilibre.

Toujours lorsque $S_a = 0$, la polarité tend quant à elle à se stabiliser dans une configuration isotrope (figure 10.27, colonne de gauche). Elle est globalement de norme 1, et ses changements de direction créent des couches limites (les filaments blancs), semblables aux défauts topologiques rencontrés chez les cristaux liquides et les gels actifs [Mar+13 ; TS17 ; Lin+18], même si ceux-ci ont plus tendance à être ponctuels et non filamenteux. Quand $S_a = 0$, ces couches limites fusionnent petit à petit (figure 10.27, colonne de gauche), et ne restent que deux points singuliers. Nous n'avons pas mené le calcul plus loin, mais nous

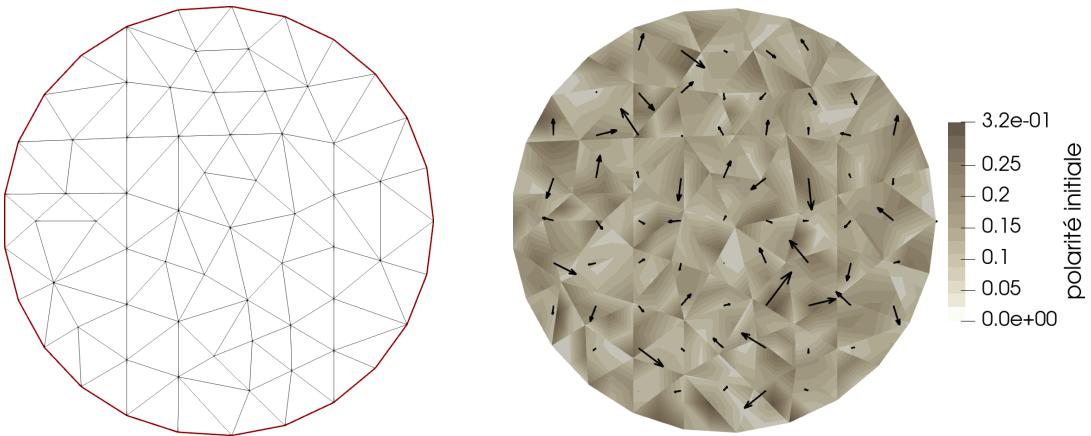


FIGURE 10.25. – Maillage du disque unité construit comme un polygone de $N = 25$ côtés (gauche), sur lequel est interpolé la polarité initiale (droite).

conjecturons que ces deux points finiront par fusionner en un seul point singulier qui se stabilisera au centre du disque et duquel partira radialement la polarité.

Au contraire, la présence de contraintes actives ($S_a \in \{1, 3\}$) crée bien un mouvement spontané et même l'entretient (figure 10.26, colonnes centrale et de droite). Elle maintient ou façonne également les défauts topologiques, d'autant plus que S_a est élevé (figure 10.27, colonnes centrale et de droite).

Évolution de l'énergie libre en fonction de S_a

Ces calculs présentent de nombreuses fluctuations et les comparaisons semi-quantitatives à l'aide des coupes selon des axes spécifiques, réalisées avec les calculs sur bande avec obstacle (section 10.3), ne sont donc pas pertinentes. Des outils de physique statistique pourraient sans doute s'avérer utiles ici, notamment pour des comparaisons futures avec des données expérimentales. Nous proposons ici de comparer des quantités effectives sur tout le domaine, et notamment l'influence du coefficient de contraintes actives S_a sur l'évolution temporelle de l'énergie libre.

Nous tenons du théorème 7.1.2 une estimation de l'énergie libre dans laquelle le tenseur des contraintes actives $\sigma_a := -S_a \mathbf{p} \otimes \mathbf{p}$ occupe une place primordiale, et entre en particulier en compétition avec le tenseur taux de déformation $\mathbf{D}(\mathbf{v})$, l'un tendant à déstabiliser le système (ce qui revient à augmenter l'énergie), l'autre à le stabiliser (ce qui revient à diminuer l'énergie). La figure 10.28 montre effectivement que l'énergie libre tend vers une constante (probablement nulle) pour $S_a = 0$, ce qui signifie que le système tend vers un état d'équilibre, tandis qu'elle oscille pour $S_a > 0$, indiquant que le système est constamment maintenu hors-équilibre.

Les courbes de Lissajous (figure 10.29), c'est-à-dire les trajectoires $(\mathcal{F}, \dot{\mathcal{F}})$, où $\dot{\mathcal{F}}$ désigne simplement la dérivée en temps de l'énergie libre \mathcal{F} , illustrent l'augmentation des

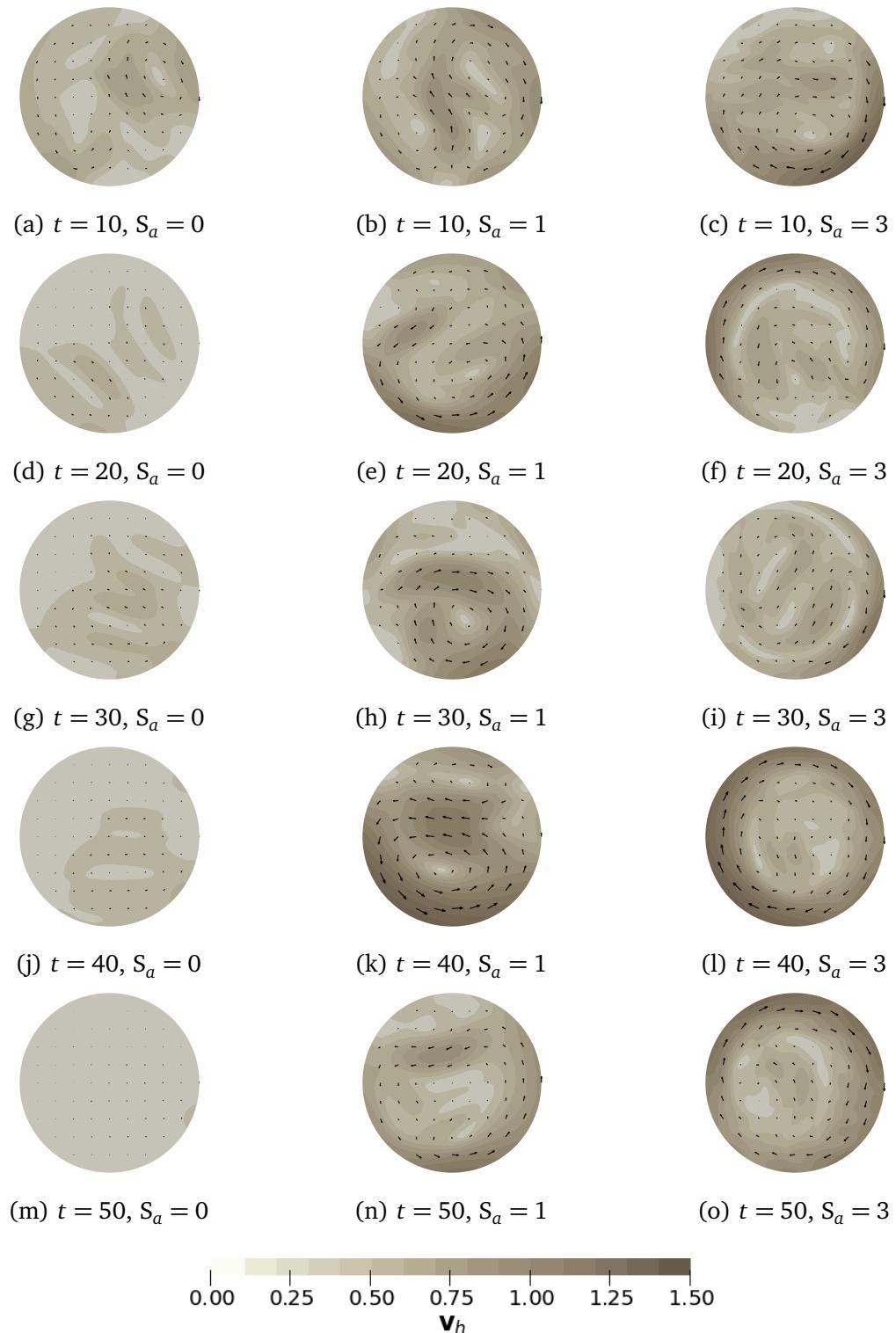


FIGURE 10.26. – Cartes des vitesses en différents temps en fonction du coefficient de contrainte active S_a . Les autres paramètres sont donnés par le tableau 10.7.

10.4. Étude de l'influence de la contrainte active dans le disque unité

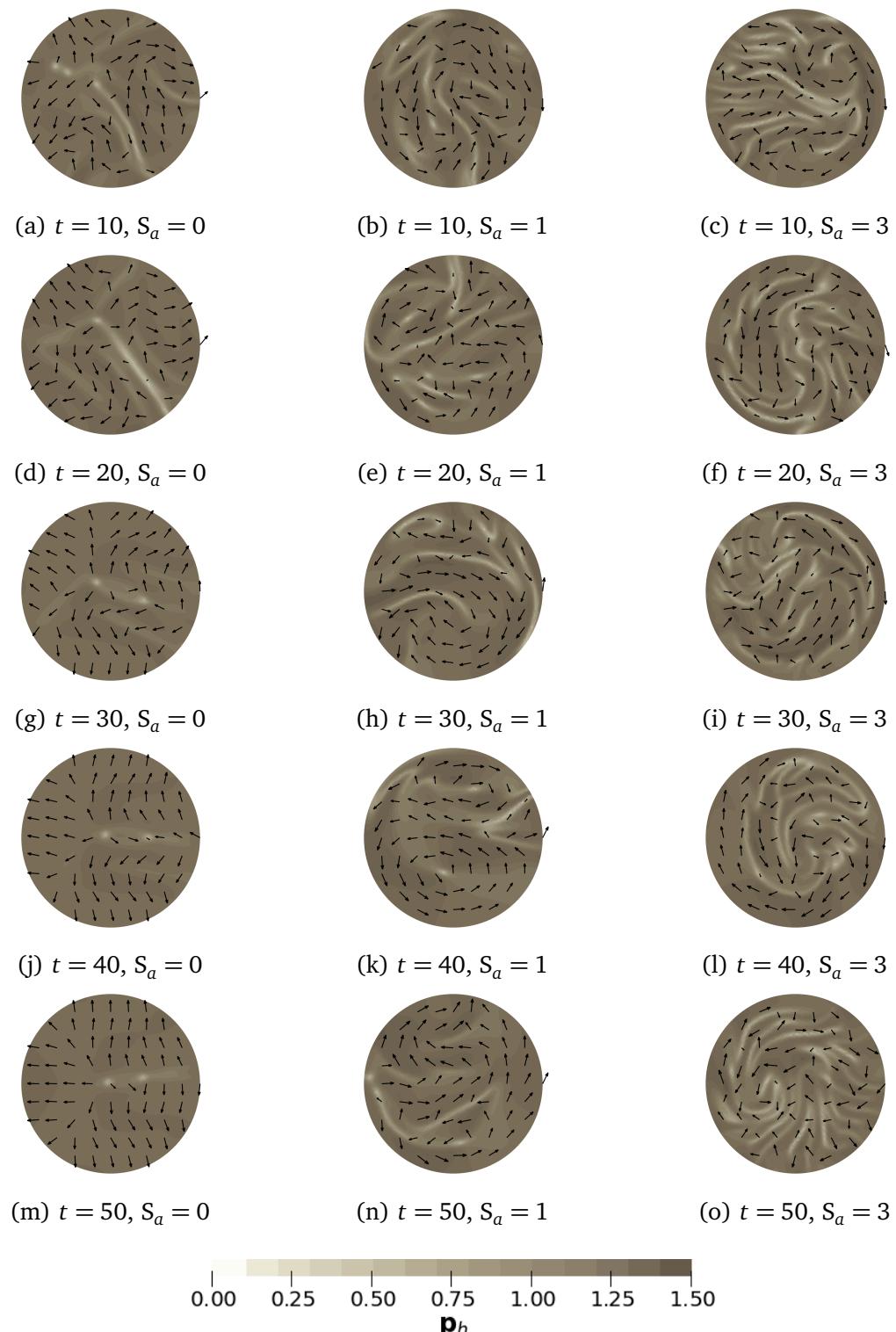


FIGURE 10.27. – Cartes des polarités en différents temps en fonction du coefficient de contrainte active S_a . Les autres paramètres sont donnés par le tableau 10.7.

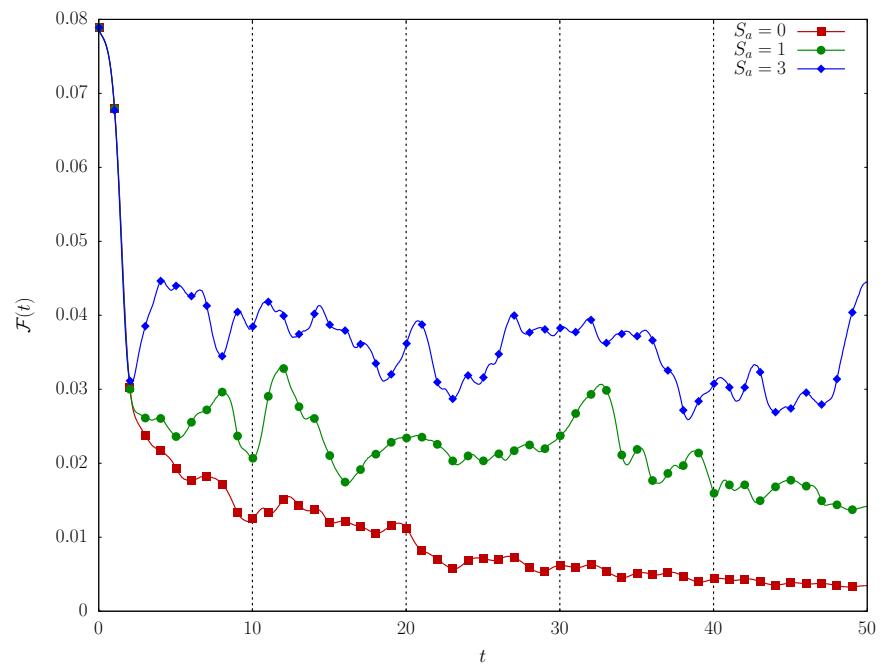


FIGURE 10.28. – Variations temporelles de l'énergie libre \mathcal{F} en fonction du coefficient de contraintes actives S_a . Les autres paramètres sont donnés par le tableau 10.7. Les barres verticales en pointillés correspondent aux instants dont on a extrait les cartes des figures 10.26 et 10.27.

fluctuations avec le coefficient S_a .

Remarque 10.4.I: L'énergie libre tracée ici correspond à l'énergie libre continue, définie par les équations (5.31) et (5.38), et non à sa version semi-discrète (7.14). L'utilisation de cette dernière améliorerait certainement la précision des calculs.

10.4.6. Discussion

L'influence des contraintes actives est connue depuis longtemps dans la littérature [Mar+13]. De nombreuses simulations ont déjà été effectuées montrant le même type de structures complexes [Saw+17 ; TS17 ; Lin+18], semblables à des défauts topologiques, que l'on obtient ici. Les résolutions numériques que nous réalisons dans cette section sont cependant, à notre connaissance, les premières à avoir été menées avec un modèle continu, à l'aide de la méthode des éléments finis. En conséquence, on peut très bien imaginer produire des calculs similaires sur des géométries plus complexes, notamment un hippodrome rempli de cellules [Dur20], sur lequel les quantités mesurées sont très fluctuantes voir chapitre 11.

10.5. Bilan

La résolution de modèles similaires au nôtre, en géométrie complexe, n'avait jamais été considérée dans la littérature. Sur la bande avec obstacle, elle représente par exemple un véritable défi numérique, dans la mesure où l'obstacle force une migration hétérogène.

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'influence des paramètres C_F et Pe sur le comportement des solutions sur une bande avec obstacle circulaire (section 10.3), et celle du coefficient de contrainte active S_a sur le comportement des solutions sur le disque unité (section 10.4). Nous en avons conclu

- que le coefficient de friction C_F contrôle la longueur de cohérence de la vitesse (et donc la portée de l'influence de l'obstacle), qui est d'autant plus grande que C_F est petit ;
- l'existence d'un coefficient de friction critique, situé quelque part entre 0.9 et 0.99, à partir duquel la vitesse et la polarité deviennent très dissymétriques relativement à l'axe horizontal central $x_2 = 0$, marquant l'entrée dans un régime à friction dominante ;
- que le nombre Pe a une influence majeure sur la migration et contrôle la capacité de la polarité à résister au flot ;
- qu'en conséquence, à faible Pe , la polarité a sa dynamique propre : elle cherche à se retourner contre le flot, créant une migration là aussi très dissymétrique haut/bas ;

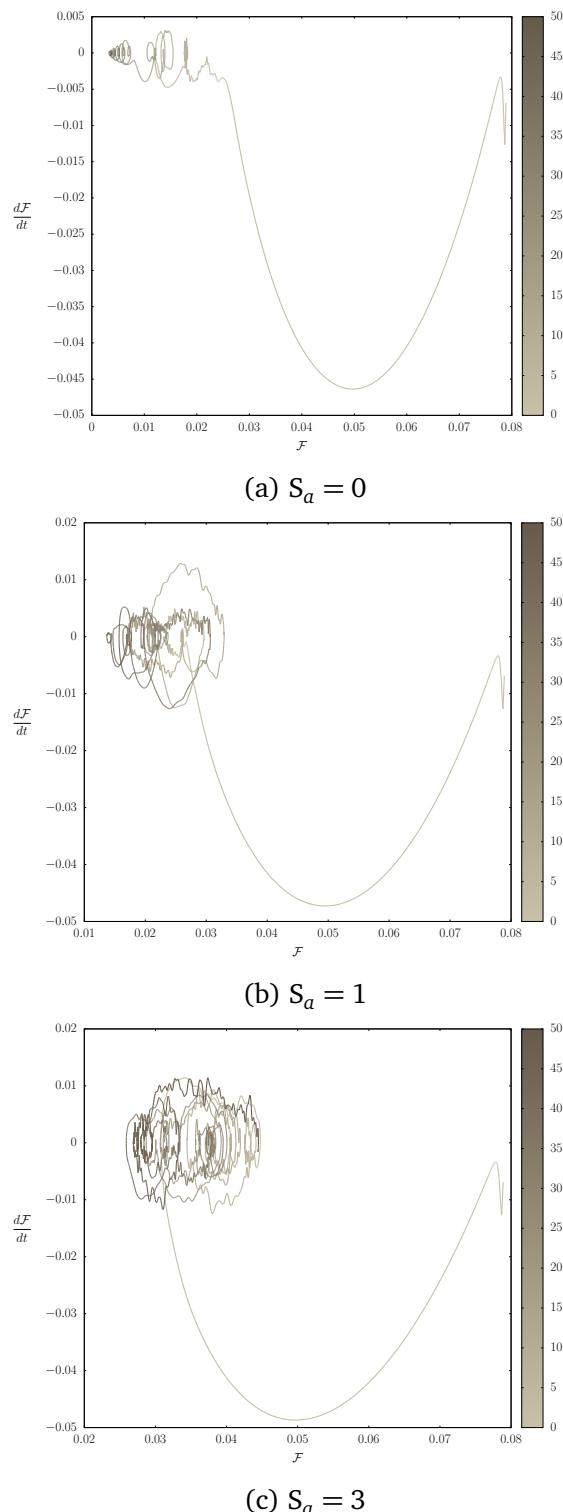


FIGURE 10.29. – Courbes de Lissajous de l'énergie libre \mathcal{F} équation (5.31) en fonction du coefficient de contrainte active S_a . Les autres paramètres sont donnés par le tableau 10.7.

- qu'à grande Pe , la polarité est advectée par la vitesse et le comportement de notre modèle se rapproche alors de celui d'un fluide viscoélastique à extension finie [DP03] : dans les plages de paramètres étudiés ici, la vitesse (et même la polarité) peut présenter un sursaut derrière l'obstacle ;
- qu'il est sinon nécessaire, au moins suffisant d'avoir une contrainte active non négligeable pour créer un mouvement collectif spontané ;
- que le niveau de fluctuations du système est directement dépendant de la contrainte active, générant une forme de stochasticité avec un modèle purement déterministe.

Sur ces deux géométries, les solutions exhibent donc des comportements non triviaux, dont il reste à déterminer s'ils peuvent correspondre à des mouvements collectifs de cellules ; c'est l'objet du prochain chapitre.

Comparaison avec les expériences de migration sur bande avec obstacle

Le modèle bidimensionnel incompressible construit dans le chapitre 3, discréétisé dans les chapitres 6 et 8, validé numériquement dans le chapitre 9 et exploré dans le chapitre 10, est finalement confronté aux expériences de migration d'épithéliums autour d'un obstacle, réalisées par TLILI et al. dans [Tli+20] et DURANDE dans [Dur20].

Alors que ces expériences présentent un front sec de migration et que notre modèle n'est valable qu'à densité constante, nous proposons quand même une comparaison des données expérimentales et des calculs numériques. Notre objectif est de montrer que nous sommes bel et bien en capacité de comparer des quantités représentatives de la migration en géométrie complexe, notamment le champ de vitesse.

Nous commençons ce chapitre en présentant les expériences (section 11.1). Nous décrivons brièvement le protocole utilisé avant de détailler le traitement que nous avons appliqué aux données. Nous mettons en particulier en place une correction de la vitesse capable de réduire l'influence du front sec de migration. Dans la section 11.2, nous comparons ensuite ces données traitées au cas numérique de référence étudié dans le chapitre 10 précédent (section 10.3), qui nous a semblé être le meilleur candidat.

Table des matières

11.1. Présentation de l'expérience sur bande avec obstacle circulaire	263
11.2. Comparaisons avec les expériences sur bande avec obstacle circulaire	271

11.1. Présentation de l'expérience sur bande avec obstacle circulaire

11.1.1. Protocole expérimental

Nous décrivons brièvement les expériences menées sur bande avec obstacle circulaire. Cette géométrie présente l'avantage de forcer l'hétérogénéité de la migration, autrement

dit un mouvement bidimensionnel, ce dont nous avons déjà discuté dans la section 1.4.1. Elle a été étudiée dans le cadre de la thèse de DURANDE [Dur20].

Cette expérience est divisée en trois étapes distinctes (figure 11.1) :

1. Délimitation de la géométrie (maillage). Un motif de protéines d'adhésion (des fibronectines) est déposé sur un substrat de rigidité modulable (dur ou mou, selon l'objectif visé) à l'aide d'un tampon. Les zones vierges de fibronectines, celles où les cellules ne sont pas censées migrer, sont ensuite traitées avec un tensioactif hydrophile appelé Pluronic.

2. Dépôt des cellules (condition initiale). Dans le cas de la bande, on commence par placer un bloc de verre sur la seconde moitié du domaine pour en bloquer l'accès aux cellules. Des cellules épithéliales de rein de chien polarisées (Madin-Darby canine kidney – MDCK II) sont ensuite déposées sur le substrat avant de se positionner sur les zones de fibronectines accessibles ; ce qui dure entre un et deux jours. On leur administre alors de la mitomycine C pour les empêcher de se diviser.

3. Migration (calcul). Des images sont acquises par microscope tout au long de la migration. Elles sont ensuite analysées informatiquement pour en extraire les champs physiques pertinents. Les contours des cellules sont obtenues par segmentation des images, desquels on déduit leurs positions et formes au cours du temps. Une autre possibilité d'obtenir la déformation moyenne est d'utiliser la transformation de Fourier de l'image [Dur+19]. La vitesse est ensuite calculée à l'aide de l'algorithme de Kanade-Lucas-Tomas (KLT).

Les expériences sur bandes avec obstacle circulaire, dites de Stokes, ont déjà permis d'établir le caractère fluide viscoélastique des tissus [Tli+20]. Le temps de relaxation est estimé à $\tau_e = 70$ min, pour un temps de migration de 12 h. Une bande typique mesure 4 mm de long sur 1 mm de large pour un obstacle de rayon 200 μm .

Intérêt de cette expérience pour réaliser des comparaisons avec un modèle

Comme expliqué dans la section 1.4.1, les expériences sur bandes avec obstacle ont l'avantage de forcer les cellules à contourner l'obstacle, créant une hétérogénéité discriminante pour les modèles. Dans notre étude numérique, nous forçons la migration avec les conditions au bord (voir la section 10.1.1) plutôt que par le front sec et le gradient de densité associé. Malgré cette différence, nous comparons le modèle et l'expérience.

Ces expériences présentent un autre avantage : les fluctuations y sont moins importantes que sur d'autres géométries et contrôlables par l'adjonction de drogues qui permettent de perturber certains réseaux de protéines. Nous nous intéressons en particulier à la para-amino-blebbistatine (dénommée blebbistatine par la suite), un inhibiteur de myosine II [Dur20, chapitre IV]. Les myosines sont les moteurs moléculaires de la cellule, ils en régulent la contractilité active. Du point de vue du modèle, cela revient à choisir un

11.1. Présentation de l'expérience sur bande avec obstacle circulaire

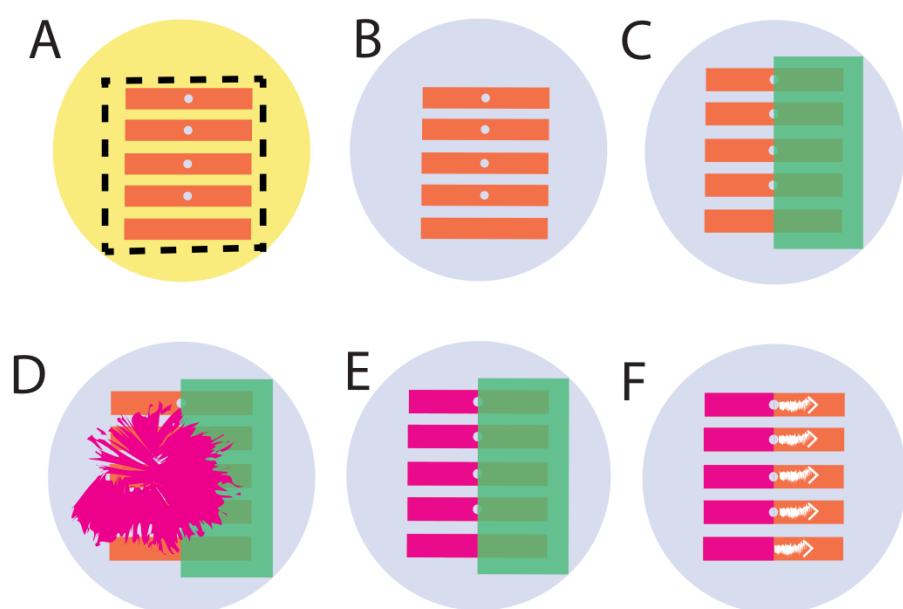


FIGURE 11.1. – Schéma du protocole expérimental utilisé dans [Dur20] pour conduire la migration d'un épithélium. A : tamponnage de la fibronectine. B : traitement au Pluronic. C : placement du bloc de verre. D : dépôt des cellules. E : attente du positionnement des cellules. F : administration de mitomycine C, retraite du bloc de verre et début de la migration. Extrait de [Dur20, figure II.5].

stress actif nul, soit $S_a = 0$. L'ajout de cette drogue présente également l'avantage de considérablement réduire le gradient spatial de la vitesse [Dur20, page 81].

11.1.2. Traitement des données

Nous présentons dans cette section un ensemble de traitements à appliquer aux données expérimentales brutes pour être en mesure de les comparer qualitativement avec les résultats numériques. En effet, d'une part, l'expérience de migration cellulaire autour d'un obstacle présente une évolution temporelle, un front sec, des densités de cellules variables, et les mesures réalisées sont relativement bruitées. D'autre part, nous avons mené nos calculs sans front sec, à densité constante (le tissu est assimilé à un fluide incompressible), dans le but d'atteindre un état stationnaire.

Plus précisément, nous souhaitons (i) réduire le plus possible les fluctuations des champs mesurés expérimentalement et extraire la dynamique principale du système, dans le but de se rapprocher d'un état stationnaire, et (ii) atténuer l'influence du front sec. Nous réalisons pour (i) une interpolation sur une grille régulière, une moyenne en temps de tous les champs expérimentaux et leur appliquons un filtre gaussien. Pour (ii), nous proposons une correction de la vitesse, qui consiste à lui retirer une composante linéaire proche de son gradient. En effet, TLILI et al. ont montré que la vitesse décroît avec la densité dans le cas d'une migration sur bande sans obstacle. Autrement dit, la vitesse serait constante en l'absence de gradient de densité. On peut donc supposer qu'une telle correction appliquée au champ de vitesse de l'expérience donnerait celui qui apparaîtrait en l'absence de front.

Lissage des données

Les données expérimentales brutes (issues des acquisitions d'images, comme décrit par l'étape 3 du protocole expérimental) sont en premier lieu interpolées sur une grille régulière de taille 80×32 entraînant une moyenne locale des champs. Chaque boîte ainsi créée est appelée *volume élémentaire représentatif* (VER), et les quantités moyennées obtenues ont a priori un rôle plus important à grande échelle que les fluctuations [Gra+08, section 4.1]. Cette opération justifie l'utilisation d'un modèle continu pour réaliser des comparaisons.

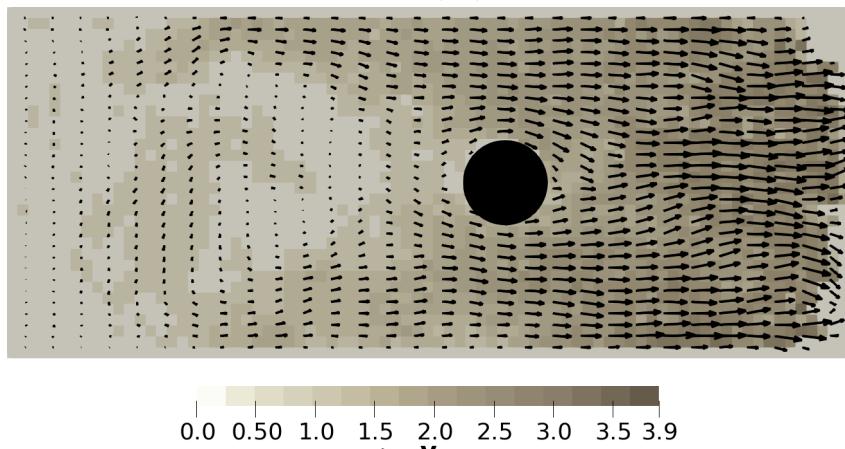
Nous moyennons ensuite les champs interpolés en temps sur toute la durée de l'expérience, en excluant les régions du domaine de l'expérience vides de cellules, c'est-à-dire l'ensemble des points du domaine où l'aire moyenne d'une cellule est nulle.

Nous appliquons ensuite un filtre gaussien en temps et en espace pour lisser les champs, en choisissant un écart-type de 1 (voir la figure 11.2). À ce stade, les champs peuvent être vus comme des approximations \mathcal{P}^0 (discontinues) des champs continus, au sens des éléments finis. Pour obtenir la continuité des champs, nous réalisons alors une interpolation \mathcal{P}^1 , comme illustré sur la figure 11.3.

Nous notons \bar{v} la vitesse, expérimentale, qui résulte de ce processus de lissage.

11.1. Présentation de l'expérience sur bande avec obstacle circulaire

(a) Sans lissage gaussien.



(b) Avec lissage gaussien d'écart-type 1.

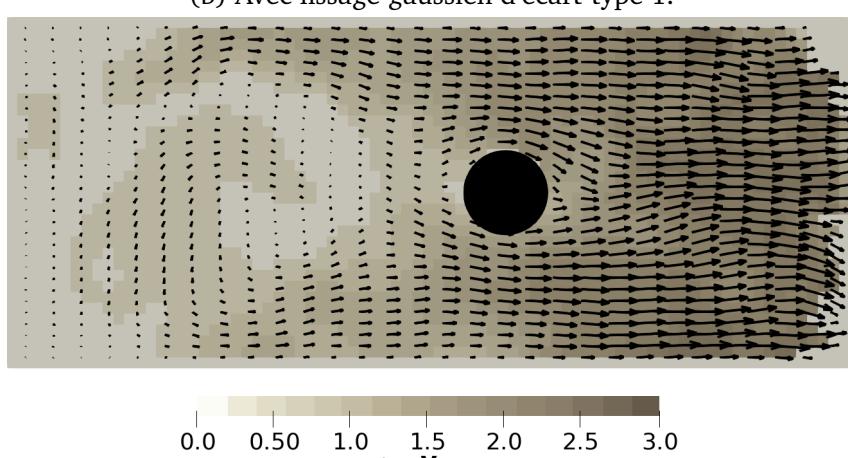


FIGURE 11.2. – Effet du lissage gaussien sur les données expérimentales sans blebbistatine.

