

Travaux de Modélisation et de Simulation

*Majeure de Sciences de l'Ingénieur,
Simulation et Modélisation*

Écoulements multiéchelles de fluides
polymériques

Florian JOURDA
Benjamin KIEFFER
Promotion X2001

Mars 2004

Contents

1	Mise en équation du problème	6
1.1	Problème étudié	6
1.2	Discrétisation du problème macroscopique	7
1.3	Discrétisation du problème microscopique	7
1.3.1	Discrétisation par éléments finis	7
1.3.2	Discrétisation à l'aide d'équations différentielles stochastiques	8
2	Les différentes modélisations possibles	9
2.1	Modélisation la plus simple	9
2.2	Modélisation avec deux ressorts et trois boules	9
2.3	Modélisation avec trois ressorts et quatre boules	9
2.4	Modèle FENE	9
2.4.1	Discrétisation à l'aide d'un schéma explicite	10
2.4.2	Discrétisation à l'aide d'un schéma semi-implicite	10
2.5	Modèle FENE-P	10
3	Analyse comparative des différentes modélisations	11
3.1	Modèle d'Oldroyd-b	11
3.2	Modèles 2 - 3 - 4 boules	13
3.3	Modèle FENE : schéma explicite contre schéma semi-implicite	14
3.4	FENE contre FENE-P	16
4	Analyse énergétique de la simulation	17
4.1	Equations de conservation de l'énergie	17
4.2	Visualisation par la simulation	17
5	Réduction de la variance au cours de la simulation numérique des équations différentielles stochastiques (EDS)	19
5.1	Retour sur le calcul du tenseur des contraintes τ	19
5.2	Implémentation de la réduction de variance	19
5.3	Résultats numériques de la réduction de variance	19

Abstract

Polymeric fluids, i.e. fluids containing a certain amount of macromolecules, are very common in technology as well as in nature. They combine properties of viscous fluids and elastic solids. While the theory of both viscous fluids and elastic solids is well established, there are still many open questions regarding the viscoelastic case, even on the level of what the governing equations should be.

We study the properties of a polymer solution under simple shear flow using Brownian dynamics simulation. The dynamics of different bead-spring models are investigated in a Couette flow.

In particular, the standard, the FENE, the FENE-P and several multi-chain models are compared. It is shown that the different models produce qualitatively similar results for the mean extension when the shear rate is not too high. It is also found that the action of polymers is confined in the near wall region where the polymers are mainly oriented in the streamwise direction. The efficiency of the time and space discretisation is evaluated through the verification of energy conservation. Finally, the interest of variance reduction is discussed.

Remerciements

Nous tenons à remercier M. LE BRIS pour son suivi de notre projet ainsi que pour son cours intitulé "Systèmes multi-échelles : modélisation et simulation".

Introduction

But de ce travail de modélisation et simulation

Le but de ce TMS est d'étudier un écoulement de Couette d'un fluide polymérique (colle à papier-peint, etc.). La particularité de la simulation utilisée est de coupler équations aux dérivées partielles à l'échelle macroscopique pour résoudre l'équation de Navier-Stokes avec équations différentielles stochastiques pour l'échelle microscopique (équation de Fokker-Planck pour la simulation de l'agitation des chaînes polymériques).

Méthode de travail

Le projet est réalisé selon le plan suivant :

- présentation des équations et de la technique de résolution ;
- présentation des différentes modélisations utilisées et résultats ;
- analyse comparative des différentes modélisations possibles ;
- analyse énergétique de la simulation ;
- réduction de la variance au cours de la simulation numérique des équations différentielles stochastiques (EDS) ;

1 Mise en équation du problème

1.1 Problème étudié

On étudie un écoulement de Couette pour un fluide non-newtonien car polymérique, le tenseur des contraintes τ ne se calculant pas par la formule $\lambda(\text{div } u)Id + 2\mu d$. On considère le fluide comme incompressible, et on modélise les molécules de polymère par des haltères ("beads"), ie des boules reliées entre elles par des ressorts de raideur K , raideur de nature entropique, due au fait qu'une chaîne allongée explore moins de configurations qu'une chaîne repliée, et donc que l'agitation tend à raccourcir une chaîne polymérique allongée, pour augmenter l'entropie du système.

