



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Energétique et Energies Renouvelables

Par :

Mr MERABET Ilyes

Sur le thème

Modélisation des interactions hydrodynamiques de particules actives dans un fluide visqueux

Soutenu publiquement le 30 Juin 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme SENNOUDI Assia Rachida	MCA	Université de TLEMCEN	Président
Mr BABA AHMED Nassim	MCA	Université de TLEMCEN	Encadrant
Mr LIAZID Abdelkrim	Pr	Université de TLEMCEN	Examineur
Mr BOUSAID Abdelhak	Pr	Université de TLEMCEN	Président

Année Universitaire : 2020 ~ 2021



Je dédie ce modeste travail :

A mes parents ma mère et mon père.

A mes sœurs.

A mes frères.

A toute mes amies.

*Je tiens à remercier l'ensemble de tous les Etudiants et
Etudiantes de ma promotion,*

*En fin je dédie ce mémoire à mes collègues et tous ceux
qui me sont chers.*

A tous mes amis sans exception

Mr MERABET Ilyes

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord Dieu le tout puissant qui nous éclaire le bon chemin.

On m'aurait dit au début de la rédaction que les remerciements seraient la partie la plus difficile à écrire, je n'y aurais pas cru. Et pourtant, je peux le confirmer maintenant. Ils représentent bien souvent la partie la plus lue d'un mémoire de thèse, ou du moins celle qu'un lecteur regardera naturellement en premier. Il s'agit donc de trouver les mots justes pour chacun, tout en n'oubliant personne. Je commencerai donc par remercier toute personne que j'aurais pu malencontreusement oublier par la suite. Contrairement aux idées reçues, une thèse n'est pas le résultat d'un travail purement personnel. Au-delà d'être une expérience scientifique incroyable, c'est également une aventure humaine inoubliable qui m'a permis de rencontrer et côtoyer des personnes extraordinaires, qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de ce travail. C'est donc naturellement et en toute sincérité que je vais maintenant remercier l'ensemble des personnes qui m'ont entourée pendant ces quelques années !

Je remercie vivement et chaleureusement mon encadreur Docteur BABA AHMED Nassim Maître de conférences « A » à l'université de Tlemcen. Je tiens à lui exprimer toute ma gratitude pour son aide technique, scientifique et morale ; pour son encouragement et surtout pour la patience et la disponibilité dont il a fait preuve à mon égard.

Je tiens ensuite à adresser mes remerciements à l'ensemble des membres du jury pour le temps qu'ils ont accordé à la relecture du manuscrit.

Je remercie en particulier Madame SENNOUDI Assia Rachida Maître de conférences « A » à l'université de Tlemcen de vouloir présider le jury de ce Master. Je suis très honorée par la présence de Monsieur LIAZID Abdelkrim Professeur à l'université de Tlemcen et Monsieur BOUSAID Abdelhak Professeur à l'université de Tlemcen et je les remercie pour avoir accepté de siéger dans ce jury en tant que examinateurs. Je remercie tous les membres du jury pour leur expérience et leur regard critique qu'ils ont porté sur mon travail.

LISTE DES FIGURES

Chapitre 1 : NOTIONS GENERALES SUR LES FLUIDES

Figure (1.1) : fluide compressible.

Figure (1.2) : Ecoulements laminaires et turbulents

Figure (1.3) : Force d'interaction au niveau de la surface élémentaire d'un fluide parfait.

Figure (1.4) : Fluide réel.

Figure (1.5) : Comparaison de l'écoulement d'un fluide parfait et réel sur une plaque plane

Figure (1.6) : Schéma de l'écoulement de couette plan

Figure (1.7) : Champ des vecteurs vitesse et lignes de courant

Figure (1.8) : Tube de courant

Figure (1.9) : flux de fluide autour de l'objet

Figure (1.10) : Décollement de la couche limite

Chapitre 2 : Techniques de résolution des équations de Navier-Stokes et des équations intégrales dans le cadre axisymétrique

Figure (2.1) : Particules en mouvement de translation et de rotation dans un fluide de cisaillement délimité par des parois imperméables

Figure (2.2) : Décomposer un flux en plusieurs flux élémentaires.

Figure (2.3) : Le symbole de la situation où deux sphères se déplacent dans la même direction dans un fluide statique.

Figure (2.4) : Stokeslet source et Stokeslet image utilisé dans la construction de la fonction de Blake

Figure (2.5) : Notation pour une ligne de particules et une paroi

Figure (2.6) Répartition des points de collocation sur deux sphères

Figure (2.7) : La force hydrodynamique exercée sur une sphère au voisinage d'une paroi plane

Figure (2.8) : Comparaison entre les variations de la force hydrodynamique exercée sur une sphère

Chapitre 4 : Résultat et interprétation

Figure (4.1) : Flux irréductibles

Figure (4.2) : Champs d'écoulement dans les zones proches du dimère thermophile

Figure (4.3) : Distorsion des écoulements irréductibles

Figure (4.4) : Hydrodynamique fluctuante d'une paire de particules actives près d'une paroi plane.

Figure (4.5) : Séparation de la phase induite par l'écoulement des particules actives sur une paroi plane antidérapante

Figure(4.6) : Champs phorétiques irréductibles

Figure (4.7) : Arrêt phorétique de la séparation de phases induite par l'écoulement.

Figure (4.8) : Benchmarks pour le calcul du mouvement de corps rigide dû au mode de glissement $V(3t)$ dans la géométrie non bornée du flux de Stokes, sur une machine à 16 cœurs, en utilisant PyStokes.

Figure(4.9) : Configurations instantanées à partir de simulations de colloïdes actifs dans un réseau carré 3×3

Figure 4.10 : Dissipation de puissance pour le mouvement synchronisé et périodique

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre 2 : Techniques de résolution des équations de Navier-Stokes et des équations intégrales dans le cadre axisymétrique

Table (2.1) - Force hydrodynamique adimensionnée ϕ ,

Table (2.2) : - Comparaison des valeurs des forces et y obtenues pour différentes valeurs de la distance $D^2 - 1$

LISTE DES diagramme

Chapitre 3 : Dynamique des particules

Diagramme (3.1) : Les quatre étapes mathématiques principales.

Diagramme (3.2) : Ce schéma montre les équations qui déterminent les interactions hydrodynamiques et phorétiques entre les particules actives dans un domaine tridimensionnel V

TABLE DES MATIERES

Dédicace	I
Remerciement	II
Liste	III
Table des matières	V
Introduction générale	01

Chapitre 1 : NOTIONS GENERALES SUR LES FLUIDES

Notion des fluides	05
La compressibilité de l'écoulement	05
Les types d'écoulements	05
Les types de fluides	07
La viscosité	08
Le nombre de Reynolds	09
Poussée d'Archimède	10
Lignes de courant	10
Nombre de couches limites	12
Le nombre de Péclet	13
hénomène de glissement	13
Références bibliographiques	16

Chapitre 2 : Techniques de résolution des équations de Navier-Stokes et des équations intégrales dans le cadre axisymétrique

Introduction	18
Normalisation et équations de Stokes	19
Superposition des écoulements	20
Aperçu sur des techniques de résolution	21
Formulation intégrale et méthode de résolution	24
Discrétisation des équations intégrales	30
Assemblage de la matrice	31
Distribution des Stokeslets sur les particules	32
Validation des résultats pour des cas simples	34
Conclusion	37
Références bibliographiques	38

Chapitre 3 : Dynamique des particules

Introduction	41
Formulation des relations de résistance	41
Matrice de résistance de translation	42

Matrice de résistance de rotation	43
Superposition des mouvements	44
La grande matrice de résistance pour N_p particules	44
Équations du mouvement des particules	47
Équations des trajectoires des particules	48
Algorithme de calcul des trajectoires des particules	48
FONDEMENTS MATHÉMATIQUES	49
STRUCTURE DE LA BIBLIOTHÈQUE	50
Conclusion	51
Références bibliographiques	51
Chapitre 4 : Résultats et interprétation	
Introduction	55
Exemple 1 : Flux actifs irréductibles dans un domaine illimité	56
Exemple 2 : Flux actifs irréductibles : effet des frontières planes	61
Exemple 3 : Compétition entre les forces induites par l'écoulement et les fluctuations thermiques	63
Exemple 4 : Cristallisation sur une paroi plane et à une interface plane sans cisaillement	65
Exemple 5 : Champ chimique d'un colloïde phorétique - domaine non borné et près d'un mur	67
Exemple 6 : Arrêt du regroupement de colloïdes phorétiques près d'un mur	71
Exemple 7 : Un ensemble de repères précompilés	72
Exemple 8 : Synchronisation des colloïdes actifs dans un réseau 2D de pièges harmoniques	73
Conclusion	75
Références bibliographiques	77
Conclusion générale et perspectives	81

INTRODUCTION GENERALE

Il existe de nombreux phénomènes naturels et procédés industriels impliquant des particules en suspension. Les exemples courants comprennent : les sédiments dans les rivières ou les estuaires, les gouttes de pluie, les pâtes, les suspensions biologiques (comme le sang), les peintures, les encres, les eaux usées avec des solides en suspension. Les suspensions existent également dans de nombreux procédés techniques ou industriels : traitement et filtration de l'eau, séparation dans la production de minerai, synthèse de matériaux composites, fabrication de papier, pour n'en citer que quelques-uns. Par conséquent, par exemple, la méthode d'étude de la sédimentation des particules dans un fluide a de nombreuses applications :

- **Fluide granulaire** : A partir de la vitesse de sédimentation à une concentration de particules en volume très faible, la taille de particule sensiblement sphérique peut être déterminée.
- **En floculation** : La mesure de la vitesse de sédimentation d'un certain nombre de particules au cours du temps permet de suivre la coagulation de ces particules, quantifiant ainsi la stabilité de la phase liquide en suspension vis-à-vis des particules.
- **Pour lit fluidisé** : Le lit fluidisé se dépose dans un état fixe et le paramètre variable est la concentration des particules.

Cette recherche s'inscrit dans le cadre de l'écoulement à faible nombre de Reynolds, $Re = aV/\nu \ll 1$ où a est la longueur caractéristique, V est la vitesse caractéristique et ν est la viscosité cinématique du fluide. Ce flux peut avoir une origine physique très diverse, car la quantité Re est obtenue en combinant les trois quantités a , V et $Re \ll 1$ peut correspondre au mouvement d'objets microscopiques, à la dynamique de suspensions de particules à très basse vitesse et à l'écoulement de fluides très visqueux. Il convient de noter que sous la taille de particule considérée dans la pratique (inférieure ou égale à 100 μm), même l'eau se comporte comme un fluide très visqueux (c'est-à-dire que le nombre de Reynolds est petit), donc l'équation de Stokes s'applique.

Historiquement, La première méthode théorique de la sédimentation remonte à Stokes (1851), qui a calculé la vitesse à laquelle les particules sphériques tombent dans un fluide infiniment visqueux. La force F appliquée à une sphère de vitesse U et de rayon a est notée :

$$F = -6\pi\mu aU$$

μ : Viscosité dynamique du fluide.

Le couple C appliqué sur une sphère de vitesse angulaire Ω est donné par la formule suivante :

$$C = -8\pi\mu a^3\Omega$$

Le débit considéré ici est contrôlé par l'équation de Stokes. La résolution de l'équation de Stokes équivaut à la résolution d'un système d'équations aux dérivées partielles elliptiques linéaires. Des recherches approfondies sur le cadre mathématique et les techniques de résolution de tels systèmes d'équations, Pironneau [2.29], Ladyzhenskaya [2.16].

En raison de la linéarité de ces équations, une grande classe de problèmes peut être résolue analytiquement, ce qui est impossible pour les équations de Navier-Stokes.

Le but de cet travail est de démontrer le pouvoir de la méthode numérique qui sera mise en œuvre grâce au langage Python, à travers six exemples entièrement codés simulant des phénomènes expérimentaux. Nous présenterons une bibliothèque modulaire permettant de calculer les interactions hydrodynamique et phorétiques à plusieurs corps entre des particules actives sphériques en suspension, lorsque celles-ci sont données par des solutions des équations de Navier-Stokes et de Laplace.

Tout d'abord, dans le premier chapitre, nous avons recherché les propriétés fondamentales des fluides pour Comprendre le mouvement des fluides et faciliter l'accès au travail.

Le deuxième chapitre décrit d'abord les équations qui contrôlent l'écoulement de plusieurs particules près de la paroi, ainsi qu'un aperçu des techniques d'analyse et des solutions pour une configuration spécifique, qui valideront nos résultats. Dans la deuxième partie de ce chapitre, les équations intégrales sont résolues dans un cadre axisymétrique de plusieurs particules déposées le long d'une ligne perpendiculaire à la paroi. La distribution de Stokeslet convient à l'exploration des interactions particule / particule et particule / paroi. Nous comparerons également nos résultats avec ceux obtenus par d'autres techniques.

Au chapitre 3, nous avons calculé le coefficient de résistance et le coefficient de mobilité des particules dans les sédiments près de la paroi.

Enfin, au chapitre 4, la méthode analytique est utilisée pour calculer et vérifier la vitesse interne et pour trouver l'équation de trajectoire. Ensuite, Nous présenterons une bibliothèque modulaire permettant de calculer les interactions hydrodynamiques et phorétiques à plusieurs corps entre des particules actives sphériques en suspension lorsque celles-ci sont données par des solutions des équations de Navier-Stokes et de Laplace, et nous traitons huit exemples différents des interactions hydrodynamiques.

CHAPITRE 1 :

NOTIONS GENERALES SUR LES FLUIDES

1.1 Notion des fluides : Un fluide peut être considéré comme étant une substance formée d'un grand nombre de particules matérielles, très petites et libres de se déplacer les unes par rapport aux autres. C'est donc un milieu matériel continu, déformable, sans rigidité et qui peut s'écouler. Les forces de cohésion entre particules élémentaires sont très faibles de sorte que le fluide est un corps sans forme propre qui prend la forme du récipient qui le contient, par exemple : les métaux en fusion sont des fluides qui permettent par moulage d'obtenir des pièces brutes de formes complexes [1.1].

1.2 La compressibilité de l'écoulement : Si la masse spécifique du fluide varie légèrement avec la pression ou la température, le fluide est dit incompressible. Afin de juger de l'influence de la compressibilité dans le fluide en mouvement, la vitesse du son et la vitesse de l'écoulement doivent être utilisées simultanément. Le rapport de ces deux grandeurs définit un paramètre sans dimension appelé "nombre de Mach" :

$$M = \frac{v}{c} \quad (1.1)$$

Le nombre de Mach permet de distinguer les régimes subsoniques ($M < 1$), supersonique ($1 < M \leq 5$) et hypersonique ($M \geq 5$). En outre, pour des écoulements à nombre de Mach inférieur à 0.2 le résultat du calcul de la vitesse fait en considérant le fluide incompressible ne diffère pas de plus de 1% de la valeur trouvée en prenant en compte la compressibilité. C'est la raison pour laquelle on distingue au sein du régime subsonique, la plage des écoulements incompressibles et celle des écoulements où les effets de compressibilité due au mouvement ne peuvent être négligés [1.3].

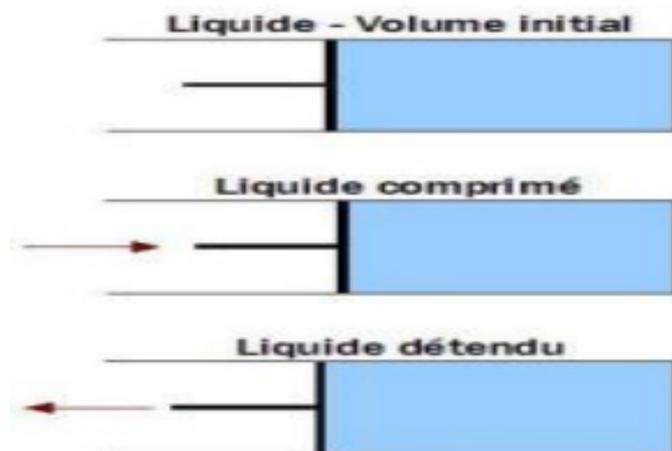


Figure (1.1) : fluide compressible. [1.4]

1.3 Les type de l'Écoulement :

1.3.1 Ecoulements laminaires et turbulents : Pendant longtemps, il existe deux types d'écoulement : l'écoulement laminaire et l'écoulement turbulent (figure 1.1). Les caractéristiques de l'écoulement à plaques sont un écoulement facile et des lignes d'écoulement parallèles, dans un écoulement instable, le mouvement du fluide est très irrégulier. Le nombre de Reynolds est une mesure utilisée pour déterminer le type de flux : il est généralement admis que si $Re < 2000$, le flux est en paillettes, et si $Re > 3000$ est instable, il est sur le compteur. Pour des valeurs comprises

entre 2000 et 3000, il faut regarder chaque cas. La valeur de Reynolds en aérodynamique est de 106 obstacles et la vitesse d'écoulement est instable.

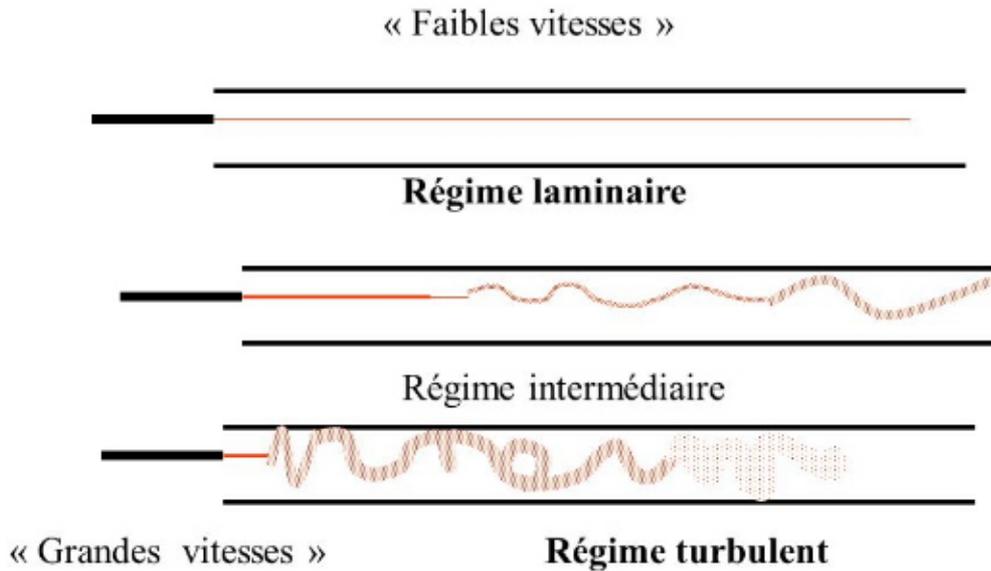


Figure (1.2) : Ecoulements laminaires et turbulents.[1.2]

La principale caractéristique de l'écoulement turbulent est que la vitesse moyenne près de la paroi est supérieure à l'écoulement laminaire. La vitesse à l'infini étant la même dans les deux cas, la pente rapide de la paroi est plus élevée pour un écoulement turbulent. En 2D, l'intensité F parfois appliquée à la paroi est donnée par :

$$F = \frac{dv}{dy} \mu \quad (1.2)$$

Utilisez le coefficient de viscosité dynamique de μ et v pour considérer la vitesse du fluide à ce point. Cela signifie que l'effet du frottement est plus important, donc la contrainte de paroi et le chauffage dynamique sont également plus importants, parce qu'elle est indispensable sur la surface de contrainte, la résistance à l'état d'écoulement turbulent est supérieure à la résistance à l'état d'écoulement laminaire. De plus, contrairement à l'état d'écoulement laminaire, la perturbation dans l'état d'écoulement turbulent n'est généralement pas atténuée, mais augmentera et provoquera d'autres perturbations.

Cependant, l'écoulement turbulent ne décolle pas aussi rapidement que l'écoulement laminaire, et si un écoulement se produit, le point de séparation (ou point d'écoulement) sera plus tardif et la zone d'écoulement sera plus petite. Cela signifie que pour un écoulement turbulent, la résistance due à la séparation sera plus petite.

I.3.2 Écoulement non stationnaire et écoulement stationnaire :

a) Écoulement non stationnaire : La vitesse des particules fluides change avec le temps et leur position. Pendant le processus de vidange, le processus de démarrage et d'arrêt de la turbine, ou dans le cas de vibrations liquides et de coups de bélier, un écoulement non régulier se formera.

- Considérant le processus d'écoulement non stationnaire, par exemple :

- Lors du dimensionnement du réservoir d'eau
- Utilisé pour déterminer la taille de la sortie au fond du barrage
- Sur le drain de l'évier au tuyau
- Lorsque deux fluides de vitesses différentes se rencontrent

b) Écoulement stationnaire : À La vitesse des particules de fluide varie en fonction de leur position plutôt que du temps.

Le principe de base du débit fixe : Dans le domaine du débit fixe, l'enseignement porte notamment sur la détermination de l'évolution du débit, la répartition de la pression et la détermination de la vitesse.

1.4 Les types des fluides :

1.4.1 Fluides parfaits : Soit un système fluide, c.à.d. un volume délimité par une surface fermée S fictive ou non. Considérons dF la force d'interaction au niveau de la surface élémentaire dS de normale n entre le fluide et le milieu extérieur. On peut toujours décomposer dF en deux composantes :

- une composante dF_N normale à dS ,
- une composante dF_T tangentielle à dS .

En mécanique des fluides, un fluide est dit parfait s'il est possible de décrire son mouvement sans prendre en compte les effets de frottement, c'est à dire quand la composante T est nul. Autrement dit, la force dF est normale à l'élément de surface dS [1.5].

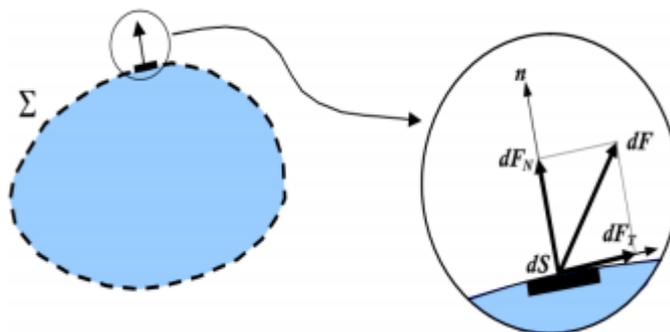


Figure (I.3) : Force d'interaction au niveau de la surface élémentaire d'un fluide parfait. [1.6]

1.4.2 Fluide Réel : A l'inverse d'un fluide parfait, qui n'est qu'un modèle simplifiant les calculs, quasiment inexistant dans la nature, dans un fluide réel les forces tangentiels de frottement interne qui s'opposent au glissement relatif des couches fluides sont prises en considération.

Ce phénomène de frottement visqueux apparaît lors du mouvement du fluide. C'est seulement au repos, qu'on accepte que le fluide réel se comporte comme un fluide parfait et on suppose que les forces de contact sont perpendiculaires aux éléments de surface sur lesquels elles s'exercent. La statique des fluides réels se confond avec celle des fluides parfaits [1.7]

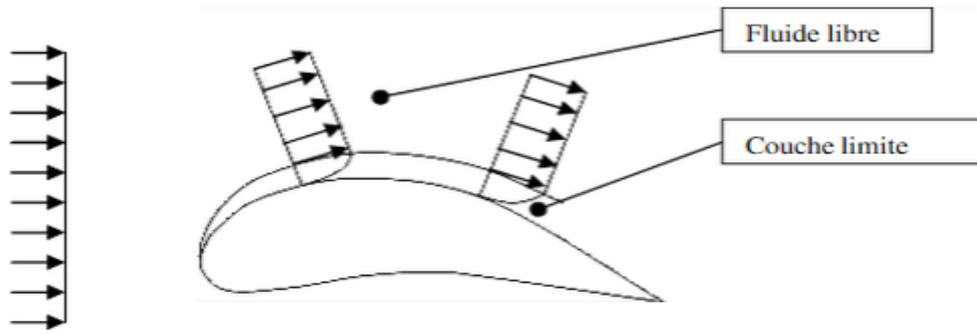


Figure (1.4) : Fluide réel. [1.8]

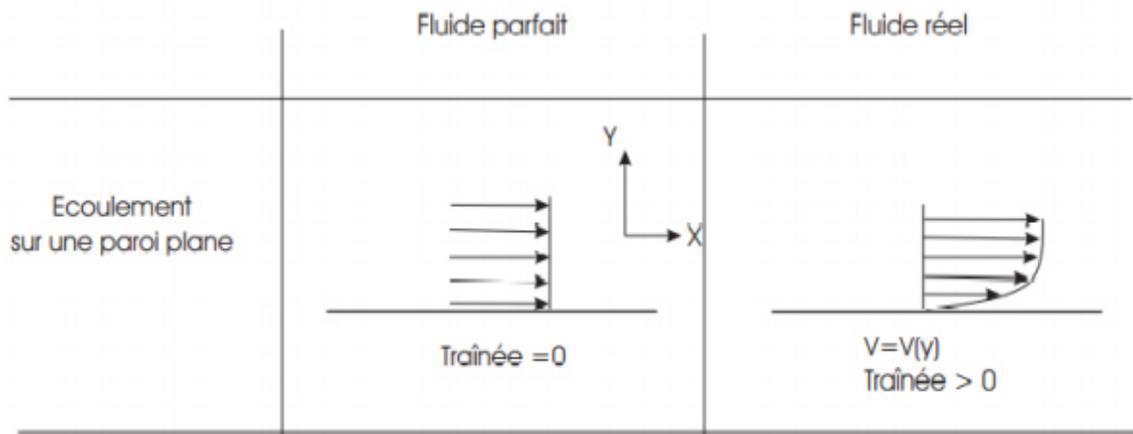


Figure (1.5) : Comparaison de l'écoulement d'un fluide parfait et réel sur une plaque plane [1.8]

1.4.3 Fluides newtoniens : Les fluides "newtoniens" ont une viscosité constante ou qui ne peut varier qu'en fonction de la température. La deuxième famille est constituée des fluides "non newtoniens" qui ont la particularité d'avoir leur viscosité qui varie en fonction de la vitesse et des contraintes qu'ils subissent lorsque ceux-ci s'écoulent [1.9].

1.5 La viscosité : La notion de viscosité est associée à la résistance qu'oppose tout fluide à sa mise en mouvement. Pour préciser cette propriété de façon plus quantitative, nous considérons l'expérience de "Couette" en écoulement plan. Telle qu'elle est schématisée à la figure (1.6)., cette expérience concerne un fluide visqueux disposé entre deux plans parallèles distants d'une hauteur S . Elle consiste à déplacer relativement à l'autre, l'une des deux parois d'un mouvement permanent de translation rectiligne dans son propre plan. Pour simplifier, on suppose la paroi inférieure fixe et la paroi supérieure mobile à la vitesse V [1.8].

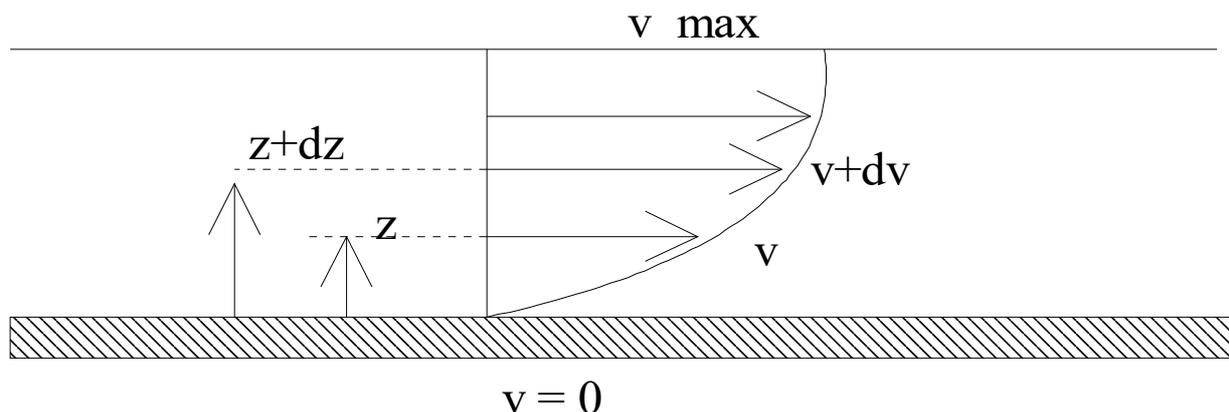


Figure (1.6) : Schéma de l'écoulement de couette plan [1.10].

1.5.1 La viscosité dynamique : La force de frottement F qui s'exerce à la surface de séparation de ces deux couches s'oppose au glissement d'une couche sur l'autre. Elle est proportionnelle à la différence de vitesse des couches soit dv , à leur surface S et inversement proportionnelle à dz : Le facteur de proportionnalité μ est le coefficient de viscosité dynamique du fluide. [1.10]

$$F = -\mu S \frac{dv}{dz} \quad (1.3)$$

Dimension $[\mu] = M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$

Unité : Dans le système international (SI), l'unité de viscosité est le **Pa·s** ou **Poiseuille (Pl)** : $1 \text{ Pl} = 1 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$

On trouve encore les tables de valeurs numériques le coefficient de viscosité dans un *ancien système d'unités (CGS)* : L'unité est le **Poise (Po)** ; $1 \text{ Pl} = 10 \text{ Po} = 1 \text{ daPo} = 10^3 \text{ cPo}$.

1.5.2 Viscosité cinématique : Dans de nombreuses formules apparaît le rapport de la viscosité dynamique μ et de la masse volumique ρ . Ce rapport est appelé viscosité cinématique ν [1.10] :

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (1.4)$$

Dimension : $[\nu] = L^2 \cdot T^{-1}$.

Unité : Dans le système international (SI), l'unité de viscosité n'a pas de nom particulier : (m^2/s) .

Dans le système CGS, l'unité est le Stoke (St) : $1 \text{ m}^2/\text{s} = 10^4 \text{ St}$.

1.5.3 Influence de la température : La viscosité des liquides diminue beaucoup lorsque la température augmente [1.10].

Ainsi pour l'eau :	à 10°C	$\mu = 1,3 \times 10^{-3} \text{ Pl}$
	à 20°C	$\mu = 1,0 \times 10^{-3} \text{ Pl}$
	à 90°C	$\mu = 0,3 \times 10^{-3} \text{ Pl}$

Il n'existe pas de relation rigoureuse liant μ et T . On peut cependant utiliser un modèle utilisant l'équation empirique de Guzman-Andrade de la forme :

$$\eta = a e^{b/T}$$

a et b étant des constantes dépendant de la nature du liquide et T la température absolue.

Contrairement à celle des liquides, *la viscosité des gaz augmente avec la température.*

1.6 Le nombre de Reynolds : Imaginons que le liquide s'écoule à une vitesse moyenne v , sur plaque plane de longueur L . Si ρ est la masse volumique du fluide, l'énergie cinétique du fluide est en gros proportionnelle à : ρv^2 . Pour la viscosité, elle fonctionne presque comme les frottements du skieur. Pour faire simple, on peut dire que la viscosité est ce qui fait que le liquide a tendance à coller à la paroi de la plaque. Les forces de viscosité sont d'autant plus importantes que la viscosité du liquide est élevée, que sa vitesse v est importante, Au final, l'énergie dissipée par les forces de viscosité est proportionnelle à la quantité $\mu \cdot v/L$:

$$Re = \frac{v \cdot l}{\nu} = \frac{\rho v L}{\mu} \quad (1.5)$$

Ce nombre va nous permettre de détecter l'apparition de la turbulence : plus il est élevé, plus l'inertie est importante et la viscosité faible, et plus les tourbillons pourront se développer [1.7].

1.7 Poussée d'Archimède : La poussée d'Archimède est la force particulière que subit un corps placé entièrement ou partiellement dans un fluide et soumis à un champ de gravité. Cette force provient de l'augmentation de la pression du fluide avec la profondeur ou l'altitude: la pression étant plus forte sur la partie inférieure d'un objet immergé que sur sa partie supérieure, il en résulte une poussée globalement verticale ascendante. C'est à partir de cette poussée qu'on définit la flottabilité d'un corps. Cette poussée a été pour la première fois étudiée par Archimède [1.11].

Formulation du théorème d'Archimède : Pour que le théorème s'applique il faut que le fluide immergeant et le corps immergé soient au repos. Il faut également qu'il soit possible de remplacer le corps immergé par du fluide immergeant sans rompre l'équilibre, le contre-exemple étant le bouchon d'une baignoire remplie d'eau : si celui-ci est remplacé par de l'eau, il est clair que la baignoire se vide et que le fluide n'est alors plus au repos. Le théorème ne s'applique pas puisque nous sommes dans un cas où le bouchon n'est pas entièrement mouillé par le liquide et ne traverse pas sa surface libre. [1.11]. Une fois les conditions précédentes respectées, dans un champ de pesanteur uniforme, la poussée d'Archimède, notée P_A est donnée par la formule :

$$\vec{P}_A = -m_f \vec{g} \quad (1.6)$$

Où : m_f est la masse du fluide contenu dans le volume V déplacé.

g est l'accélération du champ de pesanteur.

Dans le cas particulier où la masse volumique ρ du fluide est elle aussi uniforme, on a :

$$\vec{P}_A = -\rho V \vec{g} \quad (1.7)$$

Où V est le volume de fluide déplacé.

Si l'on considère les intensités (normes) des forces alors, en notant P_A et g les normes des vecteurs associés, on a :

$$P_A = \rho V g \quad (1.8)$$

L'intensité P_A de la poussée d'Archimède s'exprime en N, la masse volumique ρ en kg m^{-3} , le volume de fluide déplacé V en m^3 et l'accélération de la pesanteur g m/s^2 .

1.8 Lignes de courant :

Dans ce paragraphe, le flot est donné par la description d'Euler : $\vec{U} = \vec{U}(x, y, z, t)$. Pour un t_1 fixe et un volume de fluide \mathcal{D} , il existe un vecteur vitesse \vec{U} en chaque point M de \mathcal{D} . Les vecteurs \vec{U} forment un champ de vitesse (Fig. 1.7). Supposons que nous injectons de petites particules dans un fluide en mouvement, nous prenons une photo au temps t_1 et une autre photo au temps $t_1 + \Delta t$. Ces deux photos permettent de visualiser deux positions $\vec{x}(t_1)$ et $\vec{x}(t_1 + \Delta t)$ pour la même particule, il faut donc déterminer la direction du vecteur vitesse \vec{U} en chaque point du volume fluide \mathcal{D} . En chaque point de l'écoulement, la direction du vecteur vitesse est ainsi observée.

À un instant t_1 fixé, les lignes de courant sont les courbes tangentes en chacun de leur point au vecteur vitesse de l'écoulement en ce point (Fig. 1.7).

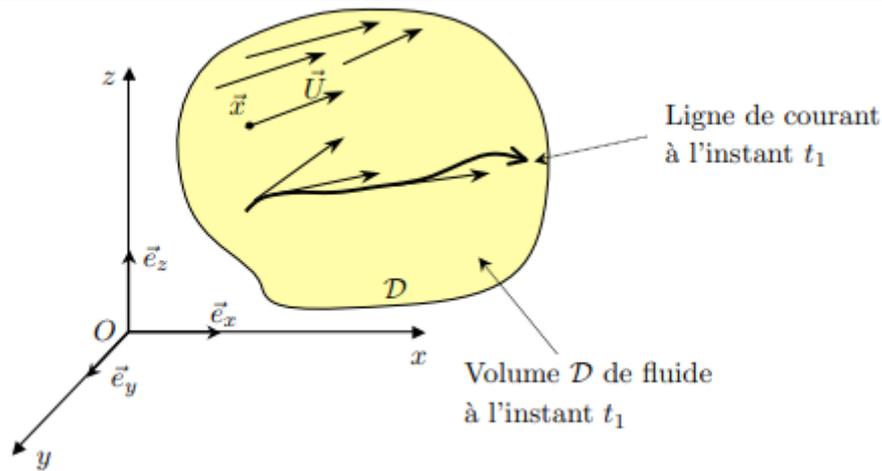


Fig. (1.7) – Champ des vecteurs vitesse et lignes de courant [1.12]

Afin d'obtenir l'équation différentielle des lignes de courant \mathcal{C} , on a écrit que le vecteur élémentaire \overrightarrow{dM} tangent à \mathcal{C} en M est parallèle au vecteur vitesse \vec{U} . Sachez que $\overrightarrow{dM} = (dx, dy, dz)$ et que $\vec{U} = (u = u(x, y, z, t_1), v = v(x, y, z, t_1), w = w(x, y, z, t_1))$, Le parallélisme de \overrightarrow{dM} et \vec{U} signifie :

$$\frac{dx}{u(x,y,z,t_1)} = \frac{dy}{v(x,y,z,t_1)} = \frac{dz}{w(x,y,z,t_1)} \quad (1.9)$$

Il est à noter que nous avons ici deux équations différentielles (par exemple : x et y en fonction de z), car t_1 est un paramètre fixe. Il est également à noter que la ligne courante à l'instant t_1 est généralement différente de la ligne courante à l'instant t_2 .

Nous appelons le tube courant à l'instant t_1 , c'est-à-dire la surface courbe formée par toutes les lignes de courant à l'instant t_1 sur la base d'une courbe fermée (Fig. 1.8).

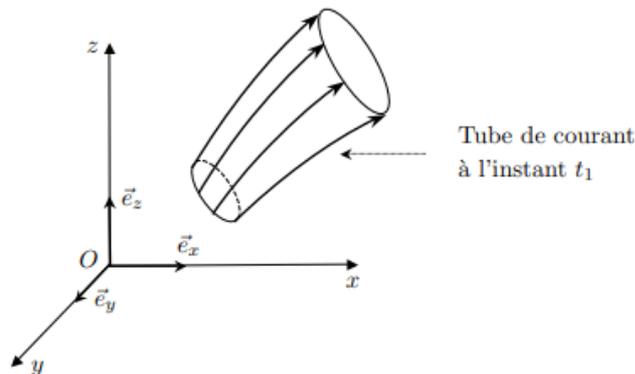


Fig. (1.8) – Tube de courant [1.12]

Lignes de courant et trajectoires : Ces deux notions ne doivent pas être confondues. Afin de construire la ligne courante à l'instant t_1 , nous considérons différentes particules au même instant t_1 , et la trajectoire est composée de positions consécutives de la même particule à des instants différents.