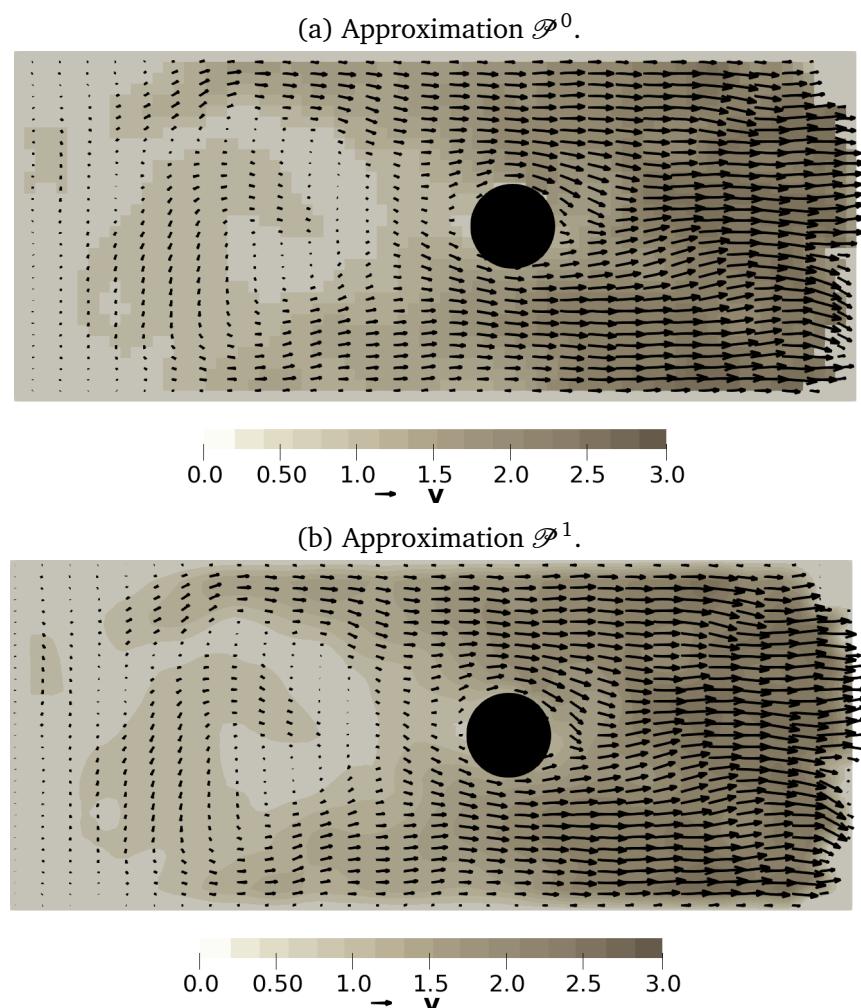


FIGURE 11.3. – Effet de l'interpolation \mathcal{P}^1 sur les données expérimentales sans blebbistatine après lissage gaussien d'écart-type 1.

Correction de la vitesse

La correction de la vitesse que nous cherchons à mettre en place doit permettre d'atténuer voire d'éliminer le gradient de vitesse présent dans les expériences, causé par le front. Pour cela, nous retirons de la vitesse une composante linéaire en x_1 qui constitue une approximation de son gradient dans la direction principale de propagation du front. Nous restreignons cette correction à une fenêtre locale autour de l'obstacle $[-\ell, \ell]$, où $\ell \in]1, L/2[$, où l'on rappelle que L désigne la longueur de la bande et $R = 1$ le rayon de l'obstacle, pour éviter d'un côté la partie réservoir de l'expérience où le mouvement n'est pas clairement établi, et de l'autre côté l'influence importante du front. Plutôt que de réaliser une régression linéaire ou d'approcher le gradient de la vitesse par une méthode issue des différences finies, nous préférons construire une correction qui conserve le débit de la vitesse (moyennée en temps), en entrée et en sortie de cette fenêtre.

Notons Q le débit surfacique de la vitesse moyenne en temps \bar{v} , c'est-à-dire la moyenne de sa première composante dans la largeur de la bande, définie pour tout $x_1 \in [-L/2, L/2]$ par

$$Q(x_1) := \frac{1}{2c} \int_{-c}^c \bar{v}_1(\mathbf{x}) dx_2, \quad (11.1)$$

où c désigne la demi-largeur de la bande. Par définition, les débits d'entrée et de sortie de la fenêtre sont respectivement donnés par $Q_{\text{in}} := Q(-\ell)$ et $Q_{\text{out}} := Q(\ell)$. Une approximation linéaire en x_1 de \bar{v}_1 qui conserve ces débits est alors de la forme

$$\frac{1}{2\ell}(Q_{\text{out}} - Q_{\text{in}})x_1 + \frac{1}{2}(Q_{\text{in}} + Q_{\text{out}}). \quad (11.2)$$

On en déduit finalement la vitesse corrigée \tilde{v}_1 , définie pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$ par

$$\tilde{v}_1(\mathbf{x}) := \frac{2}{Q_{\text{in}} + Q_{\text{out}}} \left(\bar{v}_1(\mathbf{x}) - \frac{1}{2\ell}(Q_{\text{out}} - Q_{\text{in}})x_1 \right). \quad (11.3)$$

On vérifie que cette nouvelle définition de la vitesse conserve bien le débit en entrée et en sortie de la fenêtre considérée. La figure 11.4 montre le résultat pour différentes tailles de fenêtre. La vitesse corrigée avec la fenêtre $[-2.5, 2.5]$ nous semble être le meilleur choix, le débit étant proche de 1 à ses bornes, contrairement au débit aux bornes de $[-5, 5]$, qui est plus élevé en aval.

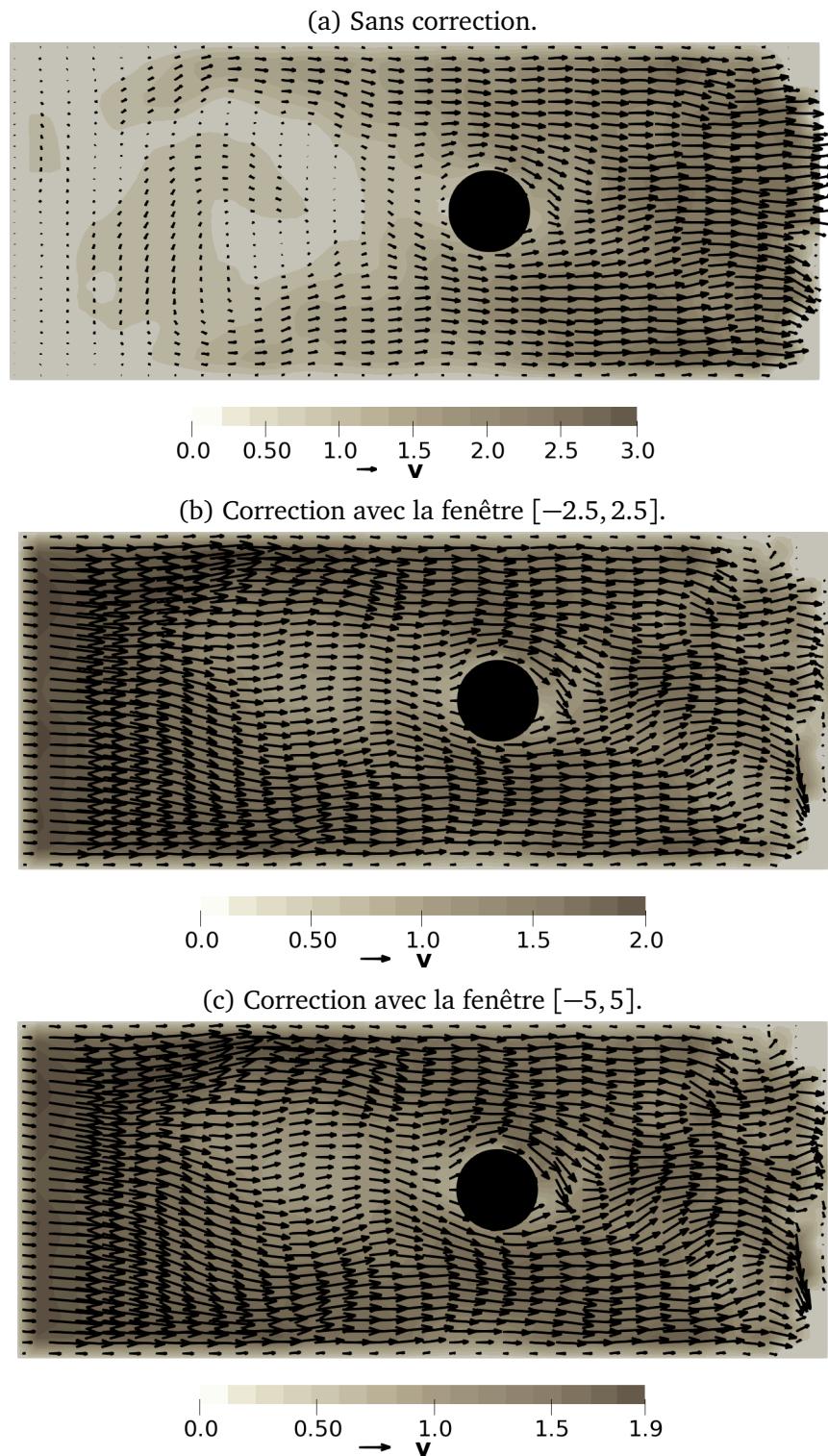


FIGURE 11.4. – Effet de la taille de la fenêtre $[-\ell, \ell]$ sur la correction de la vitesse expérimentale (lissée et \mathcal{P}^1).

11.2. Comparaisons avec les expériences sur bande avec obstacle circulaire

11.2.1. Protocole de comparaison

Scénarios de comparaisons

Nous proposons de réaliser les comparaisons de la vitesse expérimentale corrigée (voir la section 11.1.2) et de la vitesse obtenue avec notre modèle en deux temps, selon la présence ou non de blebbistatine. Nous notons Exp BBLEBB (respectivement Exp B) pour faire référence aux comparaisons avec l'expérience en présence (respectivement en l'absence) de blebbistatine. A priori, l'ajout de blebbistatine réduit les fluctuations sur les champs et correspond à une absence de contraintes actives, cas que l'on a étudiés dans la section 10.3. On s'attend donc à obtenir de meilleures comparaisons avec les données des expériences traitées par blebbistatine. Nous renvoyons à l'annexe D pour les comparaisons avec les données non corrigées, plus fidèles aux expériences mais donnant de moins bons résultats.

Le modèle fournit les champs de vitesse, de polarité et de pression dans le régime incompressible. Les expériences, quant à elles, fournissent les champs de vitesse, de densité et de forme cellulaire. Dans le cas avec blebbistatine, les positions des noyaux cellulaires sont également accessibles. Il est possible de les utiliser pour définir un éventuel marqueur de polarité expérimentale : $p_{\text{noyau}} := x_{\text{noyau}} - x$, où x_{noyau} est le centre de masse du noyau et x celui de la cellule [Dur20 ; Tho+22]. Nous discutons plus en détail de la comparaison des polarités expérimentale et calculée dans les perspectives (section 12.2.3). Dans tous les cas, la vitesse est le ici champ privilégié pour la comparaison.

Représentation des données

La représentation des données a déjà été discutée dans la section 10.1.4. Nous adoptons ici exactement les mêmes modes de représentation, à savoir des cartes bidimensionnelles pour des comparaisons qualitatives et des coupes unidimensionnelles, selon les axes définis par la figure 10.2, pour des comparaisons plus quantitatives. Ces axes ont été définis par les expérimentateurs dans [Dur20, section 2.1].

Pour les coupes, nous faisons malgré tout un choix original, comparé au chapitre précédent. Nous regroupons les courbes des axes horizontaux (2a) et (2b) sur le même graphe, pour souligner l'éventuelle dissymétrie haut/bas des champs, et dans le même esprit, nous ne traçons sur les axes verticaux (3), (4) et (5) que la partie supérieure, en y symétrisant le champ de la partie inférieure. Puisque nous n'avons accès qu'à une expérience, ce qui nous empêche de produire des intervalles de confiance, et que les données fluctuent, nous supposons que les profils des champs au-dessus et en-dessous de l'obstacle correspondent à deux états extrêmes observables, et qu'un tissu peut en réalité adopter, de manière continue, n'importe quel profil dans l'intervalle défini par ces états extrêmes. De ce point de vue, nous considérerons qu'il y a correspondance entre données expérimentales et résultats des

calculs si les courbes numériques sont contenues dans ces intervalles sur ces axes (seul l'axe horizontal central n'est pas concerné). La figure D.2 montre un exemple d'une telle représentation.

Choix des paramètres du modèle

Comme évoqué en introduction du chapitre, nous retenons le jeu de paramètres suivant:

$$\beta = 0.75 \quad Pe = 2 \quad \kappa = 0.1 \quad B = 0.4$$

TABLE 11.1. – Paramètres retenus pour la comparaison avec l'expérience sur bande en présence de blebbistatine après correction de la vitesse.

Nous avons fait ce choix après une étude systématique de l'influence des paramètres, dont une présentation a été faite à la section 10.3.

La mise en œuvre pratique des calculs numériques a quant à elle déjà été présentée dans la section 10.1. Nous rappelons que les calculs sur géométrie de Stokes ont été menés dans le but d'atteindre un état stationnaire, sans chercher à capturer le régime transitoire.

11.2.2. Scénario avec blebbistatine et correction de la vitesse

Si les différences entre les vitesses expérimentale et calculée sont suffisamment claires sur la figure 11.5, essentiellement dû au front sec, nous souhaitons mettre en avant les points communs que nous observons.

Nous en voyons principalement deux : (1) la vitesse dans les deux cas accélère au-dessus et en-dessous de l'obstacle, et (2) la vitesse diminue dans un voisinage immédiat de l'obstacle, même si les formes de cette région diffèrent dans les deux cas.

Cette observation est confirmée par la coupe le long de l'axe horizontal central (1), où les courbes et les points correspondent dans un voisinage très serré autour de l'obstacle, et par les coupes verticales (4) et (5), le long desquelles les deux composantes de la vitesse calculée se positionnent (quasiment) dans l'intervalle de correspondance (figures 11.6 et 11.7). Remarquons qu'au sens défini dans la section 11.2.1, il y a bonne correspondance des vitesses verticales calculée et expérimentale le long des axes (2a) et (2b), et quasiment le long des axes (3), (4) et (5).

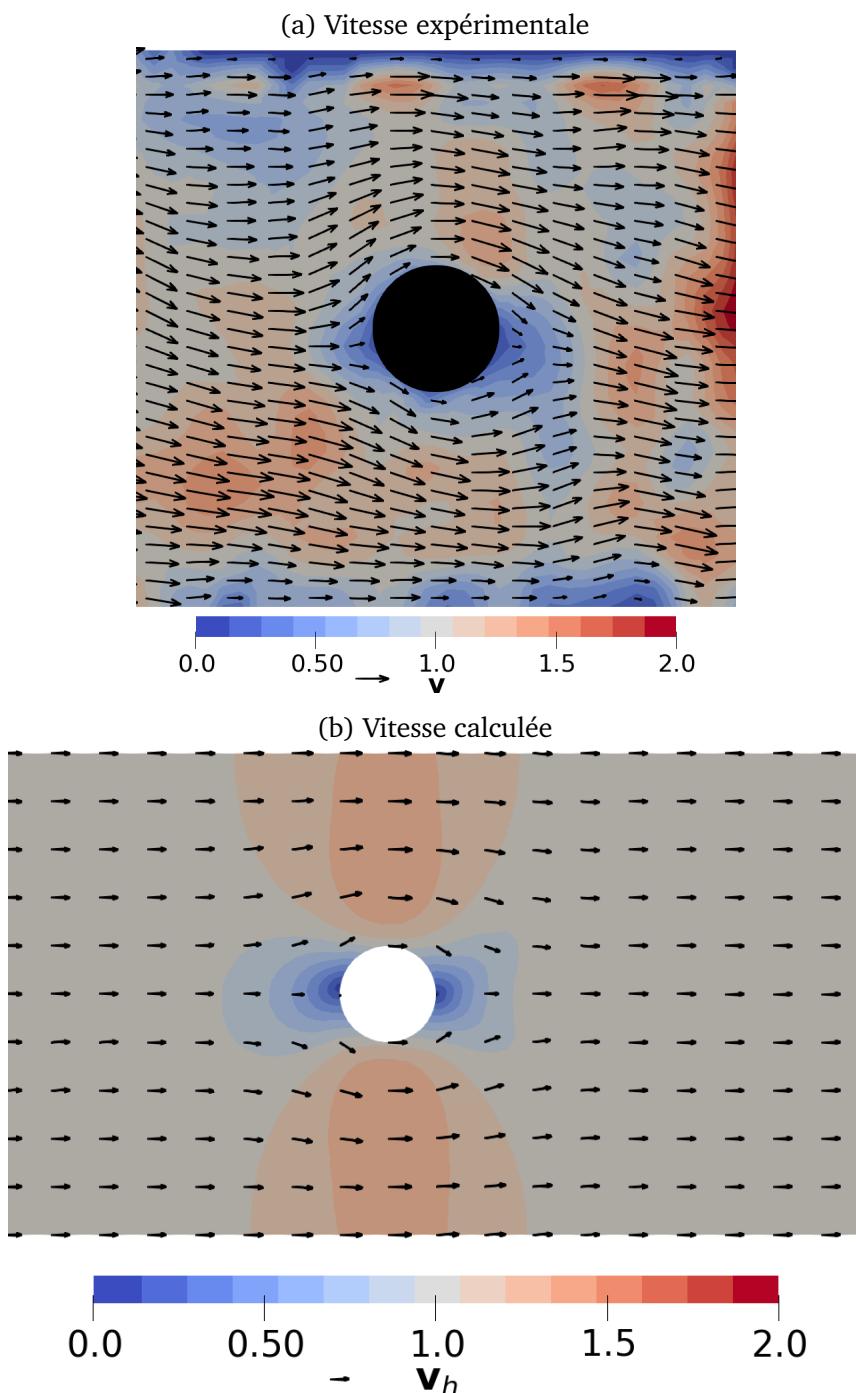


FIGURE 11.5. – Exp BBLEBB. Comparaison des cartes des champs de vitesse. Modèle résolu avec les paramètres du tableau 11.1. Expérience avec blebbistatine. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse d'entrée/caractéristique de la migration, c'est-à-dire une vitesse de norme 1.

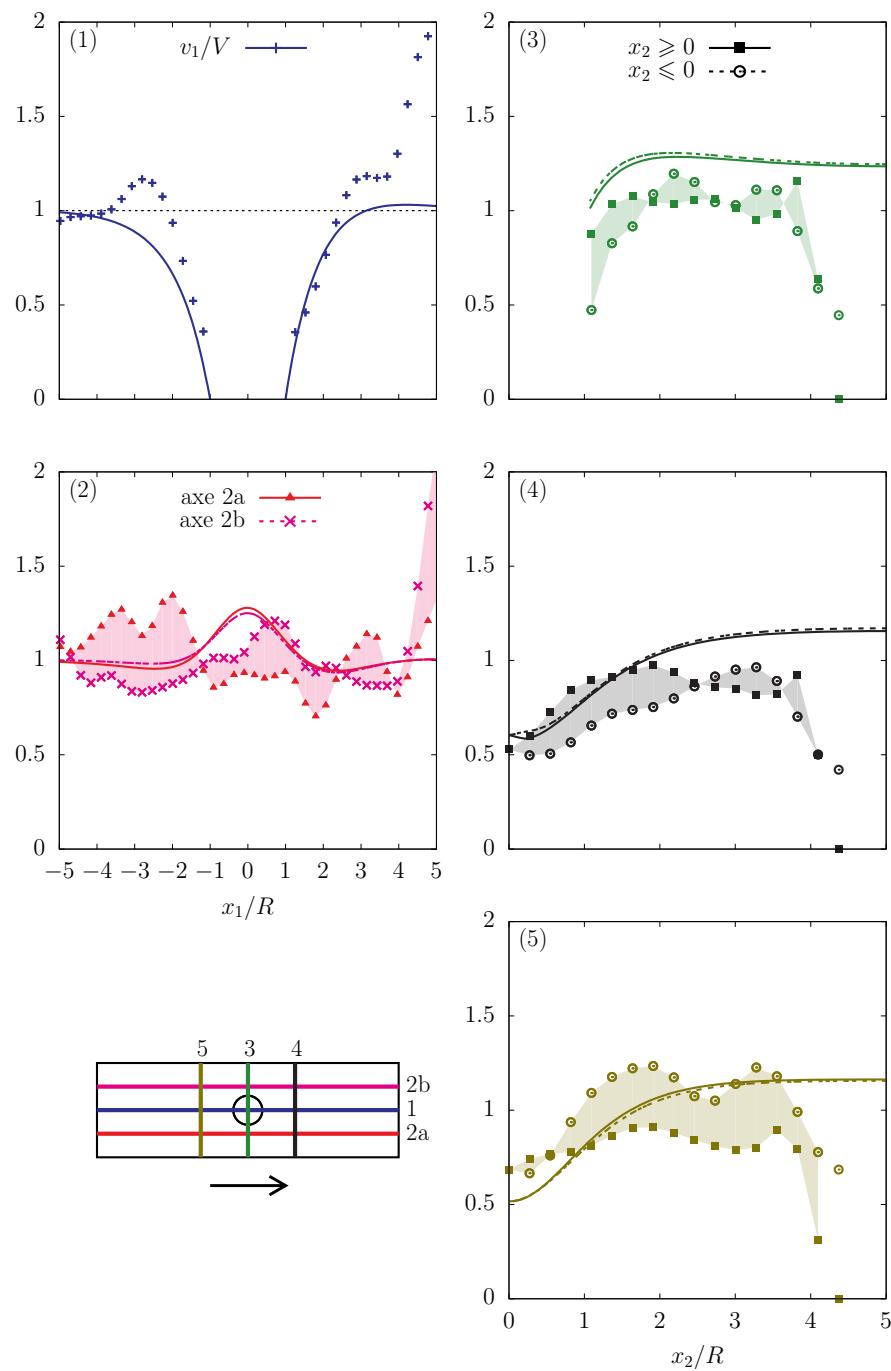


FIGURE 11.6. – Exp BBLEBB. Vitesse horizontale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse horizontale mesurée sur bande en présence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 et correction de la vitesse (points). De haut en bas puis de gauche à droite : coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

11.2. Comparaisons avec les expériences sur bande avec obstacle circulaire

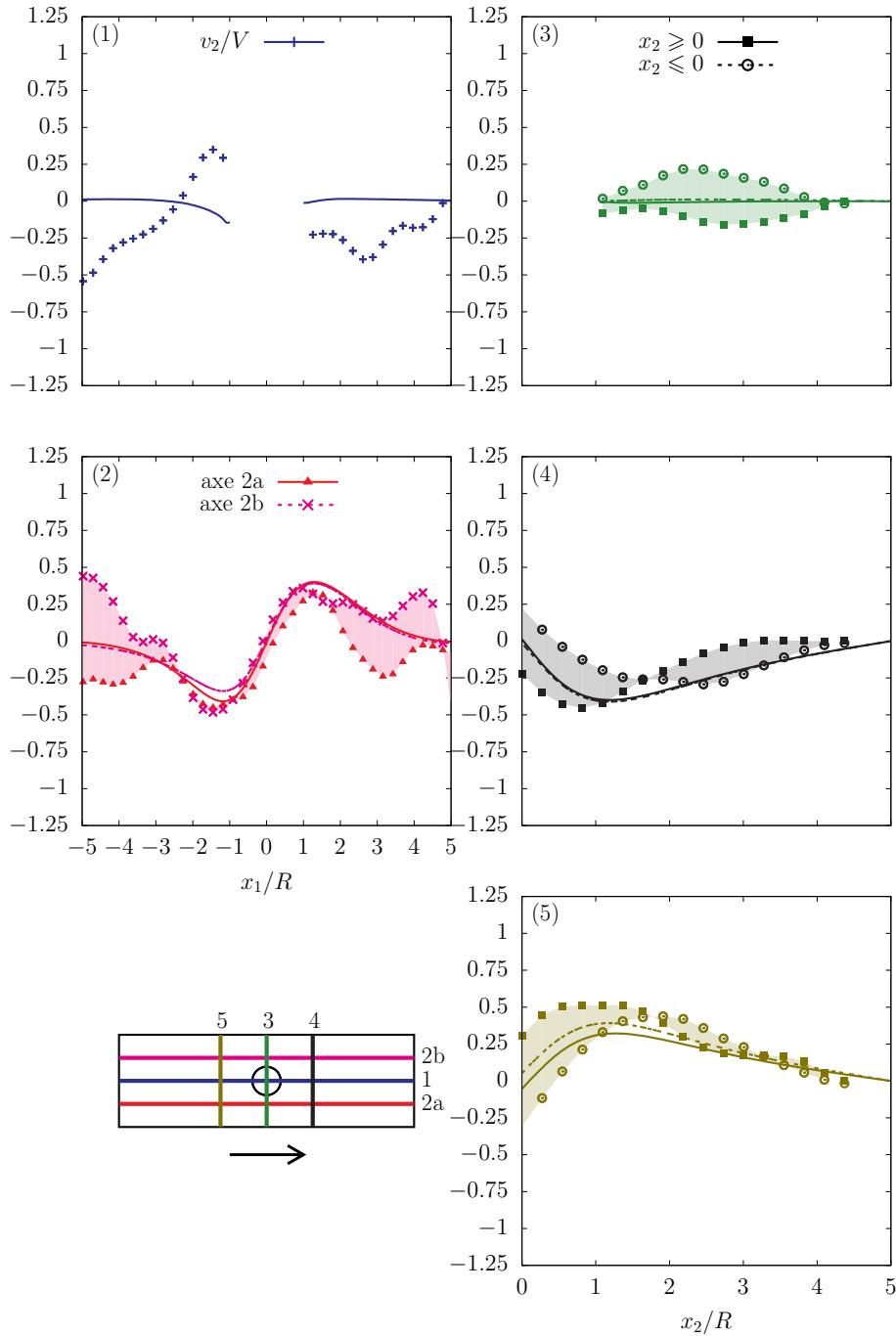


FIGURE 11.7. – Exp BBLEBB. Vitesse verticale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse verticale mesurée sur bande en présence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 et correction de la vitesse (points). De haut en bas puis de gauche à droite : coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

11.2.3. Scénario sans blebbistatine mais avec correction de la vitesse

La figure 11.8 montre l'efficacité de la correction de la vitesse : le gradient de la vitesse expérimentale a quasiment disparu. Les comparaisons qualitatives rejoignent ici celles faites dans le cadre du scénario précédent. En effet, on a toujours ces deux points communs entre vitesses expérimentale et calculée, avec des zones d'accélération au-dessus et en-dessous de l'obstacle, et une zone de décélération dans un voisinage immédiat autour de l'obstacle, même si ce second point est moins prononcé ici. Les zones d'accélération dans le cas expérimental sont également beaucoup plus étendues que dans le cas numérique, mais il est a priori difficile d'estimer si ce serait quelque chose de vraiment observé en l'absence de front de migration, et si ce n'est pas plutôt un artefact de la correction appliquée à la vitesse.

La correspondance des vitesses horizontales expérimentale et calculée est plutôt bonne, sauf peut-être le long de l'axe (1) horizontal central, loin de l'obstacle (figure 11.9). La correspondance des vitesses verticales nous semble aussi relativement satisfaisante (figure 11.9), mais moins que dans le scénario précédent.

11.2.4. Discussion des résultats

Le scénario avec blebbistatine et correction de la vitesse (section 11.2.2) nous paraît offrir la meilleure correspondance entre les résultats numériques et les données expérimentales. La blebbistatine induit une autre forme d'atténuation du gradient de vitesse causé par le front sec de migration. Combinée avec la correction de la vitesse que nous proposons, elle permet de rapprocher les données expérimentales de nos conditions de calcul. Cela dit, la correction seule, sans blebbistatine, donne par ailleurs des résultats très satisfaisants (section 11.2.3).

Devant la difficulté initiale de comparer les expériences d'une part, qui présentent un front sec de migration, une densité variable et dont les champs fluctuent beaucoup, et nos calculs numériques d'autre part, réalisés sans front sec, en incompressible et dans le but d'atteindre un état stationnaire, nous sommes assez positivement surpris des résultats obtenus. Ces premières comparaisons sont encourageantes et montrent qu'il est possible de comparer semi-quantitativement (à l'aide de coupes unidimensionnelles) des quantités caractéristiques de la migration, dont la vitesse, sans doute la variable la plus discriminante avec la déformation élastique des cellules. L'étude de cette dernière constitue un enjeu majeur et doit être sérieusement envisagée dans de futurs travaux.

11.2. Comparaisons avec les expériences sur bande avec obstacle circulaire

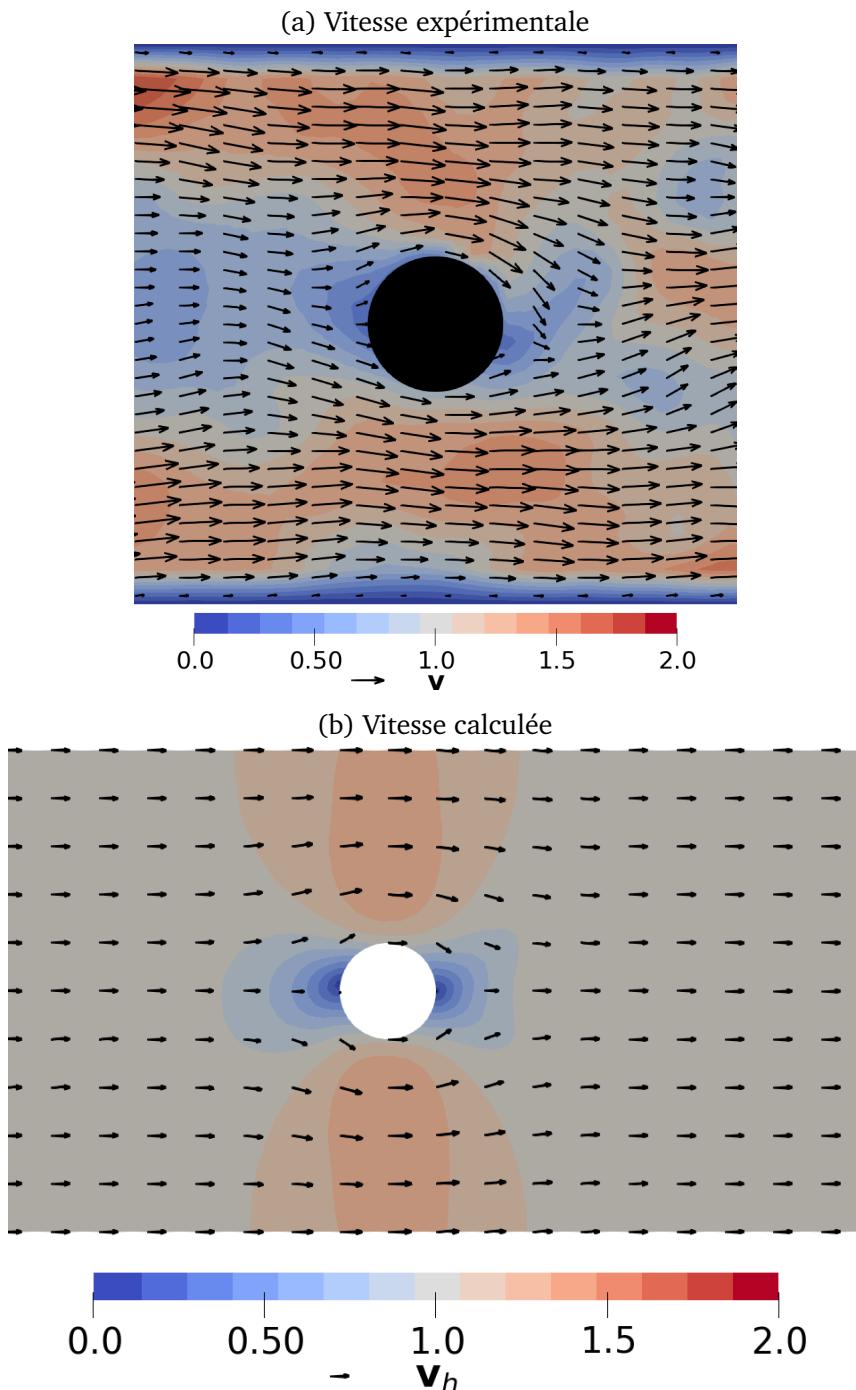


FIGURE 11.8. – Exp B. Comparaison des cartes des champs de vitesse. Modèle résolu avec les paramètres du tableau 11.1. Expérience sans blebbistatine. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse d'entrée/caractéristique de la migration, c'est-à-dire une vitesse de norme 1.