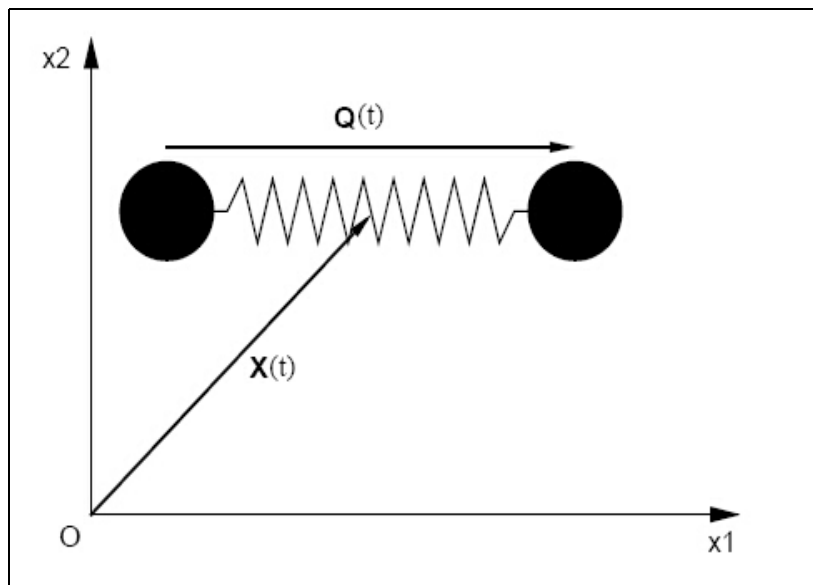


Figure 1: Modèle des haltères

Si on note $\psi(t, x, \underline{r})$ la densité de probabilité de \underline{r} au point macroscopique x et au temps t , la probabilité de trouver une chaîne polymérique représentative dans l'état d'haltère \underline{r} à $d\underline{r}$ près est $\psi(t, x, \underline{r})d\underline{r}$. L'évolution de ψ est donnée par l'équation de Fokker-Planck (FP) [4], qui prend en compte :

- une force hydrodynamique (interaction des haltères avec le fluide via un coefficient de friction ζ),
- une force intrapolymérique due à la force de rappel entropique du "ressort" \underline{r} ,

- une force brownienne, la chaîne étant bombardée par les molécules du solvant.

$$\frac{\partial \psi(t, x, \underline{r})}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla_x \psi(t, x, \underline{r}) = -div_r((\nabla_x \underline{u} \underline{r} - \frac{2K}{\zeta} \underline{r})\psi(t, x, \underline{r})) + \frac{2k_b T}{\zeta} \Delta_r \psi(t, x, \underline{r}) \quad (FP)$$

Alors le tenseur des contraintes (qui, par définition, est la force de réaction agissant sur les deux plans obtenus par "coupure imaginaire" du matériau) vaut, d'après la formule de Kramer (FdK) :

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

où n_p désigne le nombre de polymère par unité de volume; on oubliera le premier terme (constante additive à la pression).

Notre problème s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla) \underline{u} - \mu \Delta \underline{u} - \nabla p - div \tau_p = 0 \\ div \underline{u} = 0 \\ \tau_p(t, x) = n_p \int (\underline{r} \otimes F(\underline{r})) \psi(t, x, \underline{r}) d\underline{r} \\ \frac{\partial \psi(t, x, \underline{r})}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla_x \psi(t, x, \underline{r}) = -div_r((\nabla_x \underline{u} \underline{r})\psi(t, x, \underline{r})) + \frac{2k_b T}{\zeta} \Delta_r \psi(t, x, \underline{r}) \end{array} \right.$$

1.2 Discrétisation du problème macroscopique

Dans le cas de l'écoulement de Couette 2D d'un liquide incompressible, le problème macro s'écrit :

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

On réalise une méthode des différences finies avec un schéma d'Euler explicite pour le terme de contrainte, et implicite pour le terme visqueux, ce qui nous donne un système algébrique à résoudre. Il reste alors à mettre à jour le tenseur τ_p en fonction du niveau microscopique.

1.3 Discrétisation du problème microscopique

1.3.1 Discrétisation par éléments finis

Une telle discrétisation (par exemple avec un schéma de Lax-Wendroff) est difficile à mettre en oeuvre, car la discrétisée de ψ doit conserver deux propriétés lors de la simulation, à savoir $\psi \geq 0$ et $\int \psi = 1$. Très vite, les techniques de discrétisation sont mises en échec quand la dimension augmente (4, 5 ou plus). Si elle serait possible pour notre cas (dimension 2), nous avons plutôt utilisé une technique insensible à l'accroissement de dimension.

1.3.2 Discrétisation à l'aide d'équations différentielles stochastiques

On peut, dans le cas de l'écoulement de Couette 2D en incompressible, réécrire (FP) [2] :

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

On évalue τ_p par le système d'équations différentielles stochastiques associé à (FP), qui s'écrit :

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

où V_t et W_t sont deux browniens monodimensionnels indépendants. La formule de Kramer devient alors :

$$\tau(y, t) = n_p K \int_{\mathbf{R}^2} PQ \psi(t, x, \mathbf{r}) dP dQ = n_p K \mathbf{E}(P(y, t)Q(t))$$

On intègre ces deux EDS par un schéma explicite (sauf sans le cas du modèle FENE, voir section correspondante) :

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

où n désigne la discrétisation en temps et i celle en espace (selon y seulement, car le problème est invariant selon x ; de plus, Q est indépendant de y . Attention, cette indépendance de Q par rapport à y ne sera plus vraie pour le modèle FENE, voir section correspondante).

La mise-à-jour de τ se fait par $\tau_i^{n+1} = n_p K \mathbf{E}(P_i^{n+1}Q^{n+1})$

On réalise donc J (avec $J = 100$ ou $J = 1000$) réalisations des variables aléatoires P_i^n et Q^n et on calcule τ_i^n avec la loi forte des grands nombres.