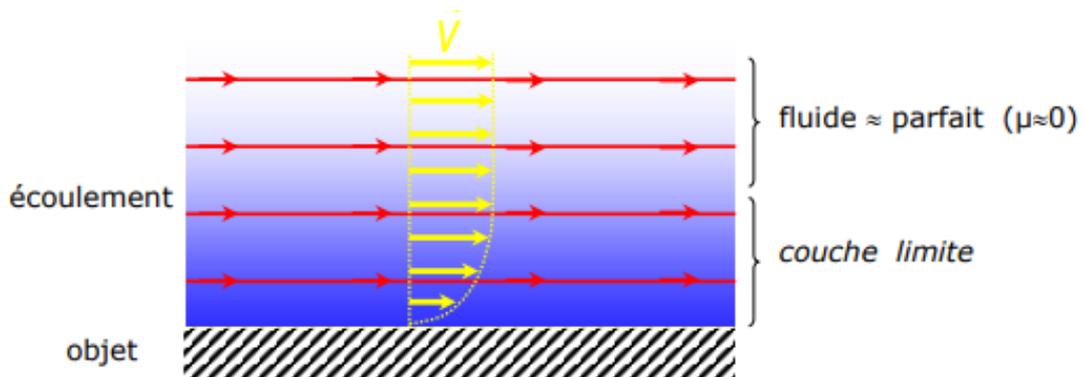
Afin d'obtenir les équations différentielles de la trajectoire en variables d'Euler, on écrit que le vecteur vitesse \overrightarrow{dM}/dt est égal au vecteur vitesse \vec{U} : $\overrightarrow{dM}/dt = \vec{U}$, d'où :

$$\frac{dx}{u(x,y,z,t)} = \frac{dy}{v(x,y,z,t)} = \frac{dz}{w(x,y,z,t)} = dt \quad (1.10)$$

Il convient de noter qu'il existe trois équations différentielles, où x , y et z sont des fonctions de la variable t .

1.9 Notion de couche limite :

Nous considérons un écoulement fluide bidimensionnel, statique, incompressible sans force de masse. On considère le flux de fluide autour de l'objet (Figure 1.9). Il est loin de l'objet, si le nombre de Reynolds est suffisamment grand, l'effet de la viscosité peut être ignoré. Dans ces conditions, le fluide peut être considéré comme parfait, et l'écoulement peut être décrit par la cinématique. Mais lorsque on s'approche de la paroi d'un objet, cette hypothèse n'a plus de sens et la vitesse du fluide devient progressivement nulle. Près de la paroi, la viscosité joue un rôle important, il faut décrire l'écoulement par l'équation de Navier-Stokes. La région de transition où la vitesse devient progressivement nulle est appelée la « couche limite ».



Fig(1.9) : flux de fluide autour de l'objet [1.13]

L'épaisseur de la couche limite dépend du nombre de Reynolds Re . Dans la couche limite, l'écoulement peut être laminaire ou turbulent (cela dépend aussi de Re). Au contact de la paroi, lorsque le profil de vitesse a une pente infinie, on dit que la couche limite est séparée (figure 1.10).

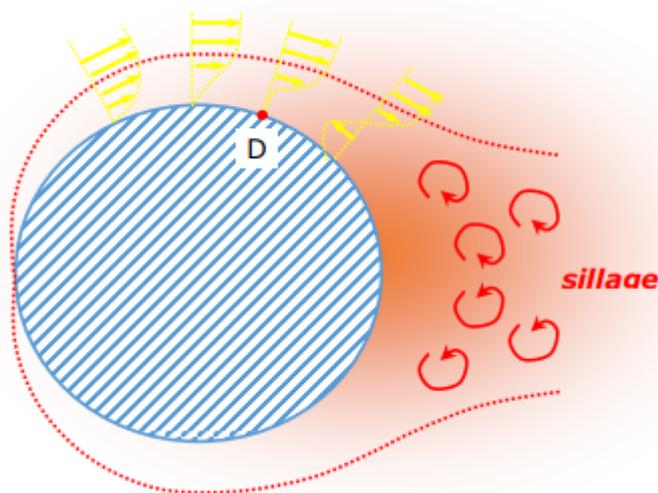


Figure (1.10) : Décollement de la couche limite [1.13]

Après le point de séparation D , la couche limite devient turbulente. Les forces visqueuses ne sont plus assez importantes pour garantir que l'objet orbitera normalement et formera un "sillage". Le

sillage est d'autant plus important que l'objet est mal profilé : en pratique, on cherche à optimiser le profil de façon à minimiser le sillage qui en effet responsable d'une dissipation d'énergie importante.

1.10 Le nombre de Péclet :

Le nombre de Péclet (Pe) est un nombre sans dimension utilisé en transfert thermique et en transfert massique. Il représente le rapport entre le transfert par convection et le transfert par conduction (ou transfert par diffusion pour les transferts massiques). Il est équivalent au produit du nombre de Reynolds et du nombre de Prandtl dans le cas du transfert thermique et au produit du nombre de Reynolds avec le nombre de Schmidt en transfert massique. Ce nombre porte le nom de Jean Claude Eugène Péclet, un physicien français [1.14].

Pe thermique : On le définit de la manière suivante :

$$Pe_{ther} = \frac{L_c \cdot v}{\alpha} = \frac{L_c \cdot v \cdot c_p \cdot \rho}{\lambda} = \frac{L_c^2 \cdot c_p \cdot \rho}{\lambda \cdot t} = Re \cdot Pr \quad (1.11)$$

Avec : α - diffusivité thermique

λ - conductivité thermique

ρ - densité

c_p - capacité calorifique.

L_c - longueur caractéristique du dispositif

t - temps caractéristique

v - vitesse

Re - nombre de Reynolds

Pr - nombre de Prandtl

Pe massique : La version massique du nombre de Péclet représente le rapport du transfert par convection sur le transfert par diffusion. On le définit de la manière suivante :

$$Pe_M = \frac{L_c \cdot v}{D} = Re \cdot Sc$$

Avec L_c - longueur caractéristique

v - vitesse

D - coefficient de diffusion

Re - nombre de Reynolds

Sc - nombre de Schmidt

Il existe un cas spécifique du nombre de Péclet massique qui fait appel à un coefficient de diffusion axial et qui est nommé nombre de Bodenstein. Ce nombre est utilisé en distribution de temps de séjour pour caractériser l'idéalité des réacteurs tubulaires.

hénomène de glissement :

Un des points clefs de la microfluidique est l'importance accrue du rôle des surfaces par rapport à une situation non miniaturisée. En effet, pour un écoulement confiné dans un système de taille

caractéristique L , le rapport surface/volume varie comme $1/L$. La physique prenant place à l'interface liquide / solide (ou gaz / solide) est amplifiée d'un facteur égal au confinement. Les phénomènes d'adsorption, de mouillage ou d'électrocinétique, qui suivent tous une loi d'échelle en $1/L$, deviennent déterminants en microfluidique [1.12]. Cette propriété est utilisée dans des systèmes de concentration par pervaporation via une membrane perméable au solvant : sa finesse permet un transport efficace, et la miniaturisation du canal rend sa surface dominante pour la solution à concentrer [1.13]. Elle peut également être à double tranchant pour la sensibilité de laboratoires sur Puces à vocation d'analyse de protéines. En effet, la séparation des macromolécules peut se faire par différence d'affinité avec un réseau de plots fonctionnalisés [104, 105], mécanisme interfacial pour lequel la réduction des échelles est favorable. Cependant, l'adsorption des protéines et la pollution du système par des impuretés présentes à sa surface ou relarguées par le matériau doivent être minimisées. On conçoit que le glissement hydrodynamique, phénomène interfacial par essence, puisse jouer un rôle important lors du passage à des échelles micrométriques. Pour quantifier son impact et ses applications potentielles, on résout les équations de l'hydrodynamique avec les conditions aux limites de glissement partiel pour la géométrie bidimensionnelle simple d'écoulement entre deux murs plans parallèles.

Écoulement de Poiseuille avec glissement partiel : On considère une vitesse orientée selon l'axe x . Les conventions pour les axes sont représentées sur la figure 1.7.

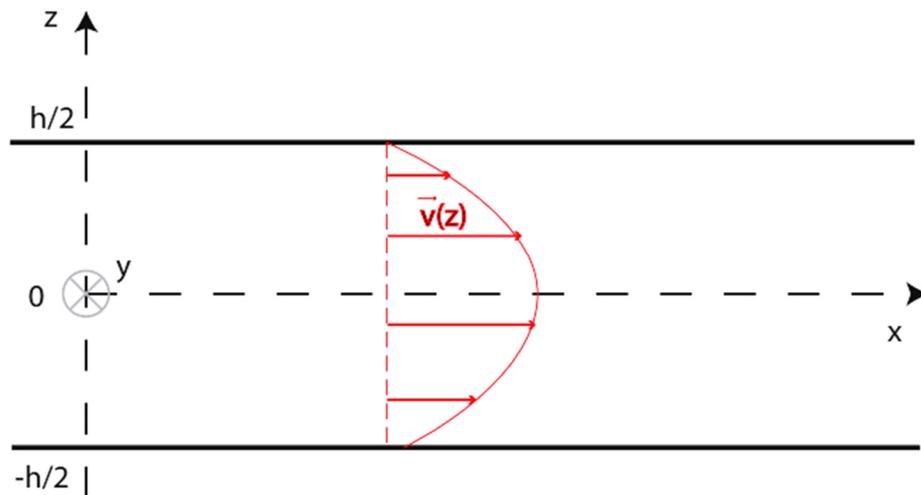


Figure 1.7 : Conventions pour les axes dans le cas d'un écoulement dans un canal rectangulaire. Le canal est limité par deux parois planes, situées en $z = \pm \frac{h}{2}$. On résout les équations de l'hydrodynamique pour l'écoulement induit par un gradient de pression (une force volumique constante appliquée sur les particules fluides). Les trois conditions de glissement suivantes sont successivement considérées sur ces interfaces :

1. non glissement sur les deux murs,
2. deux parois glissantes (caractérisée par la même longueur de glissement b), glissement sur la seule paroi inférieure. Dans les trois cas, l'écoulement est indépendant de x , du fait de la grande

longueur du système face à ses autres dimensions, et de y , car la largeur w des canaux est grande devant leur épaisseur ; et l'on se place à une distance suffisante des bords latéraux, supérieure à leur profondeur (problème bidimensionnel). Le champ de vitesse s'écrit $v = v(z) \cdot e_x$. Pour un fluide newtonien, l'écoulement est régi par l'équation de Navier-Stokes et la conservation de la masse auxquelles il faut ajouter les conditions aux limites en $z = \pm \frac{h}{2}$. Pour un canal d'épaisseur $h \approx 10 \mu\text{m}$ et une vitesse typique de $1 \text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$, si le fluide est de l'eau de viscosité $\eta = 10^{-3} \text{ Pa s}$, le nombre de Reynolds est de l'ordre de 10^{-2} . Ainsi, le cadre est celui de la microhydrodynamique, et l'équation de Navier-Stokes se réduit à celle, linéaire, de Stokes. On néglige ici de possibles autres sources de force volumique : la gravité peut être à l'origine du gradient de pression mais elle joue un rôle infime dans un microcanal, et on ne considère pas ici d'écoulement électrocinétique.

Comme on pouvait s'y attendre, l'effet du glissement est donc d'autant plus sensible que le glissement augmente pour devenir comparable à la hauteur du canal. Ce calcul d'hydrodynamique simple a permis de décrire la structure d'un écoulement de Poiseuille avec ou sans glissement. On peut en déduire comment le phénomène, s'il est maîtrisé et éventuellement amplifié, pourrait être appliqué.

La classification suivante tente de séparer les variables à même d'influencer le glissement. Notons que cette démarche reste limitée dans la mesure où les paramètres contrôlant la valeur du glissement semblent ne pas être indépendants, comme le montrent par les rôles conjugués de l'hydrophobie et du mouillage, abordés dans la deuxième partie. La condition limite peut *a priori* dépendre des paramètres suivants :

- La force de l'interaction liquide—solide, *via* le mouillage.
- La rugosité du solide.
- La nature de l'interface : Structure du liquide, l'éventuelle déplétion du liquide au voisinage de la paroi, ou encore la formation de nanobulles.
- Les conditions opératoires : importance du forçage (taux de cisaillement), pression de travail, gaz dissout.
- Les propriétés électriques du liquide (moment dipolaire, salinité)

La validité d'une description en terme de milieu continu utilisant les lois de l'hydrodynamique est confirmée d'une part par les simulations de dynamique moléculaire, dont les résultats coïncident avec les prédictions de la mécanique des fluides dès lors que la taille du système excède une dizaine de taille moléculaire, d'autre part par l'accord de nombreuses expériences en machine de force avec ces mêmes prédictions, pour une distance entre les parois supérieure à quelques nanomètres. L'enjeu est ici la condition limite hydrodynamique, non le comportement moléculaire de fluides confinés.

Références bibliographiques :

CHAPITRE 1 : NOTIONS GENERALES SUR LES FLUIDES

- [1.1] : R. Ben.Hamouda, “mécanique des fluides : introduction à la mécanique des fluides”, université virtuelle de Tunis
- [1.2] : C. Ancey, ” Chapitre 6 : écoulements laminaires et turbulents : Mécanique des fluides” école polytechnique fédérale de Lausanne.
- [1.3] : H. Berkane, “influence de l’effet thermique sur les caractéristiques de la couche limite laminaire sur une paroi lisse”, Mémoire de Magistère, Université Biskra ,2005.
- [1.4] : <http://public.iutenligne.net/mecanique>, site web, consulté le 25- 4 -2021
- [1.5] : M. Elguerri, ” MECANIQUE DES FLUIDES THEORIE ET APPLICATIONS” , Polycopié de Cours destiné aux étudiants de 2ème année Licence, UNIVERSITE DE TIARET, 2014/15.
- [1.6] : M. Beriache, ” MECANIQUE DES FLUIDES” , Cours 2ème année licence, Université de Chlef,2016.
- [1.7] : M. Elguerri, ” MECANIQUE DES FLUIDES THEORIE ET APPLICATIONS” , Polycopié de Cours destiné aux étudiants de 2ème année Licence, UNIVERSITE DE TIARET,2014/15.
- [1.8] : Ph. Marty, ” MECANIQUE DES FLUIDES” , Master 1 GDP, Université Joseph Fourier, Grenoble,2012/13.
- [1.9] : A. Kebiche, ’Fluides newtoniens et non newtoniens’ , Au profit des étudiants de Licence et Master en spécialité Physique,2018.
- [1.10] : BTS CIRA , ‘’control industriel et régulation automatique’’, MDF ,Michel Roques-2005.
- [1.11] : https://fr.wikipedia.org/wiki/Pouss%C3%A9e_d%27Archim%C3%A8de , site web ,Wikipedia , poussée d’Archimède .

CHAPITRE 2 :

**Techniques de résolution des équations de
Navier-Stokes et des équations intégrales dans le
cadre axisymétrique**

2.1. Introduction :

Nous considérons le problème des particules dans un fluide visqueux s'écoulant à proximité d'une paroi plane imperméable. Nous allons d'abord présenter les équations de Stokes qui contrôlent le mouvement des fluides, les propriétés de ces équations, un aperçu des techniques classiques de division analytique et quelques résultats d'analyse. Dans ce travail, nous proposons d'utiliser la méthode des éléments frontières (BEM) pour résoudre l'équation de Stokes afin d'étudier l'interaction entre plusieurs particules et la paroi lors de l'observation de l'échelle des particules. Le choix de cette méthode est raisonnable car notre domaine de travail est semi-infini, et l'application de la méthode des éléments finis nécessite un maillage dans un maillage suffisamment grand pour prendre en compte l'influence longue distance du flux. Pour la résolution 3D, le coût de Stokes est trop élevé. Grâce à la méthode de coordination, Youngren et Acrivos [2.23] a utilisé des particules isolées dans le fluide dans un écoulement axisymétrique tridimensionnel pour résoudre l'équation intégrale avec la distribution de surface de Stokeslets pour la première fois. Pozrikidis [2.17] par méthode de juxtaposition traite de la résolution de l'équation intégrale d'une particule elliptique dans le cas d'axisymétrique. Dans ce chapitre, nous avons traité le cas de particules sphériques multiples de diamètres différents, où le fluide est disposé de manière axisymétrique [2.24]. Cela permet de le simplifier en un problème unidimensionnel par projection azimutale. Dans le cadre axisymétrique, nous allons résoudre l'équation intégrale de surface par la méthode de collocation sur la frontière. La méthode consiste à écrire des équations intégrales à un nombre limité de points pour vérifier les conditions d'arrêt. Cela conduit à un système algébrique linéaire dont la taille dépend du nombre de particules et du nombre de points juxtaposés. Nous comparons nos résultats avec les résultats donnés dans la littérature [2.21, 2.22, 2.25, 2.26]. Ensuite, nous avons Appliqué la technologie adaptative des Stokeslets distribués à la surface des particules pour améliorer les résultats obtenus grâce à une grille uniforme. Les nouveaux résultats sont présentés à la fin de ce chapitre.

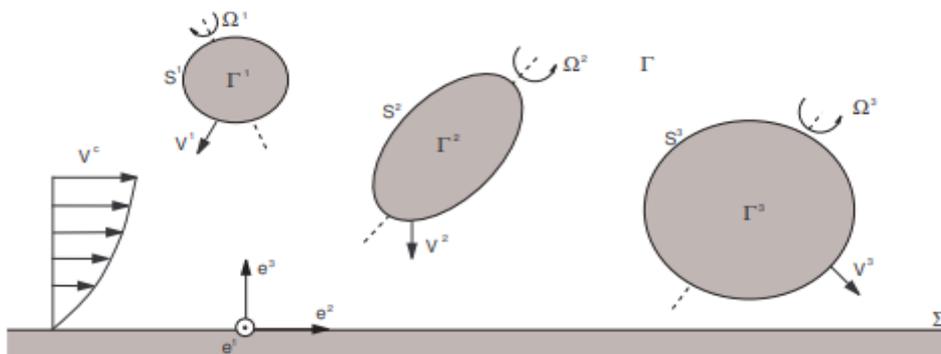


Figure (2.1) : Particules en mouvement de translation et de rotation dans un fluide de cisaillement délimité par des parois imperméables [2.1]

Afin de passer du cadre physique au cadre mathématique, les symboles suivants sont utilisés (voir Figure (2.1)) :

- N_p , le nombre de particules dans le fluide,

- Γ la région de l'espace extérieure aux particules,
- Σ la surface de la paroi du côté où se trouvent les particules,
- Γ^i la région de l'espace intérieure à la particule $i, i = 1..N_p, S = \cup S^i$
- S^i la surface de la particule $\Gamma^i, i = 1..N_p, S = \cup S^i$
- \mathbf{V}^i la vitesse de translation de la particule $i, i = 1..N_p$
- \mathbf{V}^∞ la vitesse non perturbée du fluide,
- Ω^i la vitesse angulaire de la particule $i, i = 1..N_p$
- \mathbf{n}^i la normale extérieure à la particule $\Gamma^i, i = 1..N_p$

Puisque le fluide est supposé être un fluide newtonien, le problème est régi par l'équation de Navier-Stokes, qui représente la conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Ces équations sont écrites pour un fluide incompressible homogène de densité ρ , viscosité μ , vitesse \mathbf{v} , pression p^* et soumis à la gravité $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}^3$:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p^* + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

Lorsque les parois et les surfaces des particules ont des conditions antidérapantes :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad \text{pour } \mathbf{x} \in \Sigma \quad (2.3)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_i^0 \quad \text{pour } \mathbf{x} \in S^i \quad (2.4)$$

Où \mathbf{v}_i^0 est la vitesse sur le bord de la particule, due à la translation et à la rotation. De plus, lorsque le fluide se déplace à une vitesse \mathbf{V}^∞ loin des particules, l'écoulement perturbé peut être étudié :

$$\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{V}^\infty \quad \text{pour } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (2.5)$$

2.2 Normalisation et équations de Stokes :

Soit a la taille caractéristique de l'écoulement, telle que la taille caractéristique d'une particule, V est la vitesse caractéristique de l'écoulement et P est la pression caractéristique. Ensuite, la quantité sans dimension peut être introduite en proposant la manière suivante :

$$\mathbf{v} = V\mathbf{v}' \quad , \quad \mathbf{x} = a\mathbf{x}' \quad , \quad p^* = Pp'^*$$

Les formules (2. 1) - (2. 2) sont écrites pour le problème stationnaire :

$$\begin{aligned} \nabla' \mathbf{v}' &= 0 \\ \frac{\rho a V}{\mu} (\mathbf{v}' \cdot \nabla' \mathbf{v}') &= -\frac{a P}{\mu V} \nabla' p'^* + \nabla'^2 \mathbf{v}' - \frac{g a^2 \rho}{V \mu} \mathbf{e}^3 \end{aligned}$$

Vous pouvez donc choisir en tant que caractéristique de pression $P = \frac{\mu V}{a}$. Reynolds et le numéro de Bond

lié au problème est écrit : $R_e = \frac{\rho a V}{\mu}$ et $Bo = \frac{g a^2 \rho}{V \mu}$

Si on a un faible nombre de Reynolds et un nombre de Bond égal à l'unité, les équations de Navier-Stokes se réduisent au 1^{er} ordre ($R_e \rightarrow 0$) aux équations de Stokes :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{v}' &= 0 \\ \nabla'^2 \mathbf{v}' - \nabla' p'^* &= -Bo \mathbf{e}^3 \end{aligned}$$

En revenant aux quantités cotées, les équations de Stokes devient :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \\ \mu \nabla^2 \mathbf{v} - \nabla p^* &= \rho \mathbf{g}\end{aligned}$$

p^* est la pression dans le fluide.

On fixe la pression dynamique $q = p^* - \rho g x_3$, on obtient pour $\mathbf{x} \in \Gamma$:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (2.6a)$$

$$\mu \nabla^2 \mathbf{v} = \nabla q \quad (2.6b)$$

Avec la condition de ne pas planifier sur la paroi.

$$\mathbf{V} = \mathbf{0} \quad (2.6c)$$

Et la condition d'adhésion à la surface des particules

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{v}_i^0 \quad (1.6d)$$

avec $\mathbf{x} \in S^i, i = 1..N_p$

La vitesse du point de masse en translation et en rotation est exprimée comme suit :

$$\mathbf{v}_i^0 = \mathbf{V}^i + \boldsymbol{\Omega}^i \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G^i)$$

Parmi eux, \mathbf{V}^i est la vitesse de translation de la sphère i , $\boldsymbol{\Omega}^i$ est la vitesse angulaire de rotation de la balle et \mathbf{x}_G^i est le centre de gravité de la balle. On suppose également que le fluide se déplace à l'infini, donc les conditions : $|\mathbf{v}| \rightarrow \mathbf{V}^\infty$ et $q \rightarrow p^\infty$ quand $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ (2.7)

Ensuite, nous cherchons le flux de perturbation sous la forme de $\mathbf{v} = \mathbf{V}^\infty + \mathbf{u}, q = p^\infty + p$, où (\mathbf{u}, p) représente la perturbation, lorsque $|\mathbf{u}| \rightarrow 0$ et $p \rightarrow 0$ quand $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$.

2.3 Superposition des écoulements :

Si (v, p) et (u, q) sont deux solutions de l'équation de Stokes (2.6) alors celle-ci est linéaire avec α, β sont deux nombres réels arbitraires. Les conditions aux limites sont également linéaires : lorsque v est la solution correspondant à la vitesse aux limites à l'infini \mathbf{V} et \mathbf{u} est la solution correspondant à \mathbf{U} alors $(\alpha \mathbf{v} + \beta \mathbf{u})$ correspond à $(\alpha \mathbf{V} + \beta \mathbf{U})$. Le lieu d'intérêt est l'écoulement complexe autour des particules dans plusieurs écoulements élémentaires qui se décomposent uniquement en raison de la vitesse de translation ou de rotation ou de cisaillement (voir figure (2.2)).

Tout d'abord, nous avons étudié le mouvement de translation non spécifié de la particule dans le système de coordonnées cartésien afin d'étudier la translation sur chaque axe.

$$\mathbf{V}^T = V_x \mathbf{e}^1 + V_y \mathbf{e}^2 + V_z \mathbf{e}^3 = \mathbf{V}^1 + \mathbf{V}^2 + \mathbf{V}^3 \quad (2.8)$$

$$\mathbf{V}^1 = \begin{pmatrix} V_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \mathbf{V}^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ V_y \\ 0 \end{pmatrix}; \mathbf{V}^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ V_z \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Décomposez ensuite la vitesse de rotation le long de l'axe de rotation :

$$\mathbf{V}^R = \boldsymbol{\Omega} \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G) = \mathbf{V}^4 + \mathbf{V}^5 + \mathbf{V}^6 \quad (2.10)$$

Avec

$$\mathbf{V}^4 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ -\Omega_x(z - z_G) \\ \Omega_x(y - y_G) \end{pmatrix}; \mathbf{V}^5 = \begin{pmatrix} \Omega_y(z - z_G) \\ \mathbf{0} \\ -\Omega_y(x - x_G) \end{pmatrix}; \mathbf{V}^6 = \begin{pmatrix} -\Omega_z(y - y_G) \\ \Omega_z(x - x_G) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

Par conséquent, la résolution de l'équation (2.6) tombe à une résolution système de six seconds membres $\mathbf{V} = \mathbf{V}^k, k = 1 \dots 6$

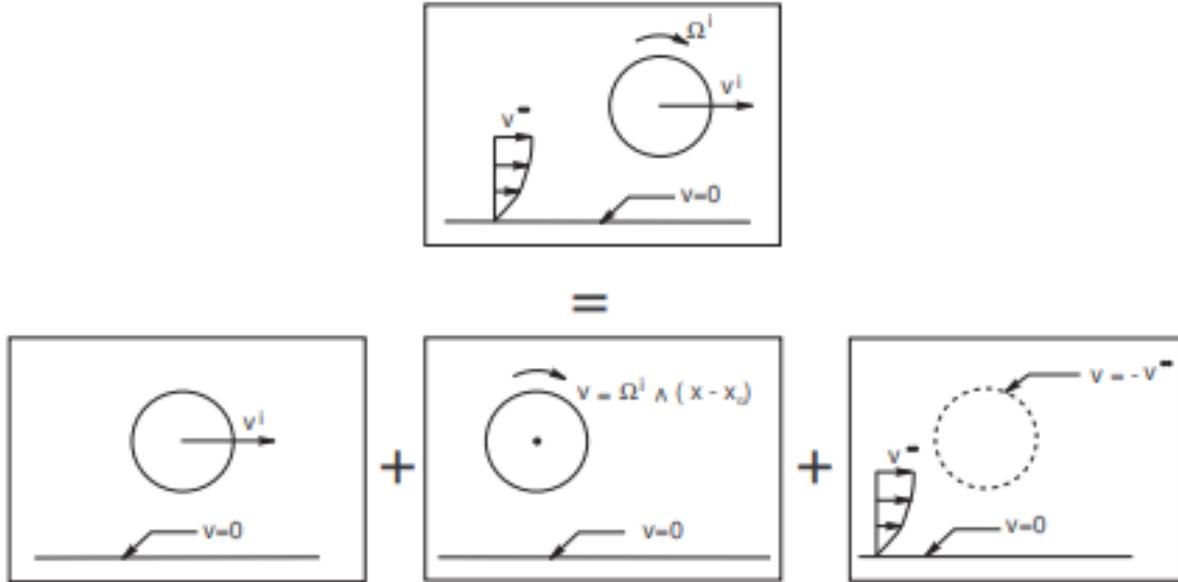


Figure (2.2) : Décomposer un flux en plusieurs flux élémentaires.[2.1]

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{v} = \frac{1}{\mu} \nabla p & \mathbf{x} \in \Gamma \\ \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}) = 0 & \mathbf{x} \in \Gamma \\ \mathbf{v} = \mathbf{V}^k & \mathbf{x} \in \mathcal{S} \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} & \mathbf{x} \in \Sigma \\ |\mathbf{v}| \rightarrow \mathbf{0} & |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \\ p \rightarrow 0 & |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \end{cases} \quad (2.12)$$

Chaque sélection du deuxième membre \mathbf{V}^k correspond à un type de mouvement. Il y a toujours un flux d'influence sans entrave. Par exemple, pour l'écoulement de cisaillement, où C est la constante de cisaillement, remplacez v dans l'équation (2.12) par la condition de la perturbation u et des particules par rapport à l'écoulement sont introduites par $u = -Cze^1$ pour $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$. Pour l'écoulement de cisaillement, la condition de pression dans des conditions infinies ne change pas.

2.4 Aperçu sur des techniques de résolution :

2.4.1 Méthode des réflexions : La linéarité de l'équation de Stokes permet la superposition de solutions élémentaires, dont chacune est attribuée à l'écoulement élémentaire [2.1].

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{v}^{(1)} + \mathbf{v}^{(2)} + \mathbf{v}^{(3)} + \dots \\ p &= p^{(1)} + p^{(2)} + p^{(3)} + \dots \end{aligned}$$

Chaque paire $(\mathbf{v}^{(i)}, p^{(i)})$ satisfait à son tour l'équation de Stokes, mais a des conditions aux limites spécifiques, de sorte que la somme des conditions aux limites de chaque solution de base donne les conditions aux limites du problème général. Par exemple, pour le cas de particules s'écoulant près d'une paroi infinie en raison du mouvement des particules, la condition au bord sont :

$$\begin{cases} \mathbf{v} = \mathbf{v}_p & \text{sur la particule} \\ \mathbf{v} = 0 & \text{sur la paroi} \\ \mathbf{v} = \mathbf{v}_\infty & \text{à l'infini} \end{cases}$$

Le problème est décomposé en processus de base. Pour le flux (1), on suppose qu'il n'y a pas de parois et la particule est présente.

$$\begin{cases} \mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{v}_p & \text{sur la particule} \\ \mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{v}_\Sigma^{(1)} & \text{sur la paroi} \\ \mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{v}_\infty & \text{à l'infini} \end{cases}$$

Pour le flux (2), on suppose qu'il y a des parois et pas de particules

$$\begin{cases} \mathbf{v}^{(2)} = \mathbf{v}_p^{(2)} & \text{sur la particule} \\ \mathbf{v}^{(2)} = -\mathbf{v}_\Sigma^{(1)} & \text{sur la paroi} \\ \mathbf{v}^{(2)} = 0 & \text{à l'infini} \end{cases}$$

Pour le flux (3), on suppose qu'il y a de particules et pas de parois

$$\begin{cases} \mathbf{v}^{(3)} = -\mathbf{v}_p^{(2)} & \text{sur la particule} \\ \mathbf{v}^{(3)} = \mathbf{v}_\Sigma^{(3)} & \text{sur la paroi} \\ \mathbf{v}^{(3)} = 0 & \text{à l'infini} \end{cases}$$

Pour le flux (4), on suppose qu'il y a des parois et pas de particules

$$\begin{cases} \mathbf{v}^{(4)} = \mathbf{v}_p^{(4)} & \text{sur la particule} \\ \mathbf{v}^{(4)} = -\mathbf{v}_\Sigma^{(3)} & \text{sur la paroi} \\ \mathbf{v}^{(4)} = 0 & \text{à l'infini} \end{cases}$$

Et ainsi de suite ...

Chaque erreur qui se produit sur la paroi ou la particule est compensée par la valeur opposée du débit suivant. De même, la force et le couple appliqués aux particules seront également décomposés.

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{(1)} + \mathbf{F}^{(2)} + \mathbf{F}^{(3)} + \dots$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}^{(1)} + \mathbf{C}^{(2)} + \mathbf{C}^{(3)} + \dots$$

Par exemple, Wakiya [2.2] a trouvé l'expression de la force exercée sur la translation perpendiculaire

à la paroi à la vitesse verticale \mathbf{U}_z :

$$F_z = \frac{-6\pi\mu a \mathbf{U}_z}{1 - \frac{9a}{8\ell} + \frac{1}{2}\left(\frac{a}{\ell}\right)^3 + \dots}$$

Où ℓ est la distance entre le centre de la sphère et le mur.

Maude [2.3] a donné une expression du couple appliqué à une particule tournant autour de (Oz) près

de la paroi de l'équation $z = 0$:

$$C_z = \frac{-6\pi\mu a \Omega_z}{1 - \frac{9a}{8\ell} + \frac{1}{2}\left(\frac{a}{\ell}\right)^3 + \dots}$$

2.4.2 Méthode des coordonnées bisphériques : Brenner [2.4] et Maude [2.3] ont utilisé le système de coordonnées à deux sphères pour résoudre analytiquement le problème des particules en mouvement de translation perpendiculaire à la paroi et le problème de deux sphères identiques [2.5]

se déplaçant le long d'une ligne droite. Cette méthode est basée sur le système de coordonnées biosphériques (ξ, η) défini à partir du système de coordonnées cylindriques (ρ_c, z_c) de la manière suivante :

$$z_c + i\rho_c = ic \cot \frac{1}{2}(\xi + i\eta) \quad (2.13)$$

En considérant les parties réelle et imaginaire de l'équation, nous pouvons clairement obtenir :

$$z_c = c \frac{\sin \eta}{\cosh \eta - \cos \xi} \quad (2.14)$$

$$\rho_c = c \frac{\sin \xi}{\cosh \eta - \cos \xi} \quad (2.15)$$

ℓ est la distance entre le centre de la sphère et le mur

a est le rayon de la sphère, le mur est représenté par $\eta = 0$, et la sphère est représentée par $\eta = \alpha = a \cosh \frac{\ell}{a}$.

Pour la sphère et le mur, différents résultats ont été obtenus :

✚ *Particules sphériques en mouvement de translation* : La force appliquée aux particules de translation perpendiculaires à la paroi [2.3, 2.4] est donnée par :

$$F_z^t = -6\pi a \mu f_z^t \left(\frac{\ell}{a}\right) V_z$$

Où le coefficient de frottement adimensionné F_z^t s'écrit :

$$f_z^t(\alpha) = \frac{4}{3} \sinh \alpha \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)}{(2n-1)(2n+3)} \left[\frac{2 \sinh(2n+1)\alpha + (2n+1) \sinh 2\alpha}{4 \sinh^2(n+\frac{1}{2})\alpha - (2n+1)^2 \sinh^2 \alpha} - 1 \right] \quad (2.16)$$

✚ *Particules sphériques en mouvement de rotation* : Le couple appliqué aux particules en rotation autour d'un axe perpendiculaire à la paroi [2.6] est donné par :

$$C_z^r = -8\pi a^3 \mu c_z^r \left(\frac{\ell}{a}\right) \omega_z$$

Où le coefficient de frottement sans dimension c_z^r est écrit par :

$$c_z^r(\alpha) = \sinh^3 \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{cosech}^3 n\alpha \quad (2.17)$$

✚ *Particules sphériques fixes dans un fluide en mouvement* : Pour un écoulement au point d'arrêt, la vitesse du fluide à l'infini est donnée par $\mathbf{v}_\infty = \chi_a(xz\mathbf{e}^1 + yz\mathbf{e}^2 - z^2\mathbf{e}^3)$ Où χ_a est une constante. La force des particules sphériques fixes dans ce flux peut être exprimée sous la forme suivante :

$$F_z^{\chi_a} = -6\pi a \mu f_z^{\chi_a} \left(\frac{\ell}{a}\right) \chi_a \ell^2$$

Où le coefficient de frottement sans dimension $f_z^{\chi_a} \left(\frac{\ell}{a}\right)$ est écrit comme [2.7] :

$$f_z^{\chi_a} \left(\frac{\ell}{a}\right) = \frac{4}{5} \sinh^5 \alpha \operatorname{sech}^2 \alpha \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 (n+1)}{\sinh^2 \left(n + \frac{1}{2}\right) \alpha - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \sinh^2 \alpha} \quad (2.18)$$

✚ *Deux sphères en translation* : Pour le cas de deux sphères se déplaçant le long d'une ligne droite reliant leurs centres, Stimson et Jeffery [2.8] ont obtenu des résultats suivants :

$$F^t = -6\pi a \mu f^t(\alpha) V$$

Où le coefficient de frottement adimensionné f^t s'écrit pour

➤ Cas de deux particules en translation de même sens :

$$f^t(\alpha) \& = \frac{4}{3} \sinh \alpha \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)}{(2n-1)(2n+3)} \left[\frac{4 \cosh^2 \left(n + \frac{1}{2}\right) \alpha + (2n+1)^2 \sinh^2 \alpha}{2 \sinh(2n+1)\alpha - (2n+1) \sinh 2\alpha} - 1 \right] \quad (2.19)$$

➤ Cas de deux particules en translation de sens opposés :

$$f^t(\alpha) = \frac{4}{3} \sinh \alpha \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n(n+1)}{(2n-1)(2n+3)} \left[\frac{4 \cosh^2(n+\frac{1}{2}) \alpha + (2n+1)^2 \sinh^2 \alpha}{2 \sinh(2n+1) \alpha - (2n+1) \sinh 2\alpha} - 1 \right] \quad (2.20)$$

Avec $\cosh \alpha = \frac{r}{2a}$; pour les notations voir figure (2.3).