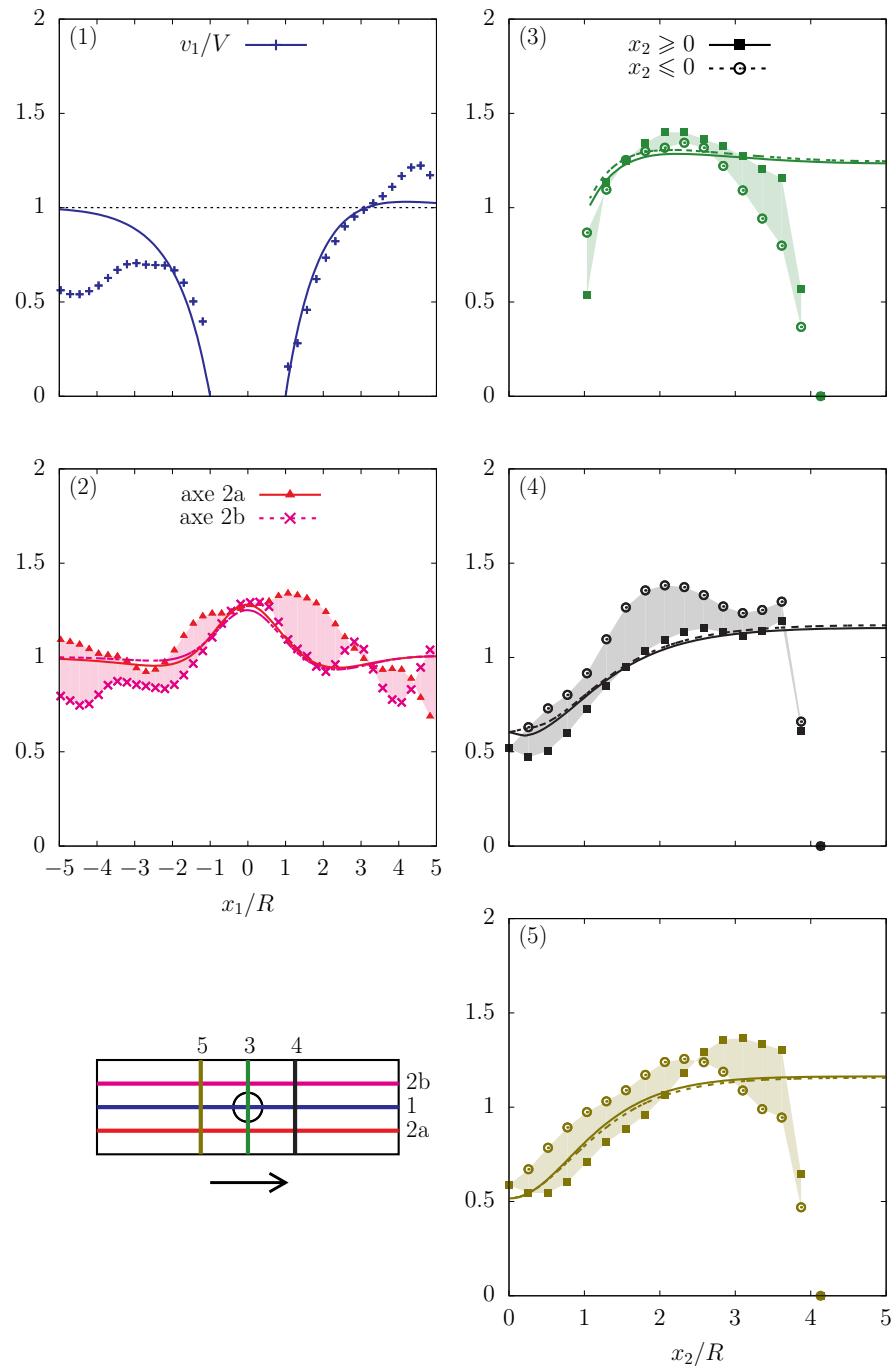


FIGURE 11.9. – Exp B. Vitesse horizontale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse horizontale mesurée sur bande en l'absence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 et correction de la vitesse (points). De haut en bas puis de gauche à droite : coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

11.2. Comparaisons avec les expériences sur bande avec obstacle circulaire

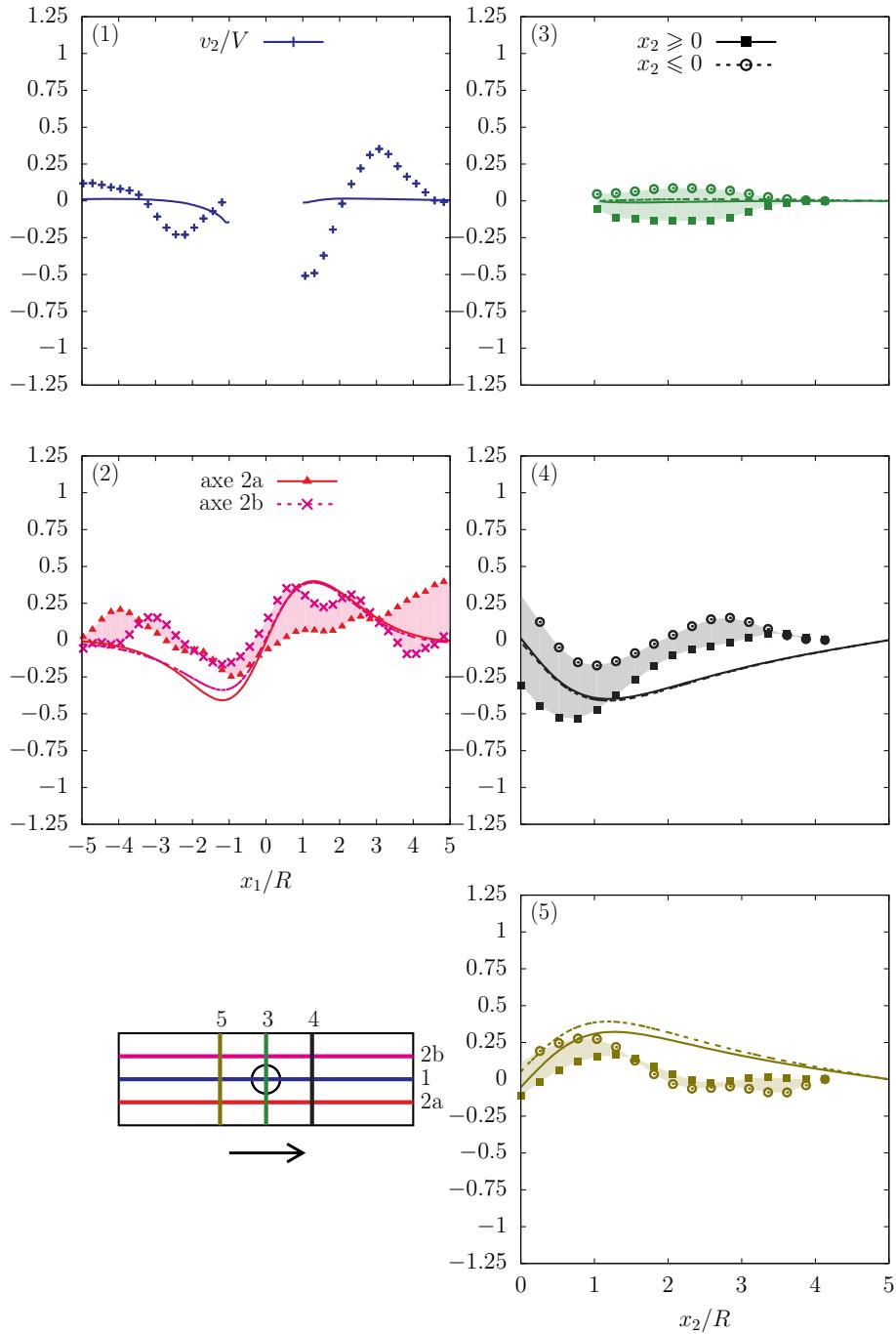


FIGURE 11.10. – Exp B. Vitesse verticale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse verticale mesurée sur bande en l'absence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 et correction de la vitesse (points). De haut en bas puis de gauche à droite: coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

Chapitre Conclusion

12

12.1. Bilan

Cette thèse interdisciplinaire, à l'interface entre mécanique théorique, mathématiques appliquées et biophysique, visait la modélisation mathématique et numérique du mouvement collectif dans les épithéliums, ces tissus biologiques minces impliqués dans la formation des organes ou des embryons, la cicatrisation des plaies ou l'expansion des tumeurs. Plus spécifiquement, l'objectif était de dégager des ingrédients biomécaniques minimaux capables de décrire la migration bidimensionnelle d'un tissu biologique *in vitro* (en milieu artificiel), et notamment de proposer une description macroscopique de la polarité, qui représente la direction privilégiée par les cellules pour exercer des forces de traction sur le substrat sur lequel elles reposent.

Ce travail a été principalement motivé par les expériences produites par TLILI et al. [Tli+18 ; Tli+20] et DURANDE [Dur20], à savoir la migration cellulaire autour d'un obstacle. Leur approche expérimentale, *in vitro* donc, présente en effet de nombreux avantages, dont la décorrélation des effets mécaniques et génétiques, le contrôle de la géométrie et la grande répétabilité [Dur20, page 2]. Tous ces aspects facilitent les comparaisons entre calculs numériques et données expérimentales. La présence d'un obstacle, quant à elle, permet de forcer une migration véritablement bidimensionnelle, plus à même de discriminer les modèles mathématiques. Ce caractère bidimensionnel est par contre hors de portée des modèles existants. L'objectif de cette thèse était donc de combler cette lacune à l'aide d'un cadre mathématique et numérique rigoureux.

Notre travail s'est alors décomposé en trois tâches distinctes : (1) la modélisation mathématique continue de la migration ; (2) la résolution numérique des équations qui en résultent ; (3) la comparaison des solutions approchées avec les observations expérimentales. Nous dressons dorénavant le bilan de chacune de ces tâches.

12.1.1. Première partie : Modélisation continue

Nous avons d'abord construit un modèle tridimensionnel dans lequel le tissu est décrit comme un milieu continu polaire actif en déformations non bornées (chapitre 3). Nous

avons pour cela utilisé un formalisme thermodynamique théorique qui garantit l'objectivité des équations, c'est-à-dire leur invariance par changement de référentiel galiléen, et le second principe de la thermodynamique. Nous l'avons combiné de manière inédite à la théorie des contraintes de couples, qui prend en compte au niveau cinétique macroscopique les microrotations des constituants (ici les cellules) du milieu continu (chapitre 2). Cette combinaison que nous avons proposée généralise l'approche habituelle, issue des théories des cristaux liquides et des gels actifs, et permet d'introduire la polarité comme une variable thermodynamique interne. Elle permet d'écrire systématiquement des équations constitutives sur l'unique base de l'énergie libre et du potentiel de dissipation, qui caractérisent alors entièrement le comportement du matériau. C'est donc par ce biais que l'équation d'évolution de la polarité a été déterminée : nous avons choisi une énergie libre qui synthétise les approches classiques développées dans la littérature, en sélectionnant uniquement les ingrédients qui nous semblaient pertinents pour modéliser le phénomène qui nous intéresse, et défini le potentiel de dissipation adéquat. Si les équations obtenues ne contiennent pas d'ingrédients originaux par rapport à la littérature, leur procédé de construction l'est, est rigoureux et très puissant, et leur application à une migration bidimensionnelle autour d'un obstacle est inédite. Nous avons en particulier démontré la puissance de ce formalisme en déterminant une estimation d'énergie (chapitre 7), première étape de tous les résultats d'existence de solutions.

En exploitant la faible épaisseur du tissu par rapport à sa longueur, nous avons réalisé une analyse asymptotique (ou approximation en couche mince) du modèle tridimensionnel, permettant de le réduire à un système bidimensionnel (chapitre 5). Cela nous a conduit à développer un formalisme très général d'analyse asymptotique pour les fluides incompressibles à surface libre, sur substrat plan avec condition de non-pénétration (chapitre 4). Ce formalisme permet de clarifier les hypothèses nécessaires à la réalisation de l'approximation en couche mince, d'en simplifier son exécution, et s'applique à une grande variété d'équations aux dérivées partielles. Mieux encore, nous l'avons combiné avec la théorie des contraintes de couples et le formalisme thermodynamique (chapitre 5), dont le résultat permet de grandement simplifier la construction de modèles directement moyennés en épaisseur, puisqu'il suffit de préciser l'énergie libre et le potentiel de dissipation du système bidimensionnel pour entièrement caractériser le comportement du matériau.

12.1.2. Deuxième partie : Résolution numérique du modèle

Les équations moyennées en épaisseur obtenues forment un système non-linéaire fortement couplé. L'équation d'évolution de la polarité présente un terme non-linéaire, issu d'une énergie en double-puits, qui contraint la polarité à préférer être de norme unitaire, un laplacien et un terme de transport. Le tenseur des contraintes est non-symétrique, présente des dépendances non-linéaires en la polarité et dépend du laplacien de cette dernière.

Pour résoudre ces équations sur des géométries complexes, et en particulier sur une bande avec obstacle circulaire, nous avons opté pour les méthodes de Galerkine discontinue, qui généralisent le schéma de décentrage amont dans le cadre de la méthode des

éléments finis, schéma utilisé pour éliminer les oscillations parasites qui émergent lorsque le terme de transport est dominant (chapitre 7). Nous avons au total proposé deux schémas numériques, l'un pour résoudre le problème en incompressible, et l'autre pour le résoudre en compressible, qui dans ce cas garantit la positivité de la densité approchée (chapitre 8). Dans chacun de ces cas, nous avons déterminé une estimation d'énergie continue, et pour le cas incompressible une estimation semi-discrète, c'est-à-dire discrète en espace mais pas en temps (chapitre 7). Enfin, les non-linéarités ont été gérées à l'aide d'une méthode de point fixe (chapitre 8).

12.1.3. Troisième partie : Exploration numérique du modèle et comparaisons avec les expériences

Après avoir validé les schémas numériques (chapitre 9), nous avons exploré le comportement du modèle en incompressible, dans une volonté de le comprendre dans une première approche sans l'influence de la densité. Par ailleurs, sur la base d'essais numériques préliminaires non concluants, nous avons estimé que le couplage de cette dernière avec les autres inconnues n'a pas été suffisamment approfondi dans ce document pour considérer une étude pertinente des équations en compressible.

L'exploration du modèle a été réalisée en premier lieu sur la bande avec obstacle puis sur le disque unité (chapitre 10). Il est apparu que le coefficient de friction et le temps de relaxation de la polarité ont l'influence la plus importante sur la dynamique de la migration sur la première géométrie. Celle-ci s'est avérée relativement complexe, car pouvant présenter de fortes dissymétries haut/bas et amont/aval, et/ou un léger sursaut de la vitesse derrière l'obstacle, tranchant complètement avec les écoulements newtoniens classiques. Sur le disque, nous avons montré la capacité de notre modèle à générer du mouvement collectif spontané très fluctuant (d'apparence stochastique), d'autant plus que le coefficient de contrainte active est grand.

Enfin, nous avons confronté notre modèle aux données expérimentales à notre disposition sur la bande avec obstacle (chapitre 11). Notre objectif était de montrer notre capacité à comparer des quantités représentatives de la migration, notamment le champ de vitesse, objectif que nous estimons avoir mené à son terme. Comme les expériences présentent un front sec de migration, contrairement à notre modèle qui est à densité constante, nous avons dû proposer pour la comparaison une correction de la vitesse visant à réduire son gradient causé par le front, minimisant ainsi l'influence de ce dernier. Nous avons alors considéré deux scénarios de comparaison, selon la présence ou non de blebbistatine, une drogue d'inhibition de la contractilité active qui a pour effet de réduire le gradient de vitesse au niveau du front, et selon l'application ou non de la correction. Nous avons obtenu des correspondances étonnamment satisfaisantes entre la vitesse expérimentale et la vitesse calculée dans les deux cas.

L'exploration et les comparaisons réalisées ont donc montré les capacités de notre modèle à décrire la migration d'un tissu biologique en géométrie non triviale.

12.1.4. Conclusion

Dans cette thèse, nous avons développé une approche mathématique de la modélisation du mouvement collectif dans les épithéliums. Nous avons mis en place un formalisme thermodynamique prenant en compte la microstructure du tissu pour construire un modèle de tissu tridimensionnel, puis un formalisme de moyenne des équations dans l'épaisseur pour réduire ce dernier à un système bidimensionnel. Nous avons ensuite proposé un algorithme robuste capable de résoudre ce système aussi bien en incompressible qu'en compressible, sur des géométries très générales. En bref, nous avons établi tout un ensemble d'outils mathématiques utiles à la modélisation du mouvement collectif. Nous avons démontré la puissance de notre approche en déterminant des estimations d'énergie continue et semi-discreté de notre modèle et en réalisant des calculs numériques sur une bande avec obstacle, chose inédite dans la littérature pour ce type de modèles. Nous avons enfin montré la capacité de notre modèle à reproduire certains comportements observés dans des expériences sur les épithéliums et même à être comparé directement à certaines d'entre elles. Nous en avons conclu l'importance de la polarité et la possibilité qu'elle soit décorrélée de la vitesse : ceci indique clairement aux expérimentateurs la nécessité d'une mesure expérimentale fiable de ce champ.

12.2. Perspectives

Le sujet abordé dans cette thèse est très vaste, très riche et n'en est qu'à ses balbutiements. Les recherches abordées dans le présent document ont amené beaucoup d'interrogations et ouvert de nombreuses pistes, que ce soit au niveau de la modélisation continue, de la discréétisation ou de l'exploration du modèle. Nous en présentons ici quelques-unes.

12.2.1. Modélisation continue

Viscoélasticité

Dans cette thèse, nous n'avons pas abordé le couplage de la viscoélasticité avec la polarité. Pourtant, comme nous l'avons affirmé en introduction, un large consensus s'est établi pour des modèles mécaniques viscoélastiques en modélisation mathématique pour la biologie. Ainsi, s'il n'est pas certain que la rhéologie joue un rôle déterminant dans la migration autour d'un obstacle, elle pourrait quand même s'avérer importante, voire cruciale dans d'autres situations, comme dans l'aspiration de cellules au travers d'un canal rétrécissant [TGD22].

Durant son stage de Master 2 [Ave23] sous la direction de Pierre Saramito (LJK, Grenoble) et d'Ibrahim Cheddadi (TIMC, Grenoble), en étroite collaboration avec François Graner (MSC, Paris) et Hélène Delanoë-Ayari (ILM, Lyon), Sara Avesani a par exemple comparé le modèle d'Oldroyd-B avec les expériences d'aspiration évoquées plus haut [TGD22]. Entouré des mêmes personnes, Maxime Renard a continué ce travail durant son stage de Master

2 en considérant à la place le modèle de FENE-P, dans le but d'éviter les déformations élastiques non bornées obtenues avec le modèle d'Oldroyd au voisinage du coin où se situe le rétrécissement du canal.

Enfin, nous aimerais essayer une définition de la force active qui prenne en compte la déformation élastique des cellules. Nous proposons par exemple une force active de la forme

$$\mathbf{f}_a := f_a(\boldsymbol{\epsilon}_e + \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{p}, \quad (12.1)$$

où $\boldsymbol{\epsilon}_e$ est le tenseur de déformation élastique. Avec cette définition, la force active tendrait à s'aligner à la fois avec la polarité et la direction principale de la forme de la cellule.

Rôle de la densité

De manière similaire, nous pourrions approfondir le rôle de la densité dans la dynamique du mouvement collectif dans les épithéliums, et en particulier son couplage avec la polarité. Dans le cas d'une migration sur bande, le mouvement se propage à partir du bord libre [Tli+18]. Pour modéliser ce comportement, il a par exemple été proposé dans la littérature d'ajouter le gradient de la densité en second membre de l'équation d'évolution de la polarité [AT19, section 3.5], puisque c'est elle qui définit la force active. Dans le cadre des gels actifs, c'est le gradient du logarithme de la densité qui a été envisagé [Mar+13, équation (58)]. Ce dernier choix peut même s'inscrire dans le formalisme de l'analyse asymptotique.

Citons également l'existence d'ondes de déplacement se propageant dans le sens inverse du mouvement et directement dépendantes de la densité [Tli+18], qu'il serait intéressant de prédire quantitativement à l'aide d'une version de notre modèle compressible prenant mieux en compte la densité.

Substrat déformable

La déformation élastique du substrat est aussi un paramètre supplémentaire que l'on pourrait prendre en compte dans la modélisation [SS13 ; SS15]. Cela ouvrirait la voie à des comparaisons à des expériences réalisées *in vitro* sur substrat mou [Dur20], voire *in vivo*, c'est-à-dire directement au sein d'un organisme vivant.

Limite continue du système compressible par pénalisation vers le système exactement incompressible

Une propriété désirable du modèle incompressible obtenu dans cette thèse serait d'être limite continue du modèle compressible. Plus formellement, on peut se demander si en faisant tendre c_0 , le coefficient de pénalisation de la densité, vers $+\infty$, le modèle compressible se réduit au système incompressible. Si tel n'est pas le cas, il pourrait être intéressant de proposer une pénalisation pour laquelle cette limite est vérifiée.

12.2.2. Résolution numérique

Systèmes de Friedrichs

La théorie de Friedrichs [PE11, chapitre 7] est un puissant formalisme qui permet d'analyser l'existence de solutions à des systèmes définis positifs, pas forcément linéaires. Elle peut notamment être utilisée pour montrer le caractère bien posé du modèle d'Oldroyd-B [Sar16, section 4.8]. Nous pourrions de même montrer que notre modèle admet une solution.

Extension des estimations d'énergies continues avec conditions aux limites générales

Les théorèmes 7.1.2 et 7.2.2 donnent les estimations d'énergie continue des problèmes incompressible et compressible respectivement. Cependant, ces résultats ne sont valables que lorsque l'on considère une condition de Neumann homogène pour la polarité. Dans le cadre des problèmes plus simples de transport pur et de diffusion pure, nous avions réussi à obtenir des estimations d'énergie continue pour des conditions aux limites générales (propositions 6.2.1 et 6.3.2). Nous aimerions donc étendre ces résultats aux équations étudiées dans cette thèse.

Estimation d'énergie semi-discrète pour le cas compressible

Contrairement au cas incompressible (théorème 7.1.4), nous n'avons pas proposé d'estimation d'énergie semi-discrète pour le cas compressible. Il pourrait alors être envisagé d'étendre le résultat en s'inspirant de l'estimation d'énergie continue (7.2.2) du cas compressible.

Estimations d'énergie discrètes

Pour aller plus loin encore, on pourrait même chercher à déterminer les estimations d'énergie *discrètes*, en espace et en temps, satisfaites par nos équations.

Amélioration du taux de convergence

Dans la section 9.2, nous n'avons pas obtenu les taux de convergence optimaux vers les solutions exactes. Une révision de l'implémentation de notre algorithme est donc à faire.

Méthode de Galerkine discontinue hybride

Au-delà de ces considérations, il est également possible de considérer une méthode plus avancée encore que la méthode de Galerkine discontinue, connue sous le nom de méthode de Galerkine discontinue hybride [NPC09] [Sar20, chapitre 6]. Celle-ci consiste à remplacer la pénalisation des sauts de la solution approchée sur les interfaces du maillage par une

variable continue à travers les interfaces qui agit comme un multiplicateur de Lagrange. Cette méthode garantit alors au laplacien de la solution approchée d'être dans L^2 , ce qui pourrait s'avérer utile pour la construction du tenseur des contraintes de notre problème, qui s'exprime entre autres en fonction du laplacien de la polarité. Elle permet également de considérablement réduire le nombre de degrés de liberté globalement couplés par rapport aux méthodes de Galerkine discontinue standard [NPC09], et est donc plus efficace.

Amélioration de la méthode de résolution du point fixe

Comme évoqué dans la section 9.1.1, plutôt que d'utiliser la distance L^2 entre deux itérés comme critère d'arrêt pour la méthode de point fixe, nous pourrions au contraire utiliser les normes des résidus des équations, qui pourraient s'avérer plus contraignantes et donc donner des résultats plus précis.

Encore mieux, la méthode de Newton serait un meilleur choix de schéma numérique puisqu'elle permettrait une convergence quadratique, contre une convergence linéaire pour la méthode de point fixe utilisée.

Front sec

Dans l'objectif de réaliser des comparaisons plus précises avec les expériences sur bande, nous aimerais être capables de produire des calculs avec front sec. Au-delà des difficultés de modélisation que cela soulève, de tels calculs sont numériquement difficiles, d'une part à cause de la discontinuité que cela engendre, d'autre part à cause des gradients de vitesses importants induits. Nous avons déjà mis en place un schéma numérique robuste qui garantit à la densité approchée de rester positive, même en cas de forts gradients de vitesses. Nous pensons alors qu'une stratégie d'adaptation du maillage dans les zones à fort gradient de densité suffirait à mener de tels calculs.

12.2.3. Comparaisons des calculs et des expériences

Comparaison de la polarité

La polarité constitue sans doute l'enjeu le plus critique pour les comparaisons entre expériences et calculs numériques. Du point de vue expérimental, l'objectif est d'obtenir une définition quantitative mesurable de la polarité. Du point de vue de la modélisation, l'objectif est de pouvoir valider les équations d'évolution de la polarité, et ses différents couplages avec les autres champs du modèle.

Comme discuté dans la section 11.2.1, l'expérience de migration autour d'un obstacle avec ajout de blebbistatine fournit les positions des noyaux cellulaires, ce qui permet de définir une polarité expérimentale comme le vecteur reliant le centre de masse de la cellule au centre de son noyau. Si l'on reprend les mêmes données que dans la section 11.2, on peut alors comparer qualitativement les cartes des polarités expérimentale et calculée. La

figure 12.1 montre qu'il n'existe pas de points communs entre la polarité définie expérimentalement et la polarité théorique. Les différences sont d'autant plus marquées sur le bord du bas du domaine et sur la moitié de l'obstacle en aval, où la polarité y est quasiment perpendiculaire. Il est important de noter que cette comparaison qualitative ne met pas en défaut notre modèle. En effet, les mesures de polarité présentent actuellement trop d'incertitudes et sont même assez décorrélées de celles de la vitesse (figure D.1). Des efforts sont faits dans la littérature pour déterminer une définition quantitative adéquate de la polarité, dont une des plus prometteuses concerne l'appareil de Golgi [GJG05 ; Nas+20], un composant cellulaire qui, entre autres, trie et transfère des macromolécules, et modifie des protéines. Au vu des comparaisons des vitesses réalisées dans la section 11.2, on peut affirmer que notre modèle est en mesure de proposer une description vraisemblable de la polarité, à laquelle les expérimentateurs peuvent se raccrocher pour évaluer la qualité de leurs définitions expérimentales.

Comparaison de la déformation élastique en l'absence de contraintes élastiques

Malgré l'absence de contraintes élastiques dans le modèle, il est possible d'obtenir en post-traitement le tenseur de déformation élastique à partir des équations étudiées dans ce manuscrit. Soient E le module élastique, η_c la viscosité intercellulaire, $\lambda := \eta_c/E$ le temps de relaxation que l'on suppose non nul, $We := \lambda V/L \neq 0$ le nombre de Weissenberg, ϵ_e le tenseur de déformation élastique et $\sigma_e := E\epsilon_e$ le tenseur des contraintes élastiques. On suppose que ce dernier satisfait le modèle d'Oldroyd [Old50] :

$$\lambda \overset{\nabla}{\sigma}_e + \sigma_e = 2\eta_c \mathbf{D}(\nu). \quad (12.2)$$

Dans ce cas, le tenseur de déformation élastique ϵ_e satisfait l'équation

$$\overset{\nabla}{\epsilon}_e + \frac{\epsilon_e}{We} = 2\mathbf{D}(\nu). \quad (12.3)$$

Dans ce manuscrit, nous nous sommes placés dans le régime où $E, \eta_c \rightarrow 0$ à $\lambda \equiv \text{cst}$, de sorte que les contraintes élastiques soient négligeables devant les contraintes visqueuses. Mais l'équation (12.3) montre qu'il est quand même possible d'obtenir une description de la déformation élastique, autrement dit de la forme des cellules.

La déformation des cellules étant immédiatement mesurable par les expérimentateurs et caractérisant la migration du tissu, au même titre que la vitesse, il serait pertinent d'enrichir nos comparaisons en l'y incorporant.

Dissymétries haut/bas

Comme relevé dans la section 10.2.3, la dissymétrie haut/bas observée dans les calculs numériques peut s'inverser par rapport à l'axe horizontal $x_2 = 0$ avec un maillage différent, ce qui montre l'existence de deux solutions dans ce cas. Nous serions curieux de savoir

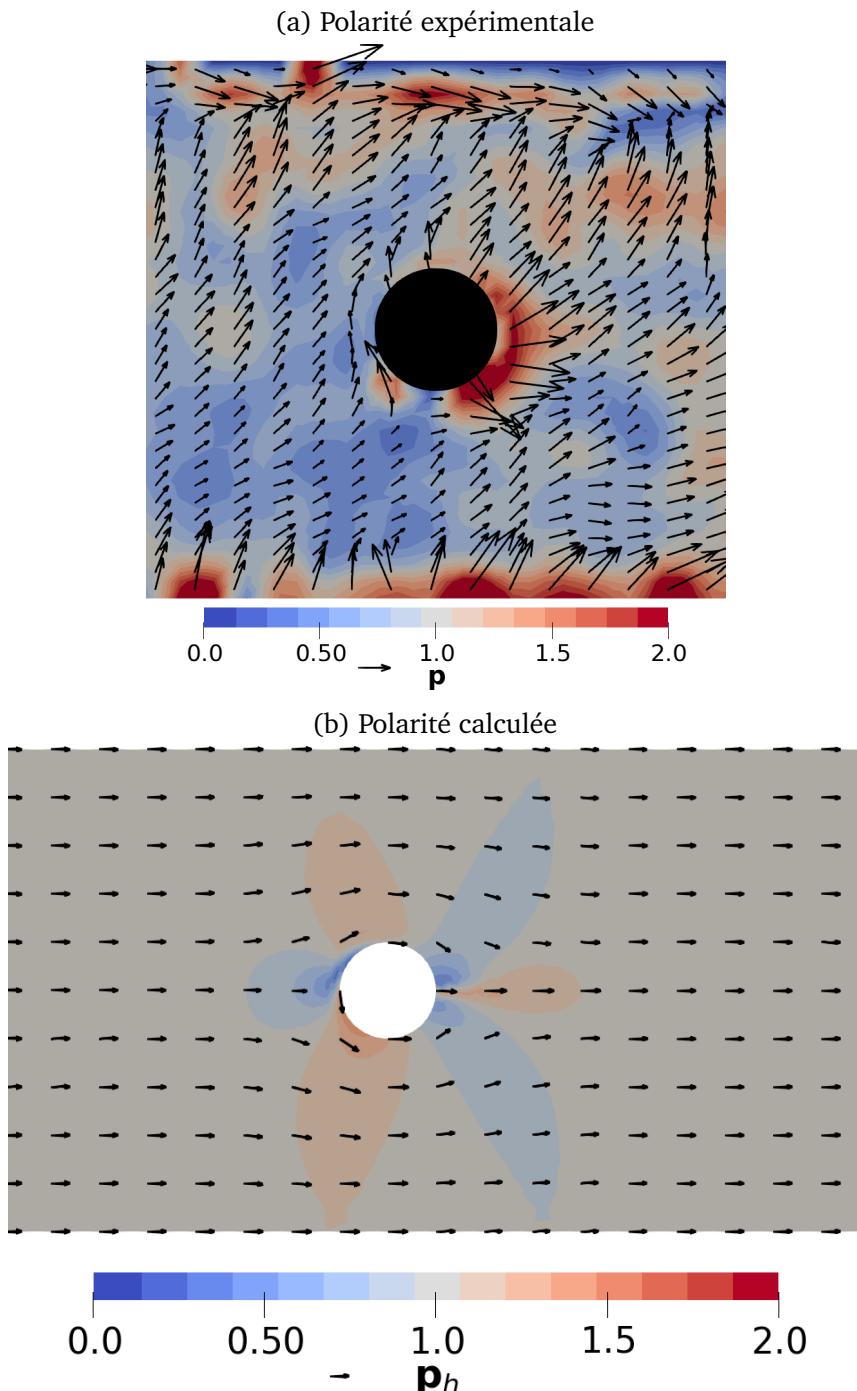


FIGURE 12.1. – Scénario 1. Comparaison des cartes des champs de polarité. Modèle résolu avec les paramètres du tableau 11.1. Expérience avec blebbistatine. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à une polarité de norme 1.

le résultat que l'on obtiendrait avec un maillage parfaitement symétrique par rapport à cet axe. La solution serait-elle symétrique ? Si oui, serait-elle la moyenne des deux solutions dissymétriques ? Plus généralement, nous aimerions analyser quantitativement et systématiquement en fonction des paramètres cette brisure de symétrie.

Drogues

Dans la section 11.2, nous avons réalisé une comparaison avec une expérience dans laquelle a été utilisée la blebbistatine, une drogue inhibant la contractilité active des cellules. De manière générale, les drogues permettent d'isoler certains facteurs de la migration cellulaire collective et ainsi mieux en comprendre leur rôle [Dur20, chapitre IV]. Nous sommes en particulier intéressés par le CK666, une drogue qui perturbe le réseau d'actine branché, qui intervient dans la formation des lamellipodes et donc dans l'exercice de la force active. Les expériences dans lesquelles celui-ci a été ajouté [Dur20, chapitre IV] constituent ainsi une base de données utile pour les comparaisons et isoler l'effet de la force active, incarnée par le coefficient T_a dans notre modèle.

Expérience sur hippodrome

En complément de l'expérience sur bande avec obstacle, DURANDE [Dur20] a réalisé une étude expérimentale du mouvement collectif des épithéliums sur un hippodrome (un substrat de forme oblongue) avec un obstacle sur chacun de ses bras (figure 12.2). Si cette expérience sur hippodrome ne présente pas de migration unidirectionnelle, utile pour la comparaison des champs physiques, elle permet néanmoins de mesurer des forces sur des substrats mous (peu rigides)¹ et de s'affranchir du front libre, qui peut établir des corrélations entre les champs qui ne sont pas nécessairement intrinsèques à l'étalement des tissus. DURANDE [Dur20, section VII.2] en a entre autres conclu que la relation déformation-densité était indépendante de la présence d'un tel front, et donc caractéristique de la migration cellulaire, et qu'elle devrait faire l'objet d'une étude approfondie. Malgré l'absence de la densité dans notre modèle incompressible, nous pourrions le comparer à cette expérience sur hippodrome, notamment pour essayer de capturer les fluctuations que l'on y observe et de retrouver des temps et des longueurs de cohérence caractéristiques de l'expérience [Dur20, section V.1.1.a].

12.3. Le mot de la fin

Les interactions entre mathématiques appliquées et biophysique ont considérablement enrichi les résultats de cette thèse. Nous espérons en retour que les outils que nous avons développés ici aideront les physiciens à mieux comprendre les mécanismes biophysiques

1. Dans le cas de la migration sur bande, les protéines d'adhésion situées sous le bloc de verre étaient systématiquement arrachées sur de tels substrats.

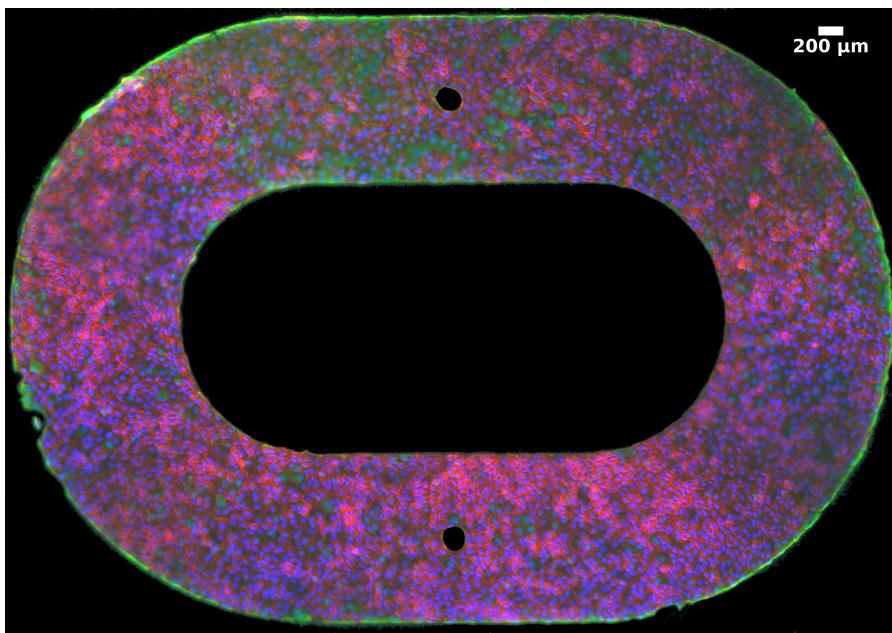


FIGURE 12.2. – Avec l'autorisation de François Graner

en œuvre dans le mouvement cellulaire collectif, et pourront bénéficier à des domaines apparentés, tels les suspensions de fibres et de particules, les gels actifs ou les mouvements de foules.

