
Étude mathématique et numérique d'un système couplé fluide-cinétique modélisant le transport d'un aérosol

Ayman Moussa

Laboratoire Jacques-Louis Lions, UPMC

Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

Problématique

Étude du transport d'un aérosol dans les voies supérieures du poumon (générations 0-15), motivée par l'aérosol thérapie :

- ☺ Utilisée depuis plusieurs décennies,
- ☺ Asthme, allergies, mucoviscidose ...
- ☹ Aspect « boîte noire »,
- ☹ Observation *in vivo* délicate.



Principales hypothèses

- Aérosol supposé monodispersé (particules sphériques de même rayon), interactions entre particules négligées.
- Fluide (air) supposé visqueux, newtonien, incompressible.
- Interaction fluide/aérosol **dans les deux sens** : modélisation de la force de traînée et de la rétroaction.
- Domaine éventuellement mobile.

Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

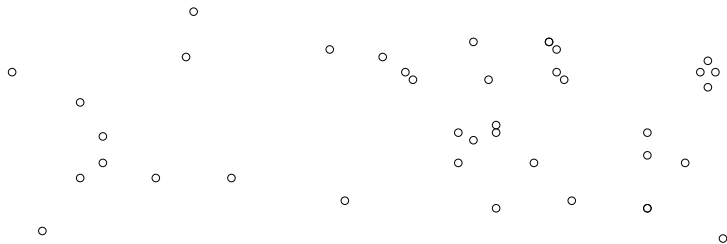
Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

L'aérosol

Aérosol : Ensemble de N particules (sans interactions) en suspension dans un fluide.



Modèle cinétique

Modèle **cinétique** : plutôt que de considérer un système différentiel de N particules on utilise une fonction de distribution,

$$f : \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \longrightarrow \mathbb{R}_+ \\ (t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) \longmapsto f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}),$$

t le temps, \mathbf{x} la position et $\boldsymbol{\xi}$ la vitesse.

En présence d'un champ d'accélération \mathbf{A}_{ext} , on a l'équation de Vlasov :

$$\partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\boldsymbol{\xi} f) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot (\mathbf{A}_{\text{ext}} f) = 0$$

Le couplage Vlasov/Navier-Stokes

- Air : densité ρ_{air} , vitesse $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$, pression $p(t, \mathbf{x})$...

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\rho_{\text{air}}} \nabla_{\mathbf{x}} p = \nu \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u} - \frac{1}{\rho_{\text{air}}} \int_{\xi} m \mathbf{A}_{\text{ext}} f \, d\xi \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \xi) + \nabla_{\xi} \cdot (f \mathbf{A}_{\text{ext}}) = 0 \end{array} \right.$$

Le couplage Vlasov/Navier-Stokes

- Air : densité ρ_{air} , vitesse $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$, pression $p(t, \mathbf{x})$...

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\rho_{\text{air}}} \nabla_{\mathbf{x}} p = \nu \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u} - \frac{1}{\rho_{\text{air}}} \int_{\xi} m \mathbf{A}_{\text{ext}} f \, d\xi \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \xi) + \nabla_{\xi} \cdot (f \mathbf{A}_{\text{ext}}) = 0 \end{array} \right.$$

- Accélération de traînée : $\mathbf{A}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}, \xi) = \frac{D}{r^2}(\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) - \xi)$, pour des particules de rayon r

Le couplage Vlasov/Navier-Stokes

- Air : densité ρ_{air} , vitesse $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$, pression $p(t, \mathbf{x})$...

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \frac{1}{\rho_{\text{air}}} \nabla_{\mathbf{x}} p = \nu \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u} - \frac{1}{\rho_{\text{air}}} \int_{\xi} m \mathbf{A}_{\text{ext}} f \, d\xi \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \xi) + \nabla_{\xi} \cdot (f \mathbf{A}_{\text{ext}}) = 0 \end{array} \right.$$

- Accélération de traînée : $\mathbf{A}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}, \xi) = \frac{D}{r^2}(\mathbf{u}(t, \mathbf{x}) - \xi)$, pour des particules de rayon r
- Coefficient D déterminé par une loi semi-empirique.

Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

Fluide

LifeV, solveur C++ EF développé dans le cadre du projet REO, résout (entre autres) les équations de Navier-Stokes.

Si $f_0(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) \simeq \sum_{p=1}^N \omega_p \delta_{\mathbf{x}_p^0}(\mathbf{x}) \delta_{\boldsymbol{\xi}_p^0}(\boldsymbol{\xi})$, alors l'unique solution initiée par f_0 de l'équation de Vlasov :

$$\partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\boldsymbol{\xi} f) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot (\mathbf{A}_{\text{ext}} f) = 0$$

est la mesure :

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) \simeq \sum_{p=1}^N \omega_p \delta_{\mathbf{x}_p(t)}(\mathbf{x}) \delta_{\boldsymbol{\xi}_p(t)}(\boldsymbol{\xi}),$$

où $(\mathbf{x}_p(t), \boldsymbol{\xi}_p(t))$ est la courbe caractéristique issue de $(\mathbf{x}_p^0, \boldsymbol{\xi}_p^0)$.

