

Molécules et écoulements : conquêtes et défis dans leur simulation numérique

*Francisco Chinesta*¹ et *Amine Ammar*²

¹ LMSP (Laboratoire de Mécanique des Systèmes et des Procédés)- Paris

francisco.chinesta@paris.ensam.fr

² Laboratoire de Rhéologie- Grenoble

amine.ammar@ujf-grenoble.fr

jeudi 30 août 2007 - 8:30 à 9:20 - Amphi Esclangon

La description fine des matériaux macromoléculaires nécessite de lever un certain nombre de verrous dont plusieurs sont à caractère numérique. Pour s'affranchir de telles descriptions il faudrait sans doute mettre en place des modélisations multi-échelles avec l'établissement de passerelles performantes entre les modèles aux différentes échelles. La description la plus fine a lieu à l'échelle atomique où la mécanique quantique permet, à priori, d'aboutir à la définition des potentiels interatomiques nécessaires pour mettre en place des simulations de type dynamique moléculaire. Aujourd'hui, la résolution de l'équation de Schrödinger (EDP), avec son caractère hautement multidimensionnel (où des effets relativistes ou ceux liés au spin peuvent être présents) reste encore un problème ouvert dans des configurations représentatives des systèmes physiques étudiés. Les simulations de type dynamique moléculaire (simulations discrètes par nature) nécessitent la considération d'un grand nombre d'atomes, de pas de temps très (parfois excessivement) petits et de potentiels d'interaction parfois incertains. Pour alléger les calculs, des modélisations plus grossières ont vu le jour : la méthode DPD où les noyaux de la dynamique moléculaires sont substitués par des ensembles d'atomes ; les méthodes issues de la dynamique Brownienne (Langevin, « *Brownian configurations fields* » ...) où la simulation se focalise sur certaines entités et l'effet des autres volontairement « oubliées » est pris en compte par des actions aléatoires. A l'échelle au dessus, nous revenons sur le milieu continu, où les entités physiques perdent leurs identités et les modèles résultants deviennent décrits à partir d'une fonction de distribution définie sur l'espace physique (l'espace tridimensionnel traditionnel), l'espace temporel et l'espace des configurations comme par exemple l'espace des vitesses pour les modèles des systèmes composés de particules chargées ou non (Boltzmann, Vlasov-Poisson-Boltzmann) ou les espaces des conformations moléculaires (formalisme de Fokker-Planck). Entre cette échelle microscopique et l'échelle macroscopique où l'écoulement a lieu, une passerelle doit être définie et capable de représenter les extra-contraintes d'origine microscopique. Dans le cas des macromolécules, le fait de négliger les effets d'inertie permet d'aboutir facilement à la définition du tenseur des extra-contraintes (règle de Kramer). Dans d'autres systèmes, le passage est plus délicat et constitue un sujet actuel de recherche. Récemment la description fine des matériaux macromoléculaires a connu un véritable progrès à la suite de l'introduction des techniques stochastiques ainsi que des techniques numériques capables de s'affranchir des difficultés liées au caractère multidimensionnel des modèles [1]. Cette avancée pourrait permettre une modélisation allant de l'échelle quantique à celle de l'écoulement qui n'était, jusqu'à présent, jamais imaginée.

[1] Ammar, A., Mokdad, B., Chinesta, F., Keunings, R., 2006. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **139**, 153-176.