Annexes

Notations

Cette annexe introduit les principales notations mathématiques pour la mécanique des milieux continus utilisées tout au long de ce document, ainsi que la logique derrière les choix faits. Les notations adoptées s'inspirent largement de celles utilisées par BIRD, ARMSTRONG et HASSAGER dans [BAH87] (voir en particulier l'annexe A) et SARAMITO dans [Sar24]. Nous préférons plus spécifiquement la notation de Gibbs, c'est-à-dire tensorielle (ou matricielle), sans faire référence explicitement aux composantes, chose que nous pourrons être amenés à utiliser dans certains calculs de par leur praticité pour cette fonction. Le premier système de notation est généralement préféré par les mathématiciens (voir [Che+11 ; Sar24] par exemple), tandis que le second est plutôt privilégié par les physiciens (voir [Sto84 ; Eri99 ; Mar+13] par exemple), et fait grand usage de la convention de sommation de Einstein.

On note

- \mathbb{N} l'ensemble des entiers naturels ;
- \mathbb{N}^* l'ensemble des entiers naturels non nuls ;
- \mathbb{R} l'ensemble des réels ;
- \mathbb{R}^* l'ensemble des réels non nuls ;
- \mathbb{R}_+ l'ensemble des réels positifs ou nuls ;
- \mathbb{R}_- l'ensemble des réels négatifs ou nuls ;
- $\mathbb{R}^{d \times d}$ l'ensemble des matrices carrées de taille $d \times d$ à coefficients réels.

A.1. Tenseurs

A.1.1. Typographie

Dans la mesure du possible, nous avons adapté la typographie aux différents types de champs, dont les règles sont résumées dans le tableau ci-dessous.

φ, c_i, τ_{ij}	scalaire (tenseur d'ordre 0)	italique ou symbole grec
$\mathbf{c}, \boldsymbol{\tau}_i$	vecteur (tenseur d'ordre 1)	italique gras
$\boldsymbol{\tau}, \mathbf{B}, \boldsymbol{\Sigma}$	tenseur d'ordre 2	symbole grec gras ou gras majuscule
\mathbb{A}	tenseur d'ordre arbitraire	« gras du tableau »

Remarquons que l'ajout d'un indice fait systématiquement baisser l'ordre du tenseur de 1. Pour des raisons de convention, nous observons quelques exceptions à ces règles (liste non exhaustive) :

- le vecteur de vorticité $\boldsymbol{\omega}$ utilise la typographie d'un tenseur ;
- et le tenseur de Hencky \mathbf{h} utilise la typographie d'un vecteur.

A.1.2. Définitions

Soit $d \in \mathbb{N}^*$ la dimension de l'espace physique. Les composantes d'un vecteur $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^d$ dans la base canonique de \mathbb{R}^d sont les réels $(c_i)_{1 \leq i \leq d}$. Les composantes d'une matrice $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{d \times d}$ dans la base canonique de $\mathbb{R}^{d \times d}$ sont les réels $(\tau_{ij})_{1 \leq i, j \leq d}$. De manière générale, les composantes d'un tenseur d'ordre p $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{\times_{i=1}^p d}$ sont les réels $(\mathbb{A}_{i_1 \dots i_p})_{i \in \{1, \dots, d\}^p}$.

Définition A.1.1 – Scalaire

Un champ de scalaires φ est une application de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$ dans \mathbb{R} .

Définition A.1.2 – Champ de vecteurs

Un champ de vecteurs \mathbf{c} est une application de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$ dans \mathbb{R}^d , dont chaque composante c_i , $i = 1, \dots, d$, est un champ de scalaires.

Définition A.1.3 – Champ de tenseurs

Un champ de tenseurs $\boldsymbol{\tau}$ est une application de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$ dans $\mathbb{R}^{d \times d}$, dont chaque composante τ_{ij} , $i, j = 1, \dots, d$, est un champ de scalaires.

Définition A.1.4 – Champ de tenseurs (cas général)

Plus généralement, un champ de tenseurs \mathbb{A} d'ordre $p \in \mathbb{N}$ est une application de $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+$ dans $\mathbb{R}^{\times_{i=1}^p d}$, dont chaque composante $\mathbb{A}_{i_1 \dots i_p}$, $i \in \{1, \dots, d\}^p$, est un champ de scalaires.

Définition A.1.5 – Produit tensoriel

Le produit tensoriel \otimes entre deux tenseurs \mathbb{A} et \mathbb{B} d'ordre $p \in \mathbb{N}$ et $q \in \mathbb{N}$ respectivement, est le tenseur d'ordre $p + q$ $\mathbb{A} \otimes \mathbb{B}$ dont les composantes sont données par

$$[\mathbb{A} \otimes \mathbb{B}]_{i_1 \dots i_p j_1 \dots j_q} := \mathbb{A}_{i_1 \dots i_p} \mathbb{B}_{j_1 \dots j_q}. \quad (\text{A.1})$$

Le produit tensoriel $\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}'$ entre deux vecteurs \mathbf{c} et \mathbf{c}' ($p = q = 1$) est parfois appelé produit dyadique ; le résultat est une matrice de coefficients $c_i c'_j$. Par défaut, le produit vide donne 1. Le produit tensoriel est représenté sans symbole dans [BAH87], avec symbole dans [Sar24]. Comme pour le choix de notation évoqué en introduction, nous utiliserons la

plupart du temps la notation avec symbole, sauf éventuellement dans certains calculs pour compacter le nombre de symboles utilisés.

A.1.3. Base canonique

Définition A.1.6 – Symbole de Kronecker

Le symbole de Kronecker est défini pour tout $i, j \in \{1, \dots, d\}$ par

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Les vecteurs de la base canonique en dimension d sont notés $(\delta_i)_{1 \leq i \leq d}$, et leurs composantes sont alors naturellement données par le symbole de Kronecker δ_{ij} défini ci-dessus, d'où le choix de notation. Les tenseurs $(\delta_i \otimes \delta_j)_{1 \leq i, j \leq d}$ forment quant à eux la base canonique de $\mathbb{R}^{d \times d}$. De manière générale, $(\bigotimes_{k=1}^p \delta_{i_k})_{i \in \{1, \dots, d\}^p}$ forme la base canonique des tenseurs d'ordre $p \in \mathbb{N}$.

Suivant le même principe, la matrice identité est notée $\delta \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Avec cette notation, δ_i désigne à la fois la première ligne de δ et le i -ème vecteur de la base canonique, tandis que δ_{ij} désigne à la fois le coefficient à l'intersection de la ligne i et de la colonne j et le symbole de Kronecker, dont les définitions coïncident, assurant une cohérence globale dans les notations.

A.1.4. Notations pour les vecteurs

Définition A.1.7 – Orthogonal

On suppose que $d = 2$. Soit $c \in \mathbb{R}^2$. L'orthogonal de c , noté c^\perp , est défini par

$$c^\perp := \begin{pmatrix} -c_2 \\ c_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

A.1.5. Notations pour les matrices

Définition A.1.8 – Transposée

La matrice transposée de $\tau \in \mathbb{R}^{d \times d}$, notée τ^T , est la matrice dont les composantes sont données par

$$[\tau^T]_{ij} := \tau_{ji}, \quad (\text{A.4})$$

quels que soient i et j dans $\{1, \dots, d\}$.

Définition A.1.9 – Matrice symétrique

Une matrice $\tau \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est symétrique si $\tau^T = \tau$. L'ensemble des matrices symétriques est noté $\mathbb{R}_s^{d \times d}$.

Définition A.1.10 – Matrice antisymétrique

Une matrice $\tau \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est antisymétrique si $\tau^\top = -\tau$.

Définition A.1.11 – Partie symétrique

La partie symétrique d'une matrice $\tau \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est définie par

$$\mathbf{sym} \tau := \frac{1}{2}(\tau + \tau^\top). \quad (\text{A.5})$$

Définition A.1.12 – Partie antisymétrique

La partie antisymétrique d'une matrice $\tau \in \mathbb{R}^{d \times d}$ est définie par

$$\mathbf{skw} \tau := \frac{1}{2}(\tau - \tau^\top). \quad (\text{A.6})$$

Toute matrice se décompose donc de manière unique en la somme d'une matrice symétrique et d'une matrice antisymétrique, soit $\tau = \mathbf{sym} \tau + \mathbf{skw} \tau$.

A.1.6. Opérations de base sur les tenseurs

Nous définissons les produits scalaires canoniques sur \mathbb{R}^d et sur $\mathbb{R}^{d \times d}$, et le produit vectoriel sur \mathbb{R}^d uniquement à travers les éléments de la base canonique, par bilinéarité des opérateurs. Voir l'annexe A.1.7 pour plus de détails.

Produit scalaire canonique sur \mathbb{R}^d

Le produit scalaire canonique sur \mathbb{R}^d est noté \cdot et est défini par la relation

$$\delta_i \cdot \delta_j := \delta_{ij}. \quad (\text{A.7})$$

La norme associée est notée $|\cdot|$.

Produit scalaire canonique sur $\mathbb{R}^{d \times d}$

Le produit scalaire canonique sur $\mathbb{R}^{d \times d}$ est noté $:$ et est défini par la relation

$$(\delta_i \otimes \delta_j) : (\delta_k \otimes \delta_l) := (\delta_i \cdot \delta_k)(\delta_j \cdot \delta_l) = \delta_{ik}\delta_{jl}. \quad (\text{A.8})$$

La norme associée est également notée $|\cdot|$.

Remarque A.1.I – Conventions selon les pays : La définition (A.8) est la convention française, que l'on retrouve par exemple dans [Sar24]. Elle s'exprime de manière équivalente sous la forme

$$\tau : \zeta = \text{tr}(\tau \cdot \zeta^\top) = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \tau_{ij} \zeta_{ij}. \quad (\text{A.9})$$

Cependant, la convention anglo-saxonne, du moins celle dans [BAH87], impose au contraire l'égalité

$$(\delta_i \otimes \delta_j) : (\delta_k \otimes \delta_l) = (\delta_j \cdot \delta_k)(\delta_i \cdot \delta_l) = \delta_{jk}\delta_{il}. \quad (\text{A.10})$$

En conséquence,

$$\tau : \zeta = \text{tr}(\tau \cdot \zeta) = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \tau_{ij} \zeta_{ji}. \quad (\text{A.11})$$

Propriété A.1.1 – Propriétés du produit scalaire canonique sur les matrices

Soient \mathbf{A} , \mathbf{B} et \mathbf{C} trois matrices dans $\mathbb{R}^{d \times d}$. Alors, on a

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) : \mathbf{C} = (\mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^T) : \mathbf{A} \quad (\text{A.12a})$$

$$\text{et } (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) : \mathbf{C} = (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{C}) : \mathbf{B}. \quad (\text{A.12b})$$

Démonstration. On calcule

$$(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) : \mathbf{C} = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d A_{ij} B_{jk} C_{ik} = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d C_{ik} [\mathbf{B}^T]_{kj} A_{ij} = (\mathbf{C} \cdot \mathbf{B}^T) : \mathbf{A}, \quad (*.1a)$$

$$\text{et } (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) : \mathbf{C} = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d A_{ij} B_{jk} C_{ik} = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \sum_{k=1}^d [\mathbf{A}^T]_{ji} C_{ik} B_{jk} = (\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{C}) : \mathbf{B}. \quad (*.1b)$$

■

La proposition suivante montre que les ensembles des matrices symétriques et antisymétriques sont en somme directe orthogonale.

Proposition A.1.2 – Orthogonalité entre matrices symétriques et antisymétriques

Une matrice symétrique et une matrice antisymétrique dans $\mathbb{R}^{d \times d}$ sont toujours orthogonales, relativement au produit scalaire canonique $\square : \square$. Autrement dit, $\Sigma : \Omega = 0$ quelles que soient les matrices symétrique Σ et antisymétrique Ω dans $\mathbb{R}^{d \times d}$,

Démonstration. Soient Σ une matrice symétrique et Ω une matrice antisymétrique dans $\mathbb{R}^{d \times d}$. Par symétrie et antisymétrie de ces matrices,

$$\Sigma : \Omega = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \Sigma_{ij} \Omega_{ij} = - \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \Sigma_{ji} \Omega_{ji} = -\Sigma : \Omega, \quad (*.1)$$

d'où le résultat. ■

Propriété A.1.3

Soient Σ une matrice symétrique et Ω une matrice antisymétrique dans $\mathbb{R}^{d \times d}$. Pour tous vecteurs $\mathbf{c}, \mathbf{c}' \in \mathbb{R}^d$, on a

$$\mathbf{c} \cdot \Sigma \cdot \mathbf{c}' = \Sigma : (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}') = \Sigma : \text{sym}(\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}'), \quad (\text{A.13a})$$

$$\mathbf{c} \cdot \Omega \cdot \mathbf{c}' = \Omega : (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}') = \Omega : \text{skw}(\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}'). \quad (\text{A.13b})$$

Démonstration. Soient $\mathbf{c}, \mathbf{c}' \in \mathbb{R}^d$. On calcule pour toute matrice $\tau \in \mathbb{R}^{d \times d}$

$$\mathbf{c} \cdot \tau \cdot \mathbf{c}' = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d c_i \tau_{ij} c'_j = \sum_{i=1}^d \sum_{j=1}^d \tau_{ij} c_i c'_j = \tau : (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}'). \quad (\text{A.1})$$

On conclut en prenant successivement $\tau = \Sigma$ et Ω et en utilisant la proposition A.1.2. ■

Produit vectoriel sur \mathbb{R}^3

Lorsque $d = 3$, on note \times le produit vectoriel entre deux vecteurs, défini par la relation

$$\delta_i \times \delta_j := \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \delta_k, \quad (\text{A.14})$$

où ϵ_{ijk} est donné par la

Définition A.1.13 – Symbole de Levi-Civita

Le symbole de Levi-Civita, ou de permutation, ϵ_{ijk} est défini pour tout $i, j, k \in \{1, \dots, 3\}$ par

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{si } ijk = \text{permutation circulaire de } 123 \\ -1 & \text{si } ijk = \text{permutation circulaire de } 321 \\ 0 & \text{si au moins deux indices se répètent.} \end{cases} \quad (\text{A.15})$$

On note improprement ϵ l'hypermatrice résultante, qui a priori n'est pas un tenseur.

Ce symbole satisfait entre autres les propriétés [BAH87, section A.2]

$$\sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \epsilon_{ikl} \epsilon_{jkl} = 2\delta_{ij} \quad (\text{A.16a})$$

$$\text{et } \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \epsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}. \quad (\text{A.16b})$$

A.1.7. Opérations générales sur les tenseurs

Soient \mathbb{A} et \mathbb{B} d'ordre $p \in \mathbb{N}^*$ et $q \in \mathbb{N}^*$ respectivement. Ces deux tenseurs admettent la décomposition suivante dans leurs bases respectives :

$$\mathbb{A} = \sum_{i \in \{1, \dots, d\}^p} A_i \bigotimes_{k=1}^p \delta_{i_k}, \quad (\text{A.17a})$$

$$\mathbb{B} = \sum_{j \in \{1, \dots, d\}^q} B_j \bigotimes_{k=1}^q \delta_{j_k}. \quad (\text{A.17b})$$

Soit \star une opération *bilinéaire* quelconque entre deux tenseurs. Alors, on a par bilinéarité

$$\begin{aligned} \mathbb{A} \star \mathbb{B} &= \left(\sum_{i \in \{1, \dots, d\}^p} A_i \bigotimes_{k=1}^p \delta_{i_k} \right) \star \left(\sum_{j \in \{1, \dots, d\}^q} B_j \bigotimes_{k=1}^q \delta_{j_k} \right) \\ &= \sum_{i, j \in \{1, \dots, d\}^{p+q}} A_i B_j \left(\bigotimes_{k=1}^p \delta_{i_k} \right) \star \left(\bigotimes_{k=1}^q \delta_{j_k} \right). \end{aligned}$$

Ainsi, l'opération \star est entièrement déterminée par son comportement avec les tenseurs de la base canonique. C'est donc comme cela que nous allons généraliser les opérations de base introduites dans la section précédente aux tenseurs d'ordre quelconque.

Définition A.1.14 – Produit scalaire

On définit le produit scalaire \cdot par

$$\begin{aligned} \left(\bigotimes_{k=1}^p \delta_{i_k} \right) \cdot \left(\bigotimes_{k=1}^q \delta_{j_k} \right) &:= (\delta_{i_p} \cdot \delta_{j_1}) \left(\bigotimes_{k=1}^{p-1} \delta_{i_k} \right) \otimes \left(\bigotimes_{k=2}^q \delta_{j_k} \right) \\ &= \delta_{i_p j_1} \left(\bigotimes_{k=1}^{p-1} \delta_{i_k} \right) \otimes \left(\bigotimes_{k=2}^q \delta_{j_k} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Les cas $(p, q) = (2, 1)$ et $(p, q) = (2, 2)$ correspondent respectivement aux produits matrice-vecteur et matrice-matrice habituels. Le produit scalaire est aussi appelé produit tensoriel contracté.

Définition A.1.15 – Produit vectoriel

Lorsque $d = 3$, le produit vectoriel \times est défini par

$$\begin{aligned} \left(\bigotimes_{l=1}^p \delta_{i_l} \right) \times \left(\bigotimes_{l=1}^q \delta_{k_l} \right) &:= \left(\bigotimes_{l=1}^{p-1} \delta_{i_l} \right) \otimes (\delta_{i_p} \times \delta_{k_1}) \otimes \left(\bigotimes_{l=2}^q \delta_{k_l} \right) \\ &= \left(\bigotimes_{l=1}^{p-1} \delta_{i_l} \right) \otimes \left(\sum_{j=1}^3 \epsilon_{i_p k_1 j} \delta_j \right) \otimes \left(\bigotimes_{l=2}^q \delta_{k_l} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Définition A.1.16 – Produit scalaire matriciel

Lorsque $p \geq 2$ et $q \geq 2$, le produit scalaire : est défini par

$$\begin{aligned} \left(\bigotimes_{k=1}^p \delta_{i_k} \right) : \left(\bigotimes_{k=1}^q \delta_{j_k} \right) &:= \left[\left(\delta_{i_{p-1}} \otimes \delta_{i_p} \right) : \left(\delta_{j_1} \otimes \delta_{j_2} \right) \right] \left(\bigotimes_{k=1}^{p-2} \delta_{i_k} \right) \otimes \left(\bigotimes_{k=3}^q \delta_{j_k} \right) \\ &= \delta_{i_{p-1} j_1} \delta_{i_p j_2} \left(\bigotimes_{k=1}^{p-2} \delta_{i_k} \right) \otimes \left(\bigotimes_{k=3}^q \delta_{j_k} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Ce produit scalaire est aussi appelé produit tensoriel doublement contracté.

On distingue donc au total quatre opérations entre les tenseurs. L'ordre du tenseur résultant de chacune de ces opération peut être anticipé à l'aide du tableau ci-dessous :

Opération	Nom	Ordre du tenseur résultant
Rien ou \otimes	produit tensoriel ou dyadique	$p + q$
\times	produit vectoriel	$p + q - 1$
\cdot	produit tensoriel contracté	$p + q - 2$
$:$	produit tensoriel doublement contracté	$p + q - 4$

Par exemple, l'opération $\tau \times c$ donne un tenseur d'ordre $2 + 1 - 1 = 2$.

A.1.8. Convention de sommation d'Einstein

Essayons d'expliquer les composantes de la matrice $\tau \times c$, en omettant les produits \otimes comme expliqué à la fin de l'annexe A.1.2 :

$$\begin{aligned} \tau \times c &= \left(\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} \delta_i \delta_j \right) \times \left(\sum_{k=1}^3 c_k \delta_k \right) \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \tau_{ij} c_k (\delta_i \delta_j) \times \delta_k \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl} \tau_{ij} c_k \delta_i \delta_l \\ &= \sum_{i=1}^3 \sum_{l=1}^3 \left(\sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \epsilon_{jkl} \tau_{ij} c_k \right) \delta_i \delta_l. \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Remarquons qu'il y a ici beaucoup de sommes. La convention de sommation d'Einstein permet de réduire drastiquement le nombre de symboles utilisés. Elle consiste à sommer implicitement sur les indices répétés et à omettre tous les vecteurs de la base canonique. Les indices non répétés font donc référence aux vecteurs de la base. L'ordre alphabétique dans lequel ces indices apparaissent définit l'ordre dans lequel les vecteurs de la base doivent

apparaître. En effet, le produit tensoriel n'est pas commutatif: $\delta_i \otimes \delta_j \neq \delta_j \otimes \delta_i$; il faut donc pouvoir lever l'ambiguïté. Ainsi, (A.21) devient

$$\tau \times c = \epsilon_{jkl} \tau_{ij} c_k. \quad (\text{A.22})$$

Les indices j et k sont répétés: il y a deux sommes implicites sur ces indices. Les indices i et l ne sont pas répétés: ils correspondent aux indices des composantes de la matrice résultante de l'opération. Comme i apparaît avant l dans l'alphabet, il est sous-entendu que le produit entre les vecteurs de base s'écrit $\delta_i \otimes \delta_l$, et pas l'inverse.

A.1.9. Représentation vectorielle d'une matrice antisymétrique 3×3

Dans cette section, on suppose que $d = 3$.

Commençons par introduire une nouvelle notation non usuelle, valable uniquement entre tenseurs d'ordre au moins 2.

Définition A.1.17 – Produit scalaire-vectoriel

Le produit scalaire-vectoriel entre deux matrices, noté \times , est défini par la relation

$$(\delta_i \otimes \delta_j) \times (\delta_k \otimes \delta_l) := (\delta_i \cdot \delta_k)(\delta_j \times \delta_l) = \delta_{ik} \epsilon_{jlm}. \quad (\text{A.23})$$

Autrement dit, $\tau \times \zeta$ est le vecteur

$$\tau \times \zeta = \begin{pmatrix} \tau_{i2}\zeta_{i3} - \tau_{i3}\zeta_{i2} \\ \tau_{i3}\zeta_{i1} - \tau_{i1}\zeta_{i3} \\ \tau_{i1}\zeta_{i2} - \tau_{i2}\zeta_{i1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.24})$$

On propose la généralisation suivante.

Définition A.1.18 – Produit scalaire-vectoriel général

Lorsque $p \geq 2$ et $q \geq 2$, le produit scalaire-vectoriel \times est défini par

$$\begin{aligned} \left(\bigotimes_{l=1}^p \delta_{i_l} \right) \times \left(\bigotimes_{l=1}^q \delta_{k_l} \right) &:= \left(\bigotimes_{l=1}^{p-2} \delta_{i_l} \right) \otimes \left[(\delta_{i_{p-1}} \otimes \delta_{i_p}) \times (\delta_{k_1} \otimes \delta_{k_2}) \right] \otimes \left(\bigotimes_{l=3}^q \delta_{k_l} \right) \\ &= \delta_{i_{p-1}k_1} \epsilon_{i_p k_2 j} \left(\bigotimes_{l=1}^{p-2} \delta_{i_l} \right) \otimes \delta_j \otimes \left(\bigotimes_{l=3}^q \delta_{k_l} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Ainsi, cet opération fait baisser l'ordre total de trois. Plus précisément, $\mathbb{A} \times \mathbb{B}$ est un tenseur d'ordre $p + q - 3$.

Propriété A.1.4 – Propriétés sur le produit scalaire-vectoriel

Soient $c, c' \in \mathbb{R}^3$, $\tau, \zeta \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ et $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{\times_{i=1}^p 3}$, où $p \geq 2$ est un entier. Les propriétés

suivantes sont vérifiées.

$$\delta \times \tau = \epsilon : \tau = \begin{pmatrix} \tau_{23} - \tau_{32} \\ \tau_{31} - \tau_{13} \\ \tau_{12} - \tau_{21} \end{pmatrix} \quad (\text{A.26a})$$

$$\delta \times A = \epsilon : A \quad (\text{A.26b})$$

$$\tau \times \delta = \delta \times \tau^T \quad (\text{A.26c})$$

$$\delta \times \tau = -\delta \times \tau^T \quad (\text{A.26d})$$

$$\tau \times \zeta = -\zeta \times \tau \quad (\text{antisymétrie}) \quad (\text{A.26e})$$

$$\delta \times (c \otimes c') = c \times c' \quad (\text{A.26f})$$

Démonstration.

Première identité. Par définition,

$$\begin{aligned} \delta \times \tau &= \delta_{ij} \tau_{kl} (\delta_i \otimes \delta_j) \times (\delta_k \otimes \delta_l) = \delta_{ij} \tau_{kl} \delta_{ik} \epsilon_{jlm} \\ &= \tau_{kl} \epsilon_{klm} = \epsilon_{mkl} \tau_{kl} \\ &= \epsilon : \tau. \end{aligned} \quad (*.1)$$

La seconde égalité s'obtient sans difficulté à l'aide de (A.24).

Deuxième identité. On décompose A dans la base canonique comme suit :

$$A = A_{k_1 \dots k_p} \delta_{k_1} \otimes \delta_{k_2} \otimes \bigotimes_{l=3}^p \delta_{k_l}. \quad (*.2)$$

En remarquant que

$$\delta \times A = A_{k_1 \dots k_p} [\delta \times (\delta_{k_1} \otimes \delta_{k_2})] \otimes \bigotimes_{l=3}^p \delta_{k_l}, \quad (*.3)$$

on conclut avec la première identité en prenant $\tau = \delta_{k_1} \otimes \delta_{k_2}$.

Troisième identité. On calcule

$$\begin{aligned} \tau \times \delta &= \tau_{ij} \delta_{kl} (\delta_i \otimes \delta_j) \times (\delta_k \otimes \delta_l) = \tau_{ij} \delta_{kl} \delta_{ik} \epsilon_{jlm} \\ &= \tau_{ij} \epsilon_{jim} = \epsilon_{mji} [\tau^T]_{ji} \\ &= \epsilon : \tau^T = \delta \times \tau^T. \end{aligned} \quad (*.4)$$

Quatrième identité. Elle s'obtient directement de la première.

Cinquième identité. On calcule

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\zeta} &= \tau_{ij} \zeta_{kl} (\delta_i \otimes \delta_j) \times (\delta_k \otimes \delta_l) = \tau_{ij} \zeta_{kl} \delta_{ik} \epsilon_{jlm} \\
&= \tau_{ij} \zeta_{il} \epsilon_{jlm} = -\zeta_{il} \tau_{ij} \epsilon_{ljm} \\
&= -\boldsymbol{\zeta} \times \boldsymbol{\tau}.
\end{aligned} \tag{*5)$$

Sixième identité. On calcule à l'aide de la deuxième identité et par définition du produit vectoriel

$$\boldsymbol{\delta} \times (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}') = \boldsymbol{\epsilon} : (\mathbf{c} \otimes \mathbf{c}') = \epsilon_{ijk} c_j c'_k = \mathbf{c} \times \mathbf{c}'. \tag{*6)$$

■

Corollaire A.1.5

Une matrice $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ est symétrique si, et seulement si, $\boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau} = 0$.

Démonstration. C'est une conséquence directe de la première propriété. ■

Propriété A.1.6 – Propriétés sur le produit vectoriel

(i) Pour tout tenseur d'ordre p \mathbb{A} , on a

$$\boldsymbol{\delta} \times \mathbb{A} = -\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbb{A}. \tag{A.27}$$

(ii) Pour tout vecteur $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$, on a

$$\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c} = \mathbf{c} \times \boldsymbol{\delta}. \tag{A.28}$$

Démonstration.

(i) D'après la définition A.1.15,

$$\boldsymbol{\delta} \times \mathbb{A} = \epsilon_{jk_1 l} \delta_{ij} \mathbb{A}_{k_1 \dots k_p} = \epsilon_{ik_1 l} \mathbb{A}_{k_1 \dots k_p} = -\epsilon_{il k_1} \mathbb{A}_{k_1 \dots k_p} = -\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbb{A}. \tag{*1)$$

(ii) D'après la définition A.1.15,

$$\mathbf{c} \times \boldsymbol{\delta} = \epsilon_{ijk} c_i \delta_{jl} = \epsilon_{ilk} c_i = -\epsilon_{kli} c_i = -\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{c} = \boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}, \tag{*2)$$

d'après la propriété (i). ■

Proposition A.1.7 – Représentation vectorielle d'une matrice antisymétrique

Pour tout vecteur $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^3$ et toute matrice $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$,

$$\mathbf{c} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau} \iff \text{skw } \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}. \quad (\text{A.29})$$

Autrement dit, pour toute matrice antisymétrique $\boldsymbol{\tau}$, il existe un unique vecteur $\mathbf{c} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau}$ tel que $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}$.

Démonstration. On raisonne par double implication.

(\Rightarrow) D'après la propriété A.1.6 et par hypothèse,

$$\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c} = -\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{c} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot (\boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau}). \quad (\text{*.1})$$

Ensuite, d'après la première identité de la propriété A.1.4,

$$\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\tau}. \quad (\text{*.2})$$

À l'aide de la relation (A.16b), on obtient alors

$$\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c} = \frac{1}{2} (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \tau_{lm} = \frac{1}{2} (\tau_{ij} - \tau_{ji}) = \text{skw } \boldsymbol{\tau}. \quad (\text{*.3})$$

(\Leftarrow) D'après le corollaire A.1.5 et par hypothèse,

$$-\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \text{skw } \boldsymbol{\tau} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times (\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}) \quad (\text{*.4})$$

Ensuite, d'après la première identité de la propriété A.1.4 et la relation (i) dans la propriété A.1.6,

$$-\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{c}. \quad (\text{*.5})$$

On conclut avec la relation (A.16a), en remarquant qu'elle peut s'écrire $\boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\epsilon} = 2\boldsymbol{\delta}$.

Propriété A.1.8 – Produit scalaire entre deux matrices antisymétriques

Soient $\boldsymbol{\tau}$ et $\boldsymbol{\zeta}$ deux matrices antisymétriques de $\mathbb{R}^{3 \times 3}$. Si $\mathbf{c} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\tau}$ et $\mathbf{c}' = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} \times \boldsymbol{\zeta}$, alors

$$\boldsymbol{\tau} : \boldsymbol{\zeta} = 2\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}'. \quad (\text{A.30})$$

Démonstration. D'après la proposition A.1.7, on a $\tau = \delta \times c$ et $\zeta = \delta \times c'$. Dès lors, en vertu de la propriété A.1.6 (première identité) et de l'équation (A.16a),

$$\tau : \zeta = (\delta \times c) : (\delta \times c') = (\epsilon \cdot c) : (\epsilon \cdot c') = \epsilon_{ijk} c_k \epsilon_{ijl} c'_l = 2\delta_{kl} c_k c'_l = 2c \cdot c'. \quad (*.1)$$

■

A.2. Opérateurs différentiels

A.2.1. Définitions

Soit \mathbb{A} un champ de tenseurs d'ordre $p \in \mathbb{N}$.

Définition A.2.1 – Gradient

Le gradient de \mathbb{A} est défini à partir de l'opérateur nabla ∇ par

$$\nabla \mathbb{A} := \left(\frac{\partial A_{i_1 \dots i_p}}{\partial x_j} \right)_{\substack{i \in \{1, \dots, d\}^p \\ j \in \{1, \dots, d\}}}. \quad (\text{A.31})$$

Remarque A.2.1 – Conventions selon les pays: La définition (A.31) est la convention française, que l'on retrouve par exemple dans [Sar24]. Elle s'exprime en particulier pour un champ de vecteurs sous la forme

$$\nabla c = \left(\frac{\partial c_i}{\partial x_j} \right)_{\substack{i \in \{1, \dots, d\} \\ j \in \{1, \dots, d\}}}. \quad (\text{A.32})$$

Cependant, la convention anglo-saxonne, du moins celle dans [BAH87], correspond à la transposée de cette quantité :

$$\nabla c = \left(\frac{\partial c_j}{\partial x_i} \right)_{\substack{i \in \{1, \dots, d\} \\ j \in \{1, \dots, d\}}}. \quad (\text{A.33})$$

En généralisant,

$$\nabla \mathbb{A} := \left(\frac{\partial A_{j_1 \dots j_p}}{\partial x_i} \right)_{\substack{i \in \{1, \dots, d\} \\ j \in \{1, \dots, d\}^p}}. \quad (\text{A.34})$$

Ce second choix est cohérent avec les notations introduites dans la section précédente. En effet, on peut écrire formellement avec la convention d'Einstein

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x_i} \delta_i, \quad (\text{A.35})$$

qui est alors vu comme un vecteur. Ainsi, la notation $\nabla \mathbb{A}$ peut être comprise comme le produit tensoriel entre ∇ et \mathbb{A} , soit $\nabla \mathbb{A} = \nabla \otimes \mathbb{A}$. La convention française est moins cohérente de ce point de vue : cette dernière relation dans ce cadre s'exprime formellement $\nabla \mathbb{A} = \mathbb{A} \otimes \nabla$. Nous adoptons malgré tout ce choix, par convention.

Remarque A.2.II – Opérateur $(\mathbf{c} \cdot \nabla)$: La définition de l'opérateur d'advection $(\mathbf{c} \cdot \nabla)$ est explicite :

$$(\mathbf{c} \cdot \nabla) := c_j \frac{\partial}{\partial x_j}. \quad (\text{A.36})$$

Avec la convention française, il est toujours nécessaire d'écrire les parenthèses autour de l'opérateur, puisque de manière générale,

$$(\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbb{A} = \nabla \mathbb{A} \cdot \mathbf{c} \neq \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbb{A}. \quad (\text{A.37})$$

En effet, le premier s'écrit

$$(\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbb{A} = \left((\mathbf{c} \cdot \nabla) A_{j_1 \dots j_p} \right)_{j \in \{1, \dots, d\}^p}, \quad (\text{A.38a})$$

et le second

$$\mathbf{c} \cdot \nabla \mathbb{A} = \left(c_i \frac{\partial A_{i j_1 \dots j_{p-1}}}{\partial x_k} \right)_{\substack{j \in \{1, \dots, d\}^{p-1} \\ k \in \{1, \dots, d\}}}. \quad (\text{A.38b})$$

Avec la convention anglo-saxonne, cette ambiguïté n'existe pas : les deux quantités coïncident.