Méthode particulaire

$$f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) \simeq \sum_{p=1}^N \omega_p \delta_{\mathbf{x}_p(t)}(\mathbf{x}) \delta_{\boldsymbol{\xi}_p(t)}(\boldsymbol{\xi})$$

- N (nombre de particules numériques) \ll nombre de particules physiques,
- $t \mapsto (\mathbf{x}_p(t), \boldsymbol{\xi}_p(t))$ trajectoire de la particule p dans l'espace des phases,
- ω_p poids numérique de la particule p .

Localisation, interpolation

Fluide : valeurs nodales. Il faut donner un sens à :

$$\mathbf{A}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}_p(t), \boldsymbol{\xi}_p(t)) := \frac{D}{r^2}(\mathbf{u}(t, \mathbf{x}_p(t)) - \boldsymbol{\xi}_p(t))$$

→ Nécessité d'un algorithme de localisation d'un point dans le maillage

Localisation, interpolation

Fluide : valeurs nodales. Il faut donner un sens à :

$$\mathbf{A}_{\text{ext}}(t, \mathbf{x}_p(t), \boldsymbol{\xi}_p(t)) := \frac{D}{r^2}(\mathbf{u}(t, \mathbf{x}_p(t)) - \boldsymbol{\xi}_p(t))$$

- Nécessité d'un algorithme de localisation d'un point dans le maillage
- Interpolation linéaire aux nœuds

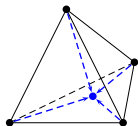
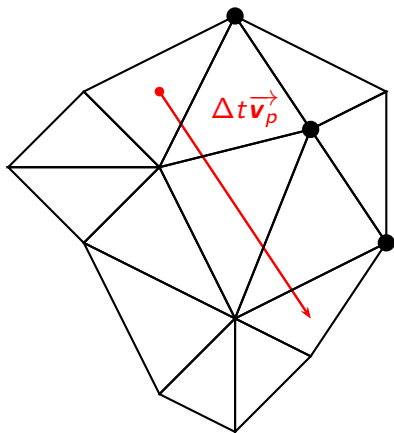


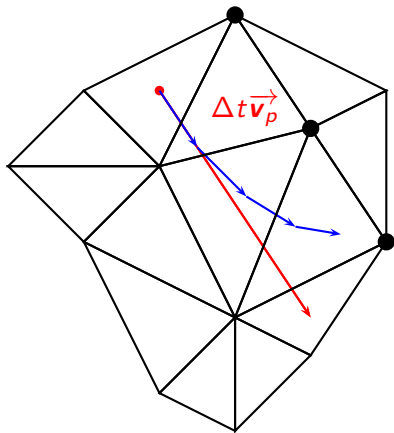
FIGURE: Interpolation de la vitesse aux nœuds

Sous-boucle en temps pour les particules



Δt : pas de temps fluide

Sous-boucle en temps pour les particules

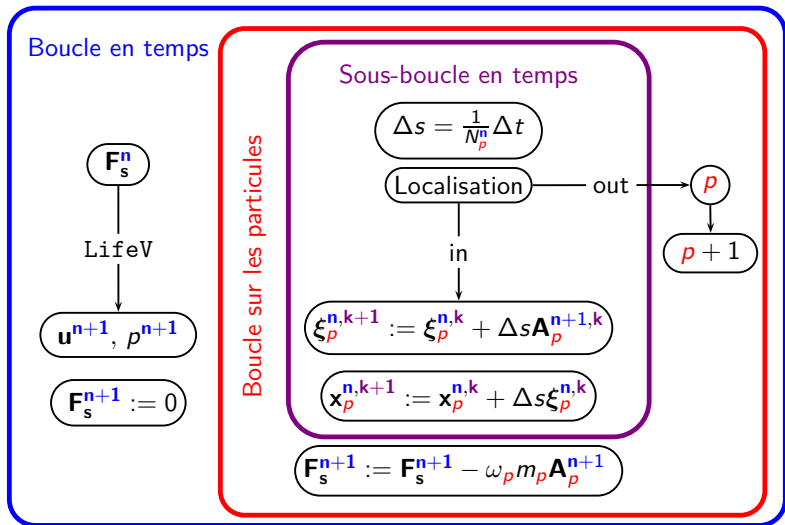


Δt : pas de temps fluide

$$\Delta s := \frac{1}{N_p} \Delta t$$

$\Delta s \vec{v}_p^k$ successifs

Algorithme



Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

Domaine mobile

ALE : Avec Marcel Filoche : l'aspect mobile augmente-t-il la capture sur des géométries particulières ?