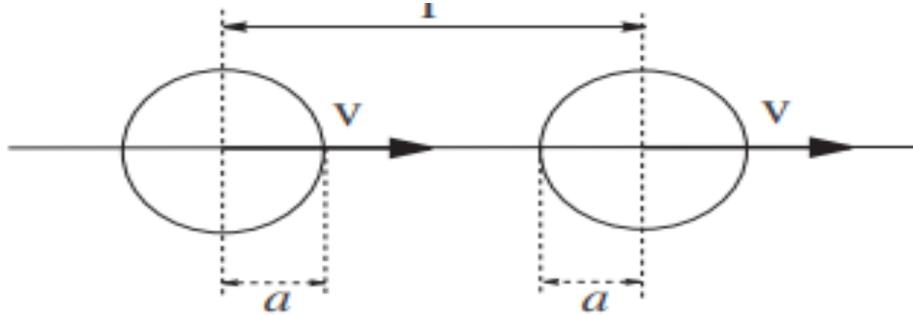


Figure (2.3) : Le symbole de la situation où deux sphères se déplacent dans la même direction dans un fluide statique. [2.1]

2.4.3 Méthode des développements multipolaires : Sur la base de l'expression de la solution introduite par Lamb [2.9] et de l'utilisation simultanée d'une méthode d'expansion multipolaire adaptée à plusieurs systèmes de coordonnées pour chaque particule, elle a été utilisée par Jeffrey et par Onishi [2.10] dans le cas de deux sphères en translation et rotation dans un fluide statique. Par exemple, la force exercée sur deux sphères égales parallèles à la ligne médiane les reliant est donnée par:

$$\begin{pmatrix} v^1 \\ v^2 \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} F_u^1 \\ F_u^2 \end{pmatrix}$$

Les coefficients x_{ij} appelés "coefficients de mobilité" calculés par Jeffrey et Onishi [59] sont donnés par :

$$\begin{aligned} x_{11} &= 1 - \frac{15}{4} s^{-4} + \frac{11}{2} s^{-6} + \frac{21}{2} s^{-8} + o(s^{-10}) \\ x_{12} &= \frac{3}{2} s^{-1} - s^{-3} + \frac{75}{4} s^{-7} - \frac{15}{2} s^{-9} + o(s^{-10}) \\ y_{11} &= 1 - \frac{17}{16} s^{-6} - \frac{5}{4} s^{-8} + o(s^{-10}) \\ y_{12} &= \frac{3}{4} s^{-1} + \frac{1}{2} s^{-3} + o(s^{-10}) \end{aligned}$$

Avec $s = \frac{r}{a}$, r la distance entre les centres des deux sphères et a leur rayon.

2.5 Formulation intégrale et méthode de résolution :

Dans ce travail, nous proposons de résoudre le problème (2.6) - (2.7) numériquement. Cette question est mathématiquement appropriée. Nous passons en revue les résultats de l'existence et du caractère unique de la solution à ce problème dans la section suivante.

2.5.1 Existence et unicité de la solution des équations de Stokes : Nous proposons de résoudre le problème (2.6) - (2.7) numériquement avec v comme problème donné. C'est un système d'équations aux dérivées partielles elliptiques linéaires dans le domaine illimité de \mathbb{R}^3 . Ces équations sont largement discutées mathématiquement dans la littérature [2.11, 2.27, 2.28, 2.29]. Un caractère illimité dicte l'introduction d'un espace avec le poids.

Définition 2.1 Soit $x \in \mathbb{R}^3$ et $r = |\mathbf{x}|$. On définit l'espace :

$$W^1(\Gamma) = \left\{ u, \frac{u}{(1+r^2)^{\frac{1}{2}}} \in L^2(\Gamma), \frac{\partial u}{\partial x_i} \in L^2(\Gamma), i = 1,2,3, \Gamma \subset \mathbb{R}^3 \right\}$$

Le poids $\frac{1}{(1+r^2)^{\frac{1}{2}}}$ fixe le comportement à l'infini des fonctions de $W^1(\Gamma)$ et la norme définie sur

l'espace de Hilbert $W^1(\Gamma)$ est donnée par :
$$\| u \|_{\Gamma}^1 = \int_{\Gamma} \left(\frac{|u(\mathbf{x})|^2}{1+r^2} dx + \sum_{i=1}^3 \left| \frac{\partial u}{\partial x_i}(\mathbf{x}) \right|^2 \right) dx$$

Le problème de Dirichlet externe (2.6)-(2.7) est bien posé. En fait, nous avons [2.11] les résultats suivants :

Théorème 2.1 En supposant que le domaine Γ est simplement connexe et que $v_i^0 \in \left(H^{\frac{1}{2}}(S^i) \right)^3$ et

satisfait à la condition $\int_{S^i} v_i^0 \cdot n ds = 0$, le problème de Dirichlet extérieur (2.6) admet une solution unique $v \in (W^1(\Gamma))^3$ vérifiant $\nabla \cdot \mathbf{v} = \mathbf{0}$ et la pression p existe et est unique à une constante près, dans $L^2(\Gamma)$.

2.5.2 Outils de résolution : Ici, nous utilisons la méthode intégrale de la surface [2.12, 2.13, 2.14, 2.30] pour résoudre numériquement les équations (2.6). Le procédé comprend la simplification de l'équation différentielle partielle définie dans le domaine non borné en une équation intégrale sur la frontière du domaine. L'établissement de l'équation intégrale est complété par la fonction de Green du problème, qui sera définie ultérieurement. Pour écrire la formule intégrale, nous appliquons la formule de Green à la fois à la solution de l'équation (2.6) et à la fonction de Green du problème. La fonction de Green est choisie pour vérifier la fixation au mur (vitesse nulle) et zéro à l'infini. Nous allons présenter le problème et le résumer à l'équation intégrale à la surface de la particule. Cette équation permet d'exprimer la vitesse de chaque particule en fonction de la force hydrodynamique qui lui est appliquée. Cette méthode permet non seulement de réduire la plage d'intégration, mais aussi de trouver une solution approximative au problème par simple quadrature. Cette méthode offre toujours une meilleure précision que le calcul numérique de la dérivée.

✚ *Fonction de Green pour un domaine semi-infini :* Rappelons que les solutions d'un problème linéaire elliptique et homogène avec des conditions aux limites peuvent être exprimées par l'intégrale de la surface portant les valeurs aux limites des inconnues et de leurs dérivées [2.11]. Pour le problème de Stokes, l'équation intégrale implique les valeurs au bord de la surface limite de vitesse et de contrainte. L'équation intégrale est obtenue en appliquant la formule de Green et la fonction de Green du problème considéré. On considère ici l'écoulement généré par la force ponctuelle (Stokeslet) en présence d'une paroi plane avec des conditions antidérapantes. Les fonctions de Green (\mathbf{G}^k, H^k) vérifient les équations :

$$\mu \nabla^2 \mathbf{G}^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \nabla H^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{e}^k \tag{2.21}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{G}^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \tag{2.22}$$

$$\mathbf{G}^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \text{ pour } \mathbf{x} \in \Sigma \quad (2.23)$$

$\mathbf{G}^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}), H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$ pour $|\mathbf{x}| = \infty$, où \mathbf{x} est un point courant de l'écoulement et $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ est la masse de Dirac.

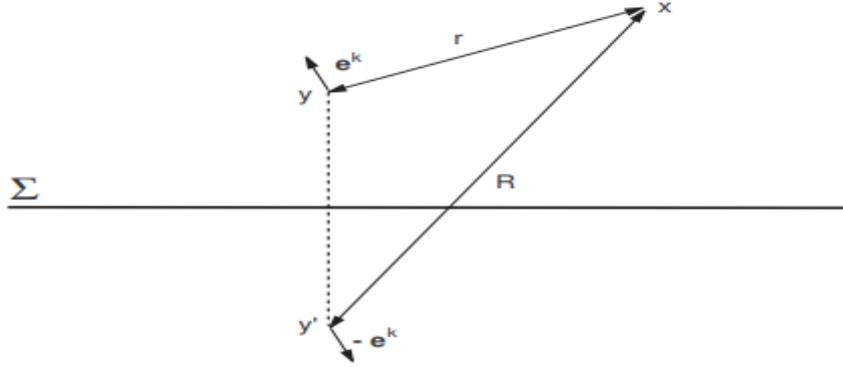


Figure (2.4) : Stokeslet source et Stokeslet image utilisé dans la construction de la fonction de Blake [2.15].

Les fonctions de Green au point $x = (x_1, x_2, x_3)$ du flux de solution (2.21) - (2.22) et de vérification (2.23) ont été obtenues par Blake [2.15] pour la force F_k suivant la direction de \mathbf{e}^k (Figure 2.4) :

$$G_j^k = \frac{F_k}{8\pi\mu} \left[\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R} \right) \delta_{jk} + \frac{r_j r_k}{r^3} - \frac{R_j R_k}{R^3} + 2y_3 (\delta_{k\alpha} \delta_{\alpha l} - \delta_{k3} \delta_{3l}) \frac{\partial}{\partial R_l} \left\{ \frac{y_3 R_j}{R^3} - \left(\frac{\delta_{j3}}{R} + \frac{R_j R_3}{R^3} \right) \right\} \right] \quad (2.24)$$

$$H^k = \frac{F_k}{4\pi} \left[\frac{r_k}{r^3} - \frac{R_k}{R^3} - 2y_3 (\delta_{k\alpha} \delta_{\alpha l} - \delta_{k3} \delta_{3l}) \frac{\partial}{\partial R_l} \left(\frac{R_3}{R^3} \right) \right] \quad (2.25)$$

Parmi eux, Stokeslet est appliqué en $\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3)$ et la singularité de l'image est appliquée en $\mathbf{y}' = (y_1, y_2, -y_3)$ avec $r = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$ et $R = \|\mathbf{x} - \mathbf{y}'\|$. La formule de Blake ainsi construite vérifie les conditions de résistance au glissement des parois et les conditions de vitesse nulle à l'infini. En utilisant la distribution de ces fonctions de Green sur la surface des particules, nous pouvons introduire les conditions sur la paroi et les conditions d'infini dans l'équation. Seules les conditions au bord peuvent vérifier chaque particule.

2.5.3 Représentation intégrale :

🚩 *Formule de Green associée au problème de Stokes :*

Théorème 2.2 Soit $\partial\Gamma$ la surface du domaine Γ , et soit \mathbf{n} la normale externe de $\partial\Gamma$. Soit $(\mathbf{u}, q) \in W^1(\Gamma) \times L^2(\Gamma)/\mathbb{R}$ la fonction de Green du problème, et (\mathbf{v}, p) la solution du problème (2.6). Pour ces champs, la formule de Green [2.16] correspondant au problème de Stokes a été écrite, et la convention de sommation d'Einstein a été utilisée :

$$\int_{\Gamma} \left\{ \left(\mu \nabla^2 v_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) u_i - \left(\mu \nabla^2 u_i - \frac{\partial q}{\partial x_i} \right) v_i \right\} dx = \int_{\partial\Gamma} \{ u_i T_{ij}(\mathbf{v}) - v_i T_{ij}(\mathbf{u}) \} n_j d\Gamma$$

Où T est le tenseur des contraintes défini par :
$$T_{ij}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) = -\delta_{ij}p + \mu \left(\frac{\partial v_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right) \quad (2.26)$$

Pour l'équation de Stokes sans le deuxième membre (2.6) - (2.7), le théorème est simplifié à la relation de réciprocité de Lorentz.

✚ *Formule de réciprocité de Lorentz :*

Corollaire 2.1 : Soit (\mathbf{u}, p) et $(\mathbf{u}', p') \in W^1(\Gamma) \times L^2(\Gamma)/\mathbb{R}$ où $\Gamma \in \mathbb{R}^3$ les solutions des équations (2.6) - (2.7) sont liées au tenseur de contraintes \mathbf{T} et \mathbf{T}' et $\partial\Gamma$, respectivement est la surface du domaine Γ . \mathbf{u} et \mathbf{u}' n'ont pas des points singuliers, donc on a :

$$\int_{\partial\Gamma} \mathbf{u} \cdot (\mathbf{T}' \cdot \mathbf{n}) d\Gamma = \int_{\partial\Gamma} \mathbf{u}' \cdot (\mathbf{T} \cdot \mathbf{n}) d\Gamma \quad (2.27)$$

Où \mathbf{n} est la normale extérieure à la surface $\partial\Gamma$.

L'avantage de la formule de réciprocité est que des informations sur les forces et les couples à la surface peuvent être obtenues sans résoudre les équations du mouvement des fluides. Dans ce chapitre, le théorème nous permettra de tester des grandes matrices de résistance et de savoir si la symétrie est bien respectée. Pour écrire la formule intégrale, nous appliquons la formule de Green à la fois à la solution de l'équation (2.6) et à la fonction de Green (2.24) qui prend en compte l'état antidérapant sur le mur, donc pour tout i et tout \mathbf{y} dans le domaine fluide :

$$\int_{\Sigma} \{G_i^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) T_{ij}(\mathbf{v}(\mathbf{x})) - v_i(\mathbf{x}) T_{ij}(\mathbf{G}^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}))\} n_j d\Sigma_x = 0 \quad (2.28)$$

Nous utilisons (\mathbf{v}, p) pour être la solution du problème de Stokes et la fonction de Green (\mathbf{G}^k, H^k) donnée par l'expression (2.24) - (2.25).

Dérivez l'équation intégrale de $x \in S_i$ à partir de la formule de Green :

$$v_k(\mathbf{x}) + \int_S v_i(\mathbf{y}) T_{ij}(\mathbf{G}^k(\mathbf{y}, \mathbf{x})) n_j dS_y = \int_S G_k^i(\mathbf{y}, \mathbf{x}) T_{ij}(\mathbf{v}(\mathbf{y})) n_j dS_y \quad (2.29)$$

$S = \bigcup_{i=1}^{N_p} S^i$ et la direction de la normale \mathbf{n} en dehors de la particule est considérée.

Lorsque l'écoulement considéré est dû à l'influence de la translation et de la rotation de particules rigides, il montre [2.17] que le potentiel double couche disparaît et que l'équation intégrale dans le fluide est simplifiée à la potentielle monocouche équation intégrale :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \int_S \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS_y, \mathbf{x} \in \Gamma \quad (2.30)$$

Cette équation (2.30) permet d'exprimer la vitesse du fluide en fonction de la contrainte hydrodynamique exercée sur la surface S . Par conséquent, il est nécessaire de définir une équation aux limites intégrale qui ne dépend que des valeurs de vitesse et de contrainte à appliquer à chaque champ. En utilisant le théorème de fin de course [2.16], nous obtenons l'équation intégrale de surface suivante :

$$v_k(\mathbf{x}^i) = \int_S G_k^j(\mathbf{x}^i, \mathbf{y}) q_j(\mathbf{y}) dS_y, \quad \mathbf{x}^i \in S^i, i = 1, \dots, N_p \quad (2.31)$$

Ou $q_j(\mathbf{y}) = T_{ij}(\mathbf{v}(\mathbf{y})) n_j$ et $S = \bigcup_{i=1}^{N_p} S^i$ (2.32)

La formule (2.31) exprime la vitesse de chaque balle en fonction de la contrainte hydrodynamique q appliquée à la particule. Ensuite, il est possible de calculer la contrainte hydrodynamique appliquée à la surface de chaque particule tout en connaissant la vitesse de toutes les particules. Par conséquent, la zone d'intégration est réduite, ce qui simplifie considérablement le problème.

✚ *Existence et unicité de la solution de la formulation faible* : D'après [2.11, 2.16] , l'équation intégrale accepte la formule faible suivante :

Théorème 2.3 : L'équation intégrale (2.31) admet une solution unique q à un vecteur près, proportionnel à la normale à la surface S ; $\mathbf{q} \in \left(H^{-\frac{1}{2}}(S)\right)^3$ si $\mathbf{v} \in \left(H^{\frac{1}{2}}(S)\right)^3$

Le système d'équations (2.31) admet la formulation variationnelle suivante :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \mathbf{q} \text{ telle que:} \\ b(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \int_S \mathbf{v}_k \mathbf{q}' dS, \forall \mathbf{q}' \in \left(H^{-\frac{1}{2}}(S)\right)^3 \end{cases}$$

Où la forme bilinéaire $b(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ est donnée par :

$$\begin{cases} b(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \int_S \int_S \mathbf{q}'(\mathbf{x}) \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS_y dS_x \forall \mathbf{q}, \mathbf{q}' \in \mathbf{T} \\ \mathbf{T} = \left(H^{-\frac{1}{2}}(S)\right)^3 / \mathfrak{R} \\ \text{où } \mathfrak{R} \text{ est la relation d'équivalence} \\ \mathbf{q} \mathfrak{R} \mathbf{q}' \Leftrightarrow \mathbf{q} - \mathbf{q}' = \lambda \mathbf{n}, \lambda \in \mathbb{R} \end{cases}$$

La forme bilinéaire $b(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ vérifie :

$$b(\mathbf{q}, \mathbf{q}') > \beta \|\mathbf{q}\|_T^2, \beta > 0 \forall \mathbf{q} \in \mathbf{T}$$

Et la vitesse \mathbf{v} du problème extérieur de Dirichlet est donnée par l'équation intégrale :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \int_S \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS_y, \quad \mathbf{x} \in S$$

✚ *La méthode des éléments de frontière* : Le principe de la méthode des éléments de frontière (BEM) est basé sur la transformation de l'équation (2.31) [2.11, 2.31, 2.32, 2.30], que nous devons résoudre sous la forme suivante :

$$L(q) = v$$

On essaye de connaître q en surface S . Par rapport à q , l'opérateur L est linéaire. Le principe de cette méthode est de chercher à approximer q par $q_n \in V_n$, où V_n est une dimension finie, n et est généré par une fonction de test ϕ_k soigneusement sélectionnée :

$$q_n = \sum_{k=1}^n \alpha_j \phi_k, \alpha_k \in \mathbb{R}, V_n = \left\{ \sum_{k=1}^n \beta_k \phi_k, \beta_k \in \mathbb{R} \right\}$$

Puisque q_n n'est qu'une approximation de q , le reste $R(q_n) = L(q_n) - v$ est a priori non nul. Par conséquent, il existe deux solutions principales :

➤ **Méthode Galerkin** : Dans la méthode Galerkin, nous voulons que le reste soit orthogonal à V_n .

Cela donne l'équation :

$$\int_S R(q_n) \phi_k dS = 0, 1 \leq k \leq n$$

Cette équation équivalent à :

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j \int_S L(\phi_j) \phi_k dS = \int_S v \phi_k dS, 1 \leq k \leq n$$

Que l'on peut noter sous forme d'un matrice $L_n Q_n = V_n$ où :

$$L_n = \left(\int_S L(\phi_j) \phi_k dS \right)_{1 \leq j, k \leq n},$$

$$Q_n = (\alpha_k)_{1 \leq k \leq n}$$

$$V_n = \left(\int_S v \phi_k dS \right)_{1 \leq k \leq n}$$

➤ **Méthode de collocation** : Dans la méthode d'appariement, on se donne n points $\mathbf{x}_k, 1 \leq k \leq n$ de la surface \bar{S} , on définit la fonction de test telle que $\phi_k(\mathbf{x}_j) = \delta_{kj}, 1 \leq j, k \leq n$ où δ_{kj} est Le symbole de Kronecker. Par conséquent $q_n(\mathbf{x}_k) = \alpha_k, 1 \leq k \leq n$. Alors, on veut le reste tel que $R(q_n)(\mathbf{x}_k) = 0$. D'où :

$$\sum_{j=1}^n \alpha_j L(\phi_j)(\mathbf{x}_k) = v(\mathbf{x}_k)$$

Que l'on peut noter sous forme matricielle $L_n Q_n = V_n$ où :

$$L_n = \left(\int_S L(\phi_j) \phi_k dS \right)_{1 \leq j, k \leq n},$$

$$Q_n = (\alpha_k)_{1 \leq k \leq n}$$

$$V_n = \left(\int_S v \phi_k dS \right)_{1 \leq k \leq n}$$

2.5.4 Calcul de la vitesse du fluide : Afin de calculer le champ de vitesse dans le fluide, seules les intégrales suivantes doivent être calculées :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \int_S \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS_y \quad (2.33)$$

Où \mathbf{x} est à l'intérieur du fluide, $\mathbf{q}(\mathbf{y})$ est la contrainte appliquée à chaque particule $S^k, k = 1..N_p$ et $S = \bigcup_{k=1}^{N_p} S^k$. Par conséquent, si nous connaissons $\mathbf{q}(\mathbf{y})$, nous pouvons calculer la vitesse interne du fluide corporel.

2.6 Équation de Laplace :

L'équation de Laplace est une équation différentielle qui traite une partie de l'hydrodynamique. Nous considérons ici un problème conduisant à la résolution de l'équation de Laplace :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0 \quad (2.34)$$

La fonction $u(x, y, z)$ qui satisfait l'équation de Laplace est appelée fonction harmonique. L'équation de Laplace peut être vérifiée par exemple par une température fixe dans un corps homogène Ω qui ne contient pas de source de chaleur, et est limitée par la surface σ .

2.7 Conditions aux limites :

Afin de déterminer sans ambiguïté la température corporelle à partir de cette équation, par exemple, il est nécessaire de connaître la température à la surface. Par conséquent, nous pouvons formuler les conditions aux limites de l'équation (2.34) comme suit : trouver une fonction qui satisfait l'équation (2.34) dans le volume Ω , et prendre la valeur de M en chaque point de la surface σ :

$$u|_{\sigma} = \phi(M) \quad (2.35)$$

Si on ne connaît pas la température de la surface de l'objet, mais que l'on connaît le flux de chaleur proportionnel à $\partial u / \partial n$, en chaque point de la surface, on aura une condition sur la surface σ :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial n} \right|_{\sigma} = \psi(M) \quad (2.36)$$

Si l'on considère la distribution de la température sur le domaine plan D, limité par le contour C, la fonction u dépend seulement de deux variables x et y, et vérifie l'équation de Laplace pour le plan :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (2.37)$$

Les conditions aux limites (2.36) ou (2.37) doivent être vérifiées sur le contour C.

2.8 Discrétisation des équations intégrales :

En utilisant le système de coordonnées cylindriques (r, θ, z) avec $y_1 = r \cos \theta$, $y_2 = r \sin \theta$, $y_3 = z$ et en intégrant l'équation (2.31), nous obtenons :

$$\begin{pmatrix} V_r^i \\ V_{\theta}^i \\ V_z^i \end{pmatrix} = \frac{1}{8\pi\mu} \sum_{j=1}^{N_p} \int_{L_j} \begin{pmatrix} J_{rr}^{*j} & J_{r\theta}^{*j} & J_{rz}^{*j} \\ J_{\theta r}^{*j} & J_{\theta\theta}^{*j} & J_{\theta z}^{*j} \\ J_{zr}^{*j} & J_{z\theta}^{*j} & J_{zz}^{*j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_r^j \\ q_{\theta}^j \\ q_z^j \end{pmatrix} dl_j \quad (2.38)$$

Où $L_j, j = 1 \dots N_p$ sont les méridiens des sphères, N_p est le nombre des particules.

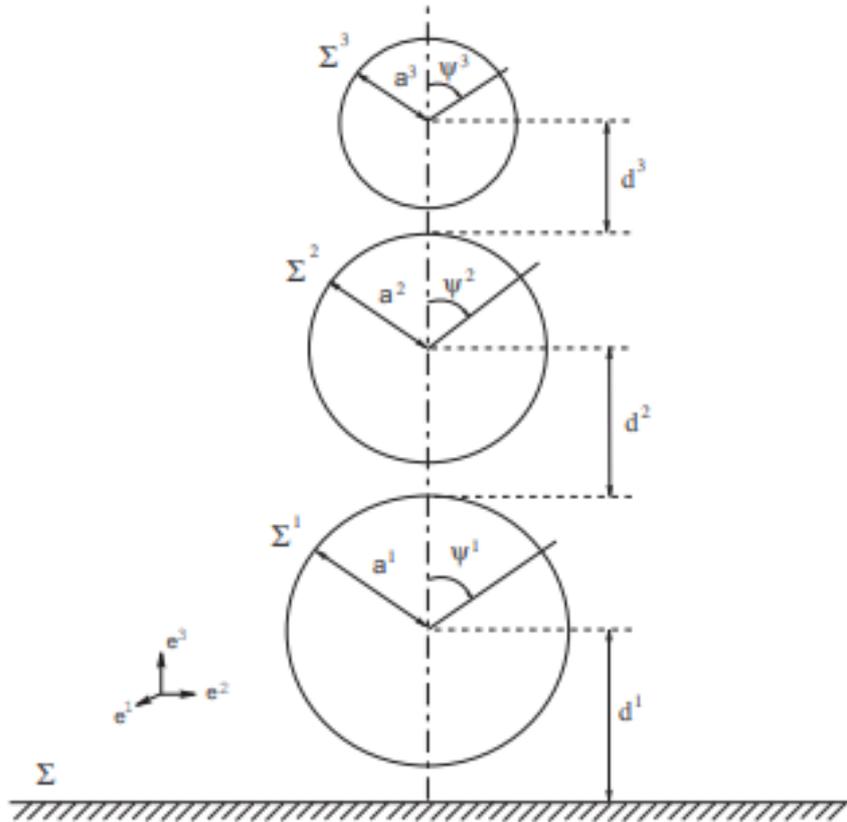


Figure (2.5) : Notation pour une ligne de particules et une paroi [2.1].

$$\begin{pmatrix} J_{rr}^{*j} & J_{r\theta}^{*j} & J_{rz}^{*j} \\ J_{\theta r}^{*j} & J_{\theta\theta}^{*j} & J_{\theta z}^{*j} \\ J_{zr}^{*j} & J_{z\theta}^{*j} & J_{zz}^{*j} \end{pmatrix} = 8\pi\mu \int_{-\pi}^{\pi} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1^1 & G_2^1 & G_3^1 \\ G_1^2 & G_2^2 & G_3^2 \\ G_1^3 & G_2^3 & G_3^3 \end{pmatrix} \sin \theta d\theta \quad (2.39)$$

En raison de l'invariance de la rotation du système autour de l'axe (Oz), le champ de vitesse tourne autour de l'axe, avec les composantes $V_r^i = 0$, $V_\theta^i = 0$ et, $V_z^i = -v_i$; il n'a rien à voir avec θ . L'équation (2.38) est simplifiée comme suit :

$$\begin{pmatrix} 0 \\ -v_i \end{pmatrix} = \frac{1}{8\pi\mu} \sum_{j=1}^{N_p} \int_{L_j} \begin{pmatrix} J_{rr}^{*j} & J_{rz}^{*j} \\ J_{zr}^{*j} & J_{zz}^{*j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_r^j \\ q_z^j \end{pmatrix} dl_j \quad (2.40)$$

Soit a_1 le rayon de la sphère la plus proche du mur (boule 1) et a_{N_p} , c'est-à-dire le rayon de la sphère la plus éloignée du mur. La vitesse v_1 de la boule 1 est utilisée comme vitesse de référence. Afin de rendre l'équation intégrale sans dimension, nous écrivons des contraintes sous la forme suivante :

$$q^j = \frac{3\mu v_1 q'^j}{a^1} \quad (2.41)$$

L'équation (2.40) devient :

$$\begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{8\pi v_i}{3 v_1} \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{N_p} \frac{a^j}{a^1} \int_{L_j} \begin{pmatrix} J_{rr}^{*j} & J_{rz}^{*j} \\ J_{zr}^{*j} & J_{zz}^{*j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_r'^j \\ q_z'^j \end{pmatrix} d\psi^j \quad (2.42)$$

Où ψ^j est l'angle entre le point y et le plan méridien de la sphère j

L'équation suivant représente la force hydrodynamique dans un fluide infini :

$$F_\infty^i = -6\pi\mu a^i V_z^i \quad (2.43)$$

Sachant que ϕ_i est la force normalisée exercée sur la sphère i, et obtenons:

$$\begin{pmatrix} 0 \\ \phi_i \end{pmatrix} = \frac{a^i v_i}{a^1 v_1} \int_0^\pi \begin{pmatrix} q_r^{ii} \\ q_z^{ii} \end{pmatrix} \sin \psi^i d\psi^i \quad (2.44)$$

$$\phi_i = F^i / F_\infty^i \text{ pour } i = 1..N_p \quad (2.45)$$

L'équation intégrale est réduite à la détermination de q'^i à partir des équations (2.42), en fonction des paramètres et pour $\frac{a^2}{a^1}, \frac{v_k}{v_1}$ et $\frac{d^l}{a^1}$ pour $i = 1 \dots N_p$

2.9 Assemblage de la matrice :

Nous introduisons que les noyaux J^S et J^I sont respectivement associés à la vitesse due au Stokeslet initial et à la singularité de l'image, par exemple :

$$J^* = J^S + J^I$$

Soit la limite :

$$J^S = \tilde{J} \text{ quand } \mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x}$$

Lorsque le point courant x tend à inclure Stokeslet y, \tilde{J} est l'expression asymptotique du noyau J^S .

Afin de trouver la solution numérique du problème (2.40), nous avons discrétisé l'équation et l'avons simplifiée en un problème linéaire dans un espace de dimension finie.

Afin d'obtenir un système algébrique, l'équation intégrale est discrétisée après application de la variation de la variable $\psi = \psi(t)$ décrite dans la section (2.41) et de la méthode orthogonale de Gaussler Gedler. Soient respectivement ω_q et t_q le poids et le point de Gauss-Legendre. Le point d'intégration est $\psi(t_q)$, et les poids sont $c_q = (d\psi/dt)\omega_q$. Sur chaque hémisphère, utilisez les M points d'intégration pour la sphère $i = 1, \dots, N_p-1$, et utilisez M points sur la sphère d'intégration N_p .

Par conséquent, en raison des deux équations de (2.38), le nombre total de points d'intégration est $2 \times (2M (N_p-1) + M) = 2M (2N_p-1)$. Les deux équations de (2.38) sont simplifiées pour résoudre un système linéaire d'une taille de $2M (2N-1) \times 2M (2N_p-1)$:

$$\sum_{j=1}^{N_p-1} \sum_{L=1}^{4M} A_{KL}^{ij} Q_L^j + \sum_{L=1}^{2M} A_{KL}^{iN_p} Q_L^{N_p} = B_k^i \quad (2.46)$$

$$\begin{cases} K = 1 \dots 4M & \text{pour } i = 1 \dots N_p - 1 \\ K = 1 \dots 2M & \text{pour } i = N_p \end{cases} \quad (2.47)$$

Les points marqués K et L sont respectivement sur la sphère i et j. L'indice impair de K, L correspond à la première composante de l'équation (2.42), et l'indice pair correspond à la deuxième composante de la même équation (2.42). La constante A_{KL}^{ij} dépend de l'angle ψ_p^i (la position du p^{ième} point lorsque la vitesse est calculée sur la sphère i) et de l'angle ψ_q^j (la position du q^{ième} point lorsque la vitesse est calculée sur la sphère j). Lorsque $i = j$, la singularité apparaît lorsque $\psi_p^i = \psi_q^j$. Par conséquent, nous considérons la situation suivante :

Cas $i \neq j$:

$$p, q = 1 \dots 2M \quad \text{et} \quad i, j = 1 \dots N_p$$

$$\begin{aligned} A_{(2p-1)(2q-1)}^{ij} &= C_q^j J_{rr}^{*i}(\psi_p^i, \psi_q^j) \\ A_{(2p-1)(2j)}^{ij} &= C_q^j J_{rz}^{*i}(\psi_p^i, \psi_q^j) \\ A_{(2p)(2j-1)}^{ij} &= C_q^j J_{zr}^{*i}(\psi_p^i, \psi_q^j) \\ A_{(2p)(2j)}^{ij} &= C_q^j J_{zz}^{*i}(\psi_p^i, \psi_q^j) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Cas $i = j$:

$$p = q, \quad \text{pour } p = 1 \dots M \text{ pour les sphères } i = 1 \dots N_p$$

$$\begin{aligned} A_{(2p-1)(2q-1)}^{ii} &= \int_0^\pi \tilde{J}_{rr}^i(\psi_p^i, \psi) d\psi - \sum_{s=1, s \neq p}^M C_s^i \tilde{J}_{rr}^i(\psi_p^i, \psi_s^i) + C_p^i J_{rr}^{ii}(\psi_p^i, \psi_p^i) \\ A_{(2p-1)(2q)}^{ii} &= \int_0^\pi \tilde{J}_{rz}^i(\psi_p^i, \psi) d\psi - \sum_{s=1, s \neq p}^M C_s^i \tilde{J}_{rz}^i(\psi_p^i, \psi_s^i) + C_p^i J_{rz}^{ii}(\psi_p^i, \psi_p^i) \\ A_{(2p)(2q-1)}^{ii} &= \int_0^\pi \tilde{J}_{zr}^i(\psi_p^i, \psi) d\psi - \sum_{s=1, s \neq p}^M C_s^i \tilde{J}_{zr}^i(\psi_p^i, \psi_s^i) + C_p^i J_{zr}^{ii}(\psi_p^i, \psi_p^i) \\ A_{(2p)(2q)}^{ii} &= \int_0^\pi \tilde{J}_{zz}^i(\psi_p^i, \psi) d\psi - \sum_{s=1}^M C_s^i \tilde{J}_{zz}^i(\psi_p^i, \psi_s^i) + C_p^i J_{zz}^{ii}(\psi_p^i, \psi_p^i) \end{aligned} \quad (2.49)$$

$p \neq q$, pour $p = 1 \dots M$ pour les sphères $i = 1 \dots N_p$, comme dans (2.48)

$$\text{Avec } C_q^j = \frac{a^j}{a^1} c_q$$

Pour l'expression du noyau J, voir annexe B.

$$\begin{aligned} \text{Les valeurs de } B_K^i &\text{ sont données par} \\ B_{(2p-1)}^i &= 0 \\ B_{(2p)}^i &= \frac{-8\pi}{3} \end{aligned} \quad (2.50)$$

2.10 Distribution des Stokeslets sur les particules :

Afin d'améliorer les calculs sans augmenter le temps d'exécution, nous envisagerons d'établir une distribution appropriée des Stokeslets à la surface des particules. En fait, les Stokeslets se

concentreront automatiquement dans les zones de stress élevé. Cette loi est d'abord obtenue sur deux sphères puis généralisée sur la ligne de sphères mobiles disposées axialement.

Pour que les points juxtaposés sur les surfaces des deux sphères reflètent l'interaction entre la sphère de squash et la sphère-sphère, ces points doivent être alloués de manière appropriée :

(1) Pour la moitié de la sphère 1 du côté de la paroi, la répartition des points juxtaposés est proportionnelle à la distance entre le point et la paroi :

$$\psi_{p+1}^1 - \psi_p^1 = \alpha^{(1,0)} \left(\frac{z_p^1}{a^1} \right) \quad (2.51)$$

(2) Pour la moitié de la sphère i ($i > 1$) du côté de la paroi 2, la répartition des points juxtaposés est proportionnelle à la distance de ces points au plan le plus proche tangent à la sphère $i-1$ et parallèle à la paroi :

$$\psi_{p+1}^i - \psi_p^i = \alpha^{(i,i-1)} \left(\frac{z_p^i - \sum_{j=1}^{i-1} (a^j + d^j)}{a^i} \right) \quad (2.52)$$

(3) Pour la moitié de la sphère i du côté de la sphère $i+1$, la distribution des points juxtaposés est proportionnelle à la distance de ces points au plan le plus proche tangent à la sphère $i+1$ et parallèle à la paroi :

$$\psi_{p+1}^i - \psi_p^i = \alpha^{(i,i+1)} \left(\frac{\sum_{j=1}^i a^j - a^{i+1} + \sum_{j=1}^{i+1} d^j - z_p^i}{a^i} \right) \quad (2.53)$$

(4) Pour la surface sphérique Non, la distribution des points juxtaposés est proportionnelle à la distance de ces points au plan le plus proche tangent à la sphère $n-1$ et parallèle à la paroi (la distribution des points juxtaposés est indiquée en (2), où $p = M$).

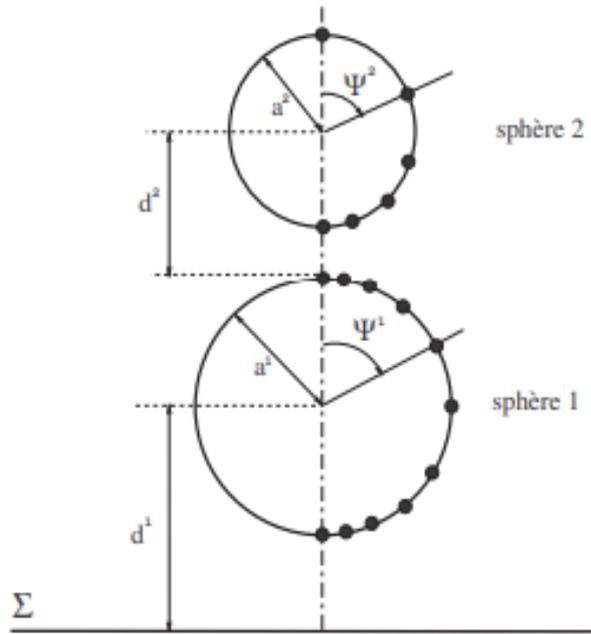


Figure (2.6) : Répartition des points de collocation sur deux sphères.[2.1]

✚ Pour les sphères $i = 1, \dots, N_p - 1$:

Pour la demi sphère i du côté de la sphère $i - 1$ (ou bien la paroi):

$$\psi_1^i = \pi/2 \text{ et } \psi_M^i = \pi$$

Pour la demi sphère i du côté de la sphère $i + 1$: $\psi_M^i = \pi/2$

✚ Pour la sphères $i = N_p$:

$$\psi_1^{N_p} = \pi \text{ et } \psi_M^{N_p} = \pi$$

Soit t une variable représentant l'indice du point de collocation hypothétique continu et différentiable. Ensuite nous avons :

$$\frac{dt}{d\psi^i} = \frac{1}{\alpha^{(i,i\pm 1)}(c_{\pm}^i \pm \cos \psi^i)} \quad (2.54)$$

Dans le cas de coefficients c_{\pm}^i constants, la loi de distribution $\psi(t)$ de Stoklet est obtenue en utilisant les coefficients appropriés pour intégrer les parties supérieure (+) et inférieure (-) de la sphère i (2.54). Le point à la fin sert de condition du bord. Par exemple, pour deux sphères de même rayon unitaire, une distribution est obtenue en intégrant sur la surface S^1 de la sphère 1, de sorte que :

$$\psi_p^1 = 2 \arctan \left\{ \sqrt{\frac{\varepsilon_1+2}{\varepsilon_1}} \tan \left[\frac{p-1}{2(M-1)} \left(\pi - \arctan \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1+2}} \right) + \arctan \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1+2}} \right) \right) \right] \right\} \quad (2.55)$$

où $\psi_p^1 \in \left[\frac{\pi}{2}, \pi \right]$

$$\psi_p^1 = 2 \arctan \left\{ \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1+2}} \tan \left[\frac{p-1}{M-1} \arctan \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_1+2}{\varepsilon_1}} \right) \right] \right\} \quad (2.56)$$

où $\psi_p^1 \in \left[0, \frac{\pi}{2} \right]$ avec $\varepsilon_1 = d^1/a^1$

et sur la surface S^2 de la sphère 2 la répartition telle que :

$$\psi_p^2 = 2 \arctan \left\{ \sqrt{\frac{\varepsilon_2+2}{\varepsilon_2}} \tan \left(\frac{(p-1)\pi}{2(M-1)} \right) \right\} \quad (2.57)$$

où $\psi_p^2 \in [0, \pi]$ avec $\varepsilon_2 = d^2/a^1$

2.11 Validation des résultats pour des cas simples :

Dans cette section, nous comparons nos résultats avec ceux donnés dans la littérature. Pour le cas de la sphère près de la paroi plane, on compare nos résultats avec ceux de Brenner [2.19] et Maude [2.20] et aux résultats de Hsu et Ganatos [2.21]. Pour deux sphères éloignées de la sphère, on compare avec ceux de Stimson et Jeffery [2.22] et Wakiya [2.2]. Nous considérons une sphère de rayon unitaire près de la paroi plane. Le mouvement de translation vertical d'une sphère placée à une distance $D^1 = d^1/a$ perpendiculaire au mur est $\mathbf{v} = \mathbf{e}^3$ (voir la figure (2.1) pour les symboles). Pour les deux sphères éloignées du mur (distance $D^1 \gg 1$ de la sphère 1 de la paroi 1), leurs rayons sont les mêmes et égaux à 1, et ils traduisent avec la vitesse $\mathbf{v}^1 = \mathbf{v}^2 = \mathbf{e}^3$. Les distances utilisées dans cette section sont toutes normalisées par le rayon de la première sphère 1, $D^i = d^i/a$ où $i = 1 \dots N_p$

2.11.1 Une sphère au voisinage d'une paroi plane : Afin d'étudier l'effet du mur sur une seule sphère, nous avons considéré deux sphères et augmenté la distance entre les sphères tout en rapprochant la première sphère du mur. Le tableau (2.1) donne l'expression de la force hydrodynamique sans dimension ϕ appliquée sur une sphère solide de rayon a et la distance de la paroi est $D^1 - 1$ (la distance séparant les deux sphères $D^2 - 1$ est supérieure à $D^2 = 100$). La valeur

hydrodynamique trouvée par la méthode d'intégration de surface est proche de la solution analytique de Brenner [2.19] et Mande [2.20], et proche de la valeur obtenue par Hsu et Ganatos [2.21] (voir colonne $D^1 = 1.1276$ par exemple. La colonne $D^1 = 3.7622$ de (A).