Définition A.2.2 – Parties symétrique et antisymétrique du gradient

Les parties symétrique et antisymétrique du gradient d'un champ de vecteurs \mathbf{c} sont respectivement notés $\mathbf{D}(\mathbf{c})$ et $\mathbf{W}(\mathbf{c})$, et définis par

$$\mathbf{D}(\mathbf{c}) := \mathbf{sym}(\nabla \mathbf{c}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{c} + \nabla \mathbf{c}^\top), \quad (\text{A.39a})$$

$$\mathbf{W}(\mathbf{c}) := \mathbf{skw}(\nabla \mathbf{c}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{c} - \nabla \mathbf{c}^\top), \quad (\text{A.39b})$$

où les opérateurs **sym** et **skw** sont respectivement définis par (A.5) et (A.6).

Définition A.2.3 – Divergence

La divergence **div** de \mathbb{A} est définie par

$$\text{div } \mathbb{A} := \left(\frac{\partial A_{i_1 \dots i_{p-1} j}}{\partial x_j} \right)_{i \in \{1, \dots, d\}^{p-1}}. \quad (\text{A.40})$$

La divergence $\nabla \cdot \mathbb{A}$ de \mathbb{A} est définie par

$$\nabla \cdot \mathbb{A} := \left(\frac{\partial A_{j i_1 \dots i_{p-1}}}{\partial x_j} \right)_{i \in \{1, \dots, d\}^{p-1}}. \quad (\text{A.41})$$

Remarque A.2.III – Conventions selon les pays : La définition (A.40) est la convention française, (A.41) la convention anglo-saxonne. Contrairement au gradient, nous avons décidé d'adopter les deux notations. On aurait pu faire de même pour le gradient, et désigner celui de la convention française par **grad**.

La notation anglo-saxonne, comme pour le gradient, est cohérente avec les notations introduites dans la section précédente. En effet, l'opération $\nabla \cdot \mathbb{A}$ peut vraiment être comprise comme le produit scalaire entre ∇ et \mathbb{A} .

Appliquées à un tenseur d'ordre 2, les deux divergences sont liées par la relation

$$\nabla \cdot \mathbf{\tau} = \operatorname{div}(\mathbf{\tau}^\top). \quad (\text{A.42})$$

Appliquées à un vecteur, elles coïncident.

Définition A.2.4 – Laplacien

Le laplacien Δ de \mathbb{A} est défini par

$$\Delta \mathbb{A} := \operatorname{div}(\nabla \mathbb{A}) = \left(\sum_{j=1}^d \frac{\partial^2 A_{i_1 \dots i_p}}{\partial x_j^2} \right)_{i \in \{1, \dots, d\}^p}. \quad (\text{A.43})$$

Définition A.2.5 – Rotationnel

Lorsque $d = 3$, le rotationnel de \mathbb{A} est défini par

$$\nabla \times \mathbb{A} := \left(\epsilon_{ijk} \frac{\partial A_{kl_1 \dots l_{p-1}}}{\partial x_j} \right)_{\substack{i \in \{1, \dots, 3\} \\ l \in \{1, \dots, 3\}^{p-1}}}. \quad (\text{A.44})$$

Lorsque $d = 2$, les rotationnels d'un champ de scalaires φ et d'un champ de vecteurs \mathbf{c} sont respectivement définis par [Sar20, p. 2.1.5] :

$$\operatorname{curl} \varphi := \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} \\ -\frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.45a})$$

$$\operatorname{curl} \mathbf{c} := \frac{\partial c_2}{\partial x_1} - \frac{\partial c_1}{\partial x_2}. \quad (\text{A.45b})$$

A.2.2. Convention d'Einstein

Dans la continuité de la annexe A.1.8, le symbole $\frac{\partial}{\partial x_j}$ pourra être remplacé par un indice prenant la forme d'une virgule suivie d'un j . Ainsi, l'équation (A.31) devient

$$\nabla \mathbb{A} := A_{i_1 \dots i_p, j}. \quad (\text{A.46})$$

On peut généraliser cette approche en itérant le processus : tout indice situé après une virgule symbolise une dérivation par rapport à la coordonnée correspondante.

A.2.3. Propriétés

Propriété A.2.1 – Lien entre rotationnel et produit scalaire-vectoriel

Pour tout champ de vecteurs \mathbf{c} , la propriété suivante est vérifiée :

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}) = \boldsymbol{\delta} \cdot \nabla \mathbf{c} = -\boldsymbol{\delta} \cdot \nabla \mathbf{c}^T = \boldsymbol{\delta} : \mathbf{W}(\mathbf{c}) = -\nabla \times \mathbf{c}. \quad (\text{A.47})$$

Démonstration. On obtient la première égalité via le calcul

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}) = -\operatorname{div}(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{c}) = -\epsilon_{ijk} c_{k,j} = \epsilon_{ikj} c_{k,j} = \boldsymbol{\epsilon} : \nabla \mathbf{c} = \boldsymbol{\delta} : \nabla \mathbf{c}, \quad (\text{*.1})$$

où l'on a utilisé les identités (A.26a) et (A.27). La deuxième égalité s'obtient alors à partir de (A.26d) et la troisième à partir du corollaire A.1.5. Enfin, la dernière s'obtient en reprenant le calcul (*.1), où on remarque que

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}) = -\epsilon_{ijk} c_{k,j} = -\nabla \times \mathbf{c}, \quad (\text{*.2})$$

par définition du rotationnel. ■

Proposition A.2.2

Soient \mathbf{c} un champ de vecteurs et $\boldsymbol{\tau}$ un champ de tenseurs. On note $\mathbf{c}' = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{c}$. Alors

$$(\boldsymbol{\delta} : \boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{c}' = -\boldsymbol{\tau} : \mathbf{W}(\mathbf{c}) = -\operatorname{skw} \boldsymbol{\tau} : \mathbf{W}(\mathbf{c}). \quad (\text{A.48})$$

Démonstration. D'après la propriété A.2.1, on a

$$\mathbf{c}' = \frac{1}{2} \nabla \times \mathbf{c} = -\frac{1}{2} \boldsymbol{\delta} : \mathbf{W}(\mathbf{c}). \quad (\text{*.1})$$

Ainsi, d'après la proposition A.1.7,

$$\mathbf{W}(\mathbf{c}) = \boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}'. \quad (\text{*.2})$$

À l'aide des propriétés (A.26a) et (A.27), on calcule alors

$$(\boldsymbol{\delta} : \boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{c}' = (\boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{c}' = \epsilon_{ijk} \tau_{jk} c'_{\ i} = \tau_{jk} \epsilon_{jkl} c'_{\ i} = \boldsymbol{\tau} : (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{c}') = -\boldsymbol{\tau} : (\boldsymbol{\delta} \times \mathbf{c}') = -\boldsymbol{\tau} : \mathbf{W}(\mathbf{c}). \quad (\text{*.3})$$

La dernière égalité s'obtient par antisymétrique de $\mathbf{W}(\mathbf{c})$, d'après la proposition A.1.2. ■

Proposition A.2.3

Quels que soient les champs de vecteurs \mathbf{c} et \mathbf{c}' , on a

$$\mathbf{W}(\mathbf{c}) : \mathbf{W}(\mathbf{c}') = \frac{1}{2}(\nabla \times \mathbf{c}) \cdot (\nabla \times \mathbf{c}'). \quad (\text{A.49})$$

Démonstration. On note $\mathbf{c}'' = \frac{1}{2}\nabla \times \mathbf{c}$ et $\mathbf{c}''' = \frac{1}{2}\nabla \times \mathbf{c}'$. D'après la propriété A.2.1, on a alors

$$\mathbf{c}'' = -\frac{1}{2}\delta \times \mathbf{W}(\mathbf{c}) \quad \text{et} \quad \mathbf{c}''' = -\frac{1}{2}\delta \times \mathbf{W}(\mathbf{c}'). \quad (\text{*.1})$$

On conclut avec la propriété A.1.8. ■

Propriété A.2.4 – Divergence d'un champ de tenseurs antisymétriques

Quel que soit le champ de tenseurs antisymétriques $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, on a

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}^T) = \operatorname{curl} \varphi, \quad (\text{A.50})$$

où $\varphi := \tau_{21}$.

Démonstration. Par antisymétrie de $\boldsymbol{\tau}$ et définition de φ , on a

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} 0 & -\varphi \\ \varphi & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{*.1})$$

Ainsi, par définition de la divergence et du rotationnel bidimensionnel,

$$\operatorname{div}(\boldsymbol{\tau}^T) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \end{pmatrix} = \operatorname{curl} \varphi. \quad (\text{*.2})$$

Proposition A.2.5 – Intégration par parties avec un rotationnel

Pour tous champs de scalaires φ et de vecteurs \mathbf{c} définis sur Ω et suffisamment réguliers, on a la formule d'intégration par parties

$$\int_{\Omega} \mathbf{c} \cdot \operatorname{curl} \varphi \, dx = \int_{\Omega} \varphi \operatorname{curl} \mathbf{c} \, dx + \int_{\partial\Omega} \varphi \mathbf{c}^\perp \cdot \mathbf{n} \, ds. \quad (\text{A.51})$$

Démonstration. Par définition du rotationnel bidimensionnel et par intégration par parties, on calcule

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \mathbf{c} \cdot \operatorname{curl} \varphi \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} c_1 \frac{\partial \varphi}{\partial x_2} - c_2 \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} \, d\mathbf{x} \\
 &= \int_{\Omega} \varphi \left(\frac{\partial c_2}{\partial x_1} - \frac{\partial c_1}{\partial x_2} \right) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \varphi (c_1 n_2 - c_2 n_1) \, ds \\
 &= \int_{\Omega} \varphi \operatorname{curl} \mathbf{c} \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \varphi \mathbf{c}^\perp \cdot \mathbf{n} \, ds. \tag{*1}
 \end{aligned}$$

■

Outils mathématiques

B.1. Quelques inégalités connues

Nous rappelons dans cette section quelques inégalités connues, notamment utiles pour la détermination des estimations d'énergie menées dans le chapitre 6.

Proposition B.1.1 – Inégalité de Cauchy-Schwarz

Soit E un espace préhilbertien muni du produit scalaire $(\cdot | \cdot)$. On note $\|\cdot\|$ la norme associée. Alors pour tous vecteurs x et y de E , on a

$$|(x | y)| \leq \|x\| \|y\|, \quad (\text{B.1})$$

avec égalité si, et seulement si, x et y sont colinéaires.

Démonstration. Voir [Eva98, annexe B.2, i.].

Proposition B.1.2 – Inégalité de Young

Soit ς un réel strictement positif. Alors pour tous réels a et b , on a

$$ab \leq \frac{a^2}{2\varsigma} + \frac{\varsigma b^2}{2}. \quad (\text{B.2})$$

Démonstration. Il suffit de remarquer que d'une part, $(a/\sqrt{\varsigma} - \sqrt{\varsigma}b)^2 \geq 0$ et que d'autre part,

$$\left(\frac{a}{\sqrt{\varsigma}} - \sqrt{\varsigma}b \right)^2 = \frac{a^2}{\varsigma} + \varsigma b^2 - 2ab. \quad (*.1)$$

Remarque B.1.I: L'inégalité de Young (cf. [PE11, p. 64]) est aussi parfois appelée inégalité de Cauchy (cf. [Eva98, annexe B.2, a., b., c., d.]). La version donnée ici en est un cas

particulier.

Lemme B.1.3 – Lemme de Gronwall

Soient I un intervalle de \mathbb{R} , $t_0 \in I$ et E une fonction absolument continue sur I , c'est-à-dire qu'il existe une fonction $e \in L^1(I)$ telle que pour tout $t \in I$,

$$E(t) - E(t_0) = \int_{t_0}^t e(s) ds. \quad (B.3)$$

Si E satisfait pour presque tout $t \in I$ avec $t \geq t_0$, l'inégalité différentielle

$$E'(t) \leq \lambda(t)E(t) + f(t), \quad (B.4)$$

alors pour tout $t \in I$ avec $t \geq t_0$,

$$E(t) \leq E_0 \exp\left(\int_{t_0}^t \lambda(s) ds\right) + \int_{t_0}^t f(s) \exp\left(\int_s^t \lambda(\tau) d\tau\right) ds, \quad (B.5)$$

où $E_0 := E(t_0)$ et $\lambda, f \in L^1(I)$.

Remarque B.1.II : Ce lemme généralise celui donné dans [Eva98, annexe B.2, j.] en relaxant la contrainte de positivité sur les fonctions λ et f .

Démonstration. On pose $g(s) := E(s) \exp(-\int_{t_0}^s \lambda(\tau) d\tau)$. Sa dérivée vérifie

$$g'(s) = \exp\left(-\int_{t_0}^s \lambda(\tau) d\tau\right) (E'(s) - \lambda(s)E(s)) \leq f(s) \exp\left(-\int_{t_0}^s \lambda(\tau) d\tau\right) \quad (*.1)$$

par hypothèse (B.4). On intègre alors entre t_0 et t :

$$g(t) - g(t_0) \leq \int_{t_0}^t f(s) \exp\left(-\int_{t_0}^s \lambda(\tau) d\tau\right) ds.$$

On conclut en remarquant que $g(t_0) = E(t_0) = E_0$ et par relation de Chasles. ■

Théorème B.1.4 – Inégalité de Poincaré

Soit Ω un domaine ouvert borné de \mathbb{R}^d . Alors il existe une constante positive C_Ω , dépendant uniquement de Ω , telle que pour toute fonction $\chi \in H^1(\Omega)$ dont la valeur est fixée sur une partie de mesure non nulle de la frontière,

$$\|\chi\|_2 \leq C_\Omega \|\nabla \chi\|_2. \quad (B.6)$$

Démonstration. Voir [Bré83, corollaire IX.19] ou [Eva98, section 5.8.1].

Théorème B.1.5 – Théorème de la trace

Soit Ω un domaine ouvert de \mathbb{R}^d suffisamment régulier. Alors il existe une constante positive K_Ω , dépendant uniquement de Ω , telle que pour toute fonction $\chi \in H^1(\Omega)$,

$$\left(\int_{\partial\Omega} \chi^2 ds \right)^{1/2} \leq K_\Omega \sqrt{\|\chi\|_2^2 + \|\nabla\chi\|_2^2}. \quad (\text{B.7})$$

Démonstration. Voir [Eva98, théorème 1, section 5.5].

B.2. Outils pour les formulations variationnelles

Les définitions et le théorème, avec sa démonstration, suivants peuvent être retrouvés dans le chapitre 1 de [PE11] ou dans la section V.3 de [Bré83].

Dans cette section, on note H un espace de Hilbert, c'est-à-dire un espace vectoriel complet muni d'un produit scalaire, que l'on note $(\cdot | \cdot)$. On note $\|\cdot\|$ la norme associée.

Définition B.2.1 – Forme linéaire

Une forme linéaire l est une application linéaire définie dans H et à valeurs dans \mathbb{R} , c'est-à-dire

$$\forall u, v \in H, \forall \lambda \in \mathbb{R}, l(u + \lambda v) = l(u) + \lambda l(v). \quad (\text{B.8})$$

Définition B.2.2 – Forme bilinéaire

L'application $a: H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ est une forme bilinéaire si elle est linéaire par rapport à chacune de ses variables.

Définition B.2.3 – Forme bilinéaire symétrique

La forme bilinéaire $a: H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ est symétrique si pour tout couple $(u, v) \in H^2$, $a(v, u) = a(u, v)$.

Définition B.2.4 – Forme bilinéaire continue

La forme bilinéaire $a: H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ est continue s'il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout couple $(u, v) \in H^2$, $|a(u, v)| \leq C\|u\|\|v\|$.

Définition B.2.5 – Forme bilinéaire coercive

La forme bilinéaire $a: H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ est coercive s'il existe une constante $\alpha > 0$ telle que pour tout $u \in H$, $a(u, u) \geq \alpha\|u\|^2$.

Théorème B.2.1 – Lax-Milgram

Soit l une forme linéaire dans H . Si a est une forme bilinéaire continue et coercive définie dans H^2 , alors le problème

$$| \text{Trouver } u \in H \text{ tel que } a(u, v) = l(v), \forall v \in H. \quad (\text{B.9})$$

admet une unique solution $u \in H$.

Démonstration. Voir [Bré83, corollaire V.8], [Eva98, théorème 1, section 6.2.1] ou [PE11, lemme 1.4]. ■

B.3. Propriétés sur les fonctionnelles

B.3.1. Rappel sur les fonctionnelles

Dans cette section, on note X un espace vectoriel normé dont les éléments, notés φ , sont des fonctions définies dans Ω , un ouvert de \mathbb{R}^d , où $d \in \mathbb{N}^*$. On munit X de la norme $\|\cdot\|$.

Définition B.3.1 – Fonctionnelle

On appelle fonctionnelle toute application de X dans \mathbb{R} .

Définition B.3.2 – Dérivée de Gâteaux

On dit qu'une fonctionnelle \mathcal{E} admet une dérivée en $\varphi \in X$ dans la direction $\chi \in X$ si la limite

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\mathcal{E}(\varphi + h\chi) - \mathcal{E}(\varphi)}{h} \quad (\text{B.10})$$

existe et est finie. On la note $D_\chi \mathcal{E}(\varphi)$ le cas échéant.

On dit que \mathcal{E} est dérivable au sens de Gâteaux – ou encore Gâteaux-dérivable – en φ si $D_\chi \mathcal{E}(\varphi)$ existe pour tout $\chi \in X$ et si l'application $D\mathcal{E}(\varphi) : \chi \rightarrow D_\chi \mathcal{E}(\varphi)$ est linéaire et continue.

Définition B.3.3 – Différentielle au sens de Fréchet

On dit qu'une fonctionnelle \mathcal{E} est différentiable en $\varphi \in X$ s'il existe une forme linéaire continue $\mathcal{L} : X \rightarrow \mathbb{R}$ telle que

$$\mathcal{E}(\varphi + \chi) = \mathcal{E}(\varphi) + \langle \mathcal{L}, \chi \rangle + o(\|\chi\|), \quad \forall \chi \in X, \quad (\text{B.11})$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le crochet de dualité, une notation qui signifie $\mathcal{L}(\chi)$. La forme linéaire \mathcal{L} est unique et est appelée différentielle de \mathcal{E} en φ . On la note $\mathcal{L} = \mathcal{E}'(\varphi)$. Dans les cas où la fonctionnelle \mathcal{E} dépend de plusieurs variables, on notera plutôt

$$\mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}.$$

On trouve aussi parfois la notation

$$\mathcal{L} = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta \varphi},$$

que nous n'utiliserons pas.

Proposition B.3.1 – Lien entre différentiabilité au sens de Fréchet et dérivée de Gâteaux

Si la fonctionnelle \mathcal{E} est différentiable au sens de Fréchet en $\varphi \in X$, alors elle est aussi Gâteaux-dérivable et $\mathcal{E}'(\varphi) = D\mathcal{E}(\varphi)$.

Remarque B.3.1: Cela signifie que si une fonctionnelle \mathcal{E} est différentiable (au sens de Fréchet), on peut calculer sa différentielle à partir de sa dérivée de Gâteaux.

Théorème B.3.2 – Formule de dérivation des fonctions composées

Soient R et X deux espaces vectoriels normés, $I \subset R$ et $Y \subset X$ deux ouverts de R et de X respectivement, et $t \in I$. Soient encore $\varphi : I \rightarrow Y$ une application différentiable en t et $\mathcal{E} : Y \rightarrow \mathbb{R}$ une application différentiable en $\varphi(t)$. Alors $\mathcal{E} \circ \varphi$ est différentiable en t et

$$(\mathcal{E} \circ \varphi)'(t) = \langle \mathcal{E}'(\varphi(t)), \varphi'(t) \rangle. \quad (\text{B.12})$$

Théorème B.3.3 – de représentation de Riesz

Soient H un espace de Hilbert muni du produit scalaire $(\cdot | \cdot)$ et \mathcal{L} une forme linéaire continue sur H . Alors il existe un unique φ dans H tel que

$$\langle \mathcal{L}, \chi \rangle = (\varphi | \chi), \quad \forall \chi \in H, \quad (\text{B.13})$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ désigne le crochet de dualité, une notation pour $\mathcal{L}(\varphi)$.

Démonstration. Voir [Bré83, théorème V.5].

B.3.2. Formules de transport de Reynolds

Théorème B.3.4 – Formule de transport de Reynolds

Soit $\mathcal{V}(t) \subset U$ un domaine ouvert borné quelconque de $U \subset \mathbb{R}^3$ transporté par le champ de vecteurs v défini dans U . Quel que soit le champ scalaire φ défini dans $U \times]0, +\infty[$, la formule dite de transport de Reynolds est donnée par

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} \varphi \, dx = \int_{\mathcal{V}(t)} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi v) \right) dx. \quad (\text{B.14})$$

Démonstration. Voir [Sar16, théorème 1.1].

Corollaire B.3.5 – Formule de transport de Reynolds

On reprend les notations du théorème B.3.4. Quel que soit le champ vectoriel \mathbf{p} défini dans $U \times]0, +\infty[$, la formule de transport de Reynolds vectorielle est donnée par

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}(t)} \mathbf{p} \, dx = \int_{\mathcal{V}(t)} \left(\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{p} \otimes \mathbf{v}) \right) dx. \quad (\text{B.15})$$

Démonstration. Voir [Sar16, corollaire 1.1]. ■

B.3.3. Quelques différentielles de fonctionnelles

Proposition B.3.6 – Différentielle d'une fonctionnelle linéaire

Soit \mathcal{E} une fonctionnelle linéaire. Alors $\mathcal{E}'(\varphi)$ est la forme linéaire définie pour tout χ par

$$\langle \mathcal{E}'(\varphi), \chi \rangle = \mathcal{E}(\chi). \quad (\text{B.16})$$

Démonstration. Par linéarité de \mathcal{E} , on a

$$\mathcal{E}(\varphi + \chi) - \mathcal{E}(\varphi) = \mathcal{E}(\chi). \quad (*.1)$$

Toujours par linéarité de \mathcal{E} , on conclut avec la définition B.3.3. ■

Proposition B.3.7 – Différentielle de la norme L^2

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et φ par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} \varphi^2 \, dx. \quad (\text{B.17})$$

Alors $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}$ est la forme linéaire définie pour tout χ par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}, \chi \right\rangle = (\rho \varphi \mid \chi), \quad (\text{B.18})$$

où $(\cdot \mid \cdot)$ désigne ici le produit scalaire canonique dans $L^2(\Omega)$. Par abus de notation, ou par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz, on notera $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi} = \rho \varphi$.

Démonstration. On calcule

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(\varphi + h\chi) - \mathcal{E}(\varphi) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} (\varphi + \chi)^2 \, dx - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varphi^2 \, dx \\
 &= \int_{\Omega} \left(h\varphi\chi + \frac{h^2}{2}\chi^2 \right) \, dx \\
 &= h(\varphi | \chi) + \frac{h^2}{2} \|\chi\|_2^2.
 \end{aligned} \tag{*1)$$

On conclut en divisant par h et en le faisant tendre vers 0^+ . ■

Proposition B.3.8 – Différentielle de la semi-norme H^1

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et φ par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} |\nabla \varphi|^2 \, dx, \tag{B.19}$$

où ρ est une fonction à valeurs réelles. Alors $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}$ est la forme linéaire définie pour tout χ par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}, \chi \right\rangle = (-\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) | \chi) + \int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \chi \, ds. \tag{B.20}$$

Dans le cas où $\partial\Omega = \emptyset$ (si Ω est périodique par exemple), on notera $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi} = -\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi)$ par abus de notation, ou par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz.

Démonstration. On calcule

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}(\rho, \varphi + h\chi) - \mathcal{E}(\rho, \varphi) &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho |\nabla \varphi + h \nabla \chi|^2 \, dx - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho |\nabla \varphi|^2 \, dx \\
 &= \int_{\Omega} \rho \left(h \nabla \varphi \cdot \nabla \chi + \frac{h^2}{2} |\nabla \chi|^2 \right) \, dx.
 \end{aligned} \tag{*1)$$

On intègre ensuite par parties :

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi + \chi) - \mathcal{E}(\rho, \varphi) = h \int_{\Omega} -\operatorname{div}(\rho \nabla \varphi) \chi \, dx + h \int_{\partial\Omega} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \chi \, ds + h^2 \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} |\nabla \chi|^2 \, dx. \tag{*2)$$

On conclut en divisant par h et en le faisant tendre vers 0^+ . ■

Proposition B.3.9 – Différentielle d'une intégrale de surface

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et φ par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Gamma} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \varphi \, ds, \quad (\text{B.21})$$

où $\Gamma \subset \partial\Omega$. Alors $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}$ est la forme linéaire définie pour tout χ par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}, \chi \right\rangle = \int_{\Gamma} \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \chi + \varphi \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{n}} \right) \, ds. \quad (\text{B.22})$$

Démonstration. On calcule

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\rho, \varphi + h\chi) - \mathcal{E}(\rho, \varphi) &= \int_{\Gamma} \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} + h\varphi \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{n}} \right) (\varphi + h\chi) \, ds - \int_{\Gamma} \rho \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \varphi \, ds \\ &= h \int_{\Gamma} \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \chi + \varphi \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{n}} \right) \, ds + h^2 \int_{\Gamma} \rho \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{n}} \chi \, ds. \end{aligned} \quad (*.1)$$

On conclut en divisant par h et en le faisant tendre vers 0^+ . ■

B.3.4. Cadre fonctionnel pour la thermodynamique – cas scalaire

Proposition B.3.10 – Différentielle d'une fonctionnelle abstraite

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et φ par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \rho e(\varphi, \nabla \varphi) \, dx, \quad (\text{B.23})$$

où $e: (\varphi, y) \mapsto e(\varphi, y)$ est une fonction définie dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. Alors $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}$ est la forme linéaire définie pour tout χ par

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}, \chi \right\rangle &= \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \varphi}(\varphi, \nabla \varphi) - \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \Big| \chi \right) \\ &\quad + \int_{\partial\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi) \cdot \mathbf{n} \right) \chi \, ds, \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

et $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho}$ est la forme linéaire définie pour tout $v \in L^\infty(\Omega)$ par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho}, v \right\rangle = (e(\varphi, \nabla \varphi) | v), \quad (\text{B.25})$$

Dans le cas où $\partial\Omega = \emptyset$ (si Ω est périodique par exemple), on notera $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi} = \rho \frac{\partial e}{\partial \varphi}(\varphi, \nabla \varphi) - \operatorname{div}(\rho \frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi))$ par abus de notation, ou par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz. En vertu du même théorème, on notera $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho} = e(\varphi, \nabla \varphi)$.

Démonstration. La fonction e est différentiable par rapport à chacune de ses variables donc par définition de la différentielle,

$$e(\varphi + \chi, \nabla \varphi + \nabla \chi) = e(\varphi, \nabla \varphi) + \frac{\partial e}{\partial \varphi} \chi + \frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi) \cdot \nabla \chi + o(|\chi| + |\nabla \chi|). \quad (*.1)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\rho, \varphi + \chi) - \mathcal{E}(\rho, \varphi) &= \int_{\Omega} \rho e(\varphi + \chi, \nabla \varphi + \nabla \chi) \, dx - \int_{\Omega} \rho e(\varphi, \nabla \varphi) \, dx \\ &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \varphi} \chi + \frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi) \cdot \nabla \chi \right) \, dx + o(\|\chi\|). \end{aligned} \quad (*.2)$$

On intègre ensuite par parties :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\rho, \varphi + \chi) - \mathcal{E}(\rho, \varphi) &= \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \varphi} - \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \right) \chi \, dx \\ &\quad + \int_{\partial\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial y}(\varphi, \nabla \varphi) \cdot \mathbf{n} \right) \chi \, ds + o(\|\chi\|). \end{aligned} \quad (*.3)$$

On conclut avec la définition B.3.3.

L'équation (B.25) s'obtient directement à partir de la proposition B.3.6. ■

Proposition B.3.11 – Intégration par parties d'une fonctionnelle abstraite

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et φ par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \rho e(\varphi, \nabla \varphi) \, dx, \quad (B.26)$$

où $e: (\varphi, y) \mapsto e(\varphi, y)$ est une fonction définie dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. Si \mathbf{v} est un champ de vecteurs

défini sur Ω , alors

$$-(e(\varphi, \nabla \varphi) \mid \operatorname{div}(\rho \mathbf{v})) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}, (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi \right\rangle - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \varphi \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\varphi, \nabla \varphi) \, ds, \quad (\text{B.27})$$

où $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}$ est définie par (B.24).

Démonstration. Par intégration par parties,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -e(\varphi, \nabla \varphi) \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) [e(\varphi, \nabla \varphi)] \, d\mathbf{x} - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\varphi, \nabla \varphi) \, ds \\ &= \int_{\Omega} \rho \frac{\partial e}{\partial \varphi}(\varphi) (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \cdot ((\mathbf{v} \cdot \nabla) [\nabla \varphi]) \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\varphi, \nabla \varphi) \, ds. \end{aligned} \quad (*.1)$$

Or $\nabla[(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi] = (\mathbf{v} \cdot \nabla)[\nabla \varphi] + \nabla \varphi \cdot \nabla \mathbf{v}$, donc

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \cdot ((\mathbf{v} \cdot \nabla) [\nabla \varphi]) \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \cdot \nabla[(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi] \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \rho \nabla \varphi \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \cdot \nabla[(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi] \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \varphi \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

Une intégration par parties donne ensuite

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) \cdot ((\mathbf{v} \cdot \nabla) [\nabla \varphi]) \, d\mathbf{x} &= \int_{\partial \Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \cdot \mathbf{n} \right) (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi \, ds \\ &\quad - \int_{\Omega} \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi] \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \varphi \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x} \quad (*.2) \end{aligned}$$

En combinant ce résultat, (*.1) et (B.24), on obtient finalement le résultat escompté. ■

Théorème B.3.12 – Estimation d'énergie d'une fonctionnelle abstraite

Soit X un espace fonctionnel. Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et $\varphi \in X$ par

$$\mathcal{E}(\rho, \varphi) := \int_{\Omega} \rho e(\varphi, \nabla \varphi) \, d\mathbf{x}, \quad (\text{B.28})$$

où $e: (\varphi, \mathbf{y}) \mapsto e(\varphi, \mathbf{y})$ est une fonction définie dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. Si ρ désigne la densité, autrement dit satisfait la loi de conservation de la masse (2.1), et \mathbf{v} la vitesse définie sur $\Omega \times]0, +\infty[$, alors pour toute fonction $\varphi \in \mathcal{C}^1(X)$ dépendant du temps, on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \dot{\varphi} \right\rangle - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \varphi \otimes \frac{\partial e}{\partial \mathbf{y}}(\varphi, \nabla \varphi) \right) : \nabla \mathbf{v} \, d\mathbf{x} \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\varphi, \nabla \varphi) \, ds, \quad (\text{B.29}) \end{aligned}$$

où l'on a noté

$$\dot{\varphi} := \frac{\partial \varphi}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi. \quad (\text{B.30})$$

Démonstration. Par la formule de différentiation des fonctions composées (théorème B.3.2), on a

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho}(\rho, \varphi), \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle. \quad (*.1)$$

On déduit alors à partir de l'équation (2.1) et de la proposition B.3.10 que

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \varphi)) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \varphi}(\rho, \varphi), \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right\rangle - (e(\varphi, \nabla \varphi) \mid \operatorname{div}(\rho \mathbf{v})). \quad (*.2)$$

On conclut avec la proposition B.3.11. ■

B.3.5. Cadre fonctionnel pour la thermodynamique – cas vectoriel

Proposition B.3.13 – Différentielle d'une fonctionnelle avec gradient

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et \mathbf{p} par

$$\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p}) := \int_{\Omega} \rho e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) dx, \quad (\text{B.31})$$

où $e: (\mathbf{p}, \gamma) \mapsto e(\mathbf{p}, \gamma)$ est une fonction définie dans $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. Alors $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}$ est la forme linéaire définie pour tout \mathbf{q} par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}, \mathbf{q} \right\rangle = (\ell(\rho, \mathbf{p}) | \mathbf{q}) + \int_{\partial \Omega} \rho \mathbf{q} \cdot \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n} ds, \quad (\text{B.32})$$

où

$$\ell(\rho, \mathbf{p}) := \rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) - \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right), \quad (\text{B.33})$$

et $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho}$ est la forme linéaire définie pour tout $z \in L^\infty(\Omega)$ par

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho}, z \right\rangle = (e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) | z). \quad (\text{B.34})$$

Dans le cas où l'intégrale de surface est nulle, on note $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}} = \ell(\rho, \mathbf{p})$ par abus de notation, ou par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz. En vertu du même théorème, on note $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho} = e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p})$.

Démonstration. La fonction e est différentiable par rapport à chacune de ses variables donc par définition de la différentielle,

$$e(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \nabla \mathbf{p} + \nabla \mathbf{q}) = e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) + \frac{\partial e}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{q} + \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) : \nabla \mathbf{q} + o(|\mathbf{q}| + |\nabla \mathbf{q}|). \quad (*.1)$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\rho, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - \mathcal{E}(\rho, \mathbf{p}) &= \int_{\Omega} \rho e(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \nabla \mathbf{p} + \nabla \mathbf{q}) dx - \int_{\Omega} \rho e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) dx \\ &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{q} + \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) : \nabla \mathbf{q} \right) dx + o(\|\mathbf{q}\|). \end{aligned} \quad (*.2)$$

On intègre ensuite par parties :

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p} + \mathbf{q}) - \mathcal{E}(\rho, \mathbf{p}) &= \int_{\Omega} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{p}} - \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) \right) \cdot \mathbf{q} \, dx \\ &\quad + \int_{\partial \Omega} \rho \mathbf{q} \cdot \frac{\partial e}{\partial \boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n} \, ds + o(\|\mathbf{q}\|).\end{aligned}\quad (*.3)$$

On conclut avec la définition B.3.3.