2 Les différentes modélisations possibles

L'écoulement de Couette 2D considéré sera la mise en mouvement de la plaque supérieure depuis une vitesse nulle jusqu'à une vitesse v , l'autre plaque restant immobile (sauf cas particuliers mentionnés). Par défaut, on discrétise l'espace et le temps avec $I = 100$ et $N = 100$ et on utilise 1000 tirages simultanés.

2.1 Modélisation la plus simple

On considère chaque polymère comme un ensemble de deux boules reliées par un ressort, la force de rappel valant $-K\underline{r}$. Ce modèle est appelé modèle Oldroyd-b; c'est en fait le modèle présenté ci-dessus.

2.2 Modélisation avec deux ressorts et trois boules

On conserve une force en $-K\underline{r}$ entre deux boules, mais un polymère est maintenant modélisé par trois boules reliées par deux ressorts. Cela modifie l'équation du tenseur τ et les forces de rappel s'exerçant sur les boules.

2.3 Modélisation avec trois ressorts et quatre boules

On conserve une force en $-K\underline{r}$ entre deux boules, mais un polymère est maintenant modélisé par quatre boules reliées par trois ressorts. Cela modifie l'équation du tenseur τ et les forces de rappel s'exerçant sur les boules.

2.4 Modèle FENE

Le modèle FENE (Finitely Extensible Nonlinear Elastic) est caractérisé par le fait que l'extensibilité maximale du "dumbell" est fixée à une certaine valeur déterminée par le paramètre adimensionnel b , et que la force de rappel s'écrit

$$F(\underline{r}) = \frac{\underline{r}}{1 - \frac{|\underline{r}|^2}{b}}$$

Ce modèle est plus réaliste que le précédent, au sens où il ne permet pas au polymère de s'allonger indéfiniment [3]. Dans ce cas, Q va dépendre de P donc de y , et Q^n s'écrit Q_i^n . La discrétisation du problème micro peut alors se faire de deux façons.

2.4.1 Discrétisation à l'aide d'un schéma explicite

On conserve le schéma du modèle de base. Dans ce cas, il faut empêcher la force de rappel de diverger, et donc rejeter les tirages de browniens V et W qui amènent $|r|^2$ trop proche de b . Le temps de simulation est allongé du fait de retirages nécessaires.

2.4.2 Discrétisation à l'aide d'un schéma semi-implicite

Cette méthode, qui évite les retirages, a été proposée par Öttinger [5]. On traite implicitement la force de rappel en calculant un prédicteur, $\tilde{\underline{r}}$:

$$\tilde{\underline{r}}^{n+1} = \underline{r}^n + \text{forces}(\underline{r}^n) \cdot \Delta t + \text{bruit}$$

Alors

$$\begin{aligned} \underline{r}^{n+1} &= \tilde{\underline{r}}^{n+1} + \frac{1}{2}\text{force élastique}(\underline{r}^{n+1}) \cdot \Delta t + \frac{1}{2}\text{force élastique}(\underline{r}^n) \cdot \Delta t \\ &+ \frac{1}{2}\text{forces non élastiques}(\tilde{\underline{r}}^{n+1}) \cdot \Delta t + \frac{1}{2}\text{forces non élastiques}(\underline{r}^n) \cdot \Delta t + \text{bruit} \end{aligned}$$

Alors la direction de \underline{r} est explicite, tandis que sa norme est donnée par une équation du troisième degré. Cette équation n'admet qu'une solution entre 0 et \sqrt{b} ; nous la résolvons avec un algorithme de Newton (pour lequel on impose un arrêt au bout de cinq passes), ce qui permet d'éviter les tests, rejets et retirages pour $|r|^2$ proche de b .

2.5 Modèle FENE-P

Le modèle FENE-P (P pour Peterlin) est une variante du modèle FENE où la force de rappel s'écrit

$$F(\underline{r}) = \frac{\underline{r}}{1 - \frac{\langle r \rangle^2}{b}}$$

3 Analyse comparative des différentes modélisations

3.1 Modèle d'Oldroyd-b

On voit apparaître, lors de la mise en mouvement de la plaque supérieure,, le phénomène d' "overshot" : la vitesse peut prendre, localement, des valeurs supérieures à la vitesse d'équilibre asymptotique. En effet, le gradient de vitesse oriente les polymères tout en les étirant et, une fois orientés, les polymères se détendent en libérant de l'énergie, qui est cédée au fluide.