	(A)				(B)			
D^1	1.1276	1.5431	2.3524	3.7622	1.1276	1.5431	2.3524	3.7622
N = 5	32.13	3.039	1.839	1.222	1.973	3.032	1.834	1.411
N = 7	12.09	3.036	1.838	1.222	9.035	3.036	1.837	1.412
N = 9	9.45	3.036	1.838	1.222	9.134	3.039	1.838	1.412
N = 11	9.25	3.036	1.838	1.222	9.196	3.038	1.838	1.413
N = 13	9.25	3.036	1.838	1.222	9.251	3.042	1.838	1.413
Exacte'	9.25	3.036	1.838	1.413	9.25	3.036	1.838	1.413

Table (2.1) - Force hydrodynamique adimensionnée ϕ , exercée sur une sphère solide de rayon a et séparée d'une distance D^1 de la paroi (la distance D^2 , qui sépare les deux sphères, est grande " $D^2 = 100$ "). Comparaison de (B) nos résultats avec les résultats (A) de Hsu et Ganatos [2.21] ainsi que la solution 'exacte' analytique de Brenner [2.19] et Maude [2.20] .

La courbe de la figure (2.3) représente la force hydrodynamique en fonction de la distance entre la sphère et la paroi $H = D^1 - 1$ ($D^1 = \frac{d^1}{a}$).. Ces courbes montrent qu'à mesure que la sphère s'approche de la paroi, la force hydrodynamique augmente. La courbe (o) obtenue par cette technique est cohérente avec la solution exacte obtenue par Brenner et Maude (-) en utilisant la méthode des coordonnées de la biosphère (l'ordre d'erreur ne dépasse pas 0,1%). Nos résultats sont meilleurs que ceux obtenus par Wakiya (+) en utilisant la méthode de réflexion. Ces courbes montrent que lorsque la distance H tend vers l'infini, la force tend vers 1, on retrouve donc le résultat de la sphère dans l'écoulement infini.

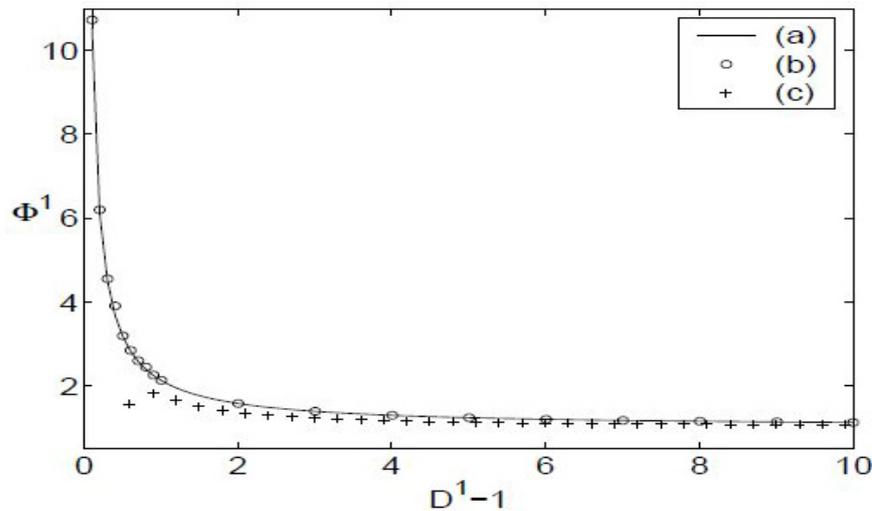


Figure (2.7) : La force hydrodynamique exercée sur une sphère au voisinage d'une paroi plane : (a) solution obtenue par la méthode des coordonnées bisphériques [2.19 , 2.20] , (b) solution obtenue par la présente technique, (c) solution obtenue par Wakiya [2.2] en utilisant la méthode de réflexions.

2.11.2 Deux sphères loin de la paroi : Lorsque la distance D^1 entre la première sphère et la paroi tend vers l'infini, on obtient la force exercée sur les deux sphères. Nous avons remarqué (Figure 2.8) que la méthode des équations intégrales donne de meilleurs résultats que la méthode de réflexion. La valeur trouvée est proche du résultat exact donné par la méthode des coordonnées de la biosphère, et le degré d'erreur ne dépasse pas 0,1%. La force appliquée à la sphère près de la deuxième sphère est inférieure à la force appliquée à la sphère dans un flux infini.

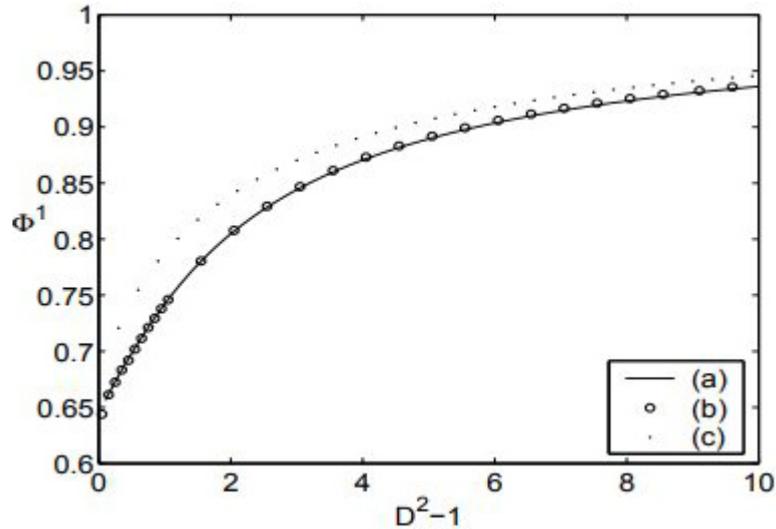


Figure (2.8) : Comparaison entre les variations de la force hydrodynamique exercée sur une sphère, pour deux sphères identiques en sédimentation, séparées par la distance $D^2 - 1$; (a) : méthode des coordonnées bisphériques [2.22],(b): nos résultats ,(c) : méthode des réflexions [2.2]

Dans le tableau (2.2), nous avons enregistré la valeur de D , c'est-à-dire la force exercée par différentes valeurs de D^2 sur la sphère 1 et la sphère 2, et $D^2 - 1$ est égal à 1000. On peut voir que la force est en fait la même qu'en l'absence de mur. Nous avons également remarqué qu'il est toujours légèrement plus grand que 02 car le mur existe même à grande distance.

$D^2 - 1$	Φ_1	Φ_2	Φ
0.10	0.6509	0.6503	0.650900
0.11	0.6515	0.6509	0.651470
0.12	0.6520	0.6515	0.652039
0.13	0.6526	0.6521	0.652607
0.14	0.6531	0.6527	0.653174
0.15	0.6537	0.6533	0.653740
0.16	0.6542	0.6539	0.654305
0.17	0.6548	0.6544	0.654868
0.18	0.6553	0.6550	0.655431
0.19	0.6559	0.6556	0.655993
0.20	0.6567	0.6561	0.656554

0.30	0.6620	0.6618	0.662106
0.40	0.6674	0.6672	0.667559
1.00	0.6981	0.6981	0.698304
2.00	0.7422	0.7422	0.742258
3.00	0.7772	0.7772	0.777239
7.00	0.8585	0.8585	0.858562
10.0	0.8895	0.8894	0.889487

Table (2.2) : - Comparaison des valeurs des forces et y obtenues pour différentes valeurs de la distance $D^2 - 1$, la sphère 1 étant loin de la paroi ($D^1 - 1 = 1000$). Φ est la solution 'exacte' obtenue par Stimson et Jeffery [2.22] avec la méthode des coordonnées bisphériques

2.12 Conclusion :

En pratique, nous supposons que la vitesse des particules est connue et nous utilisons l'équation intégrale de surface (2.31) pour calculer les contraintes. Connaissant les contraintes, nous pouvons dériver les forces et les couples exercés sur ces sphères en les intégrant à la surface des sphères. Autre façon de faire, on peut connaître la force et le couple appliqués à chaque particule peut déterminer leur vitesse et leur trajectoire. Pour vérifier les résultats du calcul, on va comparer les résultats des coordonnées bisphériques ou des méthodes de développement multipolaire proposées dans ce chapitre avec certaines configurations géométriques pour fournir des résultats d'analyse. Nous avons traité l'interaction hydrodynamique entre des sphères solides alignées dans un mouvement de translation perpendiculaire à la paroi plane dans une configuration axisymétrique. Pour le flux de Stokes infini, nous utilisons une méthode similaire à celle de Youngren et Acrivos [2.23] qui se résume dans le cas des particules solides en utilisant la méthode des équations intégrales du problème de Stokes par une équation exprimant la vitesse de chaque point à la surface d'une sphère sous la forme d'une potentielle monocouche. La densité du potentiel est la contrainte appliquée localement à chaque sphère. Nous montrons que la méthode peut être appliquée à ce genre de problème en utilisant la fonction de Green en prenant en compte l'état antidérapant sur le mur. Par conséquent, cette méthode permet de déduire les contraintes et la résistance imposées au solide se déplaçant à proximité de la paroi plane. Nous avons dérivé un système linéaire de cette équation de surface intégrale, qui permet de calculer les forces hydrodynamiques exercées sur deux sphères dans le règlement des conditions axisymétriques. La difficulté du calcul numérique est inhérente à la singularité du noyau de l'équation intégrale. Afin de traiter ces singularités, nous avons analysé et calculé les points de collocation proches de la singularité, et effectué des calculs numériques sur les points de collocation éloignés de la singularité. Pour la distribution des points colocalisés, nous utilisons une technique qui permet de réduire la quantité de calcul. Ces points sont répartis avec une plus grande densité dans la zone où l'interaction est forte. En comparant les résultats obtenus par cette méthode avec ceux obtenus par d'autres méthodes nous confirmons dans le cas des sphères et des parois l'utilité des résultats obtenus par Brenner [2.19] et Maude [2.20], et dans le cas de deux sphères, nous opterons pour les résultats obtenus par Stimson et Jeffery [2.22]. La comparaison des résultats des méthodes approchées, comme la méthode de réflexion, on constate que la solution du

problème obtenue par Wakiya [2.25, 2.26] ne donne pas de solution précise, tant que les deux sphères sont trop proches de la paroi. La méthode d'intégration de surface peut fournir une meilleure approximation de la solution pour cette situation. Nous montrons également que pour les problèmes axisymétriques, le même code informatique peut facilement être utilisé pour étudier plus de sphères.

Références bibliographiques :

- [2.1] Maher Berzig, Etude des interactions hydrodynamiques entre particules et parois par la méthode des éléments de frontière, l'Université Pierre et Marie Curie Paris 6
- [2.2] WAKIYA, S. Effect of a body onto a very slow viscous flow. Case of a plane wall and two spheres. Res. Rept. Fac. Engng. Niigata. Univ. 9 (1960), 31-40. In Japanese.
- [2.3] MAUDE, A. D. the movement of a sphere in front of a plane at low Reynolds number. British J. of Appl. Physics 14 (1963), 894.
- [2.4] BRENNER, H. The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface. Chemical Engineering Science 16 (1961), 242-251.
- [2.5] STIMSON, M., AND JEFFERY, G. B. The motion of two spheres in a viscous fluid. Proc. Royal Soc., London series A 111 (1926), 110-116.
- [2.6] JEFFERY, G. B. One the steady rotation of a solid of revolution in a viscous fluid. Proc. London Math. Soc., Ser. 14 (1915), 327-338.
- [2.7] TAKAGI, H. The force on a sphere lying near a plane surface of a viscous fluid. J. Phys. Soc. Japan 36 (1974), 1471.
- [2.8] STIMSON, M., AND JEFFERY, G. B. The motion of two spheres in a viscous fluid. Proc. Royal Soc., London series A 111 (1926), 110-116.
- [2.9] LAMB, H. Hydrodynamics. Cambridge, 1932
- [2.10] JEFFREY, D. J., AND ONISHI, Y. Calculation of resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low Reynolds number flow. J. Fluid Mech. 139 (1984), 261–290.
- [2.11] DAUTRAY, R., AND LIONS, J. L. Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology, vol. 4. Springer-Verlag, 1990.
- [2.12] BANERJEE, P. K. The Boundary Element Methods in Engineering. McGraw-Hill, 1993.
- [2.13] BEER, G. Programming the Boundary Element Method: An Introduction for Engineers. John Wiley and Sons, 2001.
- [2.14] BREBBIA, C. A., TELLES, J. C. L., AND WROBEL, L. C. Boundary Element Techniques. Theory and applications in engineering. Springer-Verlag, 1984.
- [2.15] BLAKE, J. R. A note on the image system for a Stokeslet in a no-slip boundary Proc. Camb. Phil. Soc. 70 (1971), 303-310.
- [2.16] LADYZHENSKAYA, O. A. The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow. Gordon and Breach Science Publishers, 1969.

- [2.17] POZRIKIDIS, C. *Boundary Integral and Singularity Method for Linearized Viscous Flow*. Cambridge University Press, 1992.
- [2.18] ELASMI, L., Berzig, M., AND FEUILLEBOIS, F. Stokes flow for the axisymmetric motion of several spherical particles perpendicular to a plane wall. *Journal of Applied Mathematics and Physics, ZAMP* 54, 2 (2003), 304-327.
- [2.19] BRENNER, H. The slow motion of a sphere through a viscous fluid towards a plane surface. *Chemical Engineering Science* 16 (1961), 242-251.
- [2.20] MAUDE, A. D. End effects in a falling-sphere viscometer. *British J. of Appl. Physics* 12 (1961), 293-295.
- [2.21] Hsu, R., AND GANATOS, P. The motion of rigid body in viscous fluid bounded by a plane wall. *J. Fluid Mech.* 207 (1989), 29-72.
- [2.22] STIMSON, M., AND JEFFERY, G. B. The motion of two spheres in a viscous fluid. *Proc. Royal Soc., London series A* 111 (1926), 110-116.
- [2.23] YOUNGREN, G. K., AND ACRIVOS, A. Stokes flow past a particle of arbitrary shape: a numerical method of solution. *J. Fluid Mech.* 69, 2 (1975), 377-403.
- [2.24] ELASMI, L., Berzig, M., AND FEUILLEBOIS, F. Stokes flow for the axisymmetric motion of several spherical particles perpendicular to a plane wall. *Journal of Applied Mathematics and Physics, ZAMP* 54, 2 (2003), 304-327.
- [2.25] WAKIYA, S. Effect of a body onto a very slow viscous flow. Case of a sphere between two parallel planes. *Res. Rept. Fac. Engng. Niigata. Univ.* 5 (1956), 1-12. In Japanese
- [2.26] WAKIYA, S. Effect of a body onto a very slow viscous flow. Case of a plane wall and two spheres. *Res. Rept. Fac. Engng. Niigata. Univ.* 9 (1960), 31-40. In Japanese.
- [2.27] LADYZHENSKAYA, O. A. *The Mathematical Theory of Viscous Incompressible Flow*. Gordon and Breach Science Publishers, 1969.
- [2.28] NEDELEC, J. C. Curved finite element methods for the solution of singular integral equations on surface in R^n . *Computer methods in applied mechanics and engineering* 8 (1976), 61-80.
- [2.29] PIRONNEAU, O. *Finite Element Methods for Fluids*. John Wiley and Sons, 1989.
- [2.30] POZRIKIDIS, C. *A Practical Guide to Boundary Element Methods with the Software Library Bemlib*. CRC Press, 2002.
- [2.31] PIRONNEAU, O. *Finite Element Methods for Fluids*. John Wiley and Sons, 1989.
- [2.32] POZRIKIDIS, C. *Boundary Integral and Singularity Method for Linearized Viscous Flow*. Cambridge University Press, 1992.

CHAPITRE 3 :

Dynamique des particules

3.1 Introduction :

La linéarité des équations de Stokes permet d'établir les relations entre les forces et les couples appliqués à la particule d'une part, et la relation entre la translation et la vitesse de rotation d'autre part. L'interaction hydrodynamique entre les particules est exprimée en fonction du tenseur de résistance, qui peut être calculé de différentes manières. On a plusieurs Façons de résoudre le problème par exemple, la méthode de réflexion [3.5], la méthode des coordonnées de la biphérique [3.9]. Le tenseur de résistance a été introduit pour la première fois par Brenner et O'Neill [3.3]. On calcule le tenseur de résistance et le tenseur de mobilité pour différentes configurations. Jeffrey et Onishi [3.6] ont calculé le tenseur de résistance des deux sphères selon l'expression de Lamb [3.7]. Les composantes du tenseur sont calculées pour différentes situations: Perkins et Jones [3.10] sont pour des particules proches de la paroi plane, VanSaarloos et Mazur [3.11] sont pour des particules multiples dans un fluide infini, Beenakker et al [3.1 , 3.12] sont pour l'existence d'une seule paroi et des particules multiples dans le fluide , Mazur [3.8] pour une suspension de particules à parois multiples, pour Geigenmueller et Mazur [3.4] il y a plusieurs particules dans le récipient fini. Le calcul des composantes du tenseur de résistance est une étape clé dans le calcul des trajectoires des particules à l'aide de la méthode dite de dynamique stokesienne utilisée par Bossis et al. [3.2].

Dans le troisième chapitre, Notre travail consiste au calcul des coefficients de résistance et de mobilité par notre méthode dans le cas de la sédimentation de plusieurs particules pour déterminer leurs trajectoires. Comparez les résultats obtenus avec les résultats obtenus dans la littérature pour différentes configurations géométriques. Ensuite, la matrice de mobilité est intégrée dans les équations de base de la dynamique, de sorte que les trajectoires de quelques particules dans les sédiments qui ne sont affectées que par la gravité peuvent être calculées ultérieurement.

3.2 Formulation des relations de résistance :

Soit O le centre de la particule, et soit \mathbf{U} la vitesse de translation instantanée de la particule : la vitesse du point O est la vitesse de la particule. Ω représente la vitesse de rotation instantanée de la particule. Lorsque le fluide adhère à la paroi de la particule, la condition du bord de la particule s'écrit [3.5] :

$$\mathbf{v} = \mathbf{U} + \Omega \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \quad (3.1)$$

\mathbf{x}_p : La position de O

De plus, le fluide étant infiniment stationnaire, on peut écrire :

$$\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{0} \text{ lorsque } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (3.2)$$

On peut étudier séparément les effets de la translation et de la rotation des particules sur le mouvement des fluides, Et c'est grâce à la superposition de solutions de base :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^t + \mathbf{v}^r \quad (3.3)$$

$$p = p^t + p^r \quad (3.4)$$

En mouvement de translation les équations de Stokes s'écrivent :

$$\nabla^2 \mathbf{v}^t = \frac{1}{\mu} \nabla p^t \text{ dans } \Gamma \quad (3.5.a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^t = 0 \text{ dans } \Gamma \quad (3.5.b)$$

$$\mathbf{v}^t = \mathbf{U} \text{ sur } S \quad (3.5.c)$$

$$\mathbf{v}^t = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.5.d)$$

$$\mathbf{v}^t \rightarrow 0 \text{ lorsque } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (3.5.e)$$

En mouvement de rotation les équations de Stokes s'écrivent s'écrivent :

$$\nabla^2 \mathbf{v}^r = \frac{1}{\mu} \nabla p^r \text{ dans } \Gamma \quad (3.6.a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v}^r = 0 \text{ dans } \Gamma \quad (3.6.b)$$

$$\mathbf{v}^r = \boldsymbol{\Omega} \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \text{ sur } S \quad (3.6.c)$$

$$\mathbf{v}^r = 0 \text{ sur } \Sigma \quad (3.6.d)$$

$$\mathbf{v}^r \rightarrow 0 \text{ lorsque } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (3.6.e)$$

L'effet d'un mouvement de translation ou de rotation nous donne des forces hydrodynamiques appliquées par le fluide sur les particules :

$$\mathbf{F}^t = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}^t \quad (3.7)$$

$$\mathbf{F}^r = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}^r \quad (3.8)$$

Par l'action de la translation ou de la rotation, les couples hydrodynamiques exercés par le fluide sur les particules est donné par la formule suivante :

$$\mathbf{C}^t = \int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}^t) \quad (3.9)$$

$$\mathbf{C}^r = \int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}^r) \quad (3.10)$$

Nous dirigeons le vecteur de surface élémentaire $d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}^t$ et \mathbf{T}^r sont les tenseurs des contraintes des fluides newtoniens, définis comme :

$$\mathbf{T}^t = -\mathbf{I}p^t + \mu(\nabla \mathbf{v}^t + {}^T(\nabla \mathbf{v}^t)) \quad (3.11.a)$$

$$\mathbf{T}^r = -\mathbf{I}p^r + \mu(\nabla \mathbf{v}^r + {}^T(\nabla \mathbf{v}^r)) \quad (3.11.b)$$

\mathbf{I} : Le tenseur identité

${}^T(\nabla \mathbf{v})$: Le transposé de $\nabla \mathbf{v}$.

La force totale exercée sur la particule est due à l'action simultanée de la translation et de la rotation, où

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^t + \mathbf{F}^r \quad (3.12.a)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}^t + \mathbf{C}^r \quad (3.12.b)$$

3.3 Matrice de résistance de translation :

Brenner [3.5] a montré que l'existence de la matrice \mathbb{V}^t et du vecteur pression \mathbb{P}^t est uniquement due à l'influence du mouvement de translation, tel que :

$$\mathbf{v}^t = \mathbb{V}^t \cdot \mathbf{U} \quad (3.13.a)$$

$$\mathbf{p}^t = \mathbb{P}^t \cdot \mathbf{U} \quad (3.13.b)$$

L'existence d'un couple (\mathbb{V}, \mathbb{P}) est le résultat linéaire de l'équation de translation (3.5) [3.5]. Ce

sont les solutions suivantes :

$$\left(\nabla^2 \mathbb{V}^t - \frac{1}{\mu} \nabla \mathbb{P}^t \right) \cdot \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (3.14.a)$$

$$(\nabla \cdot \mathbb{V}^t) \cdot \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (3.14.b)$$

$$(\mathbb{V}^t - \mathbf{I}) \cdot \mathbf{U} = \mathbf{0} \quad \text{sur } S \quad (3.14.c)$$

$$\mathbb{V}^t \rightarrow \mathbf{0} \quad \text{Lorsque } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (3.14.d)$$

Quelle que soit \mathbf{U} , Le système est vérifié , d'où :

$$\nabla^2 \mathbb{V}^t = \frac{1}{\mu} \nabla \mathbb{P}^t \quad (3.15.a)$$

$$\nabla \cdot \mathbb{V}^t = \mathbf{0} \quad (3.15.b)$$

$$\mathbb{V}^t = \mathbf{I} \quad \text{sur } S \quad (3.15.c)$$

$$\mathbb{V}^t \rightarrow \mathbf{0} \quad \text{lorsque } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty \quad (3.15.d)$$

D'après Brenner [3.5], il existe deux opérateurs linéaires \mathbf{R}^{tt} , \mathbf{R}^{tr} , de sorte que la force et le couple appliqués peuvent s'écrire:

$$\mathbf{F}^t = -\mathbf{R}^{tt} \cdot \mathbf{U} \quad (3.16)$$

$$\mathbf{C}^t = -\mathbf{R}^{tr} \cdot \mathbf{U} \quad (3.17)$$

En fait, à partir des équations (4.11a)-(4.13) on peut écrire :

$$\mathbf{T}^t = \left[-\mathbf{I} \mathbb{P}^t + \mu (\nabla \mathbb{V}^t + {}^T(\nabla \mathbb{V}^t)) \right] \cdot \mathbf{U} \quad (3.18)$$

Alors il y a un tenseur du troisième ordre \mathbb{T}^t défini par la relation suivante [3.5]:

$$\mathbf{T}^t = \mathbb{T}^t \cdot \mathbf{U} \quad \text{où} \quad \mathbb{T}^t = -\mathbf{I} \mathbb{P}^t + \mu (\nabla \mathbb{V}^t + {}^T(\nabla \mathbb{V}^t)) \quad (3.19)$$

Ainsi on a une autre forme de la force tel que :

$$\mathbf{F}^t = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^t \cdot \mathbf{U} \quad (3.20)$$

$$\mathbf{C}^t = \int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^t) \cdot \mathbf{U} \quad (3.21)$$

On obtient les formules suivantes :

$$\mathbf{R}^{tt} = - \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^t$$

$$\mathbf{R}^{tr} = - \int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_p) \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^t)$$

3.4 Matrice de résistance de rotation :

D'après HAPPEL, J et BRENNER [3.5], il y a deux tenseurs \mathbb{V}^r et \mathbb{P}^r tels que :

$$\mathbf{v}^r = \mathbb{V}^r \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (3.22)$$

$$\mathbf{p}^r = \mathbb{P}^r \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (3.23)$$

On peut écrire l'équation (3.6) d'une autre manière sous la forme :

$$\nabla^2 \mathbf{V}^r = \frac{1}{\mu} \nabla \mathbf{F}^r \quad (3.24.a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V}^r = 0 \quad (3.24.a)$$

$$\mathbf{V}^r = -\epsilon \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G) \text{ sur } S \quad (3.24.c)$$

$$\mathbf{V}^r \rightarrow 0 \text{ lorsque } |\mathbf{x}| \rightarrow \infty. \quad (3.24.d)$$

Où ϵ est un tenseur du troisième ordre tel que $\epsilon = \epsilon_{ijk} \mathbf{e}^i \mathbf{e}^j \mathbf{e}^k$, où ϵ_{ijk} est le symbole de permutation.

Toujours selon Brenner [3.5], il existe deux opérateurs linéaires \mathbf{R}^{rc} et \mathbf{R}^{rr} qui font que la force et le couple appliqués à la particule s'écrit :

$$\mathbf{F}^r = -\mathbf{R}^{rc} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (3.25)$$

$$\mathbf{C}^r = -\mathbf{R}^{rr} \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (3.26)$$

A l'aide de l'équation (3.11b) on trouve :

$$\mathbf{T}^r = [-\mathbf{I}\mathbb{P}^r + \mu(\nabla \mathbf{V}^r + {}^T(\nabla \mathbf{V}^r))] \cdot \mathbf{U} \quad (3.27)$$

Alors il existe un tenseur \mathbb{T}^r du troisième ordre défini comme de suite :

$$\mathbf{T}^r = \mathbb{T}^r \cdot \mathbf{U} \text{ où } \mathbb{T}^r = -\mathbf{I}\mathbb{P}^r + \mu(\nabla \mathbf{V}^r + {}^T(\nabla \mathbf{V}^r)) \quad (3.28)$$

Donc on peut déduire une nouvelle formule de la force :

$$\mathbf{F}^r = \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^r \cdot \mathbf{U} \quad (3.29)$$

$$\mathbf{C}^r = \int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G) \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^r) \cdot \mathbf{U} \quad (3.30)$$

On obtient les relations suivantes :

$$\mathbf{R}^{rc} = -\int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^r$$

$$\mathbf{C}^{rr} = -\int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G) \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbb{T}^r)$$

3.5 Superposition des mouvements :

En général, les particules sont actives par translation et rotation dans le flux de Stokes. En raison du flux satisfaisant (3.5) - (3.6), les forces et couples exercés sur les particules sont les suivants :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^r &= -\mathbf{R}^{rc} \cdot \mathbf{U} - \mathbf{R}^{rr} \cdot \boldsymbol{\Omega} \\ \mathbf{C}^r &= -\mathbf{R}^{rc} \cdot \mathbf{U} - \mathbf{R}^{rr} \cdot \boldsymbol{\Omega} \end{aligned}$$

Ou sous la forme d'une matrice suivante :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}^r \\ \mathbf{C}^r \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{R}^{rc} & \mathbf{R}^{rr} \\ \mathbf{R}^{rc} & \mathbf{R}^{rr} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{U} \\ \boldsymbol{\Omega} \end{pmatrix}$$

3.6 La grande matrice de résistance pour N_p particules :

Nous travaillons uniquement où l'écoulement dans le fluide n'est que le résultat du mouvement de translation ou de rotation de N_p particules, rigides et de forme quelconque. On se limite à la situation où le fluide est infiniment immobile. Soit S^i la surface de la $i^{\text{ème}}$ particule, Σ la surface de la paroi. On suppose également que le fluide adhère à la paroi. Soit O_i le centre de la $i^{\text{ème}}$

particule, et effectue un traitement d'animation par le mouvement de translation de la vitesse \mathbf{V}_i et la rotation de la vitesse $\mathbf{\Omega}_i$. Un point \mathbf{X}_i sur la surface de la $i^{\text{ème}}$ particule satisfait la condition aux limites.

$$\mathbf{v} = \mathbf{U}_i + \mathbf{\Omega}_i \wedge \mathbf{r}_i \quad \text{sur } S^i \quad (3.31)$$

Sachant que \mathbf{r}_i la distance entre le point \mathbf{X}_i et O_i

En revanche, les conditions de vérification au mur et à l'infini sont

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= \mathbf{0} && \text{sur } \Sigma \\ \mathbf{v} &\rightarrow \mathbf{0} && \text{à l'infini} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Nous décomposons la vitesse \mathbf{v} en la première partie qui est due à la translation \mathbf{v}^t et la seconde partie qui est due à la rotation \mathbf{v}^r à partir de La linéarité de l'équation de Stokes et des conditions aux limites :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^t + \mathbf{v}^r$$

Pour la même raison linéaire, Brenner [3.5] a proposé la décomposition de chaque mouvement de translation comme suit :

Soit \mathbf{v}_i^t la vitesse du fluide lorsque la particule i se déplace tandis que les autres particules sont au repos. Lorsque d'autres particules sont au repos, il en va de même pour \mathbf{v}_i^r la vitesse du fluide générée par la rotation de la $i^{\text{ème}}$ particule. On obtient donc :

$$\mathbf{v}^t = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{v}_i^t \quad (3.33)$$

$$\mathbf{v}^r = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{v}_i^r \quad (3.34)$$

Et des conditions marginales :

$$\mathbf{v}_i^t = \mathbf{U}_i \quad \text{sur } S^i \quad (3.35)$$

$$\mathbf{v}_i^t = \mathbf{0} \quad \text{sur } S^j, j \neq i$$

Il en est de même pour la rotation :

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i^r &= \mathbf{\Omega}_i \wedge \mathbf{r}_i && \text{sur } S^i \\ \mathbf{v}_i^r &= \mathbf{0} && \text{sur } S^j, j \neq i \end{aligned} \quad (3.36)$$

Soit \mathbf{F}_{ik}^t et \mathbf{C}_{ik}^t la force hydrodynamique et le couple exercés par le fluide sur le nombre de particules k , qui sont provoqués par la translation de la $i^{\text{ème}}$ particule à la vitesse \mathbf{v}_i^t :

$$\mathbf{F}_{ik}^t = \int_{S^k} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}_i^t \quad (3.37)$$

$$\mathbf{C}_{ik}^t = \int_{S^k} \mathbf{r}_k \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}_i^t) \quad (3.38)$$

La force totale et le couple total exercés sur le $k^{\text{ème}}$ particule en raison de la translation de toutes les particules sont écrits comme :

$$\mathbf{F}_k^t = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{F}_{ik}^t \quad (3.39)$$

$$\mathbf{C}_k^t = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{C}_{ik}^t \quad (3.40)$$

De même façon, pour le mouvement de rotation, nous obtenons :

$$\mathbf{F}_{ik}^r = \int_{S^k} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}_i^r \quad (3.41)$$

$$\mathbf{C}_{ik}^r = \int_{S^k} \mathbf{r}_k \wedge (d\mathbf{S} \cdot \mathbf{T}_i^r) \quad (3.42)$$

$$\mathbf{F}_k^r = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{F}_{ik}^r \quad (3.43)$$

$$\mathbf{C}_k^r = \sum_{i=1}^{N_p} \mathbf{C}_{ik}^r \quad (3.44)$$

Enfin, sous la translation et la rotation de toutes les particules, la force totale et le couple total de la $k^{\text{ème}}$ particule autour du centre O_k se présentent sous la forme suivante :

$$\mathbf{F}_k = \mathbf{F}_k^t + \mathbf{F}_k^r \quad (3.45)$$

$$\mathbf{C}_k = \mathbf{C}_k^t + \mathbf{C}_k^r \quad (3.46)$$

Pour la section 1, on obtient les formules suivantes :

$$\mathbf{F}_k^t = -\mathbf{R}_{ki}^{tt} \cdot \mathbf{U}_i \quad (3.47)$$

$$\mathbf{C}_k^t = -\mathbf{R}_{ki}^{tr} \cdot \mathbf{U}_i \quad (3.48)$$

$$\mathbf{F}_k^r = -\mathbf{R}_{ki}^{rt} \cdot \boldsymbol{\Omega}_i \quad (3.49)$$

$$\mathbf{C}_k^r = -\mathbf{R}_{ki}^{rr} \cdot \boldsymbol{\Omega}_i \quad (3.50)$$

Parmi eux, \mathbf{R}_{ki}^{tt} , \mathbf{R}_{ki}^{tr} , \mathbf{R}_{ki}^{rt} , \mathbf{R}_{ki}^{rr} n'ont rien à voir avec les caractéristiques du fluide, le module et la direction de la vitesse \mathbf{U}_i et $\boldsymbol{\Omega}_i$.

Les équations (3.45) - (3.46) prennent la forme suivante :

$$\mathbf{F}_k = \sum_{i=1}^{N_p} -(\mathbf{R}_{ki}^{tt} \cdot \mathbf{U}_i + \mathbf{R}_{ki}^{tr} \cdot \boldsymbol{\Omega}_i) \quad (3.51)$$

$$\mathbf{C}_k = \sum_{i=1}^{N_p} -(\mathbf{R}_{ki}^{rt} \cdot \mathbf{U}_i + \mathbf{R}_{ki}^{rr} \cdot \boldsymbol{\Omega}_i) \quad (3.52)$$

Pour $k = 1 \dots N_p$ où N_p est le nombre des particules

On peut définir les vecteurs \mathcal{F} et \mathcal{U} par :

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_{N_p} \\ \mathbf{C}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{C}_{N_p} \end{pmatrix} \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{U}_{N_p} \\ \boldsymbol{\Omega}_1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\Omega}_{N_p} \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

Soit \mathcal{R} la grande matrice de résistance :

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{11}^{tt} & \mathbf{R}_{12}^{tt} & \dots & \mathbf{R}_{1N_p}^{tt} & \mathbf{R}_{11}^{tr} & \mathbf{R}_{12}^{tr} & \dots & \mathbf{R}_{1N_p}^{tr} \\ \mathbf{R}_{21}^{tt} & \mathbf{R}_{22}^{tt} & \dots & \mathbf{R}_{2N_p}^{tt} & \mathbf{R}_{21}^{tr} & \mathbf{R}_{22}^{tr} & \dots & \mathbf{R}_{2N_p}^{tr} \\ \dots & \dots \\ \mathbf{R}_{N_p 1}^{tt} & \mathbf{R}_{N_p 2}^{tt} & \dots & \mathbf{R}_{N_p N_p}^{tt} & \mathbf{R}_{N_p 1}^{tr} & \mathbf{R}_{N_p 2}^{tr} & \dots & \mathbf{R}_{N_p N_p}^{tr} \\ \mathbf{R}_{11}^{rt} & \mathbf{R}_{12}^{rt} & \dots & \mathbf{R}_{1N_p}^{rt} & \mathbf{R}_{11}^{rr} & \mathbf{R}_{12}^{rr} & \dots & \mathbf{R}_{1N_p}^{rr} \\ \mathbf{R}_{21}^{rt} & \mathbf{R}_{22}^{rt} & \dots & \mathbf{R}_{2N_p}^{rt} & \mathbf{R}_{21}^{rr} & \mathbf{R}_{22}^{rr} & \dots & \mathbf{R}_{2N_p}^{rr} \\ \dots & \dots \\ \mathbf{R}_{N_p 1}^{rt} & \mathbf{R}_{N_p 2}^{rt} & \dots & \mathbf{R}_{N_p N_p}^{rt} & \mathbf{R}_{N_p 1}^{rr} & \mathbf{R}_{N_p 2}^{rr} & \dots & \mathbf{R}_{N_p N_p}^{rr} \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Les équations (3.51) (3.52) deviennent :

$$\mathcal{F} = -\mathcal{R} \cdot \mathcal{U} \quad (3.55)$$

L'importance de cette équation est que lorsque les forces et les couples sont connus, la vitesse de translation et la vitesse de rotation peuvent être calculées en inversant la matrice \mathcal{R} .

$$\mathbf{U} = -\mathcal{M} \cdot \mathcal{F} \quad (3.56)$$

L'inverse de matrice de résistance $\mathcal{M} = \mathcal{R}^{-1}$ est une grande matrice de mobilité.