L'équation (B.34) s'obtient directement à partir de la proposition B.3.6. ■

Proposition B.3.14 – Intégration par parties d'une fonctionnelle avec gradient

Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^\infty(\Omega)$ et \mathbf{p} par

$$\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p}) := \int_{\Omega} \rho e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, dx, \quad (\text{B.35})$$

où $e: (\mathbf{p}, \boldsymbol{\gamma}) \mapsto e(\mathbf{p}, \boldsymbol{\gamma})$ est une fonction définie dans $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. On a

$$\begin{aligned}-(e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \mid \operatorname{div}(\rho \mathbf{v})) &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}, (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{p} \right\rangle - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \mathbf{p}^\top \cdot \frac{\partial e}{\partial \boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \nabla \mathbf{v} \, dx \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds,\end{aligned}\quad (\text{B.36})$$

où $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}$ est définie par (B.32).

Démonstration. Par intégration par parties,

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} -e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) \, dx &= \int_{\Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) [e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p})] \, dx - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds \\ &= \int_{\Omega} \rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}) \cdot [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{p}] \, dx \\ &\quad + \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \boldsymbol{\gamma}}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \{(\mathbf{v} \cdot \nabla) [\nabla \mathbf{p}]\} \, dx \\ &\quad - \int_{\partial \Omega} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, ds.\end{aligned}\quad (*.1)$$

Or $\nabla[(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{p}] = (\mathbf{v} \cdot \nabla)[\nabla \mathbf{p}] + \nabla \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{v}$, donc

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \{(\mathbf{v} \cdot \nabla)[\nabla \mathbf{p}]\} \, dx &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \nabla[(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{p}] \, dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \rho (\nabla \mathbf{p} \cdot \nabla \mathbf{v}) : \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, dx \\ &= \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) \cdot \nabla[(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{p}] \, dx - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \mathbf{p}^T \cdot \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \nabla \mathbf{v} \, dx, \end{aligned}$$

d'après la relation (A.12b). Une intégration par parties donne ensuite

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) \cdot \{(\mathbf{v} \cdot \nabla)[\nabla \mathbf{p}]\} \, dx &= \int_{\partial \Omega} \rho \left(\frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \cdot \mathbf{n} \right) \cdot [(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{p}] \, ds \\ &\quad - \int_{\Omega} \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) \cdot [(\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{p}] \, dx \\ &\quad - \int_{\Omega} \rho \left(\nabla \mathbf{p}^T \cdot \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \nabla \mathbf{v} \, dx \quad (*.2) \end{aligned}$$

En combinant ce résultat, (*.1) et (B.32), on obtient finalement le résultat escompté. ■

Théorème B.3.15 – Dérivée en temps d'une fonctionnelle avec gradient

On suppose que Ω est un volume transporté par un flot à la vitesse \mathbf{v} , et qu'il peut donc évoluer en temps. Soit \mathcal{E} la fonctionnelle définie pour tous $\rho \in L^{\infty}(\Omega)$ et \mathbf{p} par

$$\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p}) := \int_{\Omega(t)} \rho e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \, dx, \quad (\text{B.37})$$

où $e: (\mathbf{p}, \gamma) \mapsto e(\mathbf{p}, \gamma)$ est une fonction définie dans $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d \times d}$ et à valeurs dans \mathbb{R} , différentiable par rapport à chacune de ses variables. On note X l'espace fonctionnel auquel appartient \mathbf{p} . Si ρ désigne la masse volumique, autrement dit satisfait la loi de conservation de la masse (2.1), alors pour tout $\mathbf{p} \in L^{\infty}(]0, +\infty[; X)$, on a

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p})) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}(\rho, \mathbf{p}), \dot{\mathbf{p}} \right\rangle - \int_{\Omega(t)} \rho \left(\nabla \mathbf{p}^T \cdot \frac{\partial e}{\partial \gamma}(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \right) : \nabla \mathbf{v} \, dx. \quad (\text{B.38})$$

Démonstration. Par la formule de Reynolds (B.14) et intégrations par parties,

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p})) &= \int_{\Omega(t)} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\rho e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p})) + \operatorname{div}(\rho e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \mathbf{v}) \right) dx \\ &= \int_{\Omega(t)} \left(\rho \frac{\partial}{\partial t}(e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p})) + e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \frac{\partial \rho}{\partial t} \right) dx + \int_{\partial \Omega(t)} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds.\end{aligned}\quad (*.1)$$

En appliquant ensuite la loi de conservation de la masse (2.1) et en remarquant que

$$\int_{\Omega(t)} \rho \frac{\partial}{\partial t}(e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p})) dx = \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}(\rho, \mathbf{p}), \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \right\rangle, \quad (*.2)$$

on obtient

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\mathcal{E}(\rho, \mathbf{p})) &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{p}}(\rho, \mathbf{p}), \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \right\rangle - (e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) \mid \operatorname{div}(\rho \mathbf{v})) \\ &\quad + \int_{\partial \Omega(t)} \rho (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) e(\mathbf{p}, \nabla \mathbf{p}) ds\end{aligned}\quad (*.3)$$

On peut alors appliquer la proposition B.3.14 et conclure. ■

B.4. Notions d'analyse convexe

Dans cette section, on note X un espace vectoriel normé, X' son dual topologique, c'est-à-dire l'ensemble des formes linéaires continues sur X , $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le crochet de dualité sur $X' \times X$ et $\overline{\mathbb{R}} := \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ la droite réelle semi-achevée. Il est important de noter que l'on exclut la valeur $-\infty$.

Toutes les définitions et tous les résultats peuvent être retrouvés dans [ET74, chapitre 1] et [Sar16, sections 3.2 et 5.3.3].

B.4.1. Définitions

Définition B.4.1 – Fonction convexe

Une fonction $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ est dite convexe si quels que soient $x, y \in X$ et $t \in [0, 1]$ [ET74, définition 2.1],

$$\varphi(tx + (1-t)y) \leq t\varphi(x) + (1-t)\varphi(y). \quad (\text{B.39})$$

Une fonction convexe est une fonction dont le graphe se situe localement en-dessous de ses cordes.

Propriété B.4.1 – Caractérisation des fonctions convexes par la différentielle seconde

Une fonction $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ deux fois différentiable est convexe si, et seulement si, $\varphi''(x)$ est une forme bilinéaire positive pour tout $x \in X$, c'est-à-dire $\varphi''(x)(h, k) \geq 0$ pour tous $h, k \in X$.

Définition B.4.2 – Fonction propre

Une fonction $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ est dite propre si elle n'est pas identiquement égale à $+\infty$ [ET74, section 2.1].

Définition B.4.3 – Fonction semi-continue inférieurement

Une fonction $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ est dite semi-continue inférieurement si son épigraphe $\{(x, c) \in X \times \mathbb{R} \mid \varphi(x) \leq c\}$ [ET74, définition 2.2] est fermé [ET74, proposition 2.3].

B.4.2. Sous-différentiel

Définition B.4.4 – Sous-différentiel

Soit $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe et propre. Le sous-différentiel de φ en $x \in X$ est le sous-ensemble $\partial\varphi(x)$ de X' défini par [ET74, définition 5.1] [Sar16, définition 3.2]

$$\partial\varphi(x) := \{x' \in X' \mid \langle x', y - x \rangle \leq \varphi(y) - \varphi(x), \forall y \in X\}. \quad (\text{B.40})$$

Si φ dépend de plusieurs variables, disons x et y , alors on note $\partial_x\varphi$ son sous-différentiel par rapport à x , sous réserve d'existence.

Intuitivement, en dimension 1, le sous-différentiel de φ en x est l'ensemble des pentes x' inférieures à tous les taux d'accroissement de φ en x . Le sous-différentiel est une opération linéaire sous certaines hypothèses [ET74, section 5.3], qui demandent principalement la convexité et la semi-continuité des fonctions impliquées. On peut montrer que φ est Gâteaux-dérivable en x si, et seulement si, φ est finie et continue en x et $\partial\varphi(x) = \{\varphi'(x)\}$ [ET74, proposition 5.3].

L'exemple emblématique du sous-différentiel est celui de la valeur absolue, qui vaut [Sar16, exemple 3.3]

$$\partial|\cdot|(x) = \begin{cases} \left\{ \frac{x}{|x|} \right\} & \text{si } x \neq 0, \\ [-1, 1] & \text{si } x = 0. \end{cases} \quad (\text{B.41})$$

Proposition B.4.2 – Caractérisation du minimum

Soit $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe et propre. Le point $x^* \in X$ est un minimum de φ sur X si, et seulement si, $0 \in \partial\varphi(x^*)$.

Démonstration. Voir [ET74, équation 5.5] ou [Sar16, théorème 3.1].

Définition B.4.5 – Fonction conjuguée

Soit $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ une fonction (non nécessairement convexe). Sa fonction conjuguée est la fonction $\varphi^*: X' \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ définie pour tout $x' \in X'$ par [ET74, définition 4.1] [Sar16, définition 3.5]

$$\varphi^*(x') := \sup_{x \in X} (\langle x', x \rangle - \varphi(x)). \quad (\text{B.42})$$

L'application $\varphi \mapsto \varphi^*$ est appelée transformée de Legendre-Fenchel.

La fonction conjuguée est un outil utile pour calculer le sous-différentiel d'une fonction convexe, comme en atteste la

Proposition B.4.3 – Inversibilité

Soit $\varphi: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ une fonction convexe, propre et semi-continue inférieurement. Alors

$$x' \in \partial \varphi(x) \iff x \in \partial \varphi^*(x'). \quad (\text{B.43})$$

Si la fonction n'est semi-continue inférieurement, alors l'équivalence n'est plus qu'une implication.

Démonstration. Voir [ET74, corollaire 5.2] ou [Sar16, propriété 3.1].

Définition B.4.6 – Fonction indicatrice

En analyse convexe, la fonction indicatrice d'une partie $C \subset X$ de X est la fonction notée \mathcal{I}_C et définie par [ET74, section 2.1]

$$\mathcal{I}_C: \begin{array}{ccc} X & \longrightarrow & \mathbb{R} \cup \{+\infty\} \\ x & \longmapsto & \begin{cases} 0 & \text{si } x \in C, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \end{array} \quad (\text{B.44})$$

Dans la suite, on se place dans l'espace des matrices carrées de taille $d \times d$ à coefficients réels ($X = \mathbb{R}^{d \times d}$). Pour toute fonction $\varphi: \mathbb{R}^{d \times d} \rightarrow \mathbb{R}$, on note par $\ker \varphi := \{\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{d \times d} \mid \varphi(\boldsymbol{\tau}) = 0\}$ son noyau.

Lemme B.4.4 – Sous-différentiel de l'indicatrice du noyau de la trace

Quelle que soit la matrice $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{d \times d}$,

$$\partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) = \begin{cases} \{\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{d \times d} \mid \boldsymbol{\tau} : (\mathbf{N} - \mathbf{M}) \leqslant 0, \forall \mathbf{N} \in \ker \text{tr}\} & \text{si } \text{tr } \mathbf{M} = 0, \\ \emptyset & \text{sinon.} \end{cases} \quad (\text{B.45})$$

Démonstration. Nous sommes en dimension finie, donc le dual de $\mathbb{R}^{d \times d}$ est isomorphe à $\mathbb{R}^{d \times d}$. Par le théorème B.3.3 de représentation de Riesz, on peut donc assimiler les deux.

Soit $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{d \times d}$. D'après la définition B.4.4 du sous-différentiel, $\boldsymbol{\tau} \in \partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M})$ si, et seulement si, quel que soit $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{d \times d}$,

$$\mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) + \boldsymbol{\tau} : (\mathbf{N} - \mathbf{M}) \leq \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{N}). \quad (*.1)$$

Si $\text{tr } \mathbf{M} \neq 0$, alors $\mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) = +\infty$ et cette contrainte n'est vérifiée par aucun $\boldsymbol{\tau}$, donc $\partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) = \emptyset$. Dans le cas contraire, $\boldsymbol{\tau} \in \partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M})$ si, et seulement si,

$$\boldsymbol{\tau} : (\mathbf{N} - \mathbf{M}) \leq \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{N}) \quad (*.2)$$

pour toute matrice \mathbf{N} à trace nulle et pour toute matrice \mathbf{N} à trace non nulle. Si $\text{tr } \mathbf{N} \neq 0$, alors cette contrainte est automatiquement vérifiée, puisque $\mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{N}) = +\infty$, sinon $\mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{N}) = 0$, d'où le résultat. ■

Proposition B.4.5 – Caractérisation du sous-différentiel de l'indicatrice du noyau de la trace

$$\boldsymbol{\tau} \in \partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) \iff \exists \Pi \in \mathbb{R} \text{ tel que } \boldsymbol{\tau} = -\Pi \boldsymbol{\delta} \text{ et } \text{tr } \mathbf{M} = 0. \quad (\text{B.46})$$

Démonstration. La démonstration suivante est une adaptation de la démonstration du lemme 5.2 dans [Sar16].

Soit $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Si $\text{tr } \mathbf{M} \neq 0$, alors, d'après le lemme B.4.4, $\partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) = \emptyset$ et le résultat est automatiquement vérifié.

(\Rightarrow) Supposons donc que $\text{tr } \mathbf{M} = 0$. Toujours d'après le lemme B.4.4, on a alors

$$\partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M}) = \{ \boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{d \times d} \mid -\boldsymbol{\tau} : \mathbf{M} \leq -\boldsymbol{\tau} : \mathbf{N}, \forall \mathbf{N} \in \ker \text{tr} \}. \quad (*.1)$$

Ainsi, s'il existe $\boldsymbol{\tau} \in \partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M})$, alors

$$\mathbf{M} = \underset{\mathbf{N} \in \ker \text{tr}}{\operatorname{argmin}} -\boldsymbol{\tau} : \mathbf{N}. \quad (*.2)$$

Nous faisons donc face à un problème de minimisation contraint. Pour le résoudre, nous introduisons alors le lagrangien associé à ce problème $L_{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{N}, \xi) := -\boldsymbol{\tau} : \mathbf{N} - \xi \text{tr } \mathbf{N}$. Le problème de minimisation (*.2) revient ainsi à trouver le point selle $(\mathbf{M}, \Pi) \in \ker \text{tr} \times \mathbb{R}$ du problème

$$\min_{\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{d \times d}} \max_{\xi \in \mathbb{R}} L_{\boldsymbol{\tau}}(\mathbf{N}, \xi). \quad (*.3)$$

Ce point selle est caractérisé par les relations

$$\frac{\partial L_{\boldsymbol{\tau}}}{\partial \mathbf{N}}(\mathbf{M}, \Pi) = \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \frac{\partial L_{\boldsymbol{\tau}}}{\partial \xi}(\mathbf{M}, \Pi) = 0, \quad (*.4)$$

ce qui donne de manière équivalente

$$\boldsymbol{\tau} = -\Pi \boldsymbol{\delta} \quad \text{et} \quad \text{tr } \mathbf{M} = 0, \quad (*.5)$$

puisque $\text{tr}'(\mathbf{M}) = \boldsymbol{\delta}$.

(\Leftarrow) Réciproquement, si $\boldsymbol{\tau} = -\Pi\boldsymbol{\delta}$ et $\text{tr} \mathbf{M} = 0$, alors $-\boldsymbol{\tau} : \mathbf{N} = \Pi \text{tr} \mathbf{N} = 0$ quel que soit $\mathbf{N} \in \ker \text{tr}$ (en particulier, c'est encore vrai si $\mathbf{N} = \mathbf{M}$), et on a donc bien $\boldsymbol{\tau} \in \partial \mathcal{I}_{\ker \text{tr}}(\mathbf{M})$ d'après (*.1).



B.5. Outils pour les méthodes de Galerkine discontinues

Lemme B.5.1 – Saut et moyenne d'un produit

Pour toute interface $S \in \mathcal{S}_h^i$, les relations suivantes sont vérifiées :

$$[\varphi_h \chi_h] = [\varphi_h] \{\chi_h\} + \{\varphi_h\} [\chi_h], \quad (\text{B.47a})$$

$$\{\varphi_h \chi_h\} = \{\varphi_h\} \{\chi_h\} + \frac{1}{4} [\varphi_h] [\chi_h], \quad (\text{B.47b})$$

$$[\varphi_h \chi_h] = [\varphi_h] \{\chi_h\}_{\bar{\omega}} + \{\varphi_h\}_{\omega} [\chi_h], \quad (\text{B.47c})$$

où $\{\varphi_h\}_{\bar{\omega}}$ est la moyenne pondérée alternative de φ_h , définie par

$$\{\varphi_h\}_{\bar{\omega}, S} := \begin{cases} \omega_{K^+, S} \varphi|_{K^-} + \omega_{K^-, S} \varphi|_{K^+} & \text{si } S = \partial K^- \cap \partial K^+, \\ \varphi|_K & \text{si } S = \partial K \cap \partial \Omega. \end{cases} \quad (\text{B.47d})$$

Démonstration. On note $\varphi^- = \varphi_h|_{K^-}$, $\varphi^+ = \varphi_h|_{K^+}$, $\chi^- = \chi_h|_{K^-}$, $\chi^+ = \chi_h|_{K^+}$, $\omega^- = \omega_{K^-, S}$ et $\omega^+ = \omega_{K^+, S}$ par commodité.

Première identité. Par définition du saut (6.8a), on calcule

$$\begin{aligned} [\varphi_h \chi_h] &= \varphi^- \chi^- - \varphi^+ \chi^+ \\ &= \varphi^- \chi^- - \varphi^+ \chi^- + \varphi^+ \chi^- - \varphi^+ \chi^+ \\ &= [\varphi_h] \chi^- + \varphi^+ [\chi_h] \\ &= [\varphi_h] \chi^- - \frac{1}{2} [\varphi_h] [\chi_h] + \frac{1}{2} [\varphi_h] [\chi_h] + \varphi^+ [\chi_h] \\ &= [\varphi_h] \{\chi_h\} + \{\varphi_h\} [\chi_h], \end{aligned} \quad (*.1)$$

où l'on a utilisé la définition de la moyenne (6.8b) pour la dernière ligne.

Deuxième identité. Par définition de la moyenne (6.8b), on calcule

$$\begin{aligned}
 2\{\varphi_h \chi_h\} &= \varphi^- \chi^- + \varphi^+ \chi^+ \\
 &= \varphi^- \chi^- - \frac{1}{2} [\varphi_h] \chi^- + \frac{1}{2} [\varphi_h] \chi^- + \varphi^+ \chi^+ + \frac{1}{2} [\varphi_h] \chi^+ - \frac{1}{2} [\varphi_h] \chi^+ \\
 &= \{\varphi_h\} \chi^- + \frac{1}{2} [\varphi_h] \chi^- + \{\varphi_h\} \chi^+ - \frac{1}{2} [\varphi_h] \chi^+ \\
 &= 2\{\varphi_h\} \{\chi_h\} + \frac{1}{2} [\varphi_h] [\chi_h], \tag{*.2}
 \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la définition du saut (6.8a) pour la dernière ligne.

Troisième identité Par définition de la moyenne pondérée (6.8c) et de son alternative, on développe

$$\begin{aligned}
 [\varphi_h] \{\chi_h\}_{\bar{\omega}} + \{\varphi_h\}_{\omega} [\chi_h] &= (\varphi^- - \varphi^+) (\omega^+ \chi^- + \omega^- \chi^+) + (\omega^- \varphi^- + \omega^+ \varphi^+) (\chi^- - \chi^+) \\
 &= \omega^+ \varphi^- \chi^- + \omega^- \varphi^- \chi^+ - \omega^+ \varphi^+ \chi^- - \omega^- \varphi^+ \chi^+ \\
 &\quad + \omega^- \varphi^- \chi^- - \omega^- \varphi^- \chi^+ + \omega^+ \varphi^+ \chi^- - \omega^+ \varphi^+ \chi^+ \\
 &= (\omega^- + \omega^+) \varphi^- \chi^- - (\omega^- + \omega^+) \varphi^+ \chi^+ \\
 &= [\varphi_h \chi_h], \tag{*.3}
 \end{aligned}$$

par définition du saut (6.8a) et parce que $\omega^- + \omega^+ = 1$.

■

Lemme B.5.2 – Lien entre intégrales sur ∂K et sur $S \subset \partial K$ avec advection

Soit \mathbf{v} un champ de vecteurs continu à travers les interfaces du maillage \mathcal{T}_h . Quel que soit $\chi_h \in \mathcal{P}^k$,

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \chi_h \, ds = \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \chi_h \, ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) [\chi_h] \, ds. \tag{B.48}$$

Démonstration. On commence par décomposer la somme pour faire apparaître des intégrales sur les faces :

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_K) \chi_h \, ds = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{S \subset \partial K} \int_S (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_K) \chi_{h|K} \, ds. \tag{*.1}$$

Dans cette double somme, chaque face externe $S \in \mathcal{S}_h^b$ n'est comptée qu'une fois. En remarquant alors que chaque face interne $S \in \mathcal{S}_h^i$ partagée par deux éléments K^- et K^+ est comptée deux fois – une première fois lorsque la somme sur les éléments s'arrête sur K^- et une seconde fois lorsqu'elle s'arrête sur K^+ (voir la figure 6.1 pour une illustration) –

on peut alors réarranger cette double somme en une simple somme sur les arêtes de la manière suivante :

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_K) \chi_h \, ds = \sum_{S \in \mathcal{S}_h^b} \int_S (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \chi_h \, ds + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S [(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K^-}) \chi_h|_{K^-} + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K^+}) \chi_h|_{K^+}] \, ds. \quad (*.2)$$

On conclut en utilisant les définitions 6.1.2 et 6.1.6 (équation (6.8a)) et en remarquant que

$$\sum_{S \in \mathcal{S}_h^b} \int_S (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \chi_h \, ds = \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \chi_h \, ds. \quad (*.3)$$

■

Proposition B.5.3 – Intégration par parties discrète avec advection

Soit \mathbf{v} un champ de vecteurs continu à travers les interfaces du maillage \mathcal{T}_h . Quels que soient $\varphi_h, \chi_h \in \mathcal{P}^k$, la formule d'intégration par parties

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [(\mathbf{v} \cdot \nabla_h) \varphi_h] \chi_h \, dx &= - \int_{\Omega} \varphi_h \operatorname{div}_h(\chi_h \mathbf{v}) \, dx + \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \varphi_h \chi_h \, ds \\ &\quad + \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) ([\varphi_h] \{ \chi_h \} + \{ \varphi_h \} [\chi_h]) \, ds \end{aligned} \quad (B.49)$$

est vérifiée.

Démonstration. Par définition 6.1.4 du gradient cassé, il vient

$$\int_{\Omega} [(\mathbf{v} \cdot \nabla_h) \varphi_h] \chi_h \, dx = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \varphi_h] \chi_h \, dx.$$

Une intégration par parties donne alors

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [(\mathbf{v} \cdot \nabla_h) \varphi_h] \chi_h \, dx &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left(- \int_K \varphi_h \operatorname{div}(\chi_h \mathbf{v}) \, dx + \int_{\partial K} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \varphi_h \chi_h \, ds \right) \\ &= - \int_{\Omega} \varphi_h \operatorname{div}_h(\chi_h \mathbf{v}) \, dx + \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \varphi_h \chi_h \, ds \end{aligned}$$

On conclut en utilisant le lemme B.5.2 et l'équation (B.47a) du lemme B.5.1.

■

Lemme B.5.4 – Lien entre intégrales sur ∂K et sur $S \subset \partial K$ avec diffusion

Quel que soit $\chi_h \in \mathcal{P}^k$,

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds &= \int_{\partial \Omega} \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S (\llbracket \nu \nabla_h \varphi_h \rrbracket \cdot \mathbf{n} \{\chi_h\}_{\bar{\omega}} + \{\nu \nabla_h \varphi_h\}_{\omega} \cdot \mathbf{n} \llbracket \chi_h \rrbracket) \, ds, \quad (\text{B.50}) \end{aligned}$$

où $\{\cdot\}_{\bar{\omega}}$ est défini par (B.47d).

Démonstration. On commence par décomposer la somme pour faire apparaître des intégrales sur les faces :

$$\sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \sum_{S \subset \partial K} \int_{\partial K} \nu|_K \frac{\partial \varphi_h|_K}{\partial \mathbf{n}_K} \chi_h|_K \, ds. \quad (*.1)$$

Comme dans la démonstration du lemme B.5.2, on peut réarranger cette double somme en une simple somme sur les arêtes :

$$\begin{aligned} \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds &= \sum_{S \in \mathcal{S}_h^b} \int_S \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds \\ &+ \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S \left[\nu|_{K^-} \frac{\partial \varphi_h|_{K^-}}{\partial \mathbf{n}_K^-} \chi_h|_{K^-} + \nu|_{K^+} \frac{\partial \varphi_h|_{K^+}}{\partial \mathbf{n}_K^+} \chi_h|_{K^+} \right] \, ds. \quad (*.2) \end{aligned}$$

On conclut en utilisant la définition 6.1.2 de la normale à une face, l'équation (B.47d) et en remarquant que

$$\sum_{S \in \mathcal{S}_h^b} \int_S \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds = \int_{\partial \Omega} \nu \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds. \quad (*.3)$$

Proposition B.5.5 – Intégration par parties discrète avec diffusion

Soit ν un champ scalaire. Quels que soient $\varphi_h, \chi_h \in \mathcal{P}^k$, la formule d'intégration par

parties

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\operatorname{div}_h(v \nabla_h \varphi_h) \chi_h \, dx &= \int_{\Omega} \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h \chi_h \, dx - \int_{\partial \Omega} v \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds \\ &\quad - \sum_{S \in \mathcal{S}_h^i} \int_S ([v \nabla_h \varphi_h] \cdot \mathbf{n} \{ \chi_h \}_{\bar{\omega}} + \{ v \nabla_h \varphi_h \}_{\omega} \cdot \mathbf{n} [\chi_h]) \, ds \quad (B.51) \end{aligned}$$

est vérifiée.

Démonstration. Par définition 6.1.5 de la divergence cassée, il vient

$$\int_{\Omega} -\operatorname{div}_h(v \nabla_h \varphi_h) \chi_h \, dx = \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K -\operatorname{div}(v \nabla_h \varphi_h) \chi_h \, dx.$$

Une intégration par parties donne alors

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -\operatorname{div}_h(v \nabla_h \varphi_h) \chi_h \, dx &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \left(\int_K v \nabla \varphi_h \cdot \nabla \chi_h \, dx - \int_{\partial K} v \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds \right) \\ &= \int_{\Omega} v \nabla_h \varphi_h \cdot \nabla_h \chi_h \, dx - \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} v \frac{\partial \varphi_h}{\partial \mathbf{n}} \chi_h \, ds \end{aligned}$$

On conclut en utilisant le lemme B.5.4. ■

B.6. Calcul de la fonction de courant

En deux dimensions, lorsque la vitesse est à divergence nulle, il est possible de calculer sa fonction de courant ψ associée, définie comme l'unique fonction, à une constante près, satisfaisant [Sar20, section 2.1.6]

$$\operatorname{curl} \psi = \mathbf{v}, \quad (B.52)$$

où curl est donné dans la définition A.2.5. On vérifie que $\operatorname{div} \operatorname{curl} \psi = 0$. En appliquant le rotationnel scalaire (définition A.2.5) à (B.52), on obtient

$$-\Delta \psi = \operatorname{curl} \mathbf{v}. \quad (B.53)$$

En pratique, nous résolvons cette équation sous la forme faible

$$\int_{\Omega} \nabla \psi \cdot \nabla \chi \, dx = \int_{\Omega} (\operatorname{curl} \mathbf{v}) \chi \, dx - \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \cdot \mathbf{t}) \chi \, ds, \quad (B.54)$$

pour toute fonction test χ , où $\mathbf{t} := \mathbf{n}^\perp$ est la tangente à la frontière du domaine (voir la définition A.1.7). L'intégrale de surface s'obtient en remarquant que $\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{n}} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{t}$. Comme la fonction de courant ψ est définie à une constante près, nous la fixons en imposant ψ à 0 sur la frontière.

Outils pour la démonstration du théorème 5.2.1

C

C.1. Composantes du vecteur issu d'une matrice antisymétrique

Proposition C.1.1 – Composantes du vecteur issu d'une matrice antisymétrique

Soit τ un champ de tenseurs antisymétriques dans $\mathbb{R}^{3 \times 3}$. On note $c = -\frac{1}{2}\delta \times \tau$ le vecteur de ses trois composantes indépendantes. Alors c vérifie

$$c_s = \tau_{s3}^\perp, \quad (C.1a)$$

$$c_3 = \tau_{21}, \quad (C.1b)$$

où l'on a noté c'^\perp l'orthogonal d'un vecteur c' (voir la définition A.1.7).

Démonstration. Par définition de c , antisymétrie de τ et d'après la propriété A.1.4,

$$c = -\frac{1}{2}\delta \times \tau = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \tau_{32} - \tau_{23} \\ \tau_{13} - \tau_{31} \\ \tau_{21} - \tau_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{s3}^\perp \\ \tau_{21} \end{pmatrix}. \quad (*.1)$$

Corollaire C.1.2 – Composantes du vecteur taux de rotation

Les composantes planaires et verticale de ω sont données par

$$\omega_s = W_{s3}^\perp, \quad (C.2a)$$

$$\omega_3 = W_{21}. \quad (C.2b)$$

Dans la suite, on note simplement $\omega := \omega_3$.

Démonstration. Immédiat avec la proposition C.1.1 en se souvenant que $\omega = -\frac{1}{2}\delta \times \mathbf{W}$. ■

Corollaire C.1.3 – Composantes du vecteur taux de courbure moyenne

Les composantes planaires et verticale du vecteur de courbure moyenne \mathbf{k} sont données par

$$\mathbf{k}_s = \frac{1}{2} \frac{\partial [\omega_s^\perp]}{\partial x_3} + \frac{1}{2} \operatorname{curl} \omega, \quad (\text{C.3a})$$

$$k_3 = \frac{1}{2} \operatorname{curl} \omega_s. \quad (\text{C.3b})$$

Dans la suite, on note simplement $k := k_3$.

Démonstration. Par définition, $\mathbf{k} = \frac{1}{2}\nabla \times \omega$, donc

$$2\mathbf{k}_s = \begin{pmatrix} \omega_{3,2} - \omega_{2,3} \\ \omega_{1,3} - \omega_{3,1} \end{pmatrix} = \frac{\partial \omega_s^\perp}{\partial x_3} + \operatorname{curl} \omega_3 \quad (*.1)$$

et

$$2k_3 = \omega_{2,1} - \omega_{1,2} = \operatorname{curl} \omega_s, \quad (*.2)$$

d'après la définition A.2.5. ■

Corollaire C.1.4 – Composantes du vecteur des contraintes de couples

Les composantes planaires et verticale du vecteur des contraintes de couples \mathbf{m} sont données par

$$\mathbf{m}_s = \boldsymbol{\mu}_{s3}^\perp, \quad (\text{C.4a})$$

$$m := m_3 = \mu_{21}. \quad (\text{C.4b})$$

Démonstration. Immédiat avec la proposition C.1.1 en se souvenant que $\mathbf{m} = -\frac{1}{2}\delta \times \boldsymbol{\mu}$. ■

C.2. Analyse asymptotique de la loi de conservation du moment cinétique

Proposition C.2.1 – Conservation du moment cinétique moyennée en épaisseur

La loi de conservation du moment cinétique moyennée en épaisseur est donnée en tout ordre $i \geq -1$ par les relations

$$\operatorname{curl}(\rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s}) + \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s})^\perp = \mathbf{0} \quad (\text{C.5a})$$

$$\operatorname{curl}(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s}) + \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{12}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{21}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) = 0. \quad (\text{C.5b})$$

Démonstration. En appliquant le théorème 4.3.2 à la loi de conservation du moment cinétique (3.3), en tenant compte de la condition aux limites (2.39a), on obtient dans un premier temps

$$\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{u}_{ss}^{(i)} \rangle_{\rho_s}^\top) + \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s})^\perp = \mathbf{0} \quad (*.1a)$$

$$\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{u}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) + \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{12}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{21}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) = 0. \quad (*.1b)$$

On conclut avec la propriété A.2.4 et le corollaire C.1.4, et en remarquant que

$$\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{u}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) = -\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} [\langle \mathbf{u}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s}^\perp]^\perp) = -\operatorname{div}_s(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s}^\perp) = \operatorname{curl}(\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s}), \quad (*.2)$$

car $-\operatorname{div}_s \mathbf{c}^\perp = \operatorname{curl} \mathbf{c}$ pour tout champ de vecteurs. ■

Proposition C.2.2

On a pour tout ordre $i \geq -1$ et pour tous champs de scalaires φ et de vecteurs \mathbf{q} définis dans Ω ,

$$\int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \operatorname{curl} \mathbf{q} \, dx = \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \cdot \mathbf{q}^\perp \, dx \quad (\text{C.6a})$$

$$\int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \operatorname{curl} \varphi \, dx = \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \sigma_{12}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \sigma_{21}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \varphi \, dx \quad (\text{C.6b})$$

Démonstration. Remarquons en premier lieu que sur $\partial\Omega$, on a $m = 0$ et $\mathbf{m}_s^\perp \cdot \mathbf{n} = 0$, en conséquence directe de la condition aux limites (2.39a) et du corollaire C.1.4, puisque $n_3 = 0$ sur $\partial\Omega$.

Première identité. On intègre par parties à l'aide de la proposition A.2.5 :

$$\int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \operatorname{curl} \mathbf{q} \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \cdot \mathbf{q} \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} \rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \mathbf{q}^{\perp} \cdot \mathbf{n}_s \, ds. \quad (*.1)$$

On conclut avec la condition aux limites et la proposition C.2.1, en remarquant que $\mathbf{c}^{\perp} \cdot \mathbf{c}' = -\mathbf{c} \cdot \mathbf{c}'^{\perp}$.