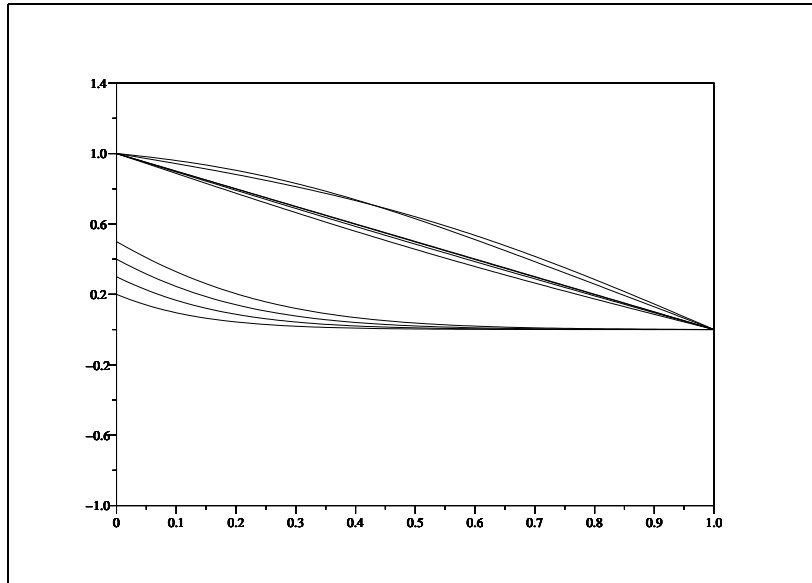


Figure 2: Simulation du modèle avec force linéaire pour $t=0, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 1$

On peut également visualiser le changement d'orientation des polymères sur la figure 3. Les polymères s'orientent naturellement dans le sens de l'écoulement à cause du gradient de vitesse, mais les mouvements browniens perturbent tout de même cette inclinaison.

On remarque aussi que les polymères s'orientent dans le sens de l'écoulement principalement aux bords (figure 4) ; les données numériques indiquent de même que l'élongation des polymères est maximale pour x proche de 1. Cela indique que l'action des polymères se fait principalement près de la plaque mobile, ce qui semble physiquement logique à cause du fort gradient de vitesse initial à cet endroit.

Si on augmente de façon importante le taux de cisaillement, on observe une forte élongation des polymères : un taux de cisaillement multiplié par

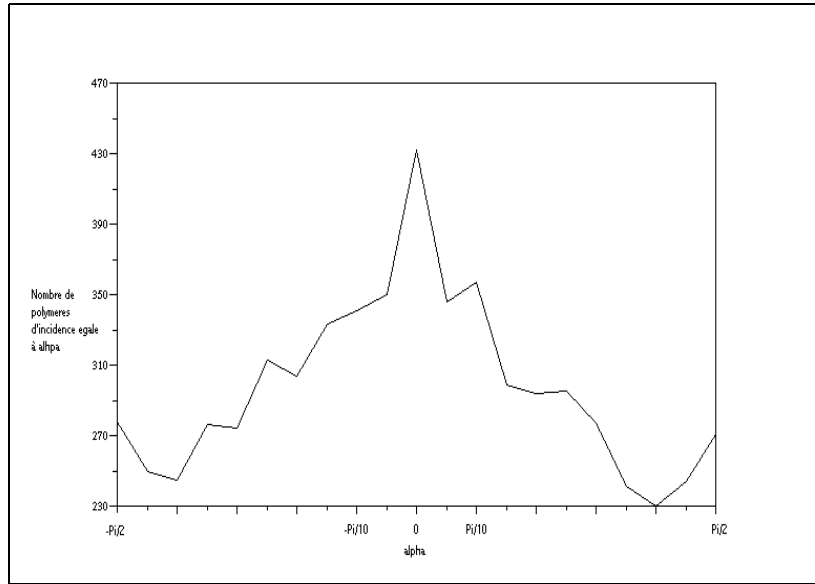


Figure 3: Orientation des polymères au milieu de l'écoulement dans la phase précédant l'overshot.

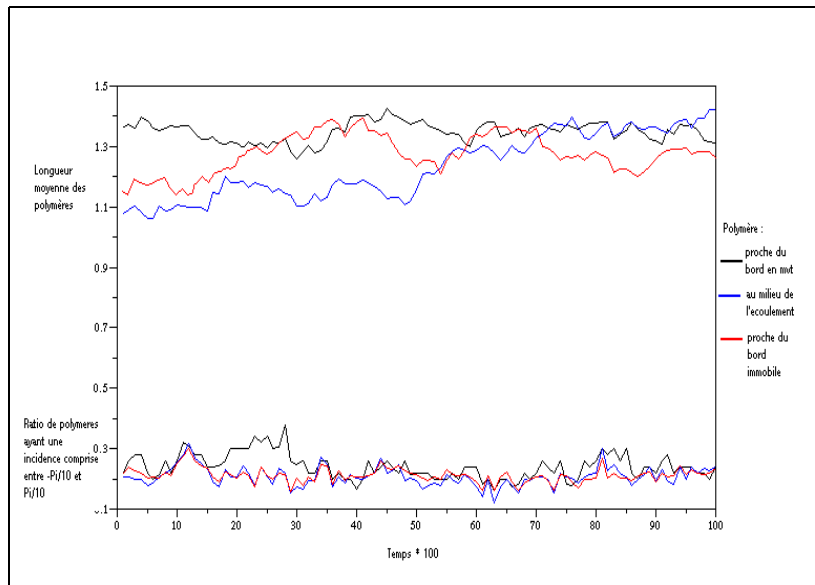


Figure 4: Longueur et indice d'orientation des polymères près de la paroi mobile, au milieu de l'écoulement, et près de la paroi immobile au cours de l'écoulement