En considérant la décomposition en translation et rotation selon le vecteur de base (e^1, e^2, e^3) , la taille de la matrice de résistance est $(6 \times N_p)^2$

4.7 Équations du mouvement des particules :

Le mouvement d'une particule solide peut être décrit comme une combinaison de la translation de la vitesse \mathbf{U} et de la rotation de la vitesse angulaire $\mathbf{\Omega}$ par rapport au centre de gravité \mathbf{x}_G de la particule à un instant donné. On peut supposer que les particules se déplacent sous la force de \mathbf{F}^e et le couple \mathbf{C}^e . Considérons maintenant des particules sphériques dans un fluide de densité ρ . Les particules sont les mêmes, ils ont la même densité uniforme ρ_p et le même rayon a . Dans ces conditions, la force extérieure est donnée par la formule suivante :

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{F}^m + \mathbf{F}^a + \mathbf{F}^s \quad (3.57)$$

Où \mathbf{F}^m représente le poids de la particule.

$$\mathbf{F}^m = M_p \mathbf{g} = \frac{4}{3} \pi a^3 \rho_p \mathbf{g} \quad (3.58)$$

\mathbf{g} est l'accélérateur de pesanteur et M_p est la masse de la particule.

$$\mathbf{F}^a \text{ Représente la poussée d'Archimède : } \mathbf{F}^a = -M_f \mathbf{g} = -\rho V \mathbf{g} = -\frac{4}{3} \pi a^3 \rho \mathbf{g} \quad (3.59)$$

Nous utilisons M_f pour représenter la masse du déplacement de fluide.

La force provoquée par le mouvement du fluide sur la surface de la particule \mathcal{S} est

$$\mathbf{F}^s = \int_{\mathcal{S}} \mathbf{q} ds \quad (3.60)$$

Enfin, la force totale \mathbf{F}^e appliquée aux particules est donnée par :

$$\mathbf{F}^e = \frac{4}{3} \pi a^3 (\rho_p - \rho) \mathbf{g} + \mathbf{F}^s = \mathbf{F} + \mathbf{F}^s \quad (3.61)$$

La couple extérieur exercé sur une particule pour le mouvement de rotation est donnée par :

$$\mathbf{C}^e = \mathbf{C}^m + \mathbf{C}^a + \mathbf{C}^s \quad (3.62)$$

En cas particulier, si les deux sphères ont la même densité uniforme $\mathbf{C}^m = \mathbf{0}$ (de plus, pour une sphère \mathbf{C}^a est nul), alors l'équation précédente devient : $\mathbf{C}^e = \mathbf{C}^s$ (3.63)

Par conséquent, le couple exercé par le fluide sur la surface des particules est :

$$\mathbf{C}^s = \int_{\mathcal{S}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G) \wedge \mathbf{q} ds \quad (3.64)$$

$$\text{Et on a aussi le couple total appliqué aux particules est : } \mathbf{C}^e = \int_{\mathcal{S}} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_G) \wedge \mathbf{q} ds \quad (3.65)$$

Lorsque $\rho_p \cong \rho$ (particules solides sont immergées dans un liquide), l'inertie des particules est aussi négligeable que l'inertie du fluide, et l'équation du mouvement des particules

$$\text{devient } \mathbf{F}^e = \mathbf{C}^e = \mathbf{0}, \text{ donc : } \quad \begin{aligned} \mathbf{F}^s &= -\mathbf{F} \\ \mathbf{C}^s &= \mathbf{0} \end{aligned}$$

Connaître la force et le couple appliqués à la surface de chaque particule permet de trouver la vitesse de translation et de rotation.

4.8 Équations des trajectoires des particules :

À l'aide de l'équation :
$$\mathcal{U} = -\mathcal{M} \cdot \mathcal{F} \quad (3.66)$$

La matrice $\mathcal{M} = \mathcal{R}^{-1}$ est la matrice de mobilité. Nous calculons les $3 \times N_p$ premiers coefficients de \mathcal{U} qui ne proviennent que du mouvement de translation. Notons ce vecteur par \mathcal{U}^t .

Dans le cas où la force de gravitation c'est la seule force appliquée sur la particule, on peut utiliser l'expression de la force dans le système (3.66) et trouver la vitesse.

La solution de l'équation différentielle ordinaire du mouvement nous donne la formule de trajectoire :

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathcal{U}^t \quad (3.67)$$

Le vecteur position de la particule est donné par :

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{N_p} \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

Pour le reste des calculs, nous avons choisi la gravité suivante (Oz). Pour simplifier, nous supposons que les particules sont les mêmes, puis divisons l'équation du mouvement par la somme du poids et de la poussée d'Archimède, c'est-à-dire $\mathbf{F}_k = \mathbf{e}_z (k = 1 \dots N_p)$. Comme mentionné ci-dessus, nous supposons que les particules tournent librement sans aucune influence extérieure : pour $\mathbf{C}_k = 0$ pour $k = 1 \dots N_p$.

La force totale appliquée à la surface de la particule est donnée par un vecteur à $3 \times N_p$

composantes :

$$\mathcal{F} = \begin{pmatrix} 0g \\ 0g \\ \vdots \\ 0g \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

Chaque particule est sous la force de gravitation g :

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.70)$$

Comme les forces hydrodynamiques varient rapidement lorsque les surfaces sont proches, \mathcal{M}^t varie également rapidement, la résolution de cette équation se fait alors par la méthode de Gear [3.13] pour les systèmes rigides.

4.9 Algorithme de calcul des trajectoires des particules :

Dans le calcul de la trajectoire de N_p , la particule passe par plusieurs étapes. Tout d'abord, nous commençons par fixer les paramètres physiques des particules, tels que le nombre de particules N_p , et la forme et le rayon des particules. Les paramètres numériques à fixer sont le nombre de triangles du maillage initial et le nombre de points d'intégration du triangle. Dans l'algorithme ci-dessous, nous montrons la boucle qui permet le calcul de la trajectoire de la

particule, qui peut également inclure une étape optionnelle pour calculer le champ de vitesse de chaque position de la particule (étape 2)

Début Boucle

Étape 0. Initialiser les positions des particules.

Étape 1. Résolution de l'équation intégrale de surface pour un écoulement élémentaire dû au mouvement de vecteur vitesse \mathbf{e}_p^k vecteur de la base canonique de \mathbb{R}^{3N_p}

$$\mathbf{e}_p^k = \iint_S \mathbf{G}(\mathbf{x}^i, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS_y, \mathbf{x}^i \in S^i, i = 1 \dots N_p$$

et remplir la matrice de résistance \mathcal{R} .

Étape 2. Nous calculons la vitesse à l'intérieur du fluide à partir de la contrainte calculée précédemment en utilisant :

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}) = \iint_S \mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{y}) dS_y, \mathbf{x} \in \Gamma$$

Étape 3. Calculer la matrice de mobilité $\mathcal{M} = \mathcal{R}^{-1}$

Étape 4. Résolution de l'équation différentielle ordinaire : $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = -\mathcal{M} \cdot \mathbf{F}$

Étape 5. on fait un test d'arrêt sur les positions des particules.

Étape 6. Retour à la première étape.

Fin Boucle

4.10. FONDLEMENTS MATHÉMATIQUES :

Notre méthode repose sur la réduction des équations différentielles partielles elliptiques linéaires en systèmes d'équations algébriques linéaires. Les quatre étapes mathématiques clés qui la soutiennent sont illustrées dans ce diagramme :



Diagramme (3.1) : Les quatre étapes mathématiques principales.

La première étape est la représentation de la solution d'une équation aux dérivées partielles (EDP) elliptique dans un volume tridimensionnel V comme une intégrale sur la frontière du volume S [3.14, 3.17-3.23]. Pour l'équation de Laplace, il s'agit du théorème classique de Green [3.24], pour l'équation de Stokes, c'est la généralisation obtenue par Lorentz [3.17, 3.18, 3.25]. La représentation intégrale conduit à une équation intégrale linéaire qui fournit une relation fonctionnelle entre le champ et son flux sur S . Ainsi, si le flux de surface dans l'équation de Laplace est spécifié, la concentration de surface est déterminée par la solution de l'équation intégrale aux limites de Laplace. De même, si la vitesse de la surface est spécifiée dans l'équation de Stokes, la traction de la surface est déterminée par la solution de l'équation intégrale des frontières de Stokes. Cette

transformation des EDP est le moyen le plus direct de relier les conditions aux limites (flux de surface, vitesses de glissement) aux valeurs aux limites (concentration de surface, traction de surface). Elle réduit la dimensionnalité du problème d'un problème tridimensionnel dans V à un problème bidimensionnel sur S . La deuxième étape est l'expansion spectrale du champ et de son flux en termes de fonctions de base globales sur S . Nous utilisons les harmoniques sphériques tensorielles adaptées à la géométrie, qui fournissent une manière unifiée d'étendre les quantités scalaires et vectorielles sur la surface d'une sphère. Ces fonctions sont à la fois complètes et orthogonales et fournissent des représentations du groupe de rotation tridimensionnel [3.26]. Ainsi, les symétries des conditions aux limites actives peuvent être représentées d'une manière simple et transparente. La troisième étape est la discrétisation de l'équation intégrale à l'aide de la procédure de Ritz et Galerkin [3.27, 3.28], qui la réduit à un système linéaire auto-adjoint à dimension infinie dans les coefficients d'expansion. Cette procédure exploite l'orthogonalité des fonctions de base sur la sphère. Les éléments de matrice du système linéaire peuvent être évalués analytiquement en termes de fonctions de Green des équations elliptiques respectives. La quatrième étape consiste à tronquer le système linéaire à dimension infinie en un système à dimension finie qui peut être résolu par des méthodes standard d'algèbre linéaire adaptées aux systèmes auto-adjoints [3.29]. La solution analytique peut être obtenue par l'itération de Jacobi, qui est équivalente à la méthode des réflexions de Smoluchowski. Les solutions numériques peuvent être obtenues par la méthode du gradient conjugué, avec un coût quadratique en nombre d'inconnues. À partir de cette solution, nous pouvons reconstruire le champ et le flux à la frontière, les utiliser pour déterminer les champs dans la masse et, à partir de là, calculer les quantités dérivées. Ces étapes ont été développées dans plusieurs articles [3.14 - 3.16, 3.30, 3.31] et nous ne les répéterons pas en détail ici. En revanche, nous montrons ci-dessous comment la méthode est appliquée à des problèmes d'intérêt expérimental.

4.11. STRUCTURE DE LA BIBLIOTHÈQUE :

L'organisation générale de la bibliothèque est présentée dans le diagramme I et sera mentionnée dans le reste de l'article. Les bibliothèques PyStokes et PyLaplace résolvent, respectivement, les équations de Stokes et de Laplace, en utilisant la méthode de réduction expliquée dans la section précédente. La bibliothèque PyLaplace prend en entrée un ensemble de coefficients de dilatation $J_i^{(i)}$ pour le flux actif prescrit $J^{(i)}$ à la surface de la i -ème particule et calcule les coefficients de dilatation de la concentration de surface. La vitesse de glissement active $v^{(i)}$ est obtenue à partir de cela en utilisant la relation de couplage linéaire $v^{(i)} = \mu_c \nabla_s c$ [3]. La bibliothèque fournit les coefficients d'expansion $V_i^{(i\sigma)}$ du glissement actif. La bibliothèque PyStokes prend en entrée ces coefficients d'expansion, qui peuvent également être spécifiés indépendamment, ainsi que les forces F_i^B et les couples T_i^B agissant sur les particules, et renvoie leur mouvement de corps rigide en

termes de vitesses \mathbf{V}_i et de vitesses angulaires Ω_i . La bibliothèque PyStokes peut être utilisée indépendamment de la bibliothèque PyLaplace pour calculer, par exemple, le mouvement d'interaction hydrodynamique de particules en mouvement où le glissement peut être spécifié indépendamment d'un champ phorétique, ou la dynamique de suspensions passives où le glissement disparaît et où les forces et les couples sont prescrits. Chaque bibliothèque calcule facultativement

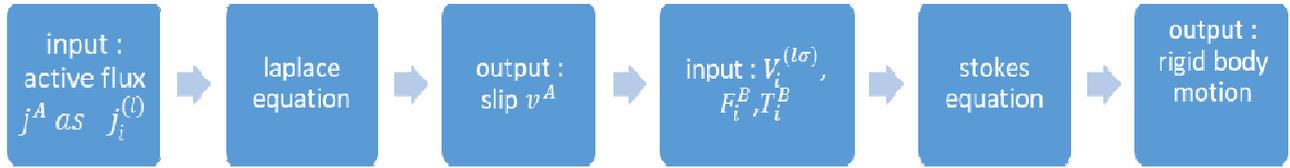


Diagramme (3.2) : Ce schéma montre les équations qui déterminent les interactions hydrodynamiques et phorétiques entre les particules actives dans un domaine tridimensionnel V , comment ces "blocs" sont couplés aux frontières des particules S , et les deux bibliothèques, PyStokes et PyLaplace, qui résolvent les équations correspondantes. La bibliothèque PyLaplace prend en entrée les flux de surface, spécifiés en termes de coefficients $\mathbf{J}_i^{(l)}$ de son expansion harmonique tensorielle, et renvoie les vitesses de glissement v^A spécifiées en termes de coefficients $\mathbf{V}_i^{(l\sigma)}$ de son expansion harmonique tensorielle. La bibliothèque PyStokes prend en entrée ces vitesses de glissement et les éventuelles forces \mathbf{F}_i^B et couples \mathbf{T}_i^B du corps et renvoie les vitesses \mathbf{V}_i et les vitesses angulaires Ω_i . Avec les vitesses de glissement fixées à zéro, PyStokes calcule le mouvement d'interaction hydrodynamique des particules passives. Chaque bibliothèque calcule en plus les champs correspondants dans le volume et les quantités dérivées de ceux-ci, comme la production d'entropie et la réponse rhéologique. Les indices des particules sont $i = 1, \dots, N$ et les indices harmoniques sont $l = 1, 2, \dots$ et $\sigma = s, a, t$.

Le champ correspondant en V , nécessaire pour la compréhension et la visualisation. De plus, PyStokes calcule la dissipation de l'énergie mécanique et la réponse rhéologique de la suspension.

4.12 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons établi des équations qui nous permettent de calculer la trajectoire des particules dans un fluide stationnaire sous gravité. Tout d'abord, nous passons en revue l'expression introduite par Brenner [3.5] pour la grande matrice de résistance, ce qui signifie que pour une position donnée des particules, la force et le couple qui leur sont appliqués sont fonction de leur vitesse de translation et de rotation. Au contraire, c'est-à-dire si la force et le couple appliqués à la particule sont connus, alors la grande matrice de mouvement permet de calculer la vitesse de translation et de rotation. Ensuite, nous avons établi l'équation de la trajectoire à partir de la relation de base de la dynamique. Pour les particules à spin libre, la densité de la particule est au même niveau que celle du fluide. Enfin, nous proposons un algorithme qui nous permet de calculer la trajectoire des particules en sédimentation. Dans le quatrième chapitre suivant, on fait une simulation Pour connaître l'efficacité de la méthode numérique

Références bibliographiques :

- [3.1] BEENAKKER, C. W. J., SAARLOOS, W. V., AND MAZUR, P. Many-sphere hydrodynamic interactions. Physica A 127 (1984), 451-472.

- [3.2] Bossis, G., MEUNIER, A., AND SHERWOOD, J. D. Stokesian dynamics simulations of particles trajectories near a plane. *Phys. Fluids A* 3,8 (1991), 1853-1858.
- [3.3] BRENNER, H., AND O'NEILL, M. E. On the Stokes resistance of multiparticle systems in a linear shear field. *Chemical Engineering Science* 27 (1972), 1421-1439.
- [3.4] GEIGENMUELLER, U., AND MAZUR, P. Sedimentation of homogeneous suspensions in finite vessels. *J. Stat. Phys.* 53, 1/2 (1988), 137-173.
- [3.5] HAPPEL, J., AND BRENNER, H. *Low Reynolds Number Hydrodynamics, with special applications to particulate media*, second revised ed. Noordhoff International Publishing Leyden, 1973
- [3.6] JEFFREY, D. J., AND ONISHI, Y. Calculation of resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low Reynolds number flow. *J. Fluid Mech.* 139 (1984), 261–290.
- [3.7] LAMB, H. *Hydrodynamics*. Cambridge, 1932.
- [3.8] MAZUR, P. Many-sphere hydrodynamic interactions. *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 83, 3 (1987), 1-14.
- [3.9] O'NEILL, M. E., AND MAJUMDAR, S. R. Axisymmetric slow viscous motions caused by translation or rotation of two spheres. part i. the determination of exact solutions for any values of the radii ratio and separation parameters. *Journal of Applied Mathematics Physics (ZAMP)* 21 (1970), 164-179
- [3.10] PERKINS, G. S., AND JONES, R. B. Hydrodynamic interaction of a spherical particle with a planar boundary. *Physica A* 189 (1992), 447 - 477.
- [3.11] VAN SAARLOOS, W., AND MAZUR, P. Many-sphere hydrodynamic interactions: Mobilities at finite frequencies. *Physica A* 120 (1983), 77-102.
- [3.12] VAN SAARLOOS, W., AND MAZUR, P. Many-sphere hydrodynamic interactions: The influence of a plane wall. *Physica A* 127 (1984), 451-472.
- [3.13] GEAR, C. W. *Numerical initial value problems in ordinary differential equations*. Prentice-Hall, NJ (1971).
- [3.14] R. Singh, S. Ghose, and R. Adhikari, "Many-body microhydrodynamics of colloidal particles with active boundary layers," *J. Stat. Mech* 2015, P06017 (2015).
- [3.15] R. Singh and R. Adhikari, "Generalized Stokes laws for active colloids and their applications," *J. Phys. Commun.* 2, 025025 (2018).
- [3.16] R. Singh, R. Adhikari, and M. E. Cates, "Competing chemical and hydrodynamic interactions in autophoretic colloidal suspensions," *J. Chem. Phys.* 151. 044901 (2019).
- [3.17] F. K. G. Odqvist, "Über die bandwertaufgaben der hydrodynamik zäher flüssigkeiten," *Mathematische Zeitschrift* 32, 329-375 (1930).

- [3.18] O. A. Ladyzhenskaia, *The mathematical theory of viscous incompressible flow*, Mathematics and its applications (Gordon and Breach, 1969).
- [3.19] G. Youngren and A. Acrivos, "Stokes flow past a particle of arbitrary shape: a numerical method of solution," *J. Fluid Mech.* 69, 377-403 (1975).
- [3.20] A. A. Zick and G. M. Homsy, "Stokes flow through periodic arrays of spheres," *J. Fluid Mech.* 115, 13-26 (1982).
- [3.21] C. Pozrikidis, *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow* (Cambridge University Press, 1992).
- [3.22] G. P. Muldowney and J. J. L. Higdon, "A spectral boundary element approach to three-dimensional Stokes flow," *J. Fluid Mech.* 298, 167-192 (1995).
- [3.23] A. H.-D. Cheng and D. T. Cheng, "Heritage and early history of the boundary element method," *Eng. Anal. Bound. Elem.* 29, 268-302 (2005).
- [3.24] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics* (Wiley, 1962).
- [3.25] H. A. Lorentz, "A general theorem concerning the motion of a viscous fluid and a few consequences derived from it," *Versl. Konigl. Akad. Wetensch. Amst* 5, 168-175 (1896).
- [3.26] S. Hess, *Tensors for physics* (Springer, 2015).
- [3.27] J. P. Boyd. *Chebyshev and Fourier spectral methods* (Dover, 2000).
- [3.28] B. A. Finlayson and L. E. Scriven, "The method of weighted residuals - a review," *Appl. Mech. Rev* 19, 735-748 (1966).
- [3.29] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems* (SIAM, 2003).
- [3.30] S. Ghose and R. Adhikari, "Irreducible representations of oscillatory and swirling flows in active soft matter," *Phys. Rev. Lett.* 112, 118102 (2014).
- [3.31] R. Singh and R. Adhikari, "Universal hydrodynamic mechanisms for crystallization in active colloidal suspensions." *Phys. Rev. Lett.* 117, 228002 (2016).

CHAPITRE 4 :

Résultats et interprétations

Les interactions hydrodynamiques et phorétiques entre particules actives dans un fluide visqueux sont au cœur de la compréhension de leur dynamique collective. Dans des conditions expérimentales pertinentes, le mouvement du fluide est régi par l'équation de Stokes et celui du champ phorétique, s'il y en a un, par l'équation de Laplace. L'activité apparaît dans ces équations comme des conditions aux limites sur les surfaces des particules qui prescrivent la vitesse de glissement dans l'équation de Stokes et le flux du champ phorétique dans l'équation de Laplace. La vitesse de glissement et le flux phorétique sont liés par une loi de comportement linéaire qui peut être dérivée d'une analyse détaillée de la physique de la couche limite. Les équations de Stokes et de Laplace sont couplées par cette loi de comportement linéaire uniquement aux frontières des particules. La linéarité des équations gouvernantes et des conditions aux limites de couplage permet une solution formellement exacte du problème de la détermination de la force par unité de surface sur les surfaces des particules. Cette solution formellement exacte peut être approximée à n'importe quel degré de précision souhaité par une expansion en série tronquée dans une base complète de fonctions sur les limites des particules. Ceci, à son tour, conduit à une méthode numérique efficace et précise pour calculer les interactions hydrodynamiques et phorétiques entre les particules actives. En plus du calcul conjoint des interactions phorétiques et hydrodynamiques, la bibliothèque PyStokes peut être utilisée pour calculer le mouvement interagissant hydrodynamiquement des particules se tortillant où le glissement est spécifié indépendamment d'un champ phorétique ou de la dynamique des suspensions passives dans lesquels le glissement disparaît, la force et les couples sont prescrits. La bibliothèque PyStokes peut également calculer le mouvement brownien hydrodynamiquement corrélé, et permet ainsi d'étudier l'interaction entre les contributions passives, actives et browniennes liées au mouvement.

La bibliothèque PyStokes a été utilisée pour modéliser des suspensions de microorganismes, particules autophorétiques synthétiques et des gouttelettes autopropulsées. Notre implémentation logicielle utilise une approche de programmation polyglotte qui combine la lisibilité de Python avec la vitesse de Cython et conserve les avantages d'un langage interprété de haut niveau, typé dynamiquement sans sacrifier les performances. Le but de notre travail est de démontrer le pouvoir de la méthode numérique qui sera mise en œuvre grâce au langage Python, à travers des exemples entièrement codés simulant des phénomènes expérimentaux. Nous présenterons une bibliothèque modulaire permettant de calculer les interactions hydrodynamiques et phorétiques à plusieurs corps entre des particules actives sphériques en suspension lorsque celles-ci sont données par des solutions des équations de Stokes et de Laplace. La bibliothèque repose sur une méthodologie associant réduction de la dimensionnalité, expansion spectrale et discrétisation de Ritz-Galerkin, réduisant le calcul à la solution d'un système linéaire. Le système peut être résolu de manière analytique en tant qu'expansion en série ou numériquement à un coût quadratique en nombre de particules. Des quantités à l'échelle de la suspension telles que le débit de fluide, la

production d'entropie et la réponse rhéologique sont obtenues à un faible coût supplémentaire. La bibliothèque est agnostique par rapport aux conditions aux limites et comprend le confinement par des parois planes ou des interfaces liquide-liquide. L'utilisation de la bibliothèque est démontrée à l'aide d'exemples entièrement codés simulant des phénomènes actifs présentant un intérêt expérimental actuel.

Exemple 1 : Flux actifs irréductibles dans un domaine illimité

Notre premier exemple montre comment tracer les parties irréductibles d'un flux actif autour d'une particule sphérique, que nous prendrons pour être loin des frontières. Nous allons prendre étape par étape la gouvernance EDP aux expressions des flux irréductibles que la bibliothèque PyStokes évalue et trace.

- **EDP elliptique** : Le champ d'écoulement $v(r)$ satisfait l'équation de Stokes dans la région V extérieure à la sphère (rayon b , centré sur R , orienté le long du vecteur unitaire p). Sur la surface de la sphère S , le champ d'écoulement satisfait la condition aux limites de glissement :

$$\lim_{r \rightarrow S} v(r) = V + \Omega \times \rho + v^A(\rho) \quad (1)$$

Où V et Ω sont les vitesses de rotation et de translation de la sphère, $v^A(\rho)$ est la vitesse de glissement et ρ est le vecteur de rayon du centre vers S . La solution fondamentale de l'équation de Stokes est déterminée à partir du système :

$$-\nabla_\alpha P_\beta + \eta \cdot \nabla^2 G_{\alpha\beta} = -\delta \cdot (r - r') \cdot \delta_{\alpha\beta} \quad (2)$$

$$K_{\alpha\beta\gamma} = -\delta_{\alpha\gamma} \cdot P_\beta + \eta \cdot (\nabla_\gamma G_{\alpha\beta} + \nabla_\alpha G_{\gamma\beta}) \quad (3)$$

$$\nabla_\alpha G_{\alpha\beta} = 0 \quad (4)$$

Où $G_{\alpha\beta}$ est la fonction de Green, P_β est la pression, $K_{\alpha\beta\gamma}$ est la solution fondamentale pour le tenseur des contraintes, et η est la viscosité du fluide. La fonction de Green devra satisfaire des conditions aux limites supplémentaires que nous ne spécifions pas pour l'instant.

- **Intégrale de frontière** : La solution fondamentale avec la relation réciproque de Lorentz donne la représentation intégrale de frontière $v_\alpha(r) = -\int G_{\alpha\beta}(r, R + \rho) \cdot f_\beta(\rho) \cdot dS + \int K_{\beta\alpha\gamma}(r, R + \rho) \cdot \hat{\rho}_\gamma \cdot v_\beta(\rho) \cdot dS$ qui exprime le champ d'écoulement en V en termes d'une intégrale simple impliquant la traction et d'une intégrale double impliquant la vitesse limite. Ce dernier est spécifié par une condition aux limites.

- **Expansion spectrale** : L'évaluation analytique des deux intégrales est possible si le glissement et la traction sont élargis spectralement en termes d'harmoniques sphériques tensorielles :

$$v^A(\rho) = \sum_{l=1}^{\infty} w_{l-1} \cdot V^{(l)} \cdot Y^{(l-1)}(\hat{\rho}) \quad (5)$$

$$f(\rho) = \sum_{l=1}^{\infty} \tilde{w}_{l-1} \cdot F^{(l)} \cdot Y^{(l-1)}(\hat{\rho}) \quad (6)$$

Où $Y^{(l)}(\hat{\rho}) = (-1)^l \cdot \rho^{l+1} \cdot \nabla^l \rho^{-1}$ est le $l^{\text{ème}}$ harmonique tensoriel irréductible. Les coefficients tensoriels $V^{(l)}$ et $F^{(l)}$ de rang l sont symétriques et irréductibles dans leurs $(l-1)$ derniers indices et ont respectivement les dimensions de vitesse et de force. Ceci implique une contraction complète des indices de $Y^{(l)}$ avec les indices contractiles des coefficients. Les poids d'expansion dépendant de l sont

$w_l = \frac{1}{l!(2l-1)!!}$ et $\tilde{w}_l = \frac{2 \cdot l + 1}{4 \cdot \pi \cdot b^2}$. L'orthogonalité des harmoniques tensorielles implique que :

$$V^{(l)} = \tilde{w}_{l-1} \cdot \int v^A(\rho + R) \cdot Y^{(l-1)}(\hat{\rho}) \cdot dS \text{ et } F^{(l)} = w_{l-1} \cdot \int v^A(\rho + R) \cdot Y^{(l-1)}(\hat{\rho}) \cdot dS \quad (7)$$

L'intégrale de la traction $F^{(l)}$ est la force hydrodynamique nette et l'intégrale du produit transversal de la traction avec le vecteur rayon, la partie antisymétrique de $F^{(2)}$ est le couple hydrodynamique net [1].

• **Discrétisation Ritz-Galerkin** : Laisser le point r approcher S à partir de V et faire correspondre le flux dans la représentation intégrale avec la condition aux limites prescrite conduit à une équation intégrale pour la traction. En multipliant les deux côtés de l'équation intégrale par la $l^{\text{ième}}$ harmonique et en intégrant, on obtient un système de dimensions infinies d'équations linéaires pour les coefficients de la traction :

$$\frac{1}{2} \cdot \tilde{V}^{(l)} = -G^{(l,l')} \cdot F^{(l')} + K^{(l,l')} \cdot \tilde{V}^{(l)} \quad (8)$$

Les indices répétés sont additionnés $\tilde{V}^{(1)} = V + V^{(1)}$, $\tilde{V}^{(2)} = b \cdot \epsilon \cdot \Omega + V^{(2)}$, $\tilde{V}^{(l)} = V^{(l)}$ pour $l > 2$, $G^{(l,l')}$ et $K^{(l,l')}$ sont les éléments matriciels du système linéaire donné en termes d'intégrales de la fonction de Green.

• **Troncature** : Le système linéaire de dimension infinie est tronqué en un système de dimension finie pour la traitabilité. Nous tronquons le système à $l = 2$ et décomposons les coefficients en leurs parties symétriques irréductibles (s), antisymétrique (a) et trace (t), de sorte que le glissement et la traction sont :

$$v^A(\rho) = F^{(1s)} + [V^{(2s)} - \epsilon \cdot V^{(2a)}] \cdot Y^{(1)} + \frac{1}{6} \cdot [V^{(3s)} - \frac{2}{3} \cdot \Delta \cdot (\epsilon \cdot V^{(3a)}) + \frac{3}{5} \cdot \Delta \cdot (\delta \cdot V^{(3t)})] \cdot Y^{(2)} \quad (9)$$

$$4 \cdot \pi \cdot b^2 \cdot f(\rho) = V^{(1s)} + 3 \cdot [V^{(2s)} - \frac{1}{2} \cdot \epsilon \cdot F^{(2a)}] \cdot Y^{(1)} + 5 \cdot [F^{(3s)} - \frac{2}{3} \cdot \Delta \cdot (\epsilon \cdot F^{(3a)}) + \frac{3}{5} \cdot \Delta \cdot (\delta \cdot F^{(3t)})] \cdot Y^{(2)} \quad (10)$$

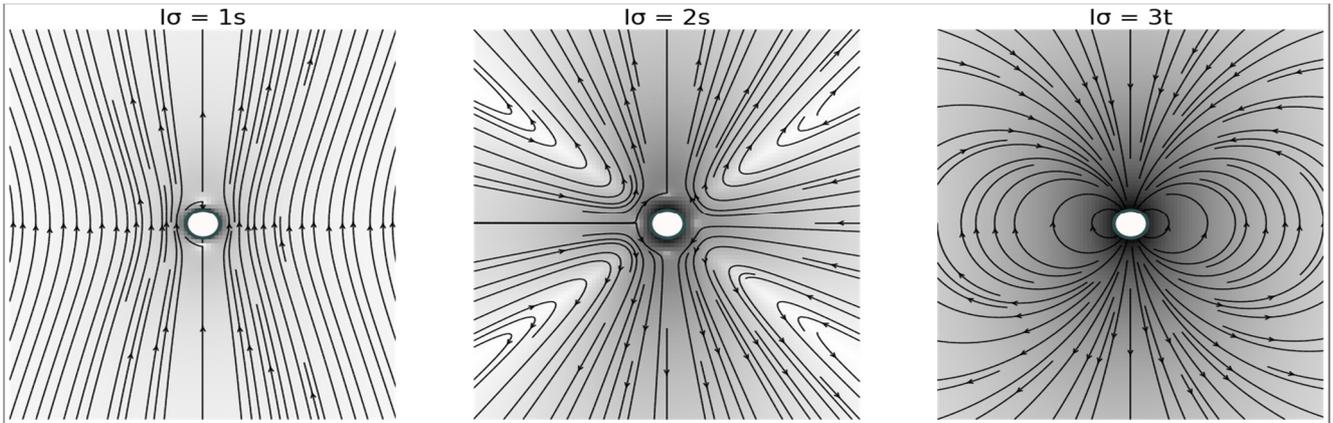
ϵ et δ sont les tenseurs de Levi-Civita et Kronecker, $\Delta_{\alpha\beta\mu\nu} = \frac{1}{2} \cdot (\delta_{\alpha\nu} \cdot \delta_{\beta\mu} + \delta_{\alpha\mu} \cdot \delta_{\beta\nu} - \frac{2}{3} \cdot \delta_{\alpha\beta} \cdot \delta_{\mu\nu})$ symétrise et détruit les tenseurs de second rang. Cette troncature comprend toutes les contributions à long terme au flux actif et est suffisante pour paramétrer les flux actifs mesurés expérimentalement autour des micro-organismes, des gouttes actives et des colloïdes autophorétiques. La solution du système linéaire de dimension finie produit une relation linéaire entre la force irréductible et les coefficients de vitesse par les lois de Stokes généralisées qui sont $F^{(l\sigma)} = -\gamma^{(l\sigma,l'\sigma')} \cdot \tilde{V}^{(l'\sigma')}$ où $\sigma = s, a, t$ et les indices répétés sont additionnés. Dans un domaine non borné, les tenseurs de frottement $\gamma^{(l\sigma,l'\sigma')}$ prennent une forme particulièrement simple : Ils sont diagonaux à la fois dans l et σ dans les indices, $\gamma^{(l\sigma,l'\sigma')} \equiv \delta_{ll'} \cdot \delta_{\sigma\sigma'} \cdot \gamma^{l\sigma} \cdot \Delta^{(l)}$ de sorte qu'un seul scalaire $\gamma^{l\sigma}$ les détermine. Pour $l\sigma = 1s$ et $l\sigma = 2a$ ce sont les coefficients familiers $6 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b$ et $8 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b^3$ qui apparaissent dans les lois de Stokes pour la force et le couple.