Seconde identité. On intègre par parties à l'aide de la proposition A.2.5 :

$$\int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \operatorname{curl} \varphi \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \varphi \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} \rho_s^{(1)} \varphi \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s}^{\perp} \cdot \mathbf{n}_s \, ds \quad (*.2)$$

On conclut avec la condition aux limites et la proposition C.2.1.



C.3. Outils pour l'analyse asymptotique de l'inégalité de Clausius-Duhem

Définition C.3.1 – Saut dans l'épaisseur

Pour tout champ de scalaires φ , on définit l'opérateur de saut dans l'épaisseur par

$$[\![\varphi]\!]_{\xi} := \varphi(x_3 = \rho_s) - \varphi(x_3 = 0). \quad (C.7)$$

On étend la définition de l'opérateur à des champs de tenseurs d'ordre quelconque en l'appliquant composante par composante.

Proposition C.3.1

Pour tous entiers $i, j \geq -1$, on a la formule

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \langle \mathbf{k}_s^{(j)} \rangle_{\rho_s} \, d\mathbf{x} &= - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \operatorname{skw} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(i)} \rangle_{\rho_s} : \langle \mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(j)}) \rangle_{\rho_s} \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot [\![\mathbf{W}_{s3}]!]_{\xi}^{(j+1)} \, d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)}) \omega^{(j)}(x_3 = \rho_s) \, d\mathbf{x}. \quad (C.8) \end{aligned}$$

Démonstration. D'après le corollaire C.1.3,

$$\int_{\Omega} -2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \langle \mathbf{k}_s^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot [\mathbf{W}_{s3}]_{\xi}^{(j+1)} d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \langle \operatorname{curl} \boldsymbol{\omega}^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x}. \quad (*.1)$$

On applique alors le corollaire 4.6.2 puis le proposition C.2.2 sur le second terme

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \langle \operatorname{curl} \boldsymbol{\omega}^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} &= - \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)} \langle \boldsymbol{\omega}^{(j)} \rangle_{\rho_s}) d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)}) \boldsymbol{\omega}^{(j)}(x_3 = \rho_s) d\mathbf{x} \\ &= - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \boldsymbol{\sigma}_{21}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \boldsymbol{\sigma}_{12}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \langle \boldsymbol{\omega}^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}_s^{(i)} \rangle_{\rho_s} \cdot \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)}) \boldsymbol{\omega}^{(j)}(x_3 = \rho_s) d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

On conclut en remarquant que, d'après la proposition A.1.2, $(\langle \boldsymbol{\sigma}_{21}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \boldsymbol{\sigma}_{12}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \langle \boldsymbol{\omega}^{(j)} \rangle_{\rho_s} = \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(i)} \rangle_{\rho_s} : \langle \mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(j)}) \rangle_{\rho_s} = \operatorname{skw} \langle \boldsymbol{\sigma}_{ss}^{(i)} \rangle_{\rho_s} : \langle \mathbf{W}_s(\mathbf{v}_s^{(j)}) \rangle_{\rho_s}$. ■

Proposition C.3.2

Pour tous entiers $i, j \geq -1$, on a la formule

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} -2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle \mathbf{k}^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \cdot \langle \mathbf{W}_{s3}^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} \\ &\quad + \int_{\Omega} \langle \mathbf{m}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)}) \cdot \boldsymbol{\omega}_s^{(j)}(x_3 = \rho_s) d\mathbf{x}. \quad (\text{C.9}) \end{aligned}$$

Démonstration. D'après le corollaire C.1.3,

$$\int_{\Omega} -2\rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle \mathbf{k}^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle \mathbf{m}^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle \operatorname{curl} \boldsymbol{\omega}_s^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x}. \quad (*.1)$$

On applique alors le corollaire 4.6.2 puis le proposition C.2.2 sur le second terme

$$\begin{aligned}
 - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \langle \operatorname{curl} \boldsymbol{\omega}_s^{(j)} \rangle_{\rho_s} d\mathbf{x} &= - \int_{\Omega} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)} \langle \boldsymbol{\omega}_s^{(j)} \rangle_{\rho_s}) d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)}) \cdot \boldsymbol{\omega}_s^{(j)}(x_3 = \rho_s) d\mathbf{x} \\
 &= - \int_{\Omega} \rho_s^{(1)} (\langle \boldsymbol{\sigma}_{s3}^{(i)} \rangle_{\rho_s} - \langle \boldsymbol{\sigma}_{3s}^{(i)} \rangle_{\rho_s}) \cdot \langle \boldsymbol{\omega}_s^{(j)} \rangle_{\rho_s}^{\perp} d\mathbf{x} \\
 &\quad + \int_{\Omega} \langle m^{(i)} \rangle_{\rho_s} \operatorname{curl} (\rho_s^{(1)}) \cdot \boldsymbol{\omega}_s^{(j)}(x_3 = \rho_s) d\mathbf{x}.
 \end{aligned}$$

On conclut avec le corollaire C.1.2. ■

Compléments du chapitre 11

Dans le chapitre 11, nous avons comparé la vitesse expérimentale corrigée (voir section 11.1.2) et la vitesse calculée avec notre modèle (problème 5.3.1). Nous présentons ici les mêmes comparaisons en considérant à la place la vitesse expérimentale non corrigée, uniquement lissée, comme expliqué dans la section 11.1.2.

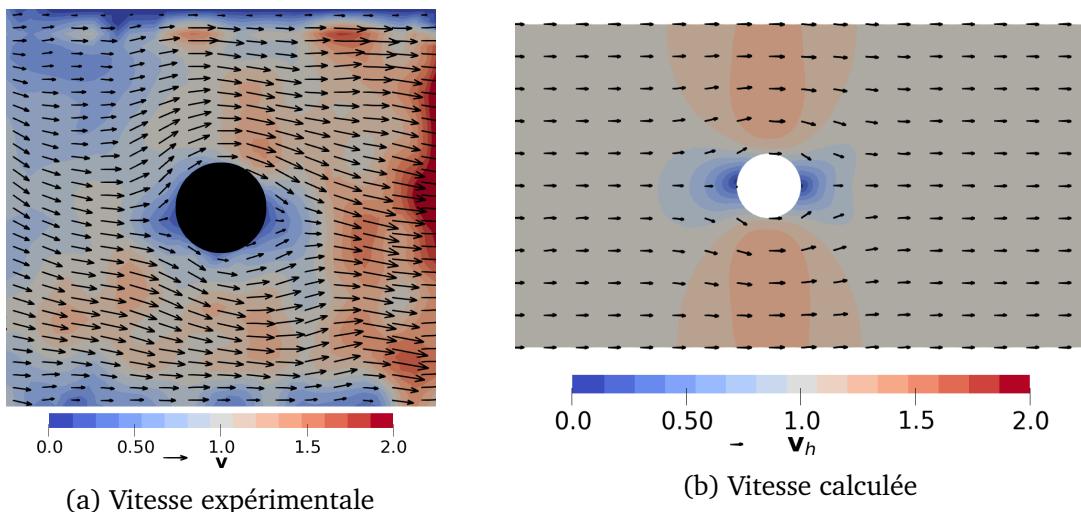


FIGURE D.1. – Exp BBLEBB. Comparaison des cartes des champs de vitesse. Modèle résolu avec les paramètres du tableau 11.1. Expérience avec blebbistatine. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse d'entrée/caractéristique de la migration, c'est-à-dire une vitesse de norme 1.

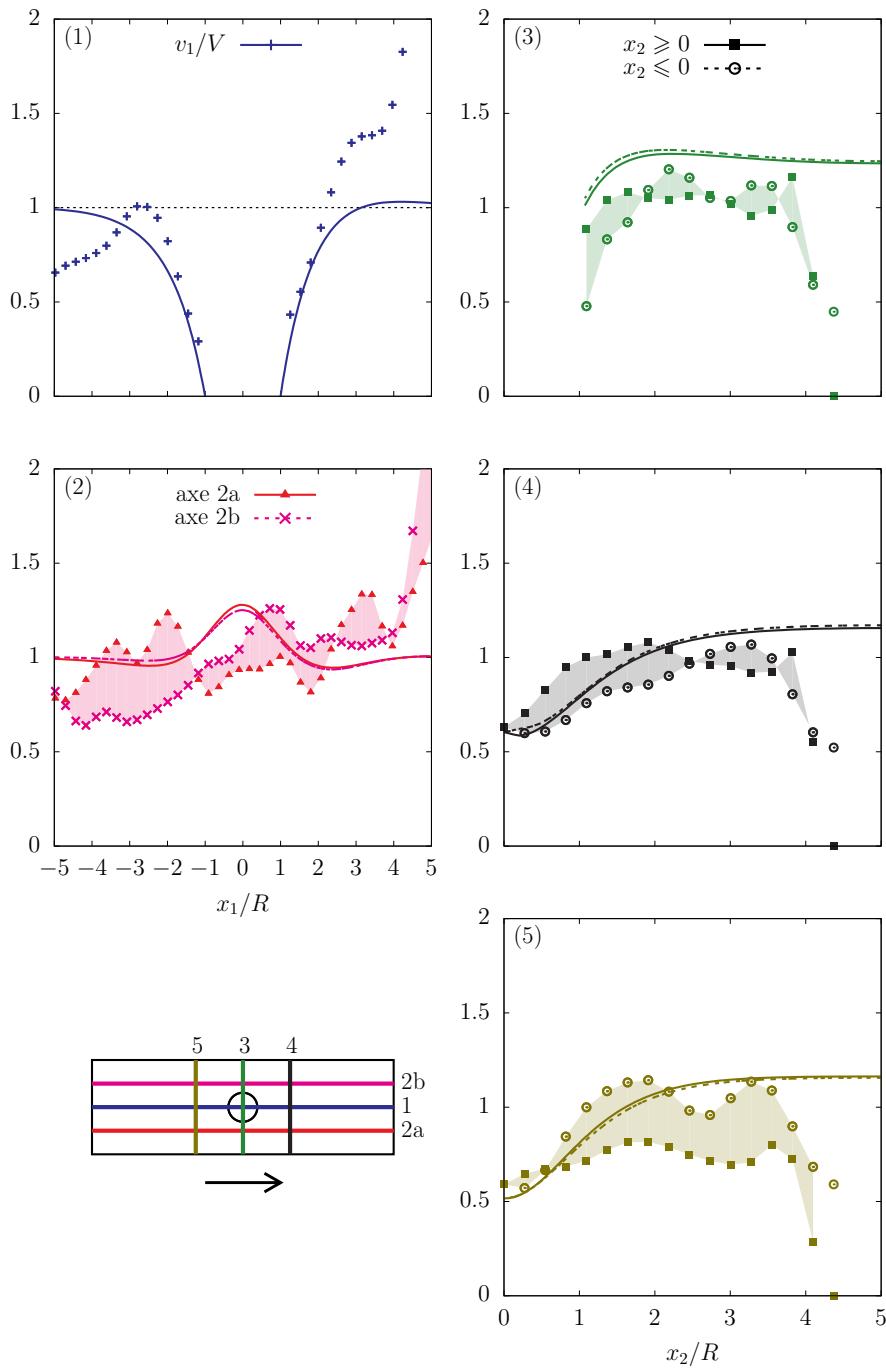


FIGURE D.2. – Exp BBLEBB. Vitesse horizontale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse horizontale mesurée sur bande en présence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 (points). De haut en bas puis de gauche à droite: coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

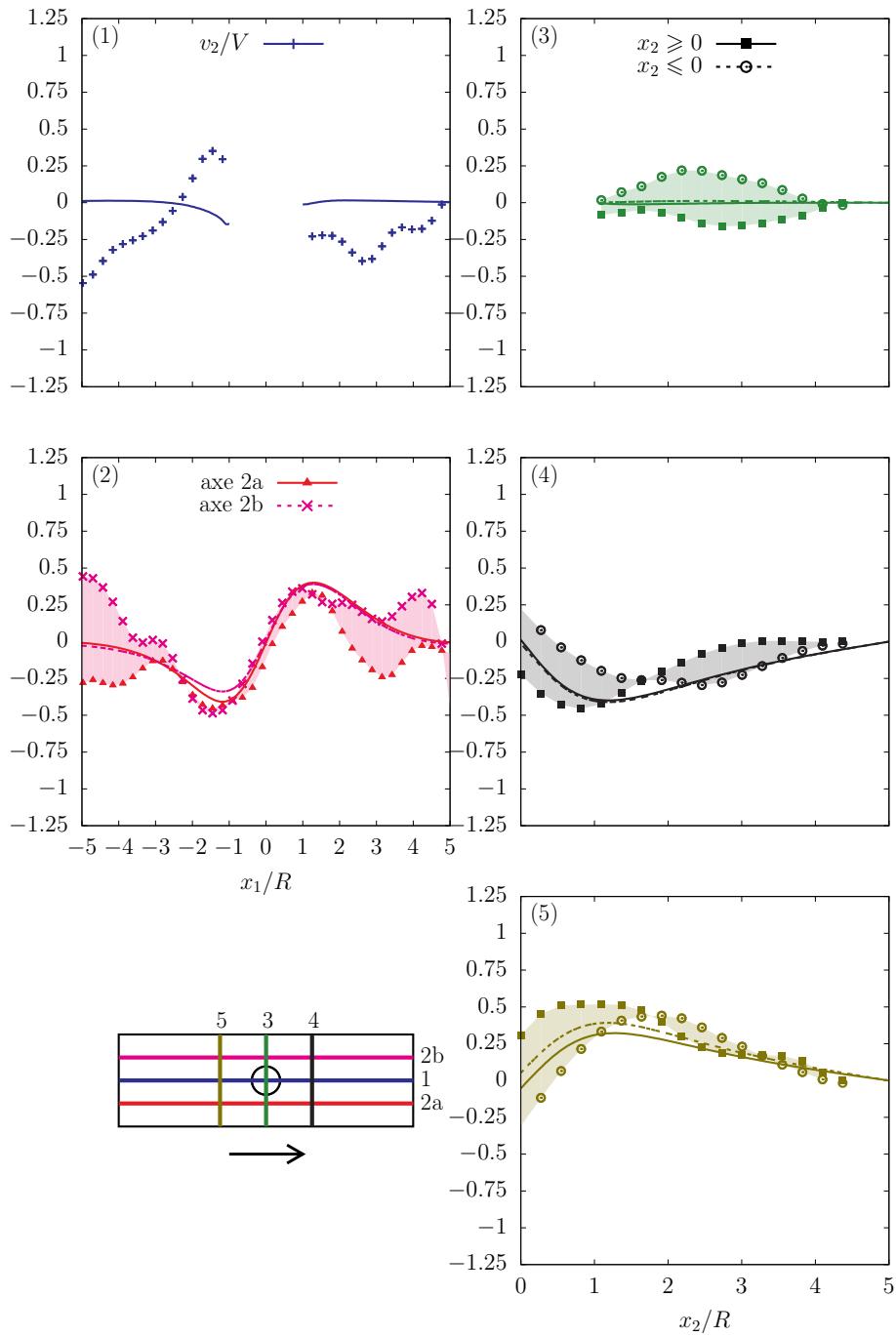


FIGURE D.3. – Exp BBLEBB. Vitesse verticale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse verticale mesurée sur bande en présence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 (points). De haut en bas puis de gauche à droite : coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

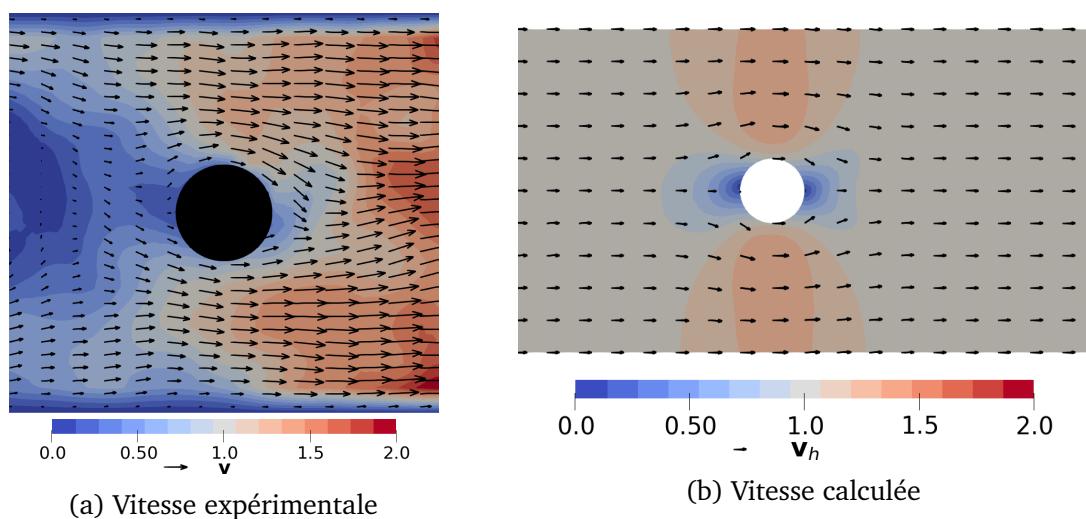


FIGURE D.4. – Exp B. Comparaison des cartes des champs de vitesse. Modèle résolu avec les paramètres du tableau 11.1. Expérience avec blebbistatine. Légende : les flèches noires à gauche des titres des barres de couleur correspondent à la vitesse d'entrée/caractéristique de la migration, c'est-à-dire une vitesse de norme 1.

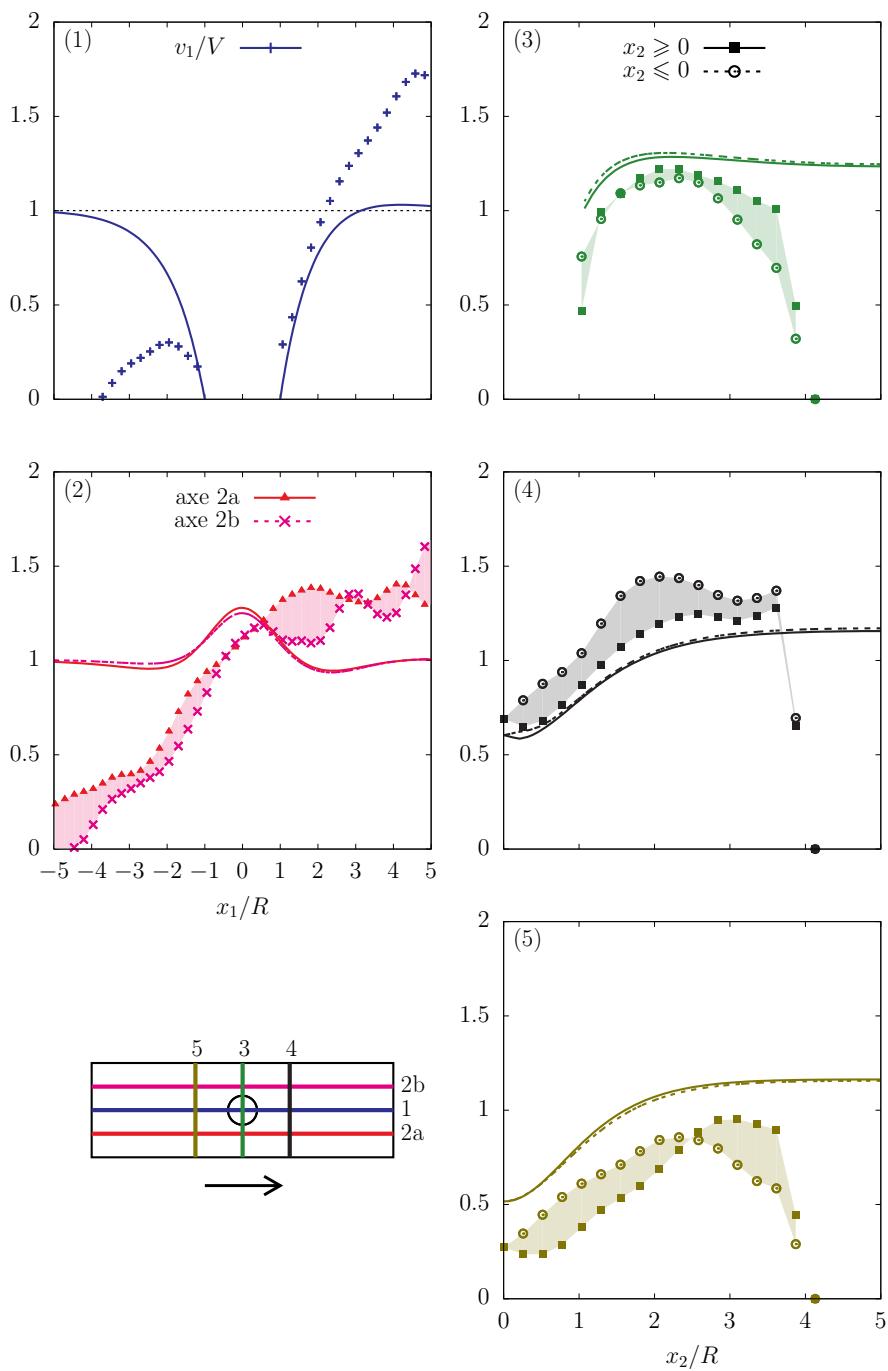


FIGURE D.5. – Exp B. Vitesse horizontale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse horizontale mesurée sur bande en l'absence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 (points). De haut en bas puis de gauche à droite : coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

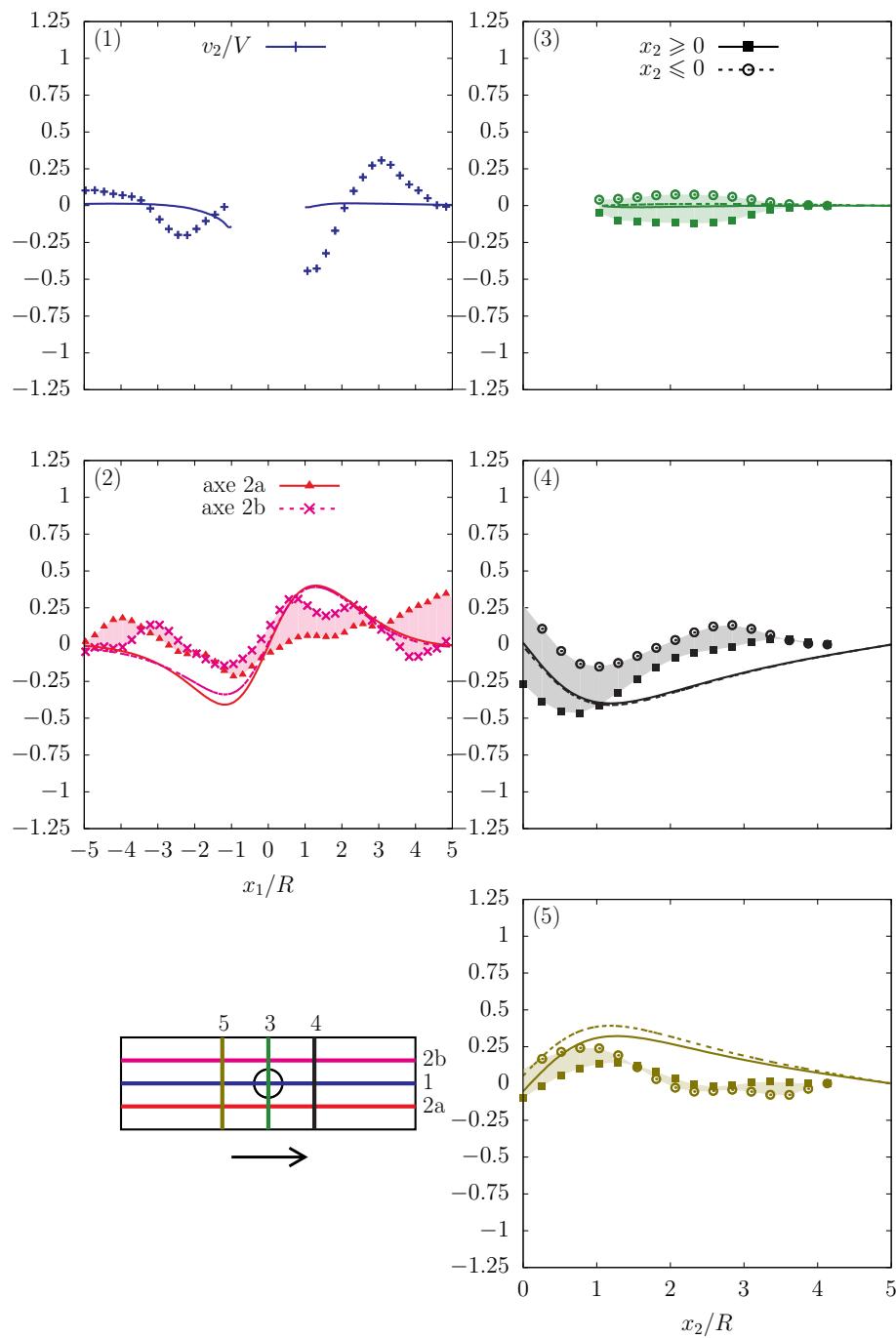


FIGURE D.6. – Exp B. Vitesse verticale du modèle incompressible résolu avec les paramètres donnés par le tableau 11.1 (courbes) et vitesse verticale mesurée sur bande en l'absence de blebbistatine, après un lissage gaussien d'écart-type 1 (points). De haut en bas puis de gauche à droite: coupes suivant les axes définis figure 10.2. Les vitesses sont adimensionnées.

Bibliographie

- [Ant04] Michael ANTCZAK. « The Synthetic and Secretory Behaviors (Nonsteroidal) of Ovarian Follicular Granulosa Cells : Parallels to Cells of the Endothelial Cell Lineage ». In : *Essential IVF : Basic Research and Clinical Applications*. Sous la dir. de Jonathan VAN BLERKOM et Linda GREGORY. Boston, MA : Springer US, 2004. Chap. Chapter One, p. 1-41. ISBN : 978-1-4419-8955-0. DOI : [10.1007/978-1-4419-8955-0_1](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-8955-0_1). URL : https://doi.org/10.1007/978-1-4419-8955-0_1 (cf. p. 1).
- [AT19] R. ALERT et X. TREPAT. « Physical models of collective cell migration ». In : *Ann. Rev. Cond. Matt. Phys.* 11 (2019). eprint : [1905.07675](https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031218-013516). URL : <https://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-conmatphys-031218-013516> (cf. p. 3, 5-7, 9, 10, 12, 15-17, 19, 57, 61, 89, 108, 285).
- [Ave23] Sara AVESANI. « FEM resolution of a viscoelastic fluid model in an abrupt contraction : Applications to highly deformed biological living tissues ». Mém. de mast. University of Verona et University of Grenoble Alpes, 2023. URL : <https://membres-ljk.imag.fr/Pierre.Saramito/Ave-2023-m2r.pdf> (cf. p. 284).
- [BAH87] R. B. BIRD, R. C. ARMSTRONG et O. HASSAGER. *Dynamics of polymeric liquids : Fluid Mechanics*. Seconde édition. T. 1. Wiley-Interscience, 1987. DOI : [10.1017/S0022112090241755](https://doi.org/10.1017/S0022112090241755) (cf. p. 26, 28, 84, 295, 296, 299, 300, 307).
- [Bal+22] Dumitru BALEANU et al. « On the boundedness stepsizes-coefficients of a-bdf methods ». eng. In : (2022). ISSN : 2473-6988. URL : <http://earsiv.cankaya.edu.tr:8080/xmlui/handle/20.500.12416/5863> (visité le 01/03/2023) (cf. p. 173, 183, 185).
- [BB13] François BOUCHUT et Sébastien BOYVAL. « A new model for shallow viscoelastic fluids ». In : *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 23.08 (2013), p. 1479-1526. DOI : [10.1142/S0218202513500140](https://doi.org/10.1142/S0218202513500140). eprint : <https://doi.org/10.1142/S0218202513500140>. URL : <https://doi.org/10.1142/S0218202513500140> (cf. p. 64, 85).

- [BB16] François BOUCHUT et Sébastien BOYVAL. « Unified derivation of thin-layer reduced models for shallow free-surface gravity flows of viscous fluids ». en. In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 55 (jan. 2016), p. 116-131. ISSN : 0997-7546. DOI : [10.1016/j.euromechflu.2015.09.003](https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2015.09.003). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997754615001120> (visité le 23/03/2023) (cf. p. 64, 67).
- [BC17] C. BLANCH-MERCADER et J. CASADEMUNT. « Hydrodynamic instabilities, waves and turbulence in spreading epithelia ». en. In : *Soft Matter* 13.38 (oct. 2017), p. 6913-6928. ISSN : 1744-6848. DOI : [10.1039/C7SM01128H](https://doi.org/10.1039/C7SM01128H). eprint : [1705.00501](https://doi.org/10.1039/C7SM01128H). URL : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/sm/c7sm01128h> (visité le 26/11/2020) (cf. p. 3).
- [BC99] N. J. BALMFORTH et R. V. CRASTER. « A consistent thin-layer theory for Bingham plastics ». en. In : *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 84.1 (juil. 1999), p. 65-81. ISSN : 0377-0257. DOI : [10.1016/S0377-0257\(98\)00133-5](https://doi.org/10.1016/S0377-0257(98)00133-5). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025798001335> (visité le 23/03/2023) (cf. p. 64, 67, 72).
- [Bea+22] Carine P. BEATRICI et al. *Comparing individual-based models of collective movements: active particles versus active cells*. Rapp. tech. arXiv, oct. 2022. DOI : [10.48550/arXiv.2210.11524](https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.11524). URL : [http://arxiv.org/abs/2210.11524](https://arxiv.org/abs/2210.11524) (visité le 27/03/2023) (cf. p. 10).
- [BM19] S. BANERJEE et M. C. MARCHETTI. « Continuum models of collective cell migration ». In : *Cell migrations: causes and functions*. Springer, 2019, p. 45-66. eprint : [1805.06531](https://doi.org/10.1007/978-3-030-18051-1_3) (cf. p. 3, 7, 12, 18, 19, 57).
- [Bon+12] Isabelle BONNET et al. « Mechanical state, material properties and continuous description of an epithelial tissue ». In : *Journal of The Royal Society Interface* 9.75 (2012), p. 2614-2623. DOI : [10.1098/rsif.2012.0263](https://doi.org/10.1098/rsif.2012.0263). eprint : [https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsif.2012.0263](https://doi.org/10.1098/rsif.2012.0263). URL : <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsif.2012.0263> (cf. p. 228).
- [Boo+21] Daniel BOOCOCK et al. « Theory of mechanochemical patterning and optimal migration in cell monolayers ». en. In : *Nature Physics* 17.2 (fév. 2021), p. 267-274. ISSN : 1745-2481. DOI : [10.1038/s41567-020-01037-7](https://doi.org/10.1038/s41567-020-01037-7). URL : [https://www.nature.com/articles/s41567-020-01037-7](https://doi.org/10.1038/s41567-020-01037-7) (visité le 12/07/2024) (cf. p. 3, 57).

-
- [Bre+09] Didier BRESCH et al. « A viscoelastic model for avascular tumor growth ». en. In : *Conference Publications 2009*.Special (sept. 2009), p. 101-108. ISSN : 0133-0189. DOI : [10.3934/proc.2009.2009.101](https://doi.org/10.3934/proc.2009.2009.101). URL : <https://www.aimscolloquium.org/en/article/doi/10.3934/proc.2009.2009.101> (visité le 10/06/2024) (cf. p. 1).
- [Bré83] Haïm BRÉZIS. *Analyse fonctionnelle. Théorie et applications*. fr. Collection mathématiques appliquées pour la maîtrise. Masson, 1983 (cf. p. 315-317).
- [BSS14] Noé BERNABEU, Pierre SARAMITO et Claude SMUTEK. « Numerical modeling of non-Newtonian viscoplastic flows : Part II. Viscoplastic fluids and general tridimensional topographies ». In : *International Journal of Numerical Analysis and Modeling* 11.1 (jan. 2014). Dedicated to Professor Francisco J. Lisbona on the occasion of his 65th Birthday, p. 213-228. URL : <https://hal.science/hal-01059334> (cf. p. 64, 67, 72).
- [BW04] Francois BOUCHUT et Michael WESTDICKENBERG. « Gravity driven shallow water models for arbitrary topography ». In : *Communications in Mathematical Sciences* 2.3 (sept. 2004), p. 359-389. URL : <https://projecteuclid.org/journals/communications-in-mathematical-sciences/volume-2/issue-3/Gravity-driven-shallow-water-models-for-arbitrary-topography/cms/1109868726.full> (visité le 23/03/2023) (cf. p. 64, 85).
- [CC09] Eugène COSSERAT et François COSSERAT. *Théorie des corps déformables*. Paris : A. Hermann et Fils, 1909. DOI : [10.1038/081067a0](https://doi.org/10.1038/081067a0). URL : <https://www.nature.com/articles/081067a0> (cf. p. 40).
- [CD07] Stephen C. COWIN et Stephen B. DOTY. *Tissue Mechanics*. Springer-Verlag New York, 2007. DOI : [10.1007/978-0-387-49985-7](https://doi.org/10.1007/978-0-387-49985-7). URL : <https://www.springer.com/gp/book/9780387368252> (cf. p. 1, 7, 10, 12).
- [Cha92] S. CHANDRASEKHAR. *Liquid Crystals*. Second. Cambridge University Press, 1992. DOI : [10.1017/CBO9780511622496](https://doi.org/10.1017/CBO9780511622496) (cf. p. 12, 13).
- [Che+11] I. CHEDDADI et al. « Understanding and predicting viscous, elastic, plastic flows ». en. In : *The European Physical Journal E* 34.1 (jan. 2011), p. 1. ISSN : 1292-895X. DOI : [10.1140/epje/i2011-11001-4](https://doi.org/10.1140/epje/i2011-11001-4). URL : <https://doi.org/10.1140/epje/i2011-11001-4> (visité le 27/03/2023) (cf. p. 19, 246, 295).
- [Che10] Ibrahim CHEDDADI. « Modélisation numérique d'écoulements de mousse ». Theses. Université Joseph-Fourier - Grenoble I ; Université de Grenoble, juin

2010. URL : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00497436> (cf. p. 219).
- [Cia03] P. G. CIARLET. *Handbook of numerical analysis. Volume 12. Computational models for the human body*. Elsevier, 2003 (cf. p. 1, 12).
- [Clé+17] Raphaël CLÉMENT et al. « Viscoelastic Dissipation Stabilizes Cell Shape Changes during Tissue Morphogenesis ». In : *Current Biology* 27.20 (oct. 2017), p. 3132-3142. ISSN : 0960-9822. DOI : [10.1016/j.cub.2017.09.005](https://doi.org/10.1016/j.cub.2017.09.005). URL : [https://www.cell.com/action/showPdf?pii=S0960-9822\(17\)31169-7](https://www.cell.com/action/showPdf?pii=S0960-9822(17)31169-7) (cf. p. 1, 12).
- [CN63] Bernard D. COLEMAN et Walter NOLL. « The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity ». en. In : *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 13.1 (déc. 1963), p. 167-178. ISSN : 1432-0673. DOI : [10.1007/BF01262690](https://doi.org/10.1007/BF01262690). URL : <https://doi.org/10.1007/BF01262690> (visité le 04/09/2023) (cf. p. 40, 50).
- [CR17] B. A. CAMLEY et W.-J. RAPPEL. « Physical models of collective cell motility: from cell to tissue ». en. In : *Journal of Physics D : Applied Physics* 50.11 (fév. 2017), p. 113002. ISSN : 0022-3727. DOI : [10.1088/1361-6463/aa56fe](https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa56fe). URL : <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6463/aa56fe> (visité le 17/11/2020) (cf. p. 3, 10).
- [CSH20] Fabio CRAMERI, Grace E. SHEPHARD et Philip J. HERON. « The misuse of colour in science communication ». en. In : *Nature Communications* 11.1 (oct. 2020), p. 5444. ISSN : 2041-1723. DOI : [10.1038/s41467-020-19160-7](https://doi.org/10.1038/s41467-020-19160-7). URL : <https://www.nature.com/articles/s41467-020-19160-7> (visité le 26/06/2024) (cf. p. 219).
- [CV07] R. CHOTARD-GHODSNIA et C. VERDIER. « Rheology of Living Materials ». In : *Modeling of Biological Materials*. Sous la dir. de Francesco MOLLICA, Luigi PREZIOSI et K. R. RAJAGOPAL. Boston, MA : Birkhäuser Boston, 2007, p. 1-31. ISBN : 978-0-8176-4411-6. DOI : [10.1007/978-0-8176-4411-6_1](https://doi.org/10.1007/978-0-8176-4411-6_1). URL : https://doi.org/10.1007/978-0-8176-4411-6_1 (cf. p. 1, 12).
- [Cza+18] Michael CZAJKOWSKI et al. « Hydrodynamics of shape-driven rigidity transitions in motile tissues ». en. In : *Soft Matter* 14.27 (juil. 2018), p. 5628-5642. ISSN : 1744-6848. DOI : [10.1039/C8SM00446C](https://doi.org/10.1039/C8SM00446C). URL : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/sm/c8sm00446c> (visité le 27/11/2020) (cf. p. 3, 19, 57, 61).