1000 entraîne une longueur de polymère 300 fois plus élevée que la longueur observée expérimentalement. On voit alors la nécessité du modèle FENE ou FENE-P

3.2 Modèles 2 - 3 - 4 boules

On peut modéliser le polymère de façon plus complexe qu'un simple haltère. On peut complexifier la géométrie en considérant un chapelet de 3, 4 ou même n boules reliées entre elles par une force de rappel. L'idée la plus simple est d'extrapoler la modélisation à deux boules issue du calcul entropique et de considérer que les boules sont toutes reliées entre elles par un ressort de raideur K' et de longueur à vide nulle. Si on prend $K' = K$, on voit par la simulation que les comportements sont complètement différents (figure 5) : la modélisation est mauvaise. Il faut donc recalculer ce K' . On peut désirer par exemple avoir une longueur totale du polymère identique à celle du modèle 2 boules pour une même contrainte. On trouve ainsi trivialement que $K' = K/(n - 1)$. On retrouve ce résultat par la simulation. Sur la figure 6, l'évolution de l'écoulement de Couette avec des modélisations différents est quasi-identique (les courbes se superposent).

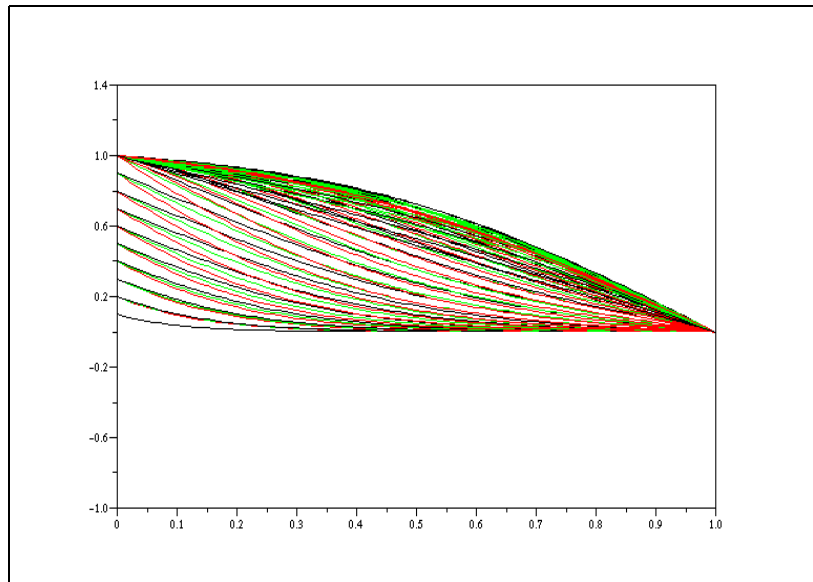


Figure 5: Evolution du profil de vitesse de Couette avec une modélisation à 2 (en rouge), 3 (en vert), et 4 boules (en noir) avec $K' = K$

Mais nous avons eu en fait de la chance, car la valeur de K était un cas particulier. En effet si on fait varier K et si on prend toujours $K' = K/(n-1)$,

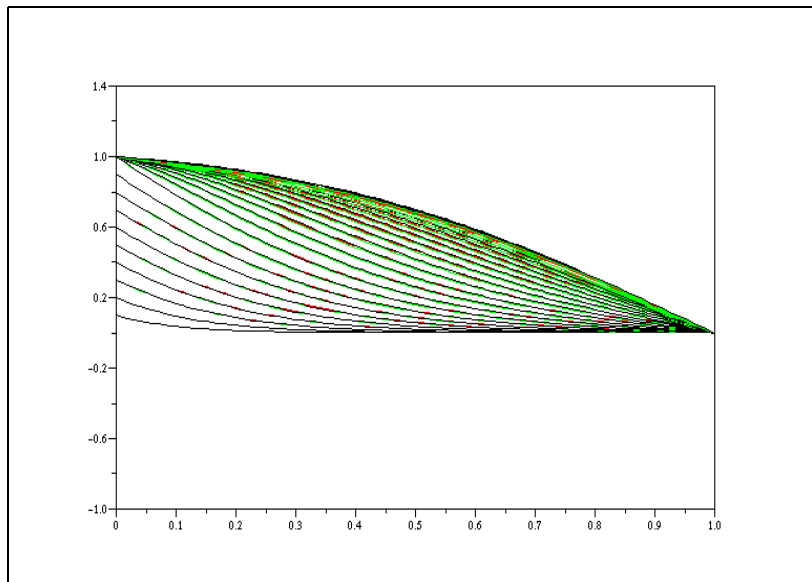


Figure 6: Evolution du profil de vitesse avec une modélisation à 2 (en rouge), 3 (en vert), et 4 boules (en noir) avec $K' = K/(n - 1)$

on trouve des divergences grandes quand K devient grand. Les figures 7 et 8 montrent le profil de vitesse de l'écoulement avec une vitesse de la paroi sinusoïdale. Sur la première figure, on a gardé K avec sa vraie valeur, puis on l'a multipliée par deux dans la suivante.