L'exécution du programme python de cet exemple nous donne les résultats indiqués sur la **figure 4.1**. En insérant les expansions spectrales tronquées pour le glissement et la traction dans l'intégrale de frontière, en éliminant les coefficients de traction inconnus au profit des coefficients de glissement connus, en développant la fonction de Green autour du centre de la sphère et enfin en utilisant l'orthogonalité des harmoniques tensorielles, on obtient le débit dû à chaque mode de glissement irréductible comme suit :

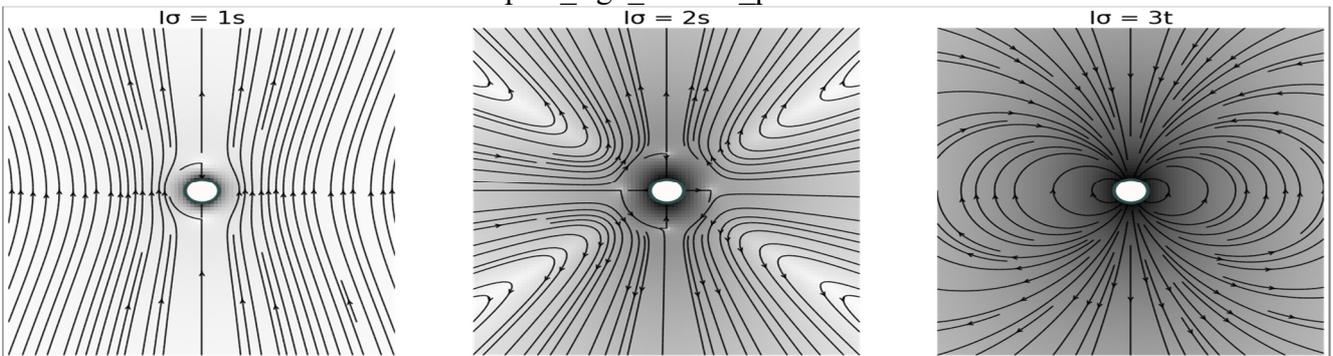
$$v^{1s}(r) = -\left(1 + \frac{b^2}{6} \cdot \nabla^2\right) \cdot G \cdot F^{(1s)} \quad (11a)$$

$$v^{2s}(r) = \frac{28 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b^2}{3} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{10} \cdot \nabla^2\right) \cdot \nabla G \cdot V^{(2s)} \quad \text{et} \quad v^{2a}(r) = -\frac{1}{2} \cdot (\nabla \times G) \cdot F^{(2a)} \quad (11b)$$

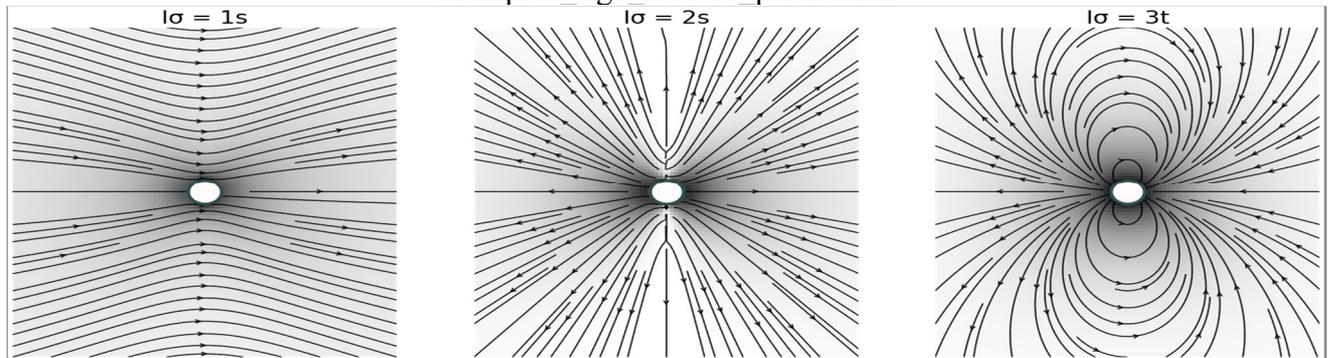
$$v^{3s}(r) = \frac{13 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b^3}{9} \cdot \left(1 + \frac{b^2}{14} \cdot \nabla^2\right) \cdot \nabla \nabla G \cdot V^{(3s)}, \quad v^{3a}(r) = \frac{2 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b^3}{3} \cdot \nabla (\nabla \times G) \cdot V^{(3a)} \quad \text{et} \quad v^{2t}(r) = \frac{2 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b^3}{5} \cdot \nabla^2 G \cdot V^{(3t)} \quad (11c)$$



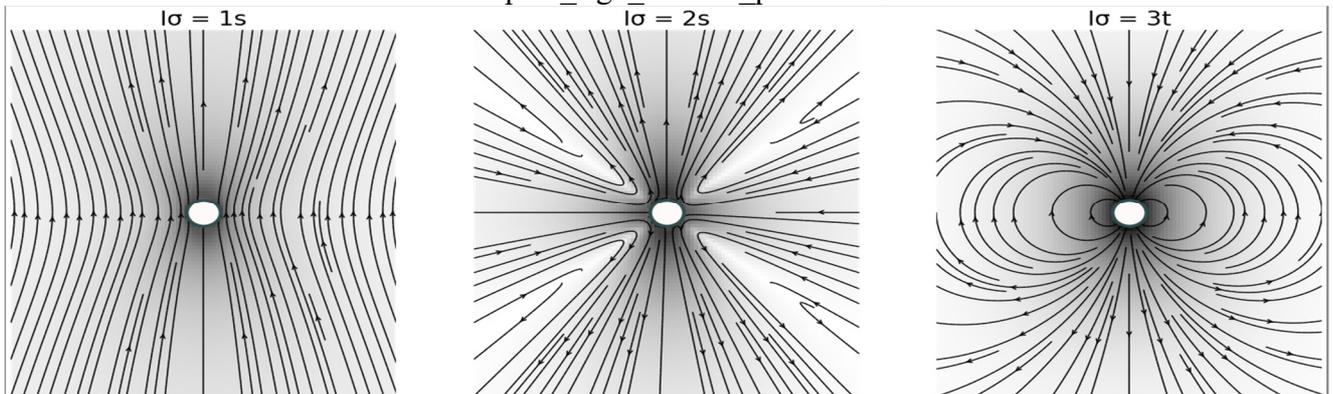
exemple1_fig1_radius1_particules1



exemple1_fig1_radius1_particules2



exemple1_fig1_radius1_particules3



exemple1_fig1_radius2_particules1

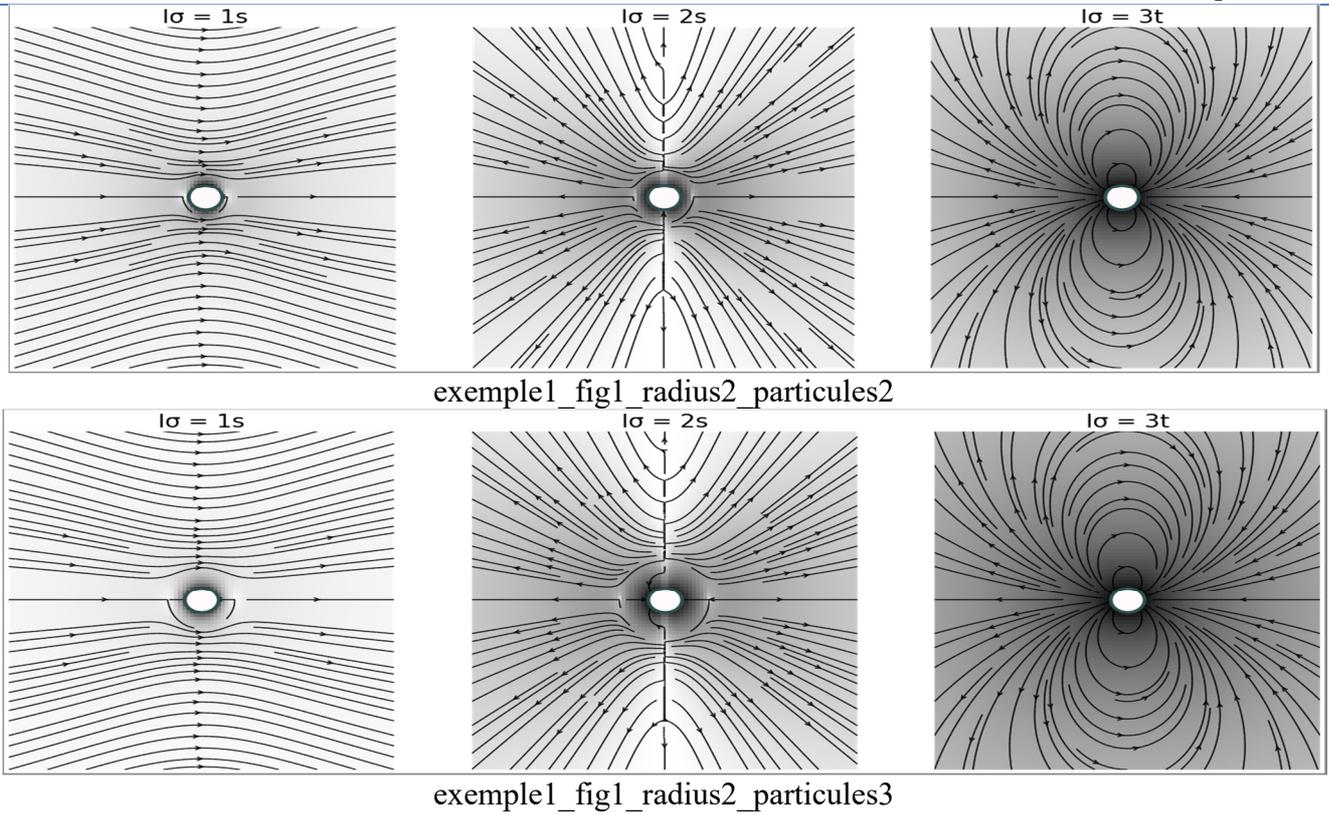


Figure 4.1 : Flux irréductibles : Lignes de courant du fluide superposées du logarithme de la vitesse d'écoulement. Le débit est dû au mode 1s de la traction, le glissement actif est dû aux modes 2s et 3t. Les lignes de courant héritent de la symétrie des modes.

Nous soulignons que ces expressions sont valables pour toute fonction de Green de l'équation de Stokes, à condition qu'elles satisfassent aux conditions aux limites supplémentaires qui peuvent être imposées. On note également qu'aucune discrétisation de l'espace que ce soit en V ou sur S n'est impliquée. A l'aide de PyStokes, on calcule ces expressions pour des valeurs fournies de la force, des coefficients de couple et de glissement. Pour cet exemple, nous choisissons un domaine illimité avec le flux disparaissant à l'infini, pour lequel la fonction de Green est représentée par le tenseur d'Oseen :

$$G_{\alpha\beta}^o(r - r') = \frac{1}{8\pi\eta} \cdot (\nabla^2 \cdot \delta_{\alpha\beta} - \nabla_\alpha \nabla_\beta) \cdot |r - r'| \quad (12)$$

Sur la figure (4.1), on calcule les flux irréductibles 1s, 2s et 3t pour un rayon $b = 1$, viscosité $\eta = \frac{1}{6}$, emplacement $R = (0; 0; 0)$ et orientation $p = (0; -1; 0)$. Les coefficients sont paramétrés comme :

$$F_\alpha^{(1s)} = -p_\alpha, V_{\alpha\beta}^{(2s)} = p_\alpha \cdot p_\beta - \frac{1}{3} \cdot \delta_{\alpha\beta} \text{ et } V_\alpha^{(3t)} = p_\alpha$$

Les singularités Stokeslet, dipôle potentiel et stresslet [2] vont être utilisées. On peut faire un traitement similaire dans le cas d'un champ d'écoulement dans les zones proches du dimère thermophile. Ceci est représenté par la figure 4.2 où on constate que les perles chaudes sont de couleur rouge, les perles phorétiques thermophiles sont rose clair et les perles phorétiques thermophobes sont bleues. Les lignes bleues continues indiquent les lignes de courant, les flèches gris clair indiquent les vitesses d'écoulement et la couleur d'arrière-plan représente le champ de température. Des flèches noires pleines sous le dimère indiquent la direction d'émergence.

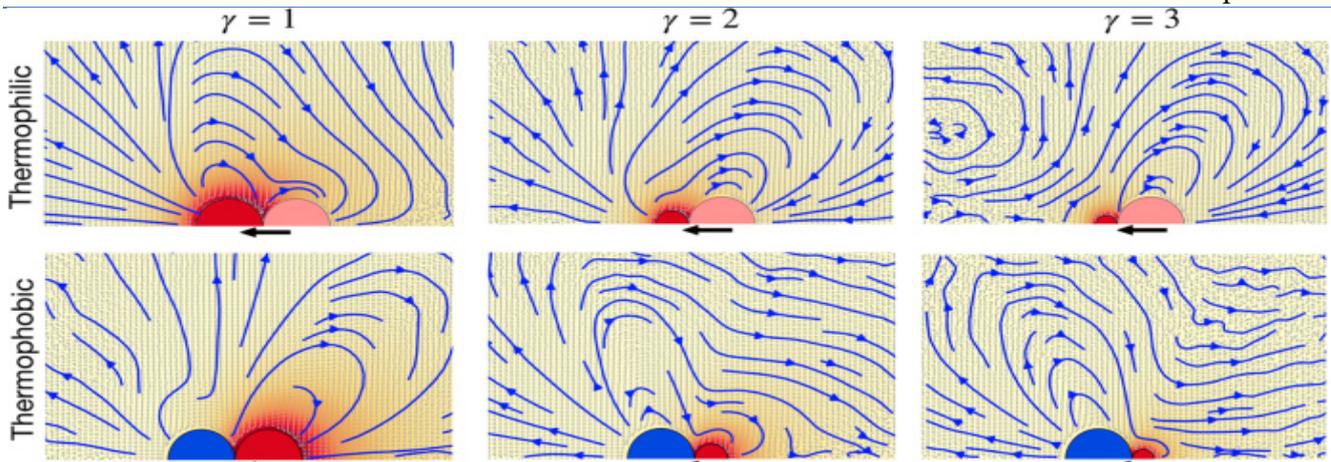


Figure 4.2 : Champs d'écoulement dans les zones proches du dimère thermophile pour les trois géométries considérées : Symétrique, et asymétrique.

En raison de la symétrie, seule la moitié de chaque colloïde est affichée. Le rayon de la particule phorétique et le rapport entre le rayon phorétique et le rayon des particules chaudes γ , ainsi que les propriétés du fluide et l'amplitude du gradient de température appliqué, ont montré qu'ils déterminaient la vitesse de dimère unique et la diffusion de rotation. Le nombre de Péclet (Pe) correspondant peut alors être calculé en considérant une échelle de longueur de dimère pertinente pour laquelle nous avons choisi le rayon de la perle phorétique. D'autres choix de la distance pertinente sont possibles, nous avons choisi le rayon de la particule phorétique car il influence de manière importante sur la force des interactions liées à la phorèse. Les valeurs de Pe les plus élevées afficheront plus de trajectoires droites que les valeurs de Pe plus petites. Pour les mêmes dimères, d'autres valeurs de Pe peuvent être obtenues simplement en modifiant la température du dimère chaud, bien que nous considérons ici ce paramètre comme fixe. Il a été démontré que la forme colloïdale affecte de manière importante les propriétés des particules phorétiques ainsi que le champ d'écoulement induit [3–5]. Par conséquent, dans le cas des dimères phorétiques actifs, la direction, la forme et l'intensité de la vitesse induite sont déterminées par les propriétés de surface des perles et par leur géométrie globale [6–8]. Les champs d'écoulement et les lignes de courant autour de divers dimères thermophorétiques sont représentés sur les **figures 4.1** et **4.2**. Les vitesses d'écoulement sont calculées par une moyenne spatiale cylindrique. Les gradateurs symétriques thermophiles, $\gamma = 1$, montrent des lignes de courant avant axiales, ce qui se traduit par une répulsion hydrodynamique avec toute autre particule placée dans cette zone. Latéralement, les lignes de courant sont dirigées vers les flèches noires ce qui se traduit par une attraction hydrodynamique avec d'autres particules voisines. Ceci est cohérent avec le comportement d'un poussoir hydrodynamique [9]. Lors du changement de géométrie, le champ d'écoulement hydrodynamique s'adapte au rapport de taille des particules constitutives, et lorsque la perle chaude diminue en taille, la vitesse du front répulsif se déplace progressivement vers la région latérale, de sorte que le champ hydrodynamique est plus cohérent avec cela d'un extracteur, comme on peut le voir pour les dimères thermophiles avec $\gamma = 2, 3$ sur la **figure 4.2**. Les thermophobes montrent un comportement réciproque à celui des thermophiles, comme le

montre la **figure 4.2**, tandis que les dimères symétriques affichent une répulsion latérale typique pour les extracteurs, et les dimères asymétriques présentent une attraction latérale typique des poussoirs. Dans ce cas, les lignes de courant arrière axiales sont attrayantes dans le cas symétrique, qui semble se déplacer vers les zones avant latérales dans les cas asymétriques. Il est très important de noter qu'aucun de ces champs de flux ne correspond aux cas idéaux d'extracteurs ou poussoirs, mais ils sont clairement moins symétriques et beaucoup plus complexes. Nous soulignons également que nous n'imposons pas directement de comportement hydrodynamique particulier, mais nous l'obtenons en adaptant la méthode explicite hydrodynamique employée aux propriétés de surface colloïdale similaire à ce qu'il se produirait expérimentalement. L'étude a permis de décrire l'évolution du coefficient de portance d'une particule plongée dans un écoulement visqueux et cisailé pour une large plage de nombres de Reynolds et pour diverses intensités de cisaillement. Elle a également montré que l'effet de cet écoulement sur la force de trainée exercée sur la particule peut être considéré comme négligeable. Le calcul analytique de la force de portance exercée sur une particule sphérique en écoulement visqueux donne une loi empirique permet également de décrire l'évolution du coefficient de portance lorsque $Re > 50$. La description de l'écoulement autour de la particule a montré que la distorsion de l'écoulement est proportionnelle à l'intensité du cisaillement et est beaucoup plus perceptible lorsque les effets visqueux ont un rôle négligeable. Un soin particulier a été consacré à la description des distributions des vitesses tangentielles à la surface de la particule. L'influence de la diffusion visqueuse s'est révélée considérable. Ce qui explique que le coefficient de portance se comporte différemment pour $Re < 10$ et pour $Re > 10$.

Exemple 2 : Flux actifs irréductibles : effet des frontières planes

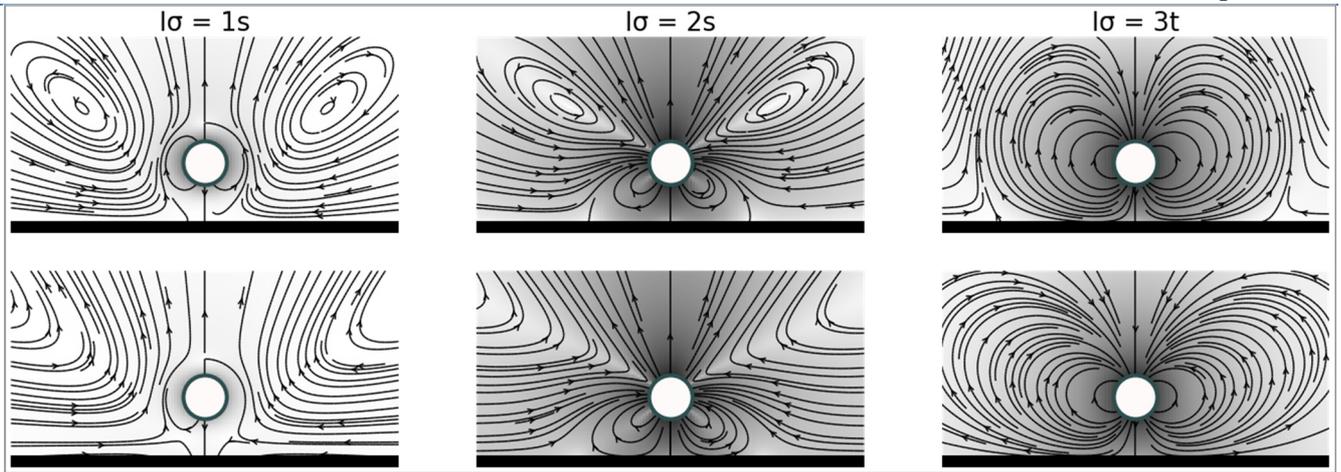
Notre deuxième exemple illustre comment les écoulements irréductibles sont modifiés par la proximité des frontières planes. Ceci est pertinent expérimentalement où le confinement par des frontières est courant [10, 11]. Cela illustre également la flexibilité de notre méthode car la seule quantité à modifier est la fonction de Green pour un mur antidérapant et elle est représentée par le tenseur de Lorentz-Blake :

$$G_{\alpha\beta}^w(R_i, R_j) = G_{\alpha\beta}^o(r_{ij}) - G_{\alpha\beta}^o(r_{ij}^*) - 2 \cdot h \cdot \nabla_{r_j^*} \cdot G_{\alpha\beta}^o(r_{ij}^*) \cdot \mathcal{M}_{\beta\gamma} + h^2 \cdot \nabla_{r_j^*}^2 \cdot G_{\alpha\gamma}^o(r_{ij}^*) \cdot \mathcal{M}_{\beta\gamma} \quad (13)$$

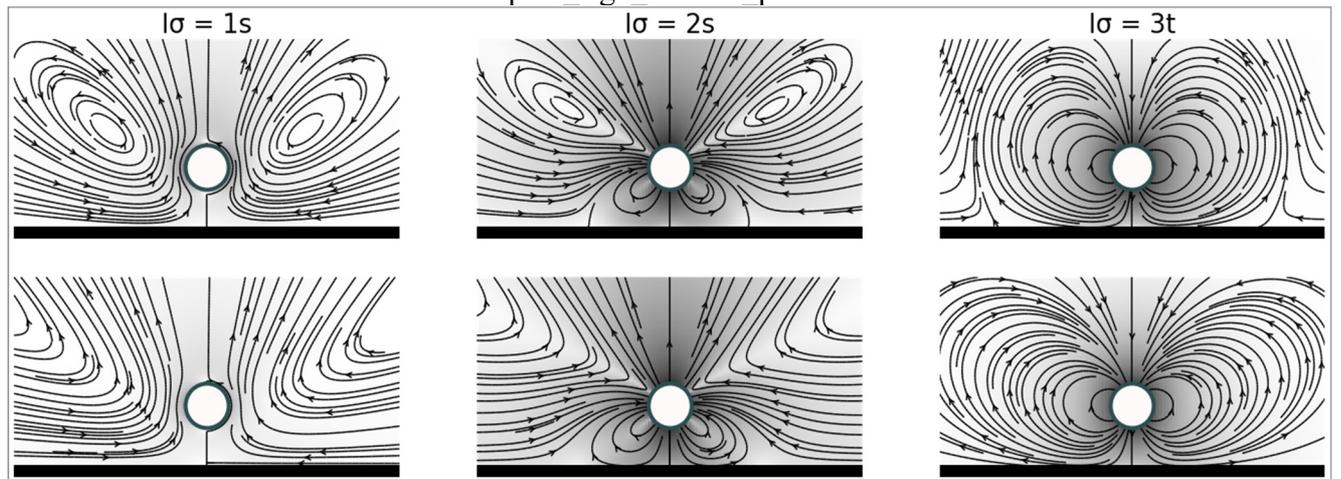
Ici $r_{ij}^* = R_i - R_j^*$ où $R_j^* = \mathcal{M} \cdot R$ est l'image du $j^{\text{ième}}$ colloïde à une distance h de la limite du plan et $\mathcal{M} = I - 2 \cdot \hat{z}\hat{z}$ est l'opérateur de réflexion. La fonction de Green pour une interface air-eau sans cisaillement est :

$$G_{\alpha\beta}^i(R_i, R_j) = G_{\alpha\beta}^o(r_{ij}) + (\delta_{\beta\rho} \cdot \delta_{\rho\gamma} - \delta_{\beta 3} \cdot \delta_{3\gamma}) \cdot G_{\alpha\gamma}^o(r_{ij}^*) \quad (14)$$

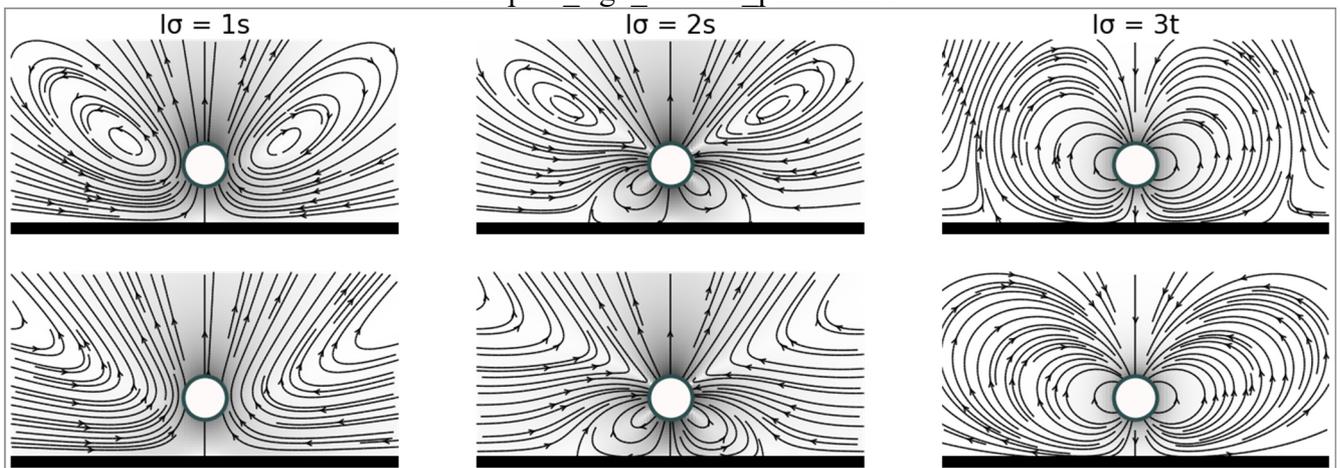
La frontière plane est placée à $z = 0$ et les flux sont tracés dans le demi-espace $z > 0$. Les flux irréductibles pour chaque condition aux limites sont obtenus par l'équation (11) avec la fonction de Green correspondante. Les écoulements irréductibles sont représentés sur la **figure 4.3** dans le cas d'une paroi antidérapante dans les panneaux supérieurs et une interface sans cisaillement dans les panneaux inférieurs. Bien que des rapports de viscosité arbitraires soient autorisés, PyStokes suppose une interface air-eau par défaut, définissant le rapport de viscosité entre les deux fluides égal à zéro.



exemple2_fig1_radius1_particules1



exemple2_fig1_radius2_particules1



exemple2_fig1_radius3_particules1

Figure 4.3 : Distorsion des écoulements irréductibles, par une paroi plane antidérapante (rangée du haut) et une interface plane sans cisaillement (rangée inférieure), due au mode 1s de la traction et aux modes 2s et 3t du glissement actif. Les lignes de courant n'héritent plus de la symétrie des modes. La composante irréductible du flux est transformée à une fonction de traçage générique pour un calcul simplifié. Notez que les lignes de courant à proximité d'une interface ne se ferment pas contrairement à celles proches d'un mur plan. La composante perpendiculaire de l'écoulement près d'un mur est plus grande que celle près d'une interface. Ces caractéristiques ont été utilisées pour comprendre le contrôle des limites de la séparation de phase induite par l'écoulement des particules actives [10].

Exemple 3 : Compétition entre les forces induites par l'écoulement et les fluctuations thermiques

Notre troisième exemple montre comment simuler la dynamique des particules actives y compris les forces actives, passives et thermiques. Cet exemple suppose que les degrés de liberté d'orientation ne sont pas dynamiques, comme c'est souvent le cas avec des particules actives fortement lourdes au fond. La bibliothèque PyStokes calcule le mouvement du corps rigide des particules actives conformément à l'équation de Langevin suramorti :

$$F_i^H + F_i^B + \hat{F}_i = 0 \quad (15)$$

Où $F_i^H = F_i^{(1s)}$, F_i^B et \hat{F}_i sont respectivement les forces hydrodynamique, corporelle et thermique et i est l'indice de particule.

Nous considérons maintenant un modèle minimal du glissement, ne conservant que les modes les plus bas de symétrie vectorielle :

$$v^{\mathcal{A}}(\hat{\rho}_i) = V_i^{(1s)} + \frac{1}{15} \cdot V_i^{(3t)} \cdot Y^{(2)}(\hat{\rho}_i) \quad (16)$$

Nous paramétrons les coefficients du glissement uniaxialement, en termes d'orientation π du ième colloïde et de sa vitesse d'autopropulsion, comme :

$$V_i^{(1s)} = v_s \cdot p_i \text{ et } V_i^{(3t)} = V_0^{(3t)} \cdot p_i \quad (17)$$

Les forces hydrodynamiques sont alors données par les lois de Stokes généralisées :

$$F_i^H = -\gamma_{ij}^{TT} \cdot (V_j + V_j^{(1s)}) - \gamma_{ij}^{(T,3t)} \cdot V_j^{(3t)} \quad (18)$$

Où les contributions rotationnelles sous-dominantes ont été négligées. Les formes explicites des tenseurs γ_{ij}^{TT} et $\gamma_{ij}^{(T,l\sigma)}$ découlent de la solution du système linéaire donnée dans l'équation (8) en prenant en considération plusieurs particules. Les termes hors diagonale, avec $i \neq j$, représentent des interactions hydrodynamiques et s'obtiennent sous la forme d'une série infinie dans la fonction de Green et ses dérivées [1]. Avec cela, l'équilibre des forces devient :

$$-\gamma_{ij}^{TT} \cdot (V_j + V_j^{(1s)}) - \gamma_{ij}^{(T,3t)} \cdot V_j^{(3t)} + F_i^B + \hat{F}_i = 0 \quad (19)$$

Ceci montre qu'en l'absence de modes de glissement avec $l > 1$, de forces externes, de fluctuations thermiques et d'interactions hydrodynamiques, la vitesse de translation de la ième particule est donnée par $V_i^{(1s)}$. Il est pratique d'introduire la notation $V_i^{\mathcal{A}} = V_i^{(1s)}$ puis de résoudre l'équation d'équilibre des forces pour la vitesse de translation. Cela donne l'équation de Langevin suramorti [1, 12] :

$$\dot{R}_i = \underbrace{\mu_{ij}^{TT} \cdot F_i^B}_{Passive} + \underbrace{\pi_{ij}^{(T,l\sigma)} \cdot V_j^{(3t)} + V_i^{\mathcal{A}}}_{Active} + \underbrace{\sqrt{2 \cdot k_B \cdot T \cdot \mu_{ij}^{TT}} \cdot \xi_j^T(t)}_{Brownien} \quad (20)$$

Qui est la base de notre algorithme de dynamique brownienne. Ici ξ_j^T est un vecteur de variables aléatoires gaussiennes indépendantes de la variance unitaire de moyenne nulle, la matrice de mobilité μ_{ij}^{TT} est l'inverse du tenseur de frottement γ_{ij}^{TT} et du tenseur de propulsion $\pi_{ij}^{(T,3t)} = -\mu_{ij}^{TT} \cdot \gamma_{ij}^{(T,3t)}$. Nous regardons maintenant la dynamique d'une paire de particules actives, $i = 1$ et 2 , près d'un mur antidérapant. Nous supposons une interaction à deux corps tronquée de Lennard-Jones entre les particules et une autre interaction à un corps tronquée de Lennard-Jones avec la paroi, conçue pour empêcher les chevauchements particule-particule et particule-paroi. L'orientation est prise pour pointer

dans le mur et un couple suffisamment grand est ajouté pour empêcher une réorientation. Le mouvement vertical cesse lorsque la répulsion du mur équilibre la propulsion active dans celui-ci. Ensuite, la force externe nette sur la particule pointe normalement à l'opposé du mur. Cela implique que la contribution principale au flux actif est due au mode $F^{(1s)}$, comme le montre la **figure 4.3**. Ce flux entraîne les particules voisines les unes dans les autres et conduit à la formation d'un état lié [1]. C'est la base de nombreux phénomènes d'agrégation de particules actives à proximité des parois et des interfaces [13–19]. En termes d'équations de mouvement, la composante z de l'équilibre des forces s'écrit :

$$-\gamma_{11}^{zz} \cdot v_s + F_{1z}^B + \xi_1^z = 0 \quad -\gamma_{22}^{zz} \cdot v_s + F_{2z}^B + \xi_2^z = 0 \quad (21)$$

Où le premier terme est la force propulsive active dans la direction z , le deuxième terme est la composante z de la force nette et le troisième terme est le bruit. La solution de cette équation donne implicitement la hauteur moyenne \bar{h} au-dessus de la paroi à laquelle les particules viennent se reposer. La composante x de l'équilibre des forces donne :

$$-\gamma_{11}^{xx} \cdot \dot{x}_1 - \gamma_{12}^{xx} \cdot \dot{x}_2 + \gamma_{12}^{xz} \cdot v_s + F_{1x}^B + \xi_1^x = 0 \quad -\gamma_{21}^{xx} \cdot \dot{x}_1 - \gamma_{22}^{xx} \cdot \dot{x}_2 + \gamma_{21}^{xz} \cdot v_s + F_{2x}^B + \xi_2^x = 0$$

Où les tenseurs de frottement sont maintenant évalués à la hauteur moyenne et à la séparation instantanée entre les particules. Cela dissocie efficacement les composantes verticale et horizontale du mouvement. Les deux premiers termes sont les traînées auto- et mutuelles de Stokes, le troisième terme est la traînée du flux hydrodynamique actif, le quatrième terme est la force corporelle et le dernier terme est le bruit. L'équation de Langevin suramorti ci-dessus peut être écrite sous la forme suivante :

$$d \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_{11}^{xx} & \mu_{12}^{xx} \\ \mu_{21}^{xx} & \mu_{22}^{xx} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \gamma_{12}^{xz} \cdot v_s + F_{1x}^B \\ \gamma_{21}^{xz} \cdot v_s + F_{2x}^B \end{bmatrix} \cdot dt + \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} dW_1 \\ dW_2 \end{bmatrix} \quad (22)$$

Où la matrice des variances contenant σ_{ij} est le facteur de Cholesky de la matrice des mobilités μ_{ij}^{xx} . Ce sont les équations que nous simulons dans l'exemple 3. Les interactions Lennard-Jones tronquées sont $U = \epsilon \cdot \left(\frac{r_{min}}{r}\right)^{12} - 2 \cdot \epsilon \cdot \left(\frac{r_{min}}{r}\right)^6 + \epsilon$; pour la séparation $r < r_{min}$, et zéro sinon [19]. En l'absence de fluctuations thermiques, la paire forme un état lié en raison de la traînée active attractive mais à des températures suffisamment élevées, elle se «délie» en raison des forces entropiques. Remarquablement, la distribution de leur séparation dans le plan peut être exprimée sous forme gibbsienne, avec un potentiel de non-équilibre, comme le montre la **figure 4.4**. A des températures finies, ils se détachent et la distribution de leur séparation découle d'un potentiel de non-équilibre. En désignant la composante x de la traînée hydrodynamique active comme $F_x^{\mathcal{A}}$ et en utilisant la forme principale pour γ_{21}^{xz} , nous avons :

$$F_x^{\mathcal{A}} = \gamma_{21}^{xz} \cdot v_s = \gamma_{\parallel} \cdot \gamma_{\perp} \cdot G_{xz}^W \cdot v_s = -\frac{\gamma_{\parallel} \gamma_{\perp} v_s}{2 \cdot \pi \cdot \eta} \cdot \frac{h^3}{(r^2 + 4 \cdot \bar{h}^2)^{5/2}} \cdot r^x \quad (23)$$

Où γ_{\parallel} et γ_{\perp} sont les coefficients d'auto-frottement dans les directions parallèle (\parallel) et perpendiculaire (\perp) à la paroi [20]. Cela montre que la force de traînée active peut être écrite comme le gradient d'un potentiel $\Phi(r) = -\frac{\gamma_{\parallel} \gamma_{\perp} v_s}{2 \cdot \pi \cdot \eta} \cdot \frac{h^3}{(r^2 + 4 \cdot \bar{h}^2)^{3/2}}$ dont la force dépend de la vitesse de propulsion.

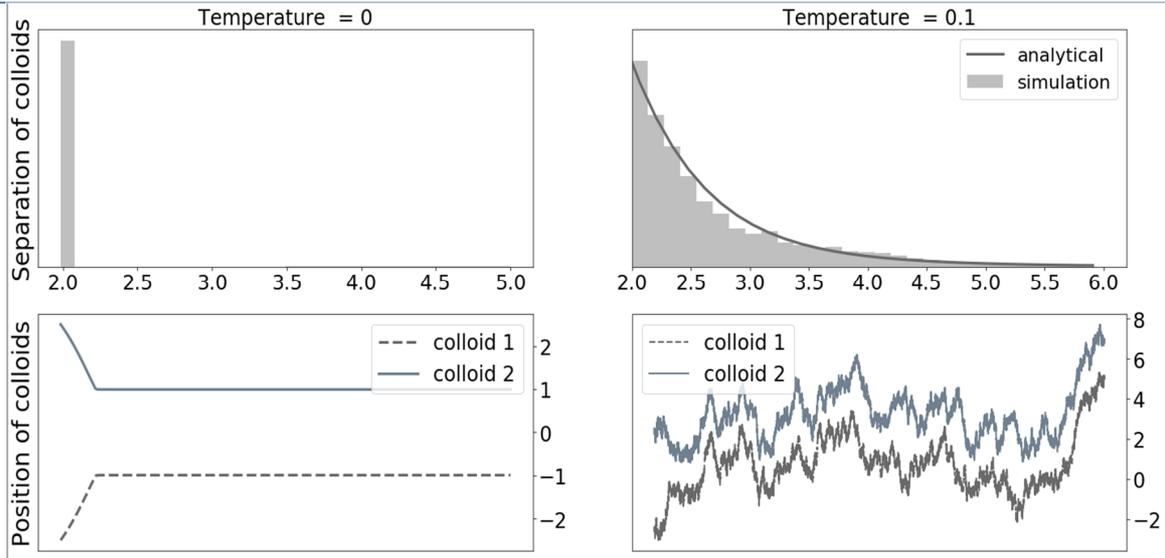


Figure 4.4 : Hydrodynamique fluctuante d'une paire de particules actives près d'une paroi plane. Les deux particules forment un état lié en l'absence de fluctuations thermiques.

La raison en est la forme asymptotique particulière de G_{xz}^w près d'un mur : Une annulation de termes laisse $\nabla^2 G_{xz}^0$ comme la seule singularité restante pour donner un gradient. L'annulation ne se produit pas à une interface sans cisaillement et la force de traînée active mais elle n'est plus le gradient d'un potentiel. Des potentiels de forme fonctionnelle identique ont été obtenus auparavant pour l'électrophorèse [21] et la thermophorèse [22] sans être associée à une force de traînée active, comme nous l'avons fait ici. Malgré l'origine hors équilibre du potentiel, cela conduit à une distribution de Gibbs pour les positions des particules $P \sim e^{-\frac{\Phi+U}{k_B T}}$, car on satisfait les conditions de potentiel à chaque fois que γ_{12}^{xx} , et par symétrie d'Onsager γ_{21}^{xx} devient un gradient. Cette compréhension de l'hydrodynamique brownienne active d'une paire de particules actives lourdes près d'une paroi plane rationalise la cristallisation omniprésente observée de particules actives près des frontières planes [13–19], qui est notre prochain exemple.

Exemple 4 : Cristallisation sur une paroi plane et à une interface plane sans cisaillement

Notre 4^{ème} exemple démontre la séparation de phase induite par l'écoulement de particules actives au niveau d'une paroi antidérapante plane. Nous utilisons le même modèle de particules actives que celui décrit dans l'exemple 3 mais en considérons un nombre plus élevé. Le glissement est tronqué pour ne contenir que 1s et 3t modes de symétrie vectorielle, qui sont paramétrés en fonction de l'orientation π des colloïdes en référence aux équations (16) et (17). Tous les colloïdes sont orientés le long de la normale à la paroi, de sorte que $p_i = -\hat{z}$. En expérience, la force active $\sim 6 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b \cdot v$, est de l'ordre 10^{-13} N dans [14, 23], tandis que 10^{-11} N dans [17]. Ainsi, ce sont des ordres de grandeur plus grands que la force brownienne $\frac{k_B T}{b} \sim 10^{-15}$ N, que nous ignorons pour cet exemple. Le code et les instantanés des simulations sont illustrés dans la **Figure 4.5**. À partir d'une distribution non cristalline, les particules actives cristallisent en un seul amas en raison d'interactions hydrodynamiques actives à longue distance entre elles [1].