-
- [DP03] Hua-Shu DOU et Nhan PHAN-THIEN. « Negative wake in the uniform flow past a cylinder ». en. In : *Rheologica Acta* 42.5 (sept. 2003), p. 383-409. ISSN : 1435-1528. DOI : [10.1007/s00397-003-0293-z](https://doi.org/10.1007/s00397-003-0293-z). URL : <https://doi.org/10.1007/s00397-003-0293-z> (visité le 11/07/2024) (cf. p. 246, 248, 261).
- [Dup03] A. DUPERRAY. « Molécules d'adhérence et signalisation cellulaire ». In : *Éléments de biologie à l'usage d'autres disciplines*. Sous la dir. de P. TRACQUI et J. DEMONGEOT. EDP Sciences, 2003. Chap. V (cf. p. 1, 4, 5).
- [Dur+19] M. DURANDE et al. « Fast determination of coarse-grained cell anisotropy and size in epithelial tissue images using Fourier transform ». In : *Physical Review E* 99.6 (juin 2019), p. 062401. DOI : [10.1103/PhysRevE.99.062401](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.062401). URL : <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.99.062401> (visité le 19/11/2020) (cf. p. 264).
- [Dur20] Mélina DURANDE. « Migration cellulaire par forçage d'hétérogénéité ». Thèse de doct. Université de Paris, août 2020 (cf. p. 1, 5, 8, 219, 221, 259, 263-266, 271, 281, 285, 290).
- [Ede74] Dominic G. B. EDELEN. « Primitive thermodynamics : A new look at the Clausius-Duhem inequality ». In : *International Journal of Engineering Science* 12.2 (fév. 1974), p. 121-141. ISSN : 0020-7225. DOI : [10.1016/0020-7225\(74\)90012-3](https://doi.org/10.1016/0020-7225(74)90012-3). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0020722574900123> (visité le 30/05/2024) (cf. p. 37).
- [Eri01] A. Cemal ERINGEN. *Microcontinuum Field Theories. II. Fluent Media*. First edition. Springer-Verlag New York, 2001. ISBN : 978-0-387-98969-3 (cf. p. 10, 12, 40, 41).
- [Eri80] A. C. ERINGEN. *Mechanics of Continua*. Second. Huntington, New York, Robert E. Krieger Publ. Co., 1980 (cf. p. 29, 35).
- [Eri99] A. Cemal ERINGEN. *Microcontinuum Field Theories. I. Foundations and Solids*. First edition. Springer-Verlag New York, 1999. ISBN : 978-1-4612-0555-5. DOI : [10.1007/978-1-4612-0555-5](https://doi.org/10.1007/978-1-4612-0555-5) (cf. p. 10, 36, 37, 40, 41, 295).
- [ET74] I. EKELAND et R. TEMAM. *Analyse convexe et problèmes variationnels*. Etudes mathématiques. Dunod, 1974. ISBN : 9782040073688. URL : <https://books.google.fr/books?id=GqtxQgAACAAJ> (cf. p. 327-329).

- [Éti+15] Jocelyn ÉTIENNE et al. « Cells as liquid motors : Mechanosensitivity emerges from collective dynamics of actomyosin cortex ». In : *Proc Natl Acad Sci USA* 112.9 (mar. 2015), p. 2740. DOI : [10.1073/pnas.1417113112](https://doi.org/10.1073/pnas.1417113112). URL : <http://www.pnas.org/content/112/9/2740.abstract> (cf. p. 1, 12).
- [Eva98] Lawrence Craig EVANS. *Partial differential equations*. Graduate Studies in Mathematics 19. American Mathematical Society, 1998 (cf. p. 313-316).
- [FM15] Sylvain FAURE et Bertrand MAURY. « Crowd motion from the granular stand-point ». In : *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* 25.03 (2015), p. 463-493. DOI : [10.1142/S0218202515400035](https://doi.org/10.1142/S0218202515400035). eprint : <https://doi.org/10.1142/S0218202515400035>. URL : <https://doi.org/10.1142/S0218202515400035> (cf. p. 2).
- [FNV10] Enrique D. FERNÁNDEZ-NIETO, Pascal NOBLE et Jean-Paul VILA. « Shallow Water equations for Non-Newtonian fluids ». en. In : *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 165.13 (juil. 2010), p. 712-732. ISSN : 0377-0257. DOI : [10.1016/j.jnnfm.2010.03.008](https://doi.org/10.1016/j.jnnfm.2010.03.008). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377025710000947> (visité le 23/03/2023) (cf. p. 64).
- [Fre98] Christoph FREDEBEUL. « A-BDF : A Generalization of the Backward Differentiation Formulae ». In : *SIAM Journal on Numerical Analysis* 35.5 (1998), p. 1917-1938. DOI : [10.1137/S0036142996306217](https://doi.org/10.1137/S0036142996306217). eprint : <https://doi.org/10.1137/S0036142996306217>. URL : <https://doi.org/10.1137/S0036142996306217> (cf. p. 21, 173, 178, 179, 183, 184).
- [Fun93] Y. C. FUNG. *Biomechanics. Mechanical Properties of Living Tissues*. Second. Springer-Verlag New York, 1993. DOI : [10.1007/978-1-4757-2257-4](https://doi.org/10.1007/978-1-4757-2257-4). URL : <https://www.springer.com/gp/book/9780387979472> (cf. p. 1, 10, 12).
- [GJG05] Edgar R. GOMES, Shantanu JANI et Gregg G. GUNDERSEN. « Nuclear Movement Regulated by Cdc42, MRCK, Myosin, and Actin Flow Establishes MTOC Polarization in Migrating Cells ». English. In : *Cell* 121.3 (mai 2005), p. 451-463. ISSN : 0092-8674, 1097-4172. DOI : [10.1016/j.cell.2005.02.022](https://doi.org/10.1016/j.cell.2005.02.022). URL : [https://www.cell.com/cell/abstract/S0092-8674\(05\)00188-1](https://www.cell.com/cell/abstract/S0092-8674(05)00188-1) (visité le 06/07/2024) (cf. p. 5, 288).
- [GM95] Paul GERMAIN et Patrick MULLER. *Introduction à la mécanique des milieux continus*. Seconde édition. Enseignement de la physique. Masson, 1995 (cf. p. 26).

-
- [GP00] Jean-Frédéric GERBEAU et Benoît PERTHAME. *Derivation of Viscous Saint-Venant System for Laminar Shallow Water; Numerical Validation*. Research Report RR-4084. Projet M3N. INRIA, 2000. URL : <https://hal.inria.fr/inria-00072549> (cf. p. 64).
- [GP93] P. G. de GENNES et J. PROST. *The Physics of Liquid Crystals*. Second. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press Publication, 1993. ISBN : 9780198517856 (cf. p. 10, 12-15, 39, 52).
- [Gra+08] F. GRANER et al. « Discrete rearranging disordered patterns, part I: Robust statistical tools in two or three dimensions ». In : *The European Physical Journal E* 25.4 (2008), p. 349-369. ISSN : 1292-895X. DOI : [10.1140/epje/i2007-10298-8](https://doi.org/10.1140/epje/i2007-10298-8). URL : <https://doi.org/10.1140/epje/i2007-10298-8> (cf. p. 10, 26, 266).
- [Grm93] Miroslav GRMELA. « Weakly nonlocal hydrodynamics ». In : *Phys. Rev. E* 47 (1 jan. 1993), p. 351-365. DOI : [10.1103/PhysRevE.47.351](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.351). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.47.351> (cf. p. 38, 39).
- [Gui+15] Boris GUIRAO et al. « Unified quantitative characterization of epithelial tissue development ». In : *eLife* 4 (déc. 2015), e08519. ISSN : 2050-084X. DOI : [10.7554/eLife.08519](https://doi.org/10.7554/eLife.08519). URL : <https://doi.org/10.7554/eLife.08519> (visité le 27/03/2023) (cf. p. 20).
- [Gum96] Barry M. GUMBINER. « Cell Adhesion : The Molecular Basis of Tissue Architecture and Morphogenesis ». In : *Cell* 84.3 (fév. 1996), p. 345-357. ISSN : 0092-8674. DOI : [10.1016/S0092-8674\(00\)81279-9](https://doi.org/10.1016/S0092-8674(00)81279-9). URL : [https://doi.org/10.1016/S0092-8674\(00\)81279-9](https://doi.org/10.1016/S0092-8674(00)81279-9) (cf. p. 7).
- [HD11] Ali R. HADJESFANDIARI et Gary F. DARGUSH. « Couple stress theory for solids ». In : *International Journal of Solids and Structures* 48.18 (sept. 2011), p. 2496-2510. ISSN : 0020-7683. DOI : [10.1016/j.ijsolstr.2011.05.002](https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2011.05.002). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768311001727> (visité le 20/10/2023) (cf. p. 25, 40, 41).
- [Hec98] Frédéric HECHT. « bamg : Bidimensional anisotropic mesh generator ». In : (jan. 1998) (cf. p. 220).
- [HHD15] Ali R. HADJESFANDIARI, Arezoo HAJESFANDIARI et Gary F. DARGUSH. « Skew-symmetric couple-stress fluid mechanics ». en. In : *Acta Mechanica* 226.3 (mar. 2015), p. 871-895. ISSN : 1619-6937. DOI : [10.1007/s00707-014-1223-0](https://doi.org/10.1007/s00707-014-1223-0).

- URL : <https://doi.org/10.1007/s00707-014-1223-0> (visité le 30/05/2024) (cf. p. 20, 40-44, 46, 51).
- [HS17] Vincent HAKIM et Pascal SILBERZAN. « Collective cell migration: a physics perspective ». In : *Reports on Progress in Physics* 80.7 (avr. 2017), p. 076601. DOI : [10.1088/1361-6633/aa65ef](https://doi.org/10.1088/1361-6633/aa65ef). URL : <https://doi.org/10.1088/1361-6633/aa65ef> (cf. p. 3, 9, 10).
- [HS75] Bernard HALPHEN et Quoc SON NGUYEN. « Sur les matériaux standard généralisés ». In : *Journal de Mécanique* 14 (1975), p. 39-63. URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00105514> (cf. p. 29).
- [Hum03] J. D. HUMPHREY. « Review Paper: Continuum biomechanics of soft biological tissues ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 459.2029 (2003), p. 3-46. DOI : [10.1098/rspa.2002.1060](https://doi.org/10.1098/rspa.2002.1060). URL : <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.2002.1060> (cf. p. 1, 10-12).
- [HWN93] Ernst HAIRER, Gerhard WANNER et Syvert P. NØRSETT. *Solving Ordinary Differential Equations I*. en. Second. Springer Series in Computational Mathematics. Springer Berlin, Heidelberg, 1993. ISBN : 978-3-540-56670-0. URL : <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-540-78862-1> (visité le 02/05/2024) (cf. p. 21, 174, 175, 178, 197).
- [IM23] Muhamet IBRAHIMI et Matthias MERKEL. « Deforming polar active matter in a scalar field gradient ». en. In : *New Journal of Physics* 25.1 (jan. 2023), p. 013022. ISSN : 1367-2630. DOI : [10.1088/1367-2630/acb2e5](https://doi.org/10.1088/1367-2630/acb2e5). URL : <https://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/acb2e5> (visité le 10/06/2024) (cf. p. 19).
- [JGS18] Frank JÜLICHER, Stephan W. GRILL et Guillaume SALBREUX. « Hydrodynamic theory of active matter ». In : *Reports on Progress in Physics* 81.7 (juin 2018), p. 076601. DOI : [10.1088/1361-6633/aab6bb](https://doi.org/10.1088/1361-6633/aab6bb). URL : <https://doi.org/10.1088/1361-6633/aab6bb> (cf. p. 10).
- [KP13] Michael H. KÖPF et Len M. PISMEN. « A continuum model of epithelial spreading ». en. In : *Soft Matter* 9.14 (mar. 2013), p. 3727-3734. ISSN : 1744-6848. DOI : [10.1039/C3SM26955H](https://doi.org/10.1039/C3SM26955H). URL : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2013/sm/c3sm26955h> (visité le 25/11/2020) (cf. p. 3).

-
- [Kru+05] K. KRUSE et al. « Generic theory of active polar gels : a paradigm for cytoskeletal dynamics ». en. In : *The European Physical Journal E* 16.1 (jan. 2005), p. 5-16. ISSN : 1292-895X. DOI : [10.1140/epje/e2005-00002-5](https://doi.org/10.1140/epje/e2005-00002-5). eprint : [physics/0406058](https://arxiv.org/abs/physics/0406058). URL : <https://link.springer.com/article/10.1140/epje/e2005-00002-5> (visité le 17/11/2020) (cf. p. 56).
- [Lin+18] Shao-Zhen LIN et al. « Dynamic Migration Modes of Collective Cells ». English. In : *Biophysical Journal* 115.9 (nov. 2018), p. 1826-1835. ISSN : 0006-3495. DOI : [10.1016/j.bpj.2018.09.010](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2018.09.010). URL : [https://www.cell.com/biophysj/abstract/S0006-3495\(18\)31062-2](https://www.cell.com/biophysj/abstract/S0006-3495(18)31062-2) (visité le 30/06/2024) (cf. p. 254, 259).
- [LM90] K. F. LIU et C. C. MEI. « Approximate equations for the slow spreading of a thin sheet of Bingham plastic fluid ». In : *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 2.1 (jan. 1990), p. 30-36. ISSN : 0899-8213. DOI : [10.1063/1.857821](https://doi.org/10.1063/1.857821). URL : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.857821> (visité le 23/03/2023) (cf. p. 64, 67).
- [LMR23] Shao-Zhen LIN, Matthias MERKEL et Jean-François RUPPRECHT. « Structure and Rheology in Vertex Models under Cell-Shape-Dependent Active Stresses ». In : *Physical Review Letters* 130.5 (fév. 2023), p. 058202. DOI : [10.1103/PhysRevLett.130.058202](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.058202). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.130.058202> (visité le 11/07/2024) (cf. p. 252).
- [LMT16] Benoit LADOUX, René-Marc MÈGE et Xavier TREPAT. « Front–Rear Polarization by Mechanical Cues: From Single Cells to Tissues ». English. In : *Trends in Cell Biology* 26.6 (juin 2016), p. 420-433. DOI : [10.1016/j.tcb.2016.02.002](https://doi.org/10.1016/j.tcb.2016.02.002). URL : [https://www.cell.com/trends/cell-biology/abstract/S0962-8924\(16\)00014-3](https://www.cell.com/trends/cell-biology/abstract/S0962-8924(16)00014-3) (visité le 12/11/2020) (cf. p. 3-6, 9, 10).
- [LW11] Pilhwa LEE et Charles W. WOLGEMUTH. « Crawling Cells Can Close Wounds without Purse Strings or Signaling ». en. In : *PLOS Computational Biology* 7.3 (mar. 2011), e1002007. ISSN : 1553-7358. DOI : [10.1371/journal.pcbi.1002007](https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1002007). URL : <https://journals.plos.org/ploscompbiol/article?id=10.1371/journal.pcbi.1002007> (visité le 25/11/2020) (cf. p. 3).
- [Mar+13] M. C. MARCETTI et al. « Hydrodynamics of soft active matter ». In : *Reviews of Modern Physics* 85.3 (juil. 2013), p. 1143-1189. DOI : [10.1103/RevModPhys.85.1143](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.85.1143). URL : <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.85.1143> (visité le 18/11/2020) (cf. p. 2, 10, 12, 14-16, 36, 37, 55, 58, 111, 254, 259, 285, 295).

- [Mar07] Fabien MARCHE. « Derivation of a new two-dimensional viscous shallow water model with varying topography, bottom friction and capillary effects ». en. In : *European Journal of Mechanics - B/Fluids* 26.1 (jan. 2007), p. 49-63. ISSN : 0997-7546. DOI : [10.1016/j.euromechflu.2006.04.007](https://doi.org/10.1016/j.euromechflu.2006.04.007). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997754606000719> (visité le 23/03/2023) (cf. p. 64, 67, 81).
- [Mar14] Philippe MARCQ. « Spatio-temporal dynamics of an active, polar, viscoelastic ring ». en. In : *The European Physical Journal E* 37.4 (avr. 2014), p. 29. ISSN : 1292-895X. DOI : [10.1140/epje/i2014-14029-x](https://doi.org/10.1140/epje/i2014-14029-x). eprint : [1402.3987](https://arxiv.org/abs/1402.3987). URL : <https://doi.org/10.1140/epje/i2014-14029-x> (visité le 25/11/2020) (cf. p. 18, 57, 61).
- [Mor09] Kenneth MORELAND. « Diverging Color Maps for Scientific Visualization ». en. In : *Advances in Visual Computing*. Sous la dir. de George BEBIS et al. Berlin, Heidelberg : Springer, 2009, p. 92-103. ISBN : 9783642105203. DOI : [10.1007/978-3-642-10520-3_9](https://doi.org/10.1007/978-3-642-10520-3_9) (cf. p. 219).
- [Nas+20] Paulina NASTALY et al. « Role of the nuclear membrane protein Emerin in front-rear polarity of the nucleus ». en. In : *Nature Communications* 11.1 (mai 2020), p. 2122. ISSN : 2041-1723. DOI : [10.1038/s41467-020-15910-9](https://doi.org/10.1038/s41467-020-15910-9). URL : <https://www.nature.com/articles/s41467-020-15910-9> (visité le 06/07/2024) (cf. p. 5, 288).
- [Not+16] Jacob NOTBOHM et al. « Cellular Contraction and Polarization Drive Collective Cellular Motion ». In : *Biophysical Journal* 110.12 (2016). ISSN : 0006-3495. DOI : <https://doi.org/10.1016/j.bpj.2016.05.019>. URL : [http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349516303010](https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349516303010) (cf. p. 3, 19, 57, 61).
- [NPC09] N. C. NGUYEN, J. PERAIRE et B. COCKBURN. « An implicit high-order hybridizable discontinuous Galerkin method for linear convection–diffusion equations ». en. In : *Journal of Computational Physics* 228.9 (mai 2009), p. 3232-3254. ISSN : 0021-9991. DOI : [10.1016/j.jcp.2009.01.030](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2009.01.030). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999109000308> (visité le 13/03/2023) (cf. p. 286, 287).
- [Old50] J. G. OLDROYD. « On the formulation of rheological equations of states ». In : *Proc. R. Soc. Lond. A* 200 (1950), p. 523-541. URL : <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/200/1063/523.full.pdf> (cf. p. 12, 64, 288).

-
- [PE11] Daniele Antonio Di PIETRO et Alexandre ERN. *Mathematical Aspects of Discontinuous Galerkin Methods*. First. T. 69. Mathématiques et Applications 1. Springer Berlin, Heidelberg, nov. 2011. ISBN : 978-3-642-22980-0. DOI : <https://doi.org/10.1007/978-3-642-22980-0>. URL : <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-22980-0> (cf. p. 21, 116, 117, 119, 121-125, 129, 131, 138, 140, 155, 167, 173, 185, 188, 286, 313, 315, 316).
- [Pér+19] Carlos PÉREZ-GONZÁLEZ et al. « Active wetting of epithelial tissues ». In : *Nature Physics* 15.1 (2019), p. 79-88. ISSN : 1745-2481. DOI : [10.1038/s41567-018-0279-5](https://doi.org/10.1038/s41567-018-0279-5). URL : <https://doi.org/10.1038/s41567-018-0279-5> (cf. p. 3).
- [Pop+17] Marko POPOVIĆ et al. « Active dynamics of tissue shear flow ». In : *New Journal of Physics* 19.3 (mar. 2017), p. 033006. DOI : [10.1088/1367-2630/aa5756](https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa5756). URL : <https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa5756> (cf. p. 3).
- [PS96] Benoit PERTHAME et Chi-Wang SHU. « On positivity preserving finite volume schemes for Euler equations ». en. In : *Numerische Mathematik* 73.1 (mar. 1996), p. 119-130. ISSN : 0945-3245. DOI : [10.1007/s002110050187](https://doi.org/10.1007/s002110050187). URL : <https://doi.org/10.1007/s002110050187> (visité le 12/05/2024) (cf. p. 185, 188).
- [QSS07] Alfio QUARTERONI, Riccardo SACCO et Fausto SALERI. *Méthodes Numériques : Algorithmes, analyse et applications*. Springer Milano, fév. 2007. ISBN : 978-88-470-0495-5 (cf. p. 196).
- [Sai71] Adhémar Jean Claude Barré de SAINT-VENANT. « Théorie et équations générales du mouvement non permanent des eaux courantes ». In : *Comptes Rendus des séances de l'Académie des Sciences, Paris, France, Séance* 17.73 (1871), p. 147-154 (cf. p. 63).
- [San+14] D. SANCHEZ-MOLINA et al. « A Microcontinuum Model for Mechanical Properties of Esophageal Tissue: Experimental Methodology and Constitutive Analysis ». en. In : *Annals of Biomedical Engineering* 42.1 (jan. 2014), p. 62-72. ISSN : 1573-9686. DOI : [10.1007/s10439-013-0897-0](https://doi.org/10.1007/s10439-013-0897-0). URL : <https://doi.org/10.1007/s10439-013-0897-0> (visité le 09/07/2024) (cf. p. 41).
- [Sar16] Pierre SARAMITO. *Complex fluids : Modeling and Algorithms*. en. Mathématiques et Applications. Springer International Publishing, 2016. ISBN : 9783319443614.

- DOI : [10.1007/978-3-319-44362-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-44362-1). (Visité le 14/10/2020) (cf. p. 2, 12, 26, 29, 30, 116, 117, 124, 152, 155, 286, 317, 318, 327-330).
- [Sar20] Pierre SARAMITO. *Efficient C++ finite element computing with Rheolef*. CNRS-CCSD ed., 2020 (cf. p. 116, 130, 140, 148, 149, 155, 173, 203, 217, 286, 309, 335).
- [Sar24] Pierre SARAMITO. *Continuum Modeling from Thermodynamics : Application to Complex Fluids and Soft Solids*. Springer, déc. 2024. URL : <https://hal.science/hal-03893505> (visité le 04/09/2023) (cf. p. 20, 26, 28-32, 34, 35, 37, 38, 52, 101, 246, 295, 296, 298, 307).
- [Saw+17] Thuan Beng SAW et al. « Topological defects in epithelia govern cell death and extrusion ». In : *Nature* 544.7649 (2017), p. 212-216. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/nature21718](https://doi.org/10.1038/nature21718). URL : <https://doi.org/10.1038/nature21718> (cf. p. 3, 259).
- [SCS23] Nathan SHOURICK, Ibrahim CHEDDADI et Pierre SARAMITO. « A new framework for shallow approximations of incompressible flows ». fr. In : *Comptes Rendus. Mathématique* 361.G11 (2023), p. 1767-1783. ISSN : 1778-3569. DOI : [10.5802/crmath.526](https://doi.org/10.5802/crmath.526). URL : <https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/mathematique/articles/10.5802/crmath.526/> (visité le 03/06/2024) (cf. p. 20, 63, 96).
- [Sha05] Khosro SHAHBAZI. « An explicit expression for the penalty parameter of the interior penalty method ». In : *Journal of Computational Physics* 205.2 (mai 2005), p. 401-407. ISSN : 0021-9991. DOI : [10.1016/j.jcp.2004.11.017](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.11.017). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999104004796> (visité le 18/06/2024) (cf. p. 130).
- [SM03] Endre SÜLI et David F. MAYER. *An Introduction to Numerical Analysis*. Cambridge : Cambridge University Press, 2003. ISBN : 9780521007948. DOI : [10.1017/CBO9780511801181](https://doi.org/10.1017/CBO9780511801181). URL : <https://www.cambridge.org/core/books/an-introduction-to-numerical-analysis/FD8BCAD7FE68002E2179D> (visité le 02/05/2024) (cf. p. 174-177).
- [SS13] Ulrich S. SCHWARZ et Samuel A. SAFRAN. « Physics of adherent cells ». In : *Rev. Mod. Phys.* 85 (3 août 2013), p. 1327-1381. DOI : [10.1103/RevModPhys.85.1327](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.85.1327). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.85.1327> (cf. p. 285).

-
- [SS15] Ulrich S. SCHWARZ et Jérôme R. D. SOINÉ. « Traction force microscopy on soft elastic substrates : A guide to recent computational advances ». In : *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular Cell Research*. Mechanobiology 1853.11, Part B (nov. 2015), p. 3095-3104. ISSN : 0167-4889. DOI : [10.1016/j.bbamcr.2015.05.028](https://doi.org/10.1016/j.bbamcr.2015.05.028). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167488915001822> (visité le 05/07/2024) (cf. p. 285).
- [Sto50] George Gabriel STOKES. « On the Effect of the Internal Friction of Fluids on Pendulums ». In : *Transactions of the Cambridge Philosophical Society* IX (1850) (cf. p. 19).
- [Sto66] Vijay Kumar STOKES. « Couple Stresses in Fluids ». In : *The Physics of Fluids* 9.9 (sept. 1966), p. 1709-1715. ISSN : 0031-9171. DOI : [10.1063/1.1761925](https://doi.org/10.1063/1.1761925). URL : <https://doi.org/10.1063/1.1761925> (visité le 30/05/2024) (cf. p. 41).
- [Sto84] Vijay Kumar STOKES. *Theories of Fluids with Microstructure. An Introduction*. First. Springer, Berlin, Heidelberg, 1984. DOI : <https://doi.org/10.1007/978-3-642-82351-0> (cf. p. 10, 12, 25, 26, 28, 29, 41, 42, 46, 51, 295).
- [SV01] André M. SONNET et Epifanio G. VIRGA. « Dynamics of dissipative ordered fluids ». In : *Physical Review E* 64.3 (août 2001), p. 031705. DOI : [10.1103/PhysRevE.64.031705](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.64.031705). URL : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.64.031705> (visité le 07/12/2020) (cf. p. 51).
- [TCJ12] Xavier TREPAT, Zaozao CHEN et Ken JACOBSON. « Cell Migration ». en. In : *Comprehensive Physiology*. American Cancer Society, 2012, p. 2369-2392. ISBN : 9780470650714. DOI : [10.1002/cphy.c110012](https://doi.org/10.1002/cphy.c110012). URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cphy.c110012> (visité le 16/11/2020) (cf. p. 1, 4).
- [TGD22] Sham L. TLILI, François GRANER et Hélène DELANOË-AYARI. « A microfluidic platform to investigate the role of mechanical constraints on tissue reorganization ». In : *Development* 149.20 (nov. 2022), dev200774. ISSN : 0950-1991. DOI : [10.1242/dev.200774](https://doi.org/10.1242/dev.200774). URL : <https://doi.org/10.1242/dev.200774> (visité le 04/07/2024) (cf. p. 27, 284).
- [Tho+22] Gilberto L. THOMAS et al. « Shape–velocity correlation defines polarization in migrating cell simulations ». In : *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 587 (fév. 2022), p. 126511. ISSN : 0378-4371. DOI : [10.1016/j.physa.2021.126511](https://doi.org/10.1016/j.physa.2021.126511). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437121008000>

- science/article/pii/S0378437121007846 (visité le 11/07/2024) (cf. p. 271).
- [Tli+15] Sham TLILI et al. « Colloquium : Mechanical formalisms for tissue dynamics ». en. In : *The European Physical Journal E* 38.5 (mai 2015), p. 33. ISSN : 1292-895X. DOI : 10.1140/epje/i2015-15033-4. URL : <https://link.springer.com/article/10.1140/epje/i2015-15033-4> (visité le 18/11/2020) (cf. p. 10, 26).
- [Tli+18] Sham TLILI et al. « Collective cell migration without proliferation : density determines cell velocity and wave velocity ». In : *Royal Society Open Science* 5.5 (2018), p. 172421. DOI : 10.1098/rsos.172421. eprint : <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rsos.172421>. URL : <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsos.172421> (cf. p. 10, 17, 18, 107, 281, 285).
- [Tli+20] S. TLILI et al. « A migrating epithelial monolayer flows like a Maxwell viscoelastic liquid ». In : *Physical Review Letters* 125.8 (août 2020), p. 088102. ISSN : 1079-7114. DOI : 10.1103/PhysRevLett.125.088102. arXiv : 1811.05001 (cf. p. 3, 8, 19, 107, 216, 225, 263, 264, 266, 281).
- [TS17] Xingzhou TANG et Jonathan V. SELINGER. « Orientation of topological defects in 2D nematic liquid crystals ». en. In : *Soft Matter* 13.32 (août 2017), p. 5481-5490. ISSN : 1744-6848. DOI : 10.1039/C7SM01195D. eprint : <https://arxiv.org/abs/1706.05065>. URL : <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/sm/c7sm01195d> (visité le 16/11/2023) (cf. p. 254, 259).
- [TTR05] John TONER, Yuhai TU et Sriram RAMASWAMY. « Hydrodynamics and phases of flocks ». en. In : *Annals of Physics*. Special Issue 318.1 (juil. 2005), p. 170-244. ISSN : 0003-4916. DOI : 10.1016/j.aop.2005.04.011. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491605000540> (visité le 12/11/2020) (cf. p. 2, 16, 19).
- [VCL20] Chiara VILLA, Mark A. J. CHAPLAIN et Tommaso LORENZI. *Mechanical models of pattern and form in biological tissues : the role of stress-strain constitutive equations*. 2020. arXiv : 2009.10953 [q-bio.TO]. URL : <https://arxiv.org/pdf/2009.10953.pdf> (cf. p. 1, 12).
- [VZ12] Tamás VICSEK et Anna ZAFEIRIS. « Collective motion ». en. In : *Physics Reports*. Collective motion 517.3 (août 2012), p. 71-140. ISSN : 0370-1573. DOI : 10.1016/j.physrep.2012.03.004. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S037015731200004>.

[com/science/article/pii/S0370157312000968](https://doi.org/10.1038/s41578-018-0066-z) (visité le 18/12/2020) (cf. p. 2).

- [Xi+19] Wang XI et al. « Material approaches to active tissue mechanics ». In : *Nature Reviews Materials* 4.1 (2019), p. 23-44. ISSN : 2058-8437. DOI : [10.1038/s41578-018-0066-z](https://doi.org/10.1038/s41578-018-0066-z). URL : <https://doi.org/10.1038/s41578-018-0066-z> (cf. p. 1, 4-7, 9, 10).
- [Zha17] Xiangxiong ZHANG. « On positivity-preserving high order discontinuous Galerkin schemes for compressible Navier–Stokes equations ». en. In : *Journal of Computational Physics* 328 (jan. 2017), p. 301-343. ISSN : 0021-9991. DOI : [10.1016/j.jcp.2016.10.002](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.10.002). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999116304958> (visité le 27/03/2023) (cf. p. 21, 173, 183, 185, 188).
- [ZSA12] Falko ZIEBERT, Sumanth SWAMINATHAN et Igor S. ARANSON. « Model for self-polarization and motility of keratocyte fragments ». In : *Journal of The Royal Society Interface* 9.70 (2012), p. 1084-1092. DOI : [10.1098/rsif.2011.0433](https://doi.org/10.1098/rsif.2011.0433). URL : <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rsif.2011.0433> (cf. p. 57, 61).