Il y a clairement divergence. Ainsi la relation entre K et K' n'est pas trivialement linéaire comme nous l'avions supposé, et le gain de degré de liberté rend le calcul de cette relation très compliqué. Malgré nos efforts de calculs analytique, nous n'avons pas réussi à l'obtenir.

3.3 Modèle FENE : schéma explicite contre schéma semi-implicite

L'intérêt du schéma semi-implicite est d'éviter à la longueur du polymère de dépasser \sqrt{b} , tout en évitant d'avoir à retirer un grand nombre de fois les bruits V_i et W_i .

Au niveau de la simulation, les résultats sont comparables : l'amplitude de l'"overshot" augmente moins rapidement lorsqu'on augmente la vitesse du cisaillement que dans le cas du modèle d'Oldroyd, et la longueur des polymères

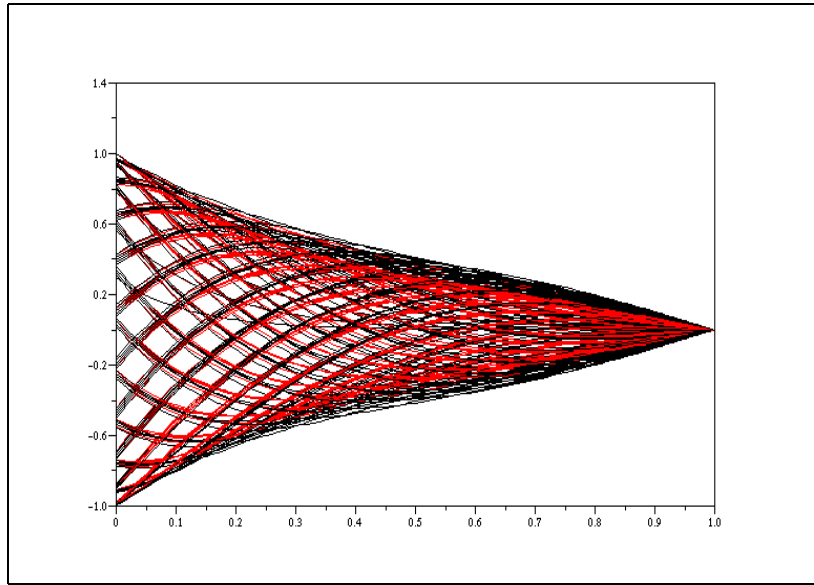


Figure 7: Evolution du profil de vitesse sinusoidal avec une modélisation à 2 (en rouge) et 4 boules (en noir) avec $K = K_0$

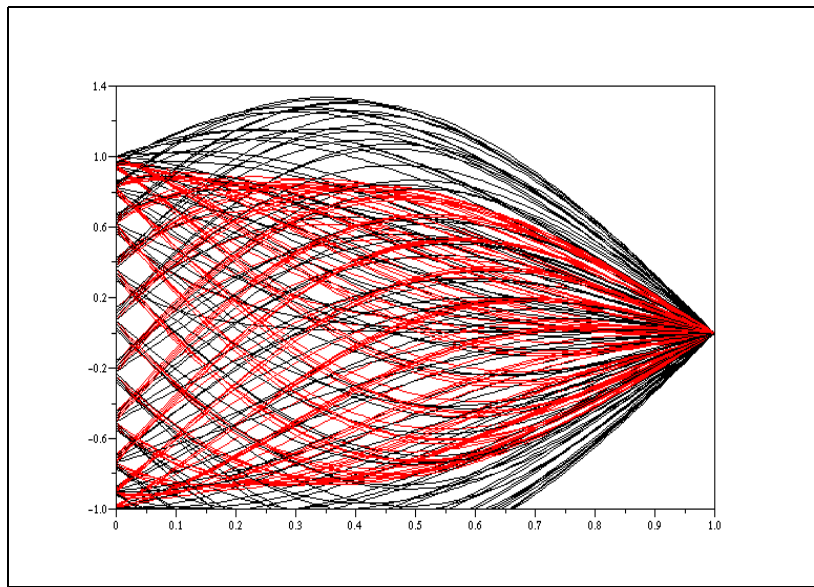


Figure 8: Evolution du profil de vitesse sinusoidal avec une modélisation à 2 (en rouge) et 4 boules (en noir) avec $K = 2 * K_0$

reste bornée.

Au niveau du temps de calcul, malgré le coût de résolution de l'équation du 3^è degré en 5 itérations, il est préférable d'utiliser un schéma semi-implicite, car un retraitage coûte très cher (coût du retraitage et coût de la vérification)

3.4 FENE contre FENE-P

Nos résultats sont tout-à-fait comparables. En fait, la littérature sur le sujet indique que ce modèle est intéressant dans les cas de "shear thinning", ie la diminution de la viscosité avec augmentation du taux de cisaillement.