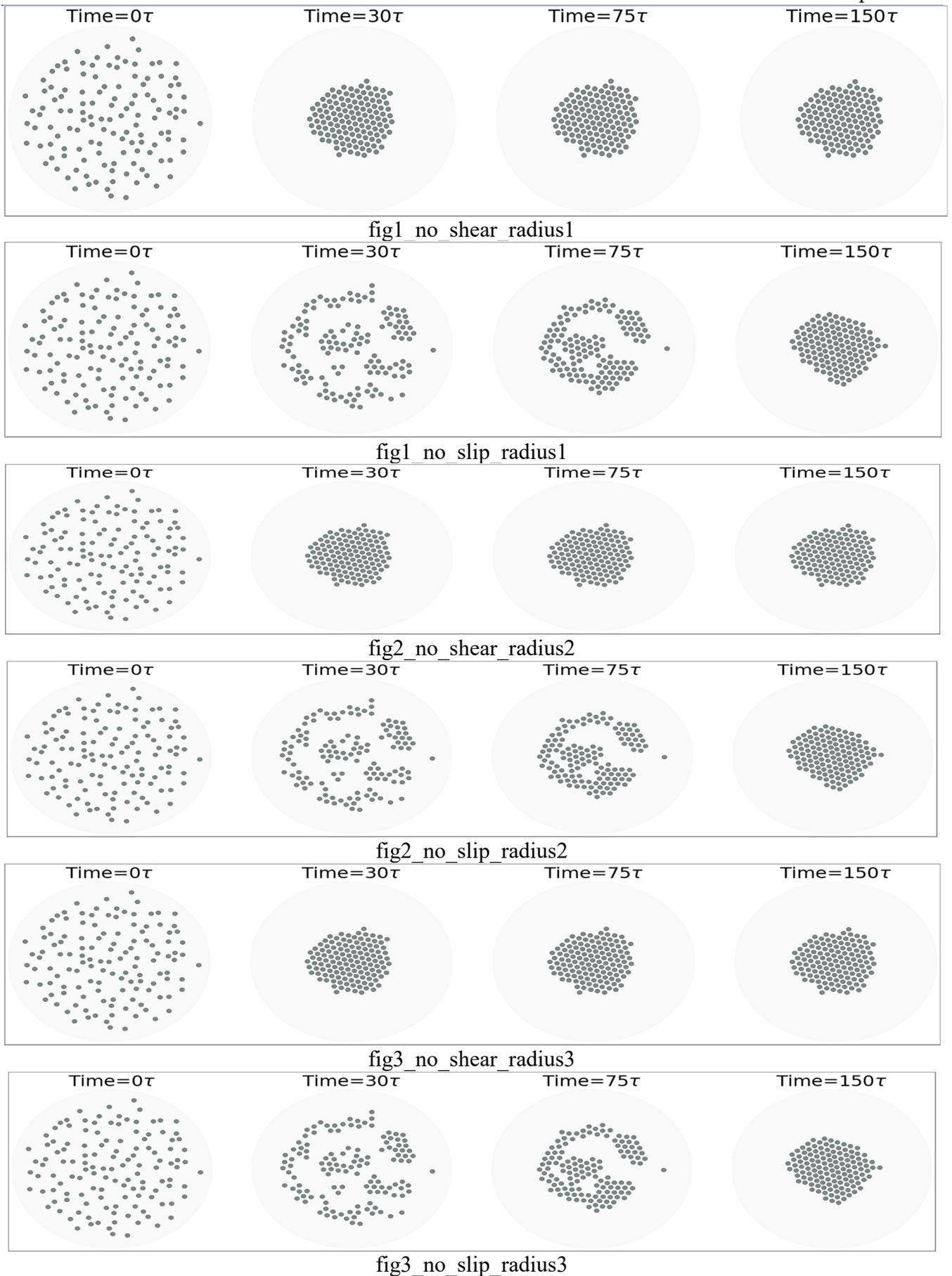


Figure 4.5 : Séparation de la phase induite par l'écoulement des particules actives sur une paroi plane antidérapante.

Exemple 5 : Champ chimique d'un colloïde phorétique - domaine non borné et près d'un mur

Notre 5^{ième} exemple introduit des champs phorétiques et montre comment tracer les parties irréductibles d'un champ phorétique actif autour d'une particule sphérique. Nous présenterons pas à pas l'EDP gouvernante à l'expression des champs phorétiques irréductibles que la bibliothèque PyLaplace évalue et trace. Nous notons les similitudes et les différences entre les exemples 1 et 5.

- **EDP elliptique** : Le champ phorétique $c(r)$ satisfait l'équation de Laplace dans la région V extérieure à une sphère et satisfait la condition aux limites de flux sur S :
$$\lim_{r \rightarrow S} \hat{\rho} \cdot (D \cdot \nabla c) = -j^{\mathcal{A}}(\rho) \quad (24)$$

Où $j^{\mathcal{A}}(\rho)$ est le flux actif et D est la diffusivité. La solution fondamentale de l'équation de Laplace est par :

$$\nabla^2 H = -\frac{\delta \cdot (r-r')}{D} \quad (25)$$

Où H est la fonction de Green qui va satisfaire des conditions aux limites supplémentaires. La dérivée normale de la fonction de Green est $L = D \cdot \hat{\rho}_\alpha \cdot \nabla_\alpha \cdot H$.

- **Intégrale de frontière** : La solution fondamentale, avec les identités de Green, donne la représentation intégrale de la frontière :
$$c(r) = \int H(r, R + \rho) \cdot j^{\mathcal{A}}(\rho) \cdot ds + \int L(r, R + \rho) \cdot c(\rho) \cdot ds \quad (26)$$

Qui exprime le champ phorétique en V en termes d'intégrale simple faisant intervenir le flux actif et d'intégrale double faisant intervenir le champ phorétique limite. Le premier est spécifié par la condition aux limites ; ce dernier doit être déterminé en fonction de celui-ci.

- **Expansion spectrale** : L'évaluation analytique des deux intégrales est possible si le champ phorétique et le flux sont étendus spectralement en termes d'harmoniques tensorielles sphériques :

$$c(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} w_m \cdot C^{(m)} \cdot Y^{(m)}(\hat{\rho}) \quad j^{\mathcal{A}}(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} \hat{w}_m \cdot J^{(m)} \cdot Y^{(m)}(\hat{\rho}) \quad (27)$$

Où $C^{(m)}$ et $J^{(m)}$ sont des coefficients tensoriels de $l^{\text{ième}}$ rang, symétriques et irréductibles dans tous leurs indices. L'orthogonalité des harmoniques tensorielles implique que :

$$C^{(m)} = \hat{w}_m \cdot \int c(R + \rho) \cdot Y^{(m)}(\hat{\rho}) \cdot ds \quad J^{(m)} = w_m \cdot \int j(R + \rho) \cdot Y^{(m)}(\hat{\rho}) \cdot ds \quad (28)$$

- **Discrétisation de Ritz-Galerkin** : Laisser le point r s'approcher de S à partir de V et exiger que le champ phorétique atteigne sa valeur sur la frontière conduit à une équation intégrale. La multiplication des deux côtés de l'équation intégrale par le $l^{\text{ième}}$ harmonique et l'intégration donnent un système d'équations linéaires de dimension infinie pour les coefficients du champ phorétique :

$$\frac{1}{2} \cdot C^{(l)} = H^{(l,l')} \cdot J^{(l')} + L^{(l,l')} \cdot C^{(l')} \quad (29)$$

Où les éléments de matrice $H^{(l,l')}$ et $L^{(l,l')}$ sont donnés en fonction de la fonction de Green et de sa dérivée normale. Ceux-ci peuvent être évalués analytiquement [24].

- **Troncation** : Le système linéaire de dimension infinie doit être tronqué en un système linéaire de dimension finie pour la traçabilité. On tronque le système à $l = 2$, de sorte que le champ phorétique et son flux sont :

$$c(\rho) = C^{(0)} + C^{(1)} \cdot Y^{(1)} + \frac{1}{6} \cdot C^{(2)} \cdot Y^{(2)} \quad (30a)$$

$$4 \cdot \pi \cdot b^2 \cdot j^{\mathcal{A}}(\rho) = J^{(0)} + 3 \cdot J^{(1)} \cdot Y^{(1)} + 5 \cdot J^{(2)} \cdot Y^{(2)} \quad (30b)$$

La solution du système linéaire de dimension finie donne une relation linéaire entre les coefficients du champ et son flux : les relations d'élasticité $\mathcal{C}^{(m)} = -\boldsymbol{\varepsilon}^{(m,m')} \cdot \mathbf{J}^{(m')}$. Dans un système non borné domaine, les tenseurs d'élasticité $\boldsymbol{\varepsilon}^{(m,m')}$ prennent une forme particulièrement simple : ils sont diagonaux dans les m indices $\varepsilon^{(m,m')} \equiv \frac{\delta_{mm'} \Delta^{(m)}}{4 \cdot \pi \cdot D \cdot w_m}$ de sorte que le seul scalaire $4 \cdot \pi \cdot D \cdot w_m$ les détermine. Pour $m = 0$ c'est le coefficient $1/4 \cdot \pi \cdot b$ de la capacité inverse d'un conducteur sphérique.

En insérant les expansions spectrales tronquées pour le champ phorétique et le flux actif puis en éliminant les coefficients phorétiques inconnus pour les coefficients de flux connus puis en élargissant la fonction de Green autour du centre de la sphère et enfin en utilisant l'orthogonalité des harmoniques tensorielles, on obtient le champ phorétique dû à chaque mode de flux irréductible comme :

$$\mathcal{C}^{(0)}(r) = H \cdot J^{(0)} \quad \mathcal{C}^{(1)}(r) = (\nabla H) \cdot J^{(1)} \quad \mathcal{C}^{(2)}(r) = \frac{4}{3} \cdot (\nabla \nabla H) \cdot J^{(2)} \quad (31)$$

Nous soulignons que ces expressions sont valables pour toute fonction de Green de l'équation de Laplace, à condition qu'elles satisfassent aux conditions aux limites supplémentaires qui peuvent être imposées. Pour cet exemple, nous considérons la fonction de Green dans un domaine non borné, où le flux s'annule à l'infini :

$$H_{\alpha\beta}^0(r - r') = \frac{1}{8 \cdot \pi \cdot D} \cdot \nabla^2 |r - r'| \quad (32)$$

Et dans un domaine confiné par une paroi plane infinie au niveau de laquelle le flux disparaît :

$$H_{\alpha\beta}^w(r, r') = H_{\alpha\beta}^0(r - r') - H_{\alpha\beta}^0(r - r^{*'}) \quad (33)$$

Ici, $r^{*'} = \mathcal{M} \cdot r'$ est l'image miroir du point, où $\mathcal{M} = I - 2 \cdot \hat{z} \cdot \hat{z}$ est l'opérateur de réflexion.

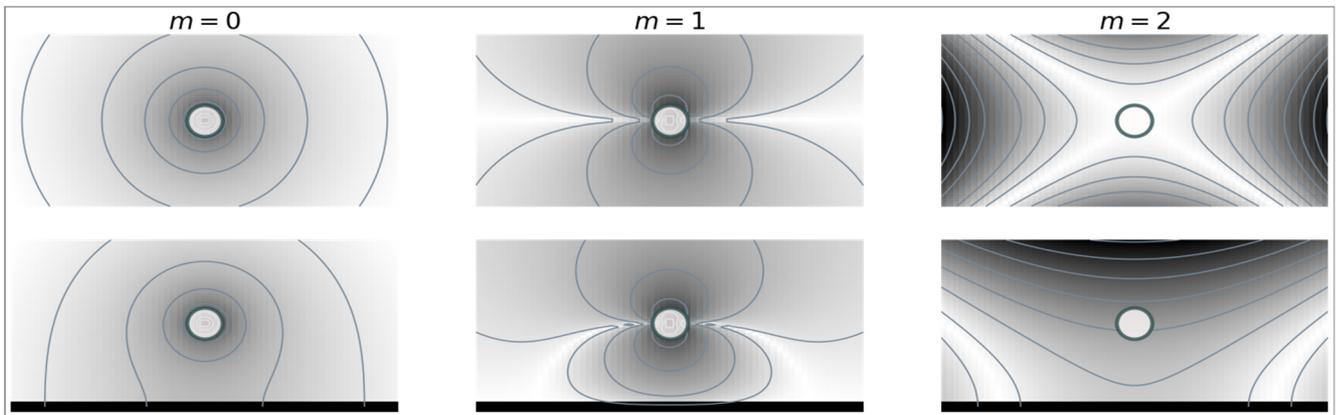


fig1_radius1_particules1_viscosity16

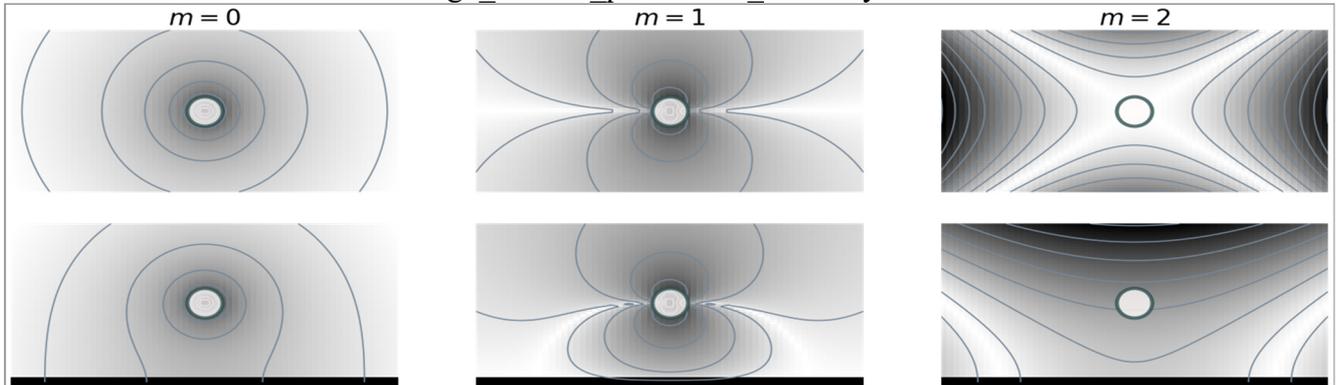


fig1_radius1_particules2

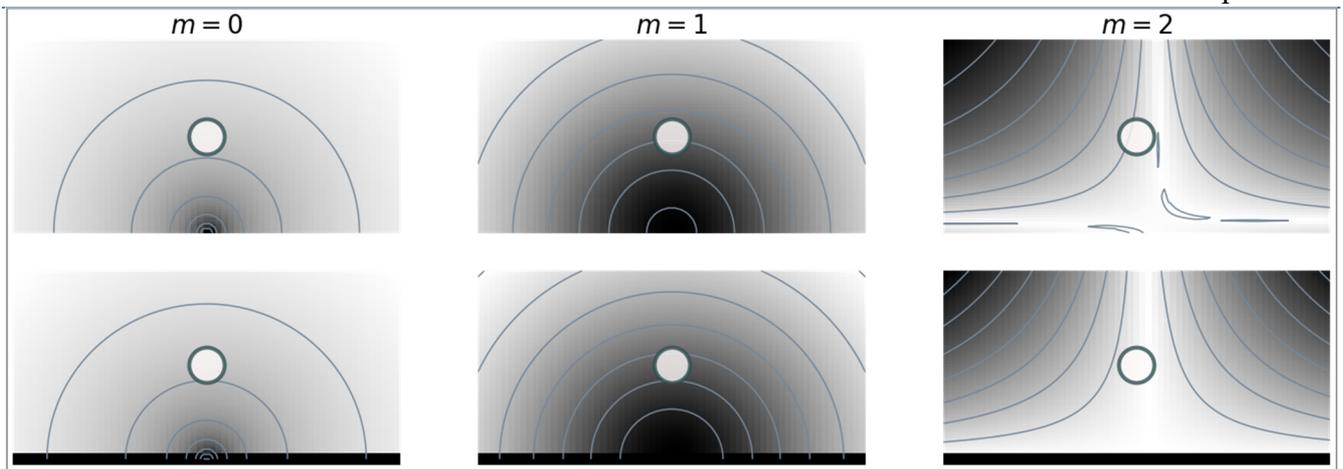


fig1_radius1_particules3

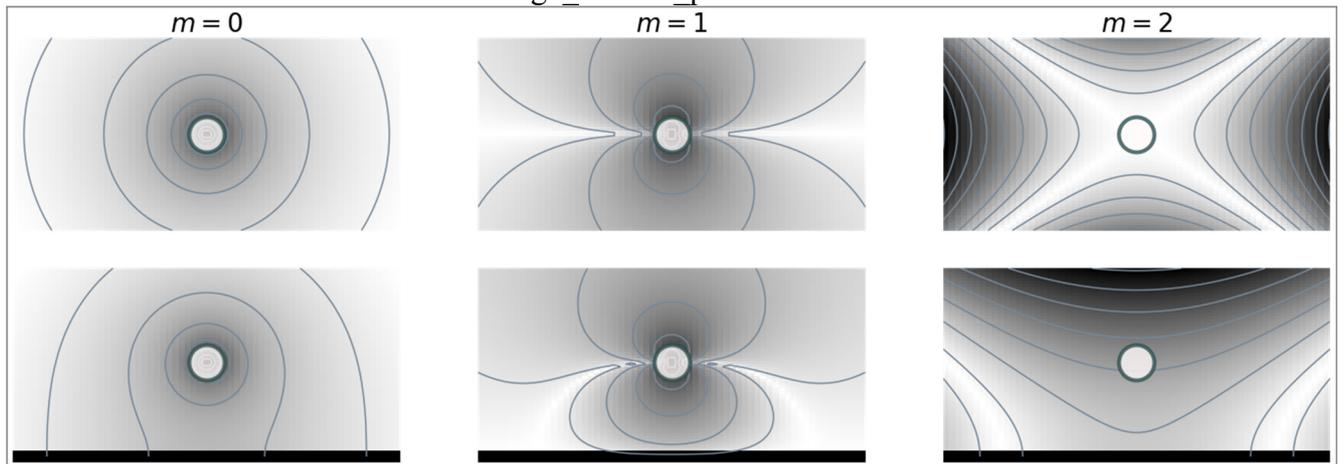


fig2_radius2_particules1

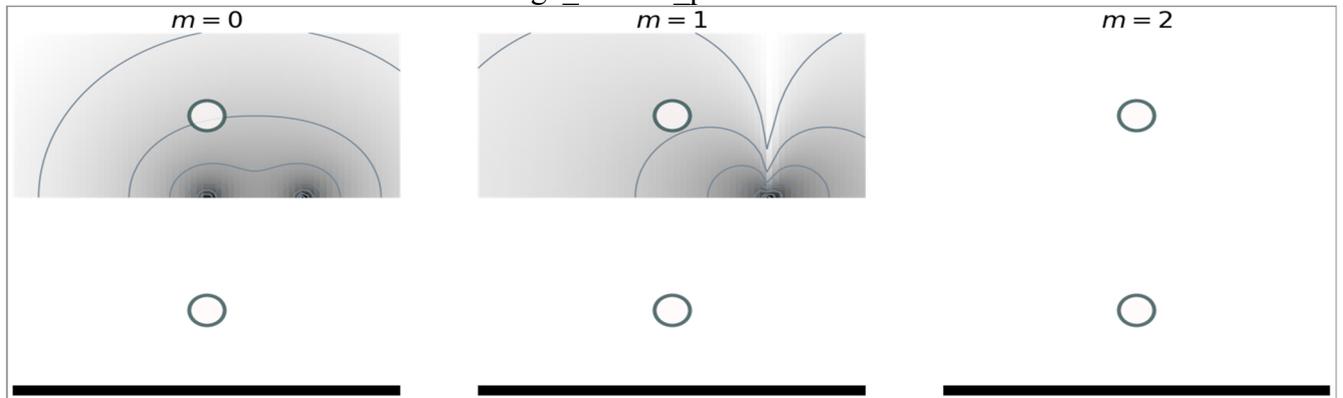
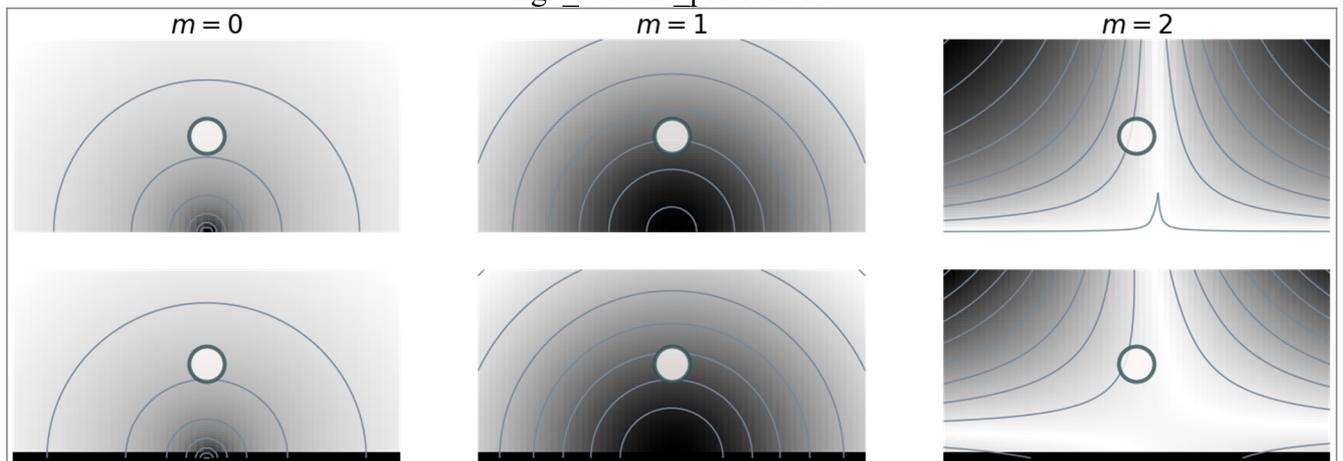


fig2_radius2_particules2



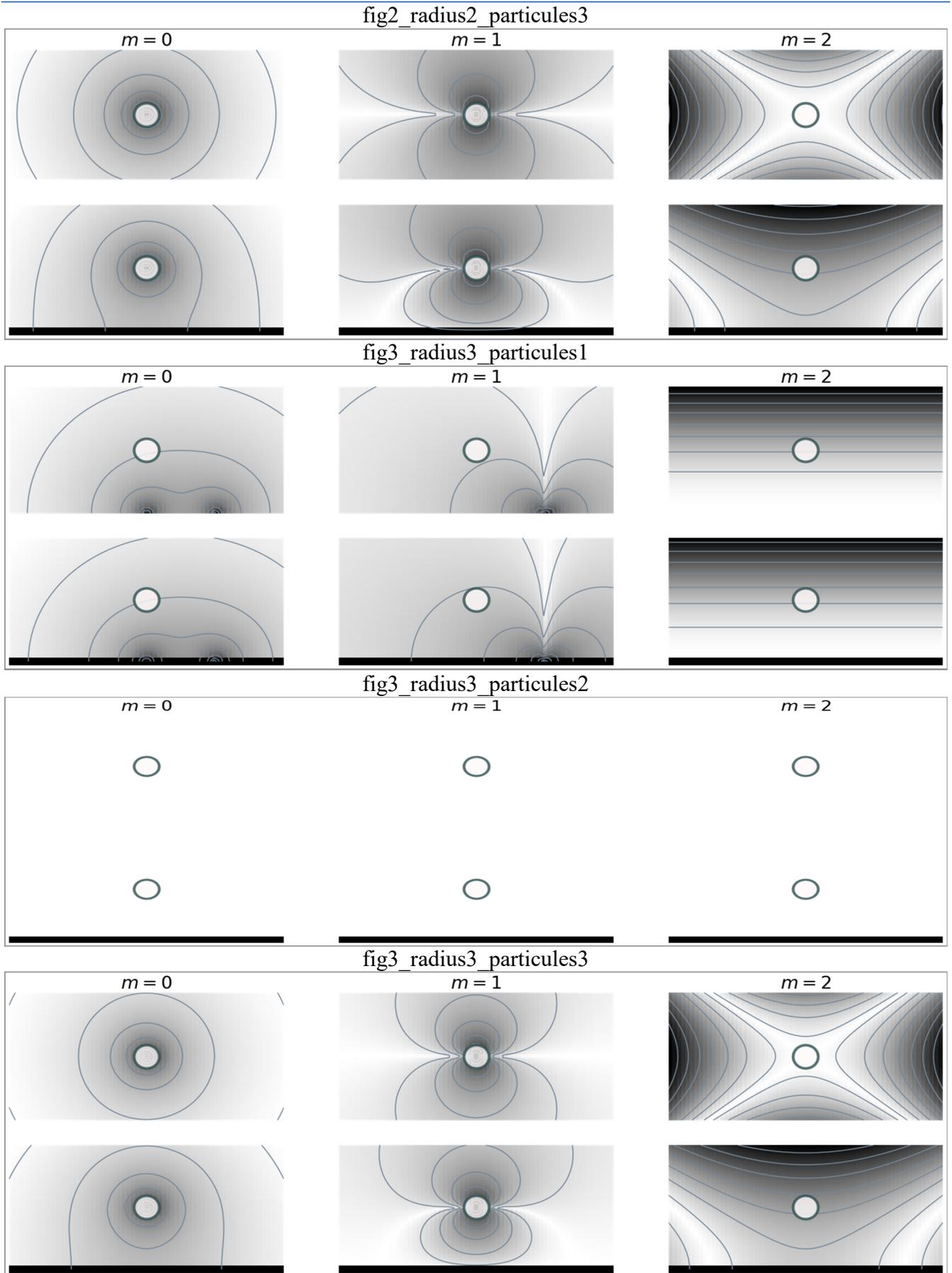


Figure 4.6 : Champs phorétiques irréductibles : tracé pseudocouleur du champ phorétique, dont l'intensité augmente du clair au foncé.

Le haut est la concentration dans le domaine non borné, tandis que le bas est près d'une paroi plane. Le premier panneau est la concentration due au mode $m = 0$ du flux, tandis que le second est pour $m = 1$, et le troisième est pour $m = 2$. La symétrie du profil suit celle des modes dans un domaine non borné. Cette symétrie est rompue dans la direction z par l'introduction de la paroi plane. Le code utilisé dans la **Figure 4.6** calcule le profil de concentration irréductible pour $m = 0, 1, 2$ modes du flux actif pour le rayon $b = 1$, la constante de diffusion $D = 1$, l'emplacement $R = (0,0,5)$ et orientation $p = (0,0,1)$: Les coefficients sont paramétrés comme $J^{(0)} = 1$, $J^{(1)} = p_\alpha$ et $J_{\alpha\beta}^{(2)} = p_\alpha p_\beta - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3}$. La m -ième composante irréductible du champ est calculée. Ceci est transmis à une fonction de traçage générique pour calculer le tracé de pseudocouleur dans un plan de symétrie. Ceux-ci sont affichés dans la sortie du code où les symétries sphériques, polaire et nématique des modes $m = 0, 1$ et 2 peuvent être vues. La deuxième ligne montre les mêmes champs près d'une paroi plane. Les champs ont une symétrie réduite dans la direction z en raison de l'introduction de la paroi plane.

Exemple 6 : Arrêt du regroupement de colloïdes phorétiques près d'un mur

Notre sixième exemple décrit la modification du glissement actif par les interactions phorétiques entre les particules actives et l'arrêt résultant de la séparation de phases induite par l'écoulement vu dans l'exemple 4. Le glissement, représentant une quantité spécifiée a priori pour chaque particule, doit maintenant être calculé à partir de l'interaction des champs phorétiques de toutes les particules. Dans l'exemple précédent, nous avons obtenu le champ phorétique pour un flux de surface spécifié. Ici, nous montrons comment le coupler à l'équation de Stokes et obtenir à la fois les interactions hydrodynamiques et phorétiques des colloïdes actifs. Le couplage de l'équation de Stokes et Laplace fait par l'expression suivante pour le glissement actif [25] :

$$v^{\mathcal{A}}(\rho_i) = \mu_c(\rho_i) \cdot \nabla_S \cdot c(\rho_i) \quad (34)$$

Dans la section précédente, nous avons montré que $\mathbf{C}_i^{(m)} = -\boldsymbol{\varepsilon}_{ik}^{(m,m')} \cdot \mathbf{J}_k^{(m')}$: Cette solution peut être utilisée pour obtenir les coefficients du glissement comme $\mathbf{V}_i^{(l)} = -\boldsymbol{\chi}^{(l,m)} \cdot \mathbf{C}_i^{(m)}$ où $\boldsymbol{\chi}^{(l,m)}$ est un tenseur de couplage de rang $(l + m)$ qui dépend de la mobilité phorétique μ_c [24]. Ainsi le problème est complètement précisé une fois que les coefficients du flux de la phorétique et la mobilité à la surface de toutes les particules seront données. Pour cet exemple, on considère un flux surfacique actif $j^{\mathcal{A}}$ avec des modes sphérique et polaire et une mobilité phorétique constante :

$$4 \cdot \pi \cdot b^2 \cdot j^{\mathcal{A}}(\rho_i) = J^{(0)} + 3 \cdot J^{(1)} \cdot p_i \cdot \hat{p}_i \quad 4 \cdot \pi \cdot b^2 \cdot \mu_c(\rho_i) = M^{(0)} \quad (35)$$

Les interactions phorétiques sont calculées avec la condition de non-flux au niveau de la paroi plane en utilisant la fonction de Green de l'équation (33). Les interactions hydrodynamiques sont calculées avec le non-glissement sur la paroi plane en utilisant le tenseur de Lorentz-Blake de l'équation (13). Les instantanés des simulations sont illustrés sur la **figure 4.7**. Dans cet exemple, nous étendons les résultats de la **figure 4.5** en ajoutant des interactions phorétiques. Nous montrons que cela peut conduire à l'arrêt de la séparation de phases induite par le flux lorsque les interactions phorétiques entre les colloïdes sont

répulsives. L'échelle de longueur à laquelle les particules sont arrêtées est proportionnelle à la vitesse d'autopropulsion d'un colloïde [6], en excellent accord avec les observations expérimentales [13, 15].

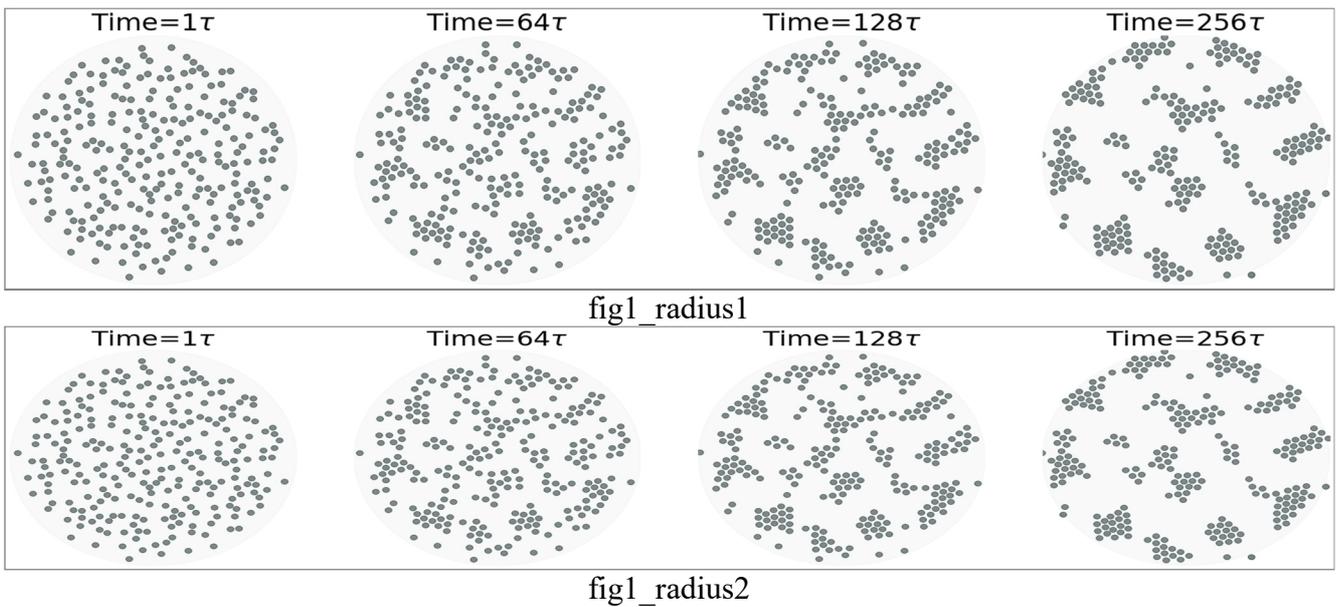


Figure 4.7 : Arrêt phorétique de la séparation de phases induite par l'écoulement.

Exemple 7 : Un ensemble de repères précompilés

Cet exemple montre que nos codes évoluent linéairement avec le nombre de cœurs CPU et quadratiquement avec N représentant le nombre de particules simulées. Dans la mise en œuvre actuelle, les vitesses d'environ 10^5 particules peuvent être calculées en quelques secondes pour un mode de glissement actif, comme le montre la **figure 4.8**. Avec les architectures à plusieurs cœurs actuelles, une simulation dynamique d'environ $N \sim 10^5$ est à portée de main. Pour un plus grand nombre de particules, des méthodes de sommation accélérée sont souhaitables, ce qui peut réduire le coût à $\mathcal{O}(N \cdot \log N)$ [26, 27] ou même $\mathcal{O}(N)$ [28-30].

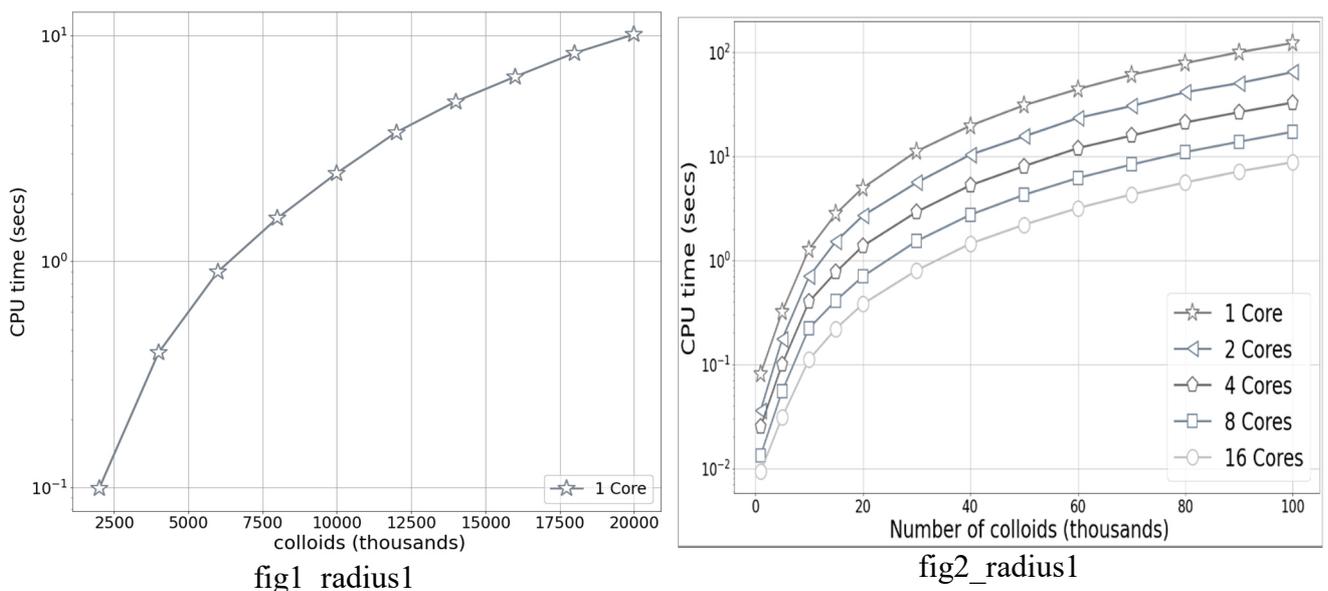


Figure 4.8 : Benchmarks pour le calcul du mouvement de corps rigide dû au mode de glissement $V(3t)$ dans la géométrie non bornée du flux de Stokes, sur une machine à 16 cœurs, en utilisant PyStokes.

Ces méthodes peuvent être implémentées dans l'architecture numérique actuelle en tant qu'amélioration par rapport à la somme directe du noyau, tout en maintenant la structure globale de la bibliothèque. La présente implémentation montre une mise à l'échelle linéaire avec le nombre de cœurs CPU, et une mise à l'échelle quadratique avec le nombre de particules, lorsque les produits matrice-vecteur sont calculés comme des sommes directes.

Exemple 8 : Synchronisation des colloïdes actifs dans un réseau 2D de pièges harmoniques

Ici, nous étudions la dynamique de colloïdes actifs sphériques de rayon b dans un réseau de pièges à deux dimensions. Nous considérons des colloïdes actifs automoteurs, polaires, avec des valeurs non nulles de $V_i^{\mathcal{A}}$, $V_i^{(2s)}$ et $V_i^{(3t)}$. Avec ce choix, un colloïde isolé à la vitesse $V_i^{\mathcal{A}} = v_s \cdot p_i$ produit des flux dipolaires et quadripolaires de forces proportionnelles à $V_i^{(2s)}$ et $V_i^{(3t)}$ respectivement. Le système que nous étudions peut être réalisé expérimentalement dans des pincettes holographiques. Les centres des pièges N sont à R_i^0 , disposés linéairement ou dans un réseau carré $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$. Chaque piège contient un seul colloïde actif qui ressent une force corporelle de ce seul piège. Le moment de force autour du centre du piège est nul. Par conséquent, dans un piège de raideur k centré sur R_i^0 , la force et le couple sur le i ème colloïde sont $F_i^P = -k \cdot (R_i - R_i^0)$ et $T_i^P = 0$.

On commence par ignorer les interactions hydrodynamiques pour obtenir le bilan des forces et des couples :

$$-6 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b \cdot (V_i - v_s \cdot p_i) - k \cdot (R_i - R_i^0) = 0 \qquad -8 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b^2 \cdot \Omega_i = 0$$

Cela donne le rayon de confinement $\frac{6 \cdot \pi \cdot \eta \cdot b \cdot v_s}{k}$, lorsque les forces de propulsion et de piège sont équilibrées. C'est l'état stable du système en l'absence d'interactions hydrodynamiques. Avec cette compréhension, nous présentons maintenant des résultats numériques pour la dynamique dans un réseau de pièges. Dans un réseau linéaire de pièges, on trouve des états stationnaires stables, atteints quelles que soient les conditions initiales, dans lesquels tous les colloïdes sont orientés le long de la ligne joignant les centres des pièges et à un rayon de confinement légèrement altéré par rapport à R^* en raison des interactions hydrodynamiques. Nous étudions ensuite la dynamique dans un réseau de pièges carré 3×3 . La dynamique des colloïdes est montrée dans la **Figure 4.9**. La condition initiale est choisie à partir d'un état stable en l'absence d'interactions hydrodynamiques. Nous constatons que les particules au centre ne tournent pas par symétrie tandis que les particules à gauche de cet axe de symétrie tournent dans le sens des aiguilles d'une montre et les particules à leur droite tournent dans le sens inverse des aiguilles d'une montre. Ceci peut être expliqué par l'estimation des couples hydrodynamiques sur chaque colloïde. La dynamique des colloïdes peut également être comprise intuitivement à partir du champ d'écoulement de la **figure 4.9**. Les colloïdes à égale distance du plan symétrique ont une dynamique synchronisée. Cela conduit à une corrélation à longue distance entre les colloïdes. En résumé, en (a) il y a une instabilité de rotation dans le système si les centres des pièges ne sont pas colinéaires, et en (b) la dynamique est synchronisée autour d'un axe de symétrie dans les pièges non colinéaires.

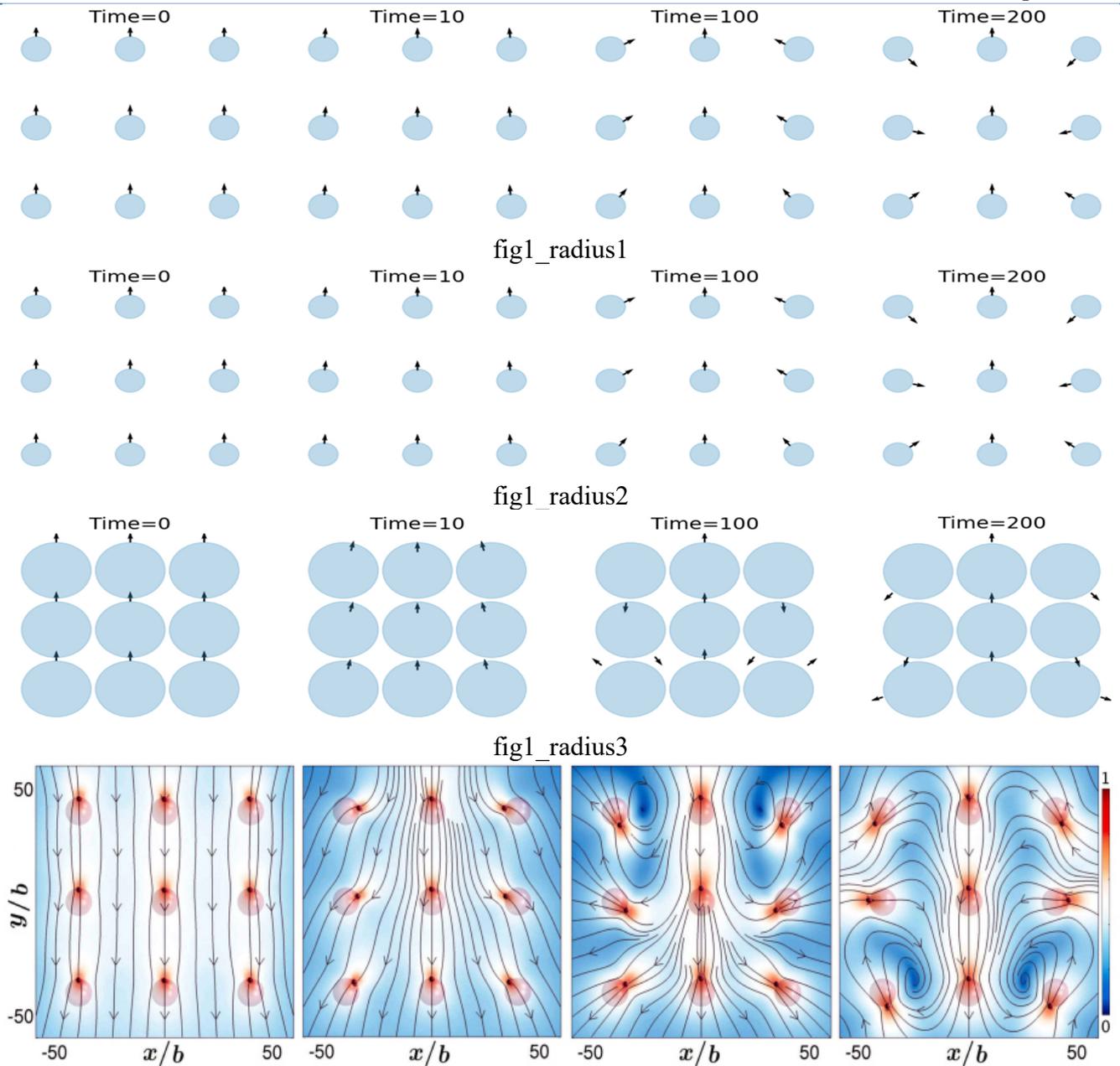


Figure 4.9 : Configurations instantanées à partir de simulations de colloïdes actifs dans un réseau carré 3×3 de pièges harmoniques et des lignes de courant correspondantes d'écoulement de fluide superposées sur le tracé en pseudo-couleur de la vitesse d'écoulement logarithmique normalisée à différents moments $(\frac{\delta \cdot \pi \cdot \eta \cdot b}{k})$.

Les pièges sont représentés par les sphères schématiques tandis que les positions et orientations des colloïdes sont représentées par des cônes, et les courbes avec flèches vertes indiquent la rotation. Les colloïdes sur l'axe de symétrie ne tournent pas, tandis que ceux de gauche et de droite tournent respectivement dans le sens horaire et antihoraire, de manière synchronisée. Les graphiques restants montrent la configuration du système à trois instants (indiqués par les marqueurs correspondants) le long de la courbe de dissipation de puissance. Les pièges sont représentés par les sphères schématiques et les positions et orientations des colloïdes sont représentées par des cônes, et les courbes avec flèches vertes indiquent la rotation.

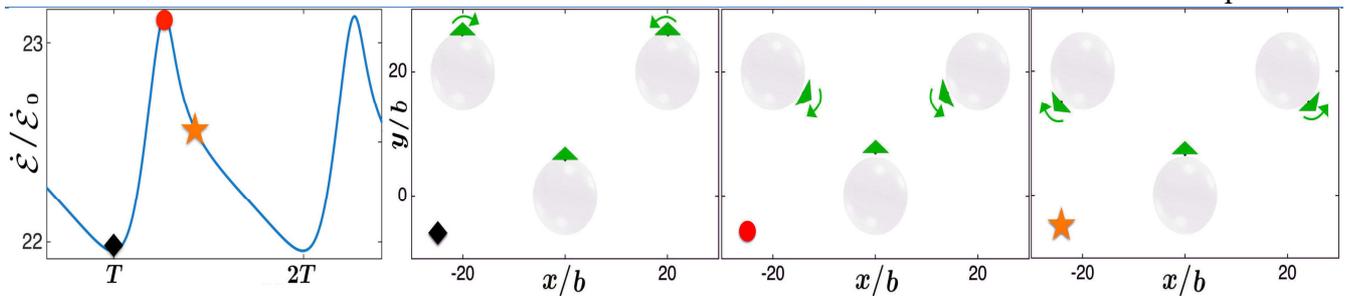


Figure 4.10 : Dissipation de puissance pour le mouvement synchronisé et périodique de trois colloïdes actifs dans un réseau triangulaire de pièges harmoniques (panneau de gauche), mis à l'échelle par la dissipation de puissance d'un colloïde isolé $\dot{\mathcal{E}}_0$.

Sur la **figure 4.10**, nous estimons la dissipation de puissance pour le mouvement synchronisé et périodique de trois colloïdes actifs dans un réseau triangulaire de pièges harmoniques qui est similaire à celle du réseau carré de pièges. Le colloïde dans le piège central n'a pas de dynamique de rotation en raison de la symétrie, tandis que celui de gauche tourne dans le sens des aiguilles d'une montre et le colloïde de droite tourne dans le sens inverse des aiguilles d'une montre. La puissance dissipée dans le système est minimale lorsque les colloïdes sont largement séparés et elle est maximale lorsque les colloïdes sont plus proches les uns des autres. La première configuration de la **figure 4.10** correspond au minimum de dissipation de puissance, tandis que le second est le maximum et la troisième configuration est une valeur intermédiaire.

Conclusion :

Dans les différents exemples présentés, nous avons démontré l'utilisation de bibliothèques Python pour simuler des phénomènes hydrodynamiques et phorétiques. Nous concluons en listant les fonctionnalités implémentées, implémentables et non implémentables :

- La bibliothèque prend en charge les géométries périodiques [31] et les parois planes parallèles [10, 32]. Les polymères [33], les membranes et autres assemblages hiérarchiques de particules actives peuvent être simulés.
- Peut-être implémenté d'autres conditions aux limites : Par exemple des écoulements à l'intérieur d'un domaine sphérique comme une goutte de liquide, des interactions de lubrification en champ proche et des solutions numériques du système linéaire peuvent être implémentées dans la conception actuelle, avec un code arborescent ou des accélérations multipolaires rapides .
- Ne peut pas être implémenté des géométries irrégulières pour lesquelles les formes analytiques des fonctions de Green des équations de Laplace et de Stokes ne peuvent pas être évaluées analytiquement et / ou particules de forme irrégulière aux frontières desquelles les fonctions de base spectrale définies globalement ne sont pas disponibles.

En exploitant la linéarité de l'écoulement visqueux lent, comme manifeste dans sa représentation intégrale de frontière, nous avons dérivé des relations linéaires entre les coefficients de la force par unité de surface et le glissement actif dans une suspension de sphères colloïdales actives. Ces relations

linéaires sont appelées lois de Stokes généralisées et les coefficients tensoriels reliant la force par unité de surface au glissement sont appelés les tenseurs de frottement généralisés. Nous avons dérivé des expressions explicites pour ces tenseurs en fonction de la fonction de Green du flux de Stokes. La représentation intégrale fournit l'écoulement en tout point du fluide, étant donné la force par unité de surface et le glissement actif sur la limite fluide-colloïde. Cela conduit à des méthodes numériques qui sont plus efficaces que celles qui ont besoin de résoudre l'écoulement de fluide [34, 37, 38]. A partir des lois de Stokes généralisées, on obtient directement les forces, les couples, l'écoulement du fluide, la pression du fluide, la puissance dissipée et la contrainte de suspension. Étant donné que les forces et les couples sont des grandeurs dynamiques fondamentales dans les descriptions newtoniennes ou de Langevin de la dynamique des particules, notre contribution constitue la base d'une théorie microscopique de la mécanique des suspensions actives et de la mécanique statistique qui conserve la quantité de mouvement à la fois dans le fluide massif et aux frontières fluide-solide. Le formalisme est appliqué à des situations expérimentalement réalisables pour dériver des prédictions testables. Il faut noter que dans ce travail, les simulations sont faites dans la formulation de mobilité et les termes directeurs des forces et couples sont calculés en utilisant le schéma itératif de Jacobi rapide et transparent. Lorsqu'une plus grande précision est souhaitée, des gradients conjugués ou d'autres méthodes de sous-espace de Krylov peuvent être utilisés [39]. Les descriptions de Langevin et Smoluchowski des colloïdes actifs sont obtenues en termes de matrices de mobilité et de tenseurs de propulsion. La limite de champ lointain des matrices de mobilité est obtenue en fonction de la fonction de Green du débit de Stokes tandis qu'une approximation de la lubrification peut être utilisée lorsque les colloïdes sont proches les uns des autres [40]. Les tenseurs de propulsion sont obtenus en termes de mobilités corrigées en lubrification et de tenseurs de frottement. Ainsi, nous tenons compte à la fois des interactions hydrodynamiques en champ lointain, à n'importe quel ordre de précision souhaitée, et des interactions de lubrification en champ proche. La discrétisation de Galerkin de l'équation intégrale de frontière fournit les résultats les plus précis pour les frontières lisses, comme les sphères, pour le moins d'inconnues et préserve l'auto-adjointité du problème [41, 42]. La simulation dynamique de centaines de milliers de colloïdes actifs sur des architectures de calcul multicœurs est possible. Dans ce travail, nous supposons une particule sphérique avec un glissement actif sur sa surface, qui est ensuite expansée dans une base de Galerkin pour obtenir la force par unité de surface. Ainsi, tout mécanisme générique générant la vitesse active peut être modélisé dans notre approche. Typiquement, le mécanisme de glissement pour les colloïdes actifs synthétiques est phorétique et ensuite, nous devons résoudre séparément un champ de concentration [43]. Ici, nous avons supposé que les parties non hydrodynamiques du problème ont été résolues séparément. Cette hypothèse nécessite le découplage de l'advection et de la diffusion et, par conséquent, est limitée aux faibles nombres de Péclet. Il est utile de comparer les résultats présentés ici avec les résultats existants pour les interactions hydrodynamiques de nombreuses sphères. En excluant

la contribution du glissement actif et en tronquant l'expansion de Galerkin à $l = 2$, on obtient la méthode de calcul des interactions hydrodynamiques en champ lointain dans la méthode de dynamique Stokesian FTS de Brady et ses collègues [40, 44]. Cette dernière méthode ignore la totalité de la contribution $l = 3$ qui décroît en r^{-3} pour un flux non borné et est à longue portée. Cette troncature d'ordre faible a été étendue jusqu'au 7^{ème} ordre par Ichiki [45]. La méthode utilise différentes bases pour l'expansion de la force par unité de surface et de la vitesse de surface et plusieurs transformations élaborées sont nécessaires pour obtenir un système linéaire de rang complet. En revanche, notre choix d'une base identique pour la force par unité de surface et le glissement actif produit automatiquement un système linéaire de rang complet. Dans notre base, les harmoniques indexées par l produisent des écoulements qui décroissent en r^{-l} , une simplicité absente des bases utilisées par Cichocki [46] et Ichiki [45]. Pour les colloïdes actifs, les travaux antérieurs les plus proches dans l'esprit du nôtre sont ceux d'Ishikawa et al [47-49] où des vitesses de glissement axisymétriques, tronquées aux deux premiers modes non triviaux, sont considérées. Les interactions hydrodynamiques en champ lointain et en champ proche sont obtenues, respectivement, dans des approximations de superposition et de lubrification. En revanche, nous incluons la forme la plus générale du glissement et utilisons une fonction de base irréductible pour la discrétisation de Galerkin qui donne un moyen systématique d'évaluer les interactions hydrodynamiques à n'importe quel ordre de précision souhaité. Les colloïdes actifs peuvent être étudiés par d'autres modèles comme la méthode du couplage de force, mais seulement en limite diluée, car la distinction entre l'intérieur et l'extérieur d'un colloïde est notionnel dans la méthode [38]. Nous renvoyons les lecteurs aux revues récentes sur les flux à faible nombre de Reynolds pour une liste plus complète des travaux dans le domaine [50-53]. Le présent travail se concentre sur les parties déterministes du problème, bien que les équations stochastiques aient été présentées. Dans un futur travail, nous explorerons plus en détail les aspects stochastiques, en utilisant la description de Langevin et Smoluchowski dérivée dans cet article. Le formalisme peut également être étendu à l'étude des fluctuations dans les chaînes de particules actives [34-36, 54].

Référence :

- [1] R. Singh and R. Adhikari, "Generalized Stokes laws for active colloids and their applications," J. Phys. Commun. **2**, 025025 (2018).
- [2] G. K. Batchelor, *An introduction to fluid dynamics* (Cambridge university press, 2000).
- [3] Z. Tan, M. Yang, M. Ripoll, Soft Matter **13**, 7283 (2017)
- [4] Y. Ibrahim, R. Golestanian, T.B. Liverpool, Phys. Rev. Fluids **3**, 033101 (2018)
- [5] Z. Wang, D. Niether, J. Buitenhuis, Y. Liu, P.R. Lang, J. K. G. Dhont, S. Wiegand, Langmuir **35**, 1000 (2019)
- [6] M. Wagner, Ph.D. thesis, Cologne University, Cologne, Germany (2017)
- [7] M. Yang, M. Ripoll, Phys. Rev. E **84**, 061401 (2011)

- [8] M. Wagner, M. Ripoll, *EPL* **119**, 66007 (2017)
- [9] E. Lauga, T.R. Powers, *Rep. Prog. Phys.* **72**(72), 096601 (2009)
- [10] S. Thutupalli, D. Geyer, R. Singh, R. Adhikari, and H. A. Stone, “Flow-induced phase separation of active particles is controlled by boundary conditions,” *Proc. Natl. Acad. Sci.* **115**, 5403–5408 (2018).
- [11] R. E. Goldstein, “Green algae as model organisms for biological fluid dynamics,” *Ann. Rev. Fluid Mech.* **47**, 343–375 (2015).
- [12] R. Singh and R. Adhikari, “Fluctuating hydrodynamics and the Brownian motion of an active colloid near a wall,” *Eur. J. Comp. Mech* **26**, 78–97 (2017).
- [13] I. Theurkauff, C. Cottin-Bizonne, J. Palacci, C. Ybert, and L. Bocquet, “Dynamic clustering in active colloidal suspensions with chemical signaling,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 268303 (2012).
- [14] J. Palacci, S. Sacanna, A. P. Steinberg, D. J. Pine, and P. M. Chaikin, “Living crystals of light-activated colloidal surfers,” *Science* **339**, 936–940 (2013).
- [15] I. Buttinoni, J. Bialké, F. Kümmel, H. Löwen, C. Bechinger, and T. Speck, “Dynamical clustering and phase separation in suspensions of self-propelled colloidal particles,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 238301 (2013).
- [16] X. Chen, X. Yang, M. Yang, and H. P. Zhang, “Dynamic clustering in suspension of motile bacteria,” *EPL* **111**, 54002 (2015).
- [17] A. P. Petroff, X.-L. Wu, and A. Libchaber, “Fast-moving bacteria self-organize into active two-dimensional crystals of rotating cells,” *Phys. Rev. Lett.* **114**, 158102 (2015).
- [18] S. Thutupalli, D. Geyer, R. Singh, R. Adhikari, and H. A. Stone, “Flow-induced phase separation of active particles is controlled by boundary conditions,” *Proc. Natl. Acad. Sci.* **115**, 5403–5408 (2018).
- [19] A. Aubret, M. Youssef, S. Sacanna, and J. Palacci, “Targeted assembly and synchronization of self-spinning microgears,” *Nat. Phys* **14**, 1114 (2018).
- [20] S. Kim and S. J. Karrila, *Microhydrodynamics: Principles and Selected Applications* (Butterworth-Heinemann, Boston, 1991).
- [21] T. M. Squires, “Effective pseudo-potentials of hydrodynamic origin,” *J. Fluid Mech.* **443**, 403–412 (2001).
- [22] R Di Leonardo, F Ianni, and G Ruocco, “Colloidal attraction induced by a temperature gradient,” *Langmuir* **25**, 4247–4250 (2009).
- [23] H.-R. Jiang, N. Yoshinaga, and M. Sano, “Active motion of a janus particle by self-thermophoresis in a defocused laser beam,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 268302 (2010).
- [24] R. Singh, R. Adhikari, and M. E. Cates, “Competing chemical and hydrodynamic interactions in autophoretic colloidal suspensions,” *J. Chem. Phys.* **151**, 044901 (2019).

- [25] J. L. Anderson, “Colloid transport by interfacial forces,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* **21**, 61–99 (1989).
- [26] J. Barnes and P. Hut, “A hierarchical $O(N \log N)$ force-calculation algorithm,” *Nature* **324**, 446–449 (1986).
- [27] A. Sierou and J. F. Brady, “Accelerated Stokesian dynamics simulations,” *J. Fluid Mech.* **448**, 115–146 (2001).
- [28] L. Greengard and Vladimir Rokhlin, “A fast algorithm for particle simulations,” *J. Comp. Phys.* **73**, 325–348 (1987).
- [29] A. S. Sangani and G. Mo, “An $O(N)$ algorithm for Stokes and Laplace interactions of particles,” *Phys. Fluids* **8**, 1990–2010 (1996).
- [30] A. J. C. Ladd, “Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation,” *J. Fluid Mech.* **271**, 285–309 (1994).
- [31] R. Singh, *Microhydrodynamics of active colloids*, Ph.D. thesis, HBNI (2018).
- [32] D. Sarkar, R. Singh, A. Som, C. K. Manju, M. A. Ganayee, R. Adhikari, and T. Pradeep, “Electrohydrodynamic assembly of ambient ion-derived nanoparticles to nanosheets at liquid surfaces,” *J. Phys. Chem. C* **122**, 17777–17783 (2018).
- [33] A. Laskar and R. Adhikari, “Brownian microhydrodynamics of active filaments,” *Soft matter* **11**, 9073–9085 (2015).
- [34] G. Jayaraman, S. Ramachandran, S. Ghose, A. Laskar, M. Saad Bhamla, P. B. Sunil Kumar, and R. Adhikari, Autonomous Motility of Active Filaments due to Spontaneous Flow-Symmetry Breaking, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 158302 (2012)
- [35] A. Laskar, R. Singh, S. Ghose, G. Jayaraman, P. B. Sunil Kumar, and R. Adhikari, Hydrodynamic instabilities provide a generic route to spontaneous biomimetic oscillations in chemomechanically active filaments, *Sci. Rep.* **3** (2013), 10.1038/srep01964.
- [36] A. Laskar and R. Adhikari, Brownian microhydrodynamics of active filaments, *Soft matter* **11**, 9073–9085 (2015).
- [37] R. W. Nash, R. Adhikari, J. Tailleur, and M. E. Cates, Run-and-Tumble Particles with Hydrodynamics: Sedimentation, Trapping, and Upstream Swimming, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 258101 (2010).
- [38] B. Delmotte, E. E. Keaveny, F. Plouraboué, and E. Climent, Large-scale simulation of steady and time-dependent active suspensions with the force-coupling method, *J. Comput. Phys.* **302**, 524–547 (2015)
- [39] M. R. Hestenes and E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **49**, 409 (1952)

- [40] J. F. Brady, R. J. Phillips, J. C. Lester, and G. Bossis, Dynamic simulation of hydrodynamically interacting suspensions, *J. Fluid Mech.* 195, 257–280 (1988)
- [41] G. Youngren and A. Acrivos, Stokes flow past a particle of arbitrary shape: a numerical method of solution, *J. Fluid Mech.* 69, 377–403 (1975).
- [42] G. P. Muldowney and J. J. L. Higdon, A spectral boundary element approach to three-dimensional Stokes flow, *J. Fluid Mech.* 298, 167–192 (1995).
- [43] W. E. Uspal, M. N. Popescu, and M. Dietrich, S. and Tasinkevych, Self-propulsion of a catalytically active particle near a planar wall: from reflection to sliding and hovering, *Soft Matter* 11, 434–438 (2015)
- [44] L. Durlofsky, J. F. Brady, and G. Bossis, Dynamic simulation of hydrodynamically interacting particles, *J. Fluid Mech.* 180, 21–49 (1987)
- [45] K. Ichiki, Improvement of the Stokesian dynamics method for systems with a finite number of particles, *J. Fluid Mech.* 452, 231–262 (2002)
- [46] B. Cichocki, B. U. Felderhof, K. Hinsen, E. Wajnryb, and J. Blawdziewicz, Friction and mobility of many spheres in Stokes flow, *J. Chem. Phys.* 100, 3780–3790 (1994)
- [47] T. Ishikawa, M. P. Simmonds, and T. J. Pedley, Hydrodynamic interaction of two swimming model micro-organisms, *J. Fluid Mech.* 568, 119–160 (2006).
- [48] T. Ishikawa, J. T. Locsei, and T. J. Pedley, Development of coherent structures in concentrated suspensions of swimming model micro-organisms, *J. Fluid Mech.* 615, 401–431 (2008).
- [49] K. Kyoya, D. Matsunaga, Y. Imai, T. Omori, and T. Ishikawa, Shape matters: Near-field fluid mechanics dominate the collective motions of ellipsoidal squirmers, *Phys. Rev. E* 92, 063027 (2015)
- [50] A. Zöttl and H. Stark, Emergent behavior in active colloids, *J. Phys.: Cond. Mat.* 28, 253001 (2016).
- [51] R. E. Goldstein, Batchelor Prize Lecture Fluid dynamics at the scale of the cell, *J. Fluid Mech* 807, 1–39 (2016).
- [52] E. Lauga and T. R. Powers, The hydrodynamics of swimming microorganisms, *Rep. Prog. Phys.* 72, 096601 (2009).
- [53] R. G. Winkler, Low reynolds number hydrodynamics and mesoscale simulations, *Eur. Phys. J. Special Topics* 225, 2079–2097 (2016).
- [54] A. Pandey, P. B. Sunil Kumar, and R. Adhikari, Flow-induced nonequilibrium self-assembly in suspensions of stiff, apolar, active filaments, *Soft Matter* 12, 9068–9076 (2016).

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Nous avons étudié les interactions hydrodynamiques entre plusieurs particules au voisinage d'une paroi imperméable en travaillant avec la méthode analytique et la méthode numérique informatisée. Nous avons d'abord résolu le problème axisymétrique de la chaîne de particules sphériques disposées en ligne droite perpendiculaire à la paroi. Ensuite, nous avons considéré ce problème dans une configuration plus générale : la situation où la position des particules est arbitraire et la situation d'écoulement du fluide, comme le cisaillement. Le problème est résolu par la méthode des équations intégrales de surface, et nous avons développé un code de solution utilisant la méthode des éléments de frontière. L'analyse de l'équation intégrale de surface permet de calculer dans un premier temps les forces et couples exercés sur les particules, construisant ainsi la matrice de résistance et la matrice de mobilité. D'après la relation de base entre la matrice d'écoulement et la dynamique, nous avons calculé la trajectoire de la sédimentation des particules dans le fluide statique. Nous avons également vérifié les solutions analytiques calculées par des méthodes directes, comme la méthode des coordonnées bisphériques, qui donne des résultats précis sous certaines configurations. Nous avons également calculé l'équivalent de la vitesse et l'équivalent de la composante de vitesse.

L'ouvrage est divisé en quatre chapitres. Le premier chapitre contient une brève note sur les propriétés des fluides, le deuxième chapitre contient le cadre physique du problème, les symboles utilisés et la formule de l'équation de Stokes qui contrôle le flux et il contient aussi la résolution de l'équation intégrale. Il décrit les solutions obtenues par diverses techniques d'analyse, telles que la méthode de réflexion, la méthode des coordonnées bisphériques et la méthode d'expansion multipolaire. Nous avons décrit ensuite l'équation de Stokes sous la forme d'une équation intégrale en utilisant la fonction de Green calculée par Blake [2.15]. La formule Green est utilisée pour intégrer automatiquement dans les conditions d'anti-patinage sur la paroi dans la résolution. Rappelant les résultats classiques, nous avons proposé la formule de l'équation intégrale de surface en utilisant la formule de réciprocité de Lorentz et la formule de Green liée au problème de Stokes. Compte tenu de la condition de non-glissement des particules, l'équation intégrale est simplifiée en une équation qui exprime la vitesse de chaque point à la surface de la particule sous la forme d'une potentielle monocouche. La densité de ce potentiel est la contrainte exercée sur chaque sphère [2.16, 2.17]. Bien que le problème soit défini dans un domaine infini, cette méthode peut réduire le calcul à la surface des particules. La contrainte calculée est ensuite utilisée pour obtenir la vitesse du fluide par intégration de surface. Nous avons choisi la méthode des éléments de frontière pour résoudre l'équation de surface intégrale. Et grâce à une sélection appropriée, nous avons pu prouver que la résolution directe de la méthode des éléments de frontière combinés et la résolution spatiale double de la méthode des éléments de frontière de Galerkin sont réduites à la résolution du même système algébrique pour l'approximation de type P_0 .

Nous appliquons aussi dans la deuxième partie de ce chapitre la méthode d'appariement des éléments de frontière aux problèmes axisymétriques. A partir de l'équation de surface intégrale, nous avons appliqué la méthode de collocation et écrit un système linéaire qui nous permet de calculer la contrainte sur les particules. Ensuite, par intégration de contraintes, nous avons obtenu les forces hydrodynamiques exercées sur une ligne de sphères en sédimentation dans le cas axisymétrique. Les difficultés posées par le calcul numérique sont inhérentes aux singularités du noyau de l'équation intégrale. Pour traiter ces singularités, nous avons effectué un calcul analytique pour les points de collocation proches des singularités et un calcul numérique pour les points de collocation éloignés des singularités. Pour la distribution des points de collocation, nous avons utilisé une technique qui optimise l'algorithme de calcul. Les points sont répartis avec une plus grande densité dans les régions où les interactions sont fortes. Nous avons comparé les résultats obtenus avec ceux obtenus par d'autres méthodes. Pour le cas d'une sphère et une paroi, nous avons utilisé les résultats de Brenner [2.19] et Maude [2.20], et pour le cas de deux sphères, ceux obtenus par Stimson et Jeffery [2.22]. Ces derniers résultats sont obtenus par la méthode exacte des coordonnées bisphériques, l'ordre de l'erreur ne dépasse pas 0.1% prouvant l'efficacité de cette méthode pour ce genre de problème. Nous avons également comparé nos résultats avec ceux obtenus par des méthodes approchées, comme la méthode des réflexions. La solution du problème obtenue par Wakiya [2.25, 2.26] utilise la méthode des réflexions qui ne donne pas de solution exacte dès que les deux sphères s'approchent trop près de la paroi. La méthode des intégrales de surface donne une meilleure approximation de la solution pour ce cas.

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté le cadre de calcul des trajectoires de plusieurs particules en sédimentation dans un fluide au repos. Nous avons présenté la matrice de grande résistance [3.3] qui exprime les effets sur les particules en fonction de leurs vitesses de translation et de rotation, ainsi que son inverse, la matrice de grande mobilité. La dernière matrice permet notamment d'écrire des vitesses des particules tournant librement dans un champ de force donné. Les trajectoires sont calculées par la résolution d'un système différentiel ordinaire pour les cas de sédimentation : sédimentation perpendiculaire à une paroi plane et sédimentation parallèle à la paroi. L'algorithme de calcul des trajectoires commence par la résolution d'un système à six seconds membres qui proviennent des différents types de mouvements (translation et rotation). (Ensuite, nous remplissons la matrice de résistance et calculons son inverse, la matrice de mobilité, pour construire le système différentiel ordinaire donnant les trajectoires. Ce système est résolu par la méthode de Gear [3.13]. L'effet de la paroi sur les trajectoires est automatiquement intégré par la méthode de Green fonction, ce qui nous permet plus tard, au chapitre 4, d'étudier l'influence de la paroi sur les trajectoires.

Enfin, dans le quatrième chapitre, nous avons présenté de nouveaux résultats et de nouvelles simulations numériques. Les forces et couples exercés sur une particule de forme ellipsoïdale sont calculés en fonction de la distance à la paroi en présence d'un écoulement de cisaillement ambiant. L'influence de la paroi est également étudiée pour le cas de deux ellipsoïdes avec une translation parallèle à la paroi et une translation perpendiculaire à la paroi.

Dans les huit exemples traités, nous avons démontré l'utilisation des bibliothèques Python pour la simulation de phénomènes hydrodynamiques et phorétiques. Ces exemples n'épuisent pas les capacités des bibliothèques et beaucoup d'autres choses peuvent être faites avec elles. Nous concluons en énumérant les fonctionnalités implémentées, implémentables et non implémentables.

Implémentées mais non montrées : la bibliothèque supporte les géométries périodiques [4.45] et les parois planes parallèles [4.15, 4.46]. Les polymères [4.47], les membranes et autres assemblages hiérarchiques de particules actives peuvent être simulés.

Peut-être implémenté : d'autres conditions aux limites, par exemple les écoulements à l'intérieur d'un domaine sphérique tel qu'une goutte de liquide, les interactions de lubrification en champ proche, et les solutions numériques du système linéaire peuvent être implémentées dans la conception actuelle, avec des accélérations en multipôle rapide.

Ne peut pas être implémenté : géométries irrégulières pour lesquelles les formes analytiques des fonctions de Green des équations de Laplace et de Stokes ne peuvent pas être évaluées analytiquement et/ou particules de forme irrégulière sur les frontières desquelles des fonctions de base spectrales globalement définies ne sont pas disponibles.

Résumé : Les interactions hydrodynamiques et phorétiques entre les «particules actives» dans un fluide visqueux sont essentielles à la compréhension de leur dynamique collective. Dans des conditions expérimentalement pertinentes, le mouvement du fluide est régi par l'équation de Navier-Stokes et celui du champ phorétique, le cas échéant, par l'équation de Laplace. L'activité apparaît dans ces équations en tant que conditions aux limites sur les surfaces des particules qui prescrivent d'une part la vitesse de glissement dans l'équation de Navier-Stokes et d'autre part le flux du champ phorétique dans l'équation de Laplace. La vitesse de glissement et le flux phorétique sont liés par une loi de comportement linéaire qui peut être déduite d'une analyse détaillée de la physique de la couche limite. Les équations de Navier-Stokes et de Laplace sont couplées par cette loi de comportement linéaire uniquement aux limites des particules. La linéarité des équations de base et des conditions aux limites de couplage permet de résoudre formellement le problème de la détermination de la force par unité de surface sur les surfaces des particules. Cette solution formellement exacte peut être approchée à n'importe quel degré de précision souhaité par une extension en série tronquée dans une base complète de fonctions sur les limites des particules. Cela conduit à une méthode numérique efficace et précise pour le calcul des interactions hydrodynamiques et phorétiques entre particules actives. Le but de cet travail est de démontrer le pouvoir de la méthode numérique qui sera mise en œuvre grâce au langage Python, à travers six exemples entièrement codés simulant des phénomènes expérimentaux. Nous présenterons une bibliothèque modulaire permettant de calculer les interactions hydrodynamiques et phorétiques à plusieurs corps entre des particules actives sphériques en suspension, lorsque celles-ci sont données par des solutions des équations de Navier-Stokes et de Laplace. Le système peut être résolu de manière analytique en tant qu'expansion en série ou numériquement à un coût quadratique en nombre de particules. Des quantités à l'échelle de la suspension telles que le débit de fluide, la production d'entropie et la réponse rhéologique sont obtenues à un faible coût supplémentaire. L'utilisation de la bibliothèque est démontrée à l'aide de six exemples entièrement codés simulant des phénomènes actifs présentant un intérêt expérimental actuel.

Abstract: The hydrodynamic and phoretic interactions between "active particles" in a viscous fluid are essential to understanding their collective dynamics. Under experimentally relevant conditions, the movement of the fluid is governed by the Navier-Stokes equation and that of the phoretic field, where applicable, by the Laplace equation. The activity appears in these equations as boundary conditions on the surfaces of the particles which prescribe on the one hand the sliding speed in the Navier-Stokes equation and on the other hand the flux of the phoretic field in the equation by Laplace. The slip speed and the phoretic flux are linked by a linear constitutive law which can be deduced from a detailed analysis of the physics of the boundary layer. The Navier-Stokes and Laplace equations are coupled by this linear constitutive law only at the limits of the particles. The linearity of the basic equations and of the coupling boundary conditions makes it possible to formally solve the problem of determining the force per unit area on the surfaces of the particles. This formally exact solution can be approximated to any degree of precision desired by a truncated serial expansion into a full base of particle boundary functions. This leads to an efficient and precise numerical method for the calculation of the hydrodynamic and phoretic interactions between active particles. The goal of this work is to demonstrate the power of the numerical method which will be implemented thanks to the Python language, through six fully coded examples simulating experimental phenomena. We will present a modular library allowing to calculate the hydrodynamic and phoretic interactions with several bodies between spherical active particles in suspension, when these are given by solutions of the Navier-Stokes and Laplace equations. The library is based on a gridless methodology combining dimensionality reduction, spectral expansion and Ritz-Galerkin discretization, thus reducing the computation to the solution of a linear system. The system can be analytically solved as a serial expansion or numerically at a quadratic particle number cost. Slurry scale quantities such as fluid flow rate, entropy generation and rheological response are achieved at little additional cost. The library is boundary condition agnostic and includes, among other things, containment by flat walls or liquid-liquid interfaces. Use of the library is demonstrated using six fully coded examples simulating active phenomena of current experimental interest.

ملخص: تعتبر التفاعلات الهيدروديناميكية والحركية بين "الجسيمات النشطة" في السائل اللزج ضرورية لفهم ديناميكياتها الجماعية. في ظل الظروف ذات الصلة من الناحية التجريبية، تخضع حركة المائع لمعادلة نافيه-ستوكس وحركة المجال الحركي، عند الاقتضاء، بواسطة معادلة لابلاس. يظهر النشاط في هذه المعادلات كشرط حدودي على أسطح الجسيمات التي تصف من ناحية سرعة الانزلاق في معادلة نافيه-ستوكس ومن ناحية أخرى تدفق المجال الحركي في المعادلة بواسطة لابلاس. ترتبط سرعة الانزلاق والتدفق phoretic بقانون تأسيسي خطي يمكن استنتاجه من تحليل مفصل لفيزياء الطبقة الحدودية. تقتزن معادلات نافيه-ستوكس ولاپلاس بهذا القانون التأسيسي الخطي فقط عند حدود الجسيمات. إن خطية المعادلات الأساسية وشروط حدود الاقتران تجعل من الممكن رسميًا حل مشكلة تحديد القوة لكل وحدة مساحة على أسطح الجسيمات. يمكن تقريب هذا الحل الدقيق رسميًا إلى أي درجة من الدقة المطلوبة بواسطة امتداد تسلسلي متور إلى قاعدة كاملة لوظائف حدود الجسيمات. يؤدي هذا إلى طريقة عددية فعالة ودقيقة لحساب التفاعلات الهيدروديناميكية والحركية بين الجسيمات النشطة. الهدف من هذا العمل هو إظهار قوة الطريقة العددية التي سيتم تنفيذها بفضل لغة بايثون، من خلال ستة أمثلة مشفرة بالكامل تحاكي الظواهر التجريبية. سنقدم مكتبة معيارية تسمح بحساب التفاعلات الهيدروديناميكية والحركية متعددة الأجسام بين الجسيمات الكروية النشطة في التعليق، عندما يتم تقديمها بواسطة حلول معادلات Navier-Stokes و Laplace. تعتمد المكتبة على منهجية خالية من الشبكات تجمع بين تقليل الأبعاد والتوسع الطيفي وتقدير Ritz-Galerkin، وبالتالي تقليل الحساب إلى حل نظام خطي. يمكن حل النظام تحليليًا كتوسيع تسلسلي أو رقميًا بتكلفة تربيعية لرقم الجسيمات. يتم تحقيق كميات مقياس الطين مثل معدل تدفق السوائل وتوليد الانتروبيا والاستجابة الريولوجية بتكلفة إضافية قليلة. المكتبة حياضية الشروط الحدودية وتشمل، من بين أمور أخرى، الاحتواء بجدران مستوية أو واجهات سائلة-سائلة. تم توضيح استخدام المكتبة باستخدام ستة أمثلة مشفرة بالكامل تحاكي الظواهر النشطة ذات الاهتمام التجريبي الحالي.