4 Analyse énergétique de la simulation

4.1 Equations de conservation de l'énergie

L'équation du mouvement du fluide s'écrit :

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, y) - \partial_{y,y}^2 u(t, y) = \partial_y \tau(t, y) + f_{ext}(t, y)$$

En la multipliant par u et en intégrant, on obtient :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} u(t, y,)^2 + \int_0^t \int_{\Omega} (\partial_y u)^2 + \int_0^t \int_{\Omega} \mathbf{E}(PQ(y)) \partial u = \int_0^t \int_{\partial\Omega} (\partial_y u)|_{bord} \cdot u(y, t)$$

soit

$$E_c + \text{Dissipation visqueuse} + E_p(\text{dumbells}) + E_{dissipee \text{ au bord}} = 0$$

4.2 Visualisation par la simulation

Dans le cas du schéma d'Oldroyd-b, on calcule les termes E_c , E_p , $E_{visqueuse}$ et $-E_{dissipee \text{ au bord}}$.

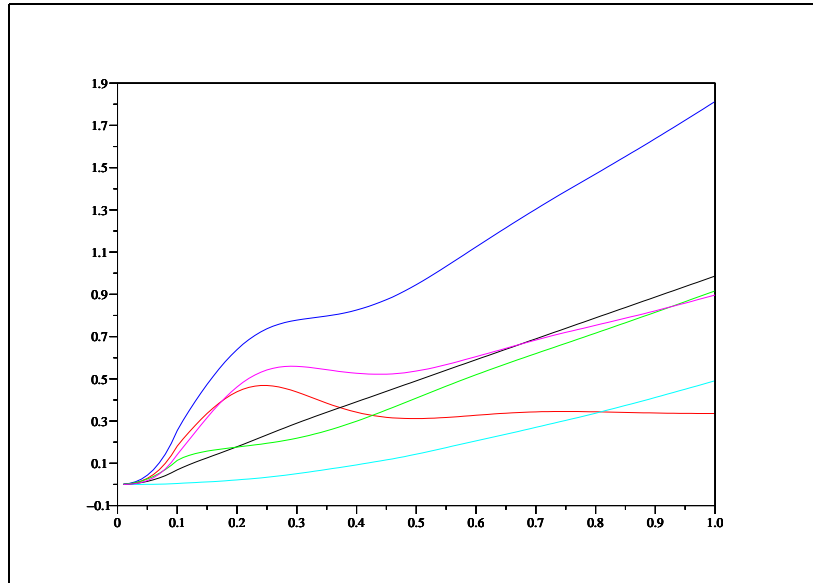


Figure 9: Simulation du modèle avec force linéaire. En rouge E_c , en vert clair E_p , en noir $E_{visqueuse}$, en vert foncé $-E_{dissipee \text{ au bord}}$, en vert foncé $E_c + E_p + E_{visqueuse}$ et en violet $E_c + E_p + E_{visqueuse} + E_{dissipee \text{ au bord}}$.

Comme le montre la figure, notre simulation est ainsi assez proche du modèle continu en ce qui concerne l'énergie; cependant, une amélioration possible serait de mieux rendre l'équilibre apport d'énergie / dissipation. Cela ne semble pas être dû à notre schéma d'intégration, mais plutôt à la programmation sous SCILAB.

5 Réduction de la variance au cours de la simulation numérique des équations différentielles stochastiques (EDS)

5.1 Retour sur le calcul du tenseur des contraintes τ

Le problème microscopique est discrétisé à l'aide d'EDS, puis τ est donné par

$$\tau_i^{n+1} = n_p K \mathbf{E}(P_i^{n+1} Q^{n+1})$$

Puisqu'on calcule cette espérance à partir de J réalisations indépendantes, le théorème de la limite centrale nous dit que, plus faible sera la variance, meilleure sera l'approximation. Nous cherchons donc à réduire la variance en ne calculant pas directement $\mathbf{E}(PQ)$.

5.2 Implémentation de la réduction de variance

On décompose $\mathbf{E}(PQ)$ en $\mathbf{E}(\tilde{P}\tilde{Q}) + \mathbf{E}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q})$ où \tilde{P} et \tilde{Q} sont deux processus aléatoires (définis par des EDS) tels que $\mathbf{E}(\tilde{P}\tilde{Q})$ soit aisément calculable et que $\tilde{P}\tilde{Q}$ soit proche de PQ .

Dans notre cas, un bon compromis est de prendre

$$\begin{cases} dP(\tilde{y}, t) &= -\frac{2K}{\zeta} P(t) dt + \frac{\sqrt{2}\sigma}{\zeta} dV_t \\ d\tilde{Q}(t) &= -\frac{2K}{\zeta} Q(t) dt + \frac{\sqrt{2}\sigma}{\zeta} dW_t \end{cases}$$

ce qui correspond aux équations de la section 1.3.2, mais sans le terme de cisaillement. On simule alors avec un schéma d'Euler explicite. On remarque que $\mathbf{E}(\tilde{P}\tilde{Q}) = 0$ (indépendance des deux processus aléatoires), et le calcul de τ_i^{n+1} amène

$$\begin{aligned} \tau_i^{n+1} &= n_p K \mathbf{E}(PQ) \\ &= n_p K \mathbf{E}(\tilde{P}\tilde{Q}) + \mathbf{E}(PQ - \tilde{P}\tilde{Q}) \\ &\approx \frac{n_p K}{J} \sum_{j=1}^J (P_{i,j}^{n+1} Q_{i,j}^{n+1} - \tilde{P}_{i,j}^{n+1} \tilde{Q}_{i,j}^{n+1}) \\ &\approx \frac{n_p K}{J} \sum_{j=1}^J (P_{i,j}^{n+1} Q - \tilde{P}_{i,j}^{n+1} Q) \end{aligned}$$

5.3 Résultats numériques de la réduction de variance

Nous avons implémenté la réduction de la variance dans le cas le plus simple du dumbell à deux boules avec force linéaire. Les résultats sont les suivants.

- $J = 100$, t varie de 0 à 1 avec 100 pas de temps, la mesure de la variance de τ est faite en $y = 1/3$

	avec réduction de variance	sans réduction de variance	avec réduction de variance	sans réduction de variance
	t=0.3	t=0.3	t=0.5	t=0.5
Simulation 1	1.07	1.28	1.33	1.47
Simulation 2	1.08	1.29	1.17	1.26
Simulation 3	1.05	1.11	1.34	1.32
Simulation 4	0.91	1.25	1.21	1.63
Simulation 5	1.09	0.97	1.22	1.08
Simulation 6	1.13	1.08	1.20	1.29
Simulation 7	0.95	1.11	0.98	1.33
Simulation 8	1.08	1.14	1.24	1.28
Simulation 9	1.08	0.91	1.18	1.15
Simulation 10	1.08	1.17	1.18	1.23

- $J = 1000$, t varie de 0 à 1 avec 100 pas de temps, la mesure de la variance de τ est faite en $y = 1/3$, et donc une diminution d'autant de l'incertitude sur τ .

	avec réduction	sans réduction	avec réduction	sans réduction	avec réduction	sans réduction
	t=0.1	t=0.1	t=0.3	t=0.3	t=0.5	t=0.5
Simu. 1	0.906	1.019	1.092	1.168	1.350	1.078
Simu. 2	0.954	0.987	1.108	1.144	1.209	1.213

On observe deux phénomènes :

- une diminution de la variance entre cinq et dix pourcents.
- une diminution de l'écart-type de la variance : les variations de la variance sur deux simulations sont moindres lorsque la réduction de variance est implémentée.

Conclusion

La simulation des polymères est un domaine où peu de choses ont été faites. Ainsi, les calculs analytiques de convergence des modèles multiéchelles sont extrêmement complexes.

Dans le cas le plus simple (écoulement de Couette, force linéaire, dumbell à deux boules, schéma explicite pour le problème micro), on peut arriver à une estimation de l'erreur (ou au moins une borne supérieure). Jourdain, Lilièvre et Le Bris ont montré [1] que, sous certaines hypothèses de régularité des fonctions en jeu et en utilisant certaines normes, on a, avec δt pas de temps et h pas d'espace :

$$\| u(t_n) - u_h^n \| + \| \mathbf{E}(P_{t_n} Q_{t_n}) - \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M P_n^j Q_{h,n}^j \| \leq C(h + \delta t + \frac{1}{\sqrt{M}})$$

Une telle analyse n'a pas encore été réalisé pour des modèles plus complexes, comme les modèles FENE et FENE-P.

Lorsque l'écoulement n'est plus un simple écoulement de couette, de nouvelles difficultés apparaissent, à savoir :

- la prise en compte de $div \underline{u} = 0$, qui n'est plus automatiquement vérifié ;
- le terme de Navier doit être traité ;
- les deux EDS dépendent alors de l'écoulement.
- apparition de nouveaux termes de couplage dont l'EDS.

Enfin, lorsque la solution n'est plus considérée comme infiniment diluée, on peut avoir recours aux modèles de reptations, qui eux aussi proposent une approche multi-échelles. Le cas le plus difficile à traiter sera bien évidemment le cas intermédiaire entre un polymère fondu et une solution infiniment diluée !

References

- [1] T. Lelièvre et c. Le Bris B. Jourdain, *Numerical analysis of micro-macro simulations of polymeric fluid flows : a simple case*, Mathematical Models and Methods in Applied Science **12** (2002), no. 9, 1205–1243.
- [2] C Le Bris, *Systèmes multi-échelles : modélisation et simulation*, Ecole Polytechnique, 2004.
- [3] Robert C. Armstrong Ole Hassager R. Byron Bird, Charles F. Curtiss, *Dynamics of polymeric liquids*, 2 ed., Wiley-Interscience, 1987.
- [4] H. Risken, *The fokker-planck equation*, 1992.
- [5] H. C. Öttinger, *Stochastic processes in polymeric fluids*, Springer, 1996.