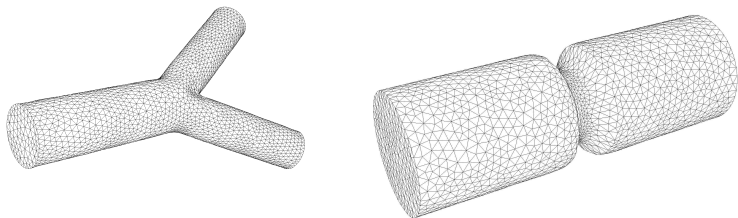


FIGURE: Bifurcation, tube avec constriction. Maillages réalisés par M. Grasseau

Tube avec constriction

- Paradigme d'une déformation de cylindre (paroi des bronches non régulière)

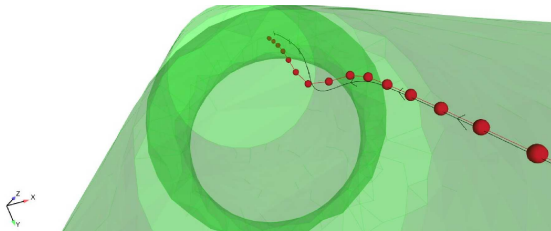


FIGURE: Trajectoire et ligne de courant

Tube avec constriction

- Paradigme d'une déformation de cylindre (paroi des bronches non régulière)
- Injection des particules avec la vitesse du fluide

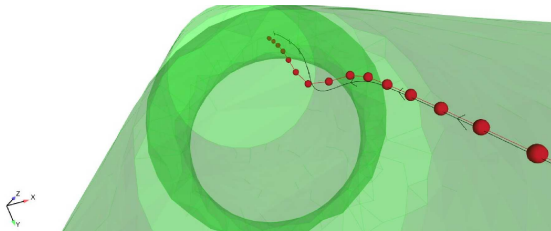


FIGURE: Trajectoire et ligne de courant

Tube avec constriction

- Paradigme d'une déformation de cylindre (paroi des bronches non régulière)
- Injection des particules avec la vitesse du fluide
- Régime sinusoïdal pour l'air

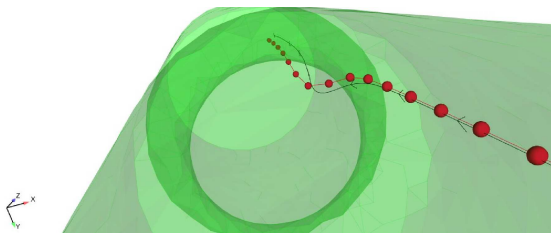


FIGURE: Trajectoire et ligne de courant

Tube avec constriction

- Paradigme d'une déformation de cylindre (paroi des bronches non régulière)
- Injection des particules avec la vitesse du fluide
- Régime sinusoïdal pour l'air
- Disposition près du bord en entrée

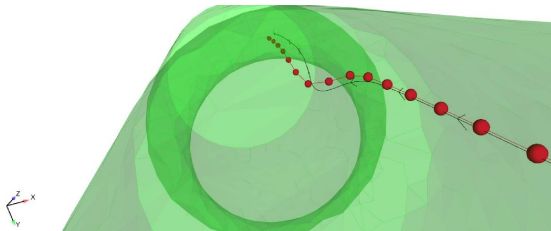
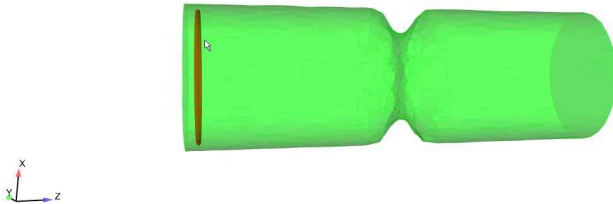


FIGURE: Trajectoire et ligne de courant

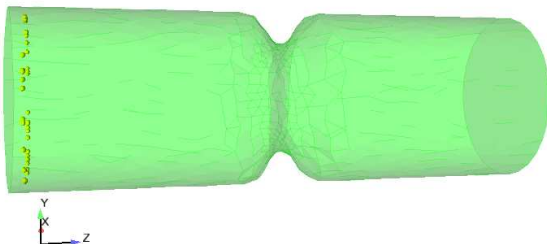
Injection régulière

Particules de rayon $30\ \mu\text{m}$, 10% d'amplitude pour l'oscillation de la paroi.



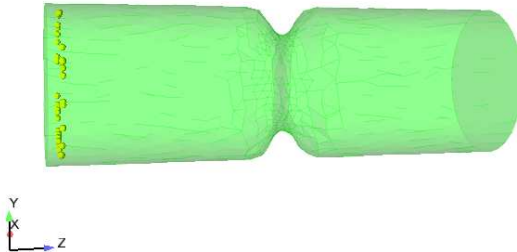
Différents instants d'injections

Particules plus fines ($10\ \mu\text{m}$), mais amplitude de 25% et fluide plus rapide, domaine fixe.



Différents instants d'injections

Même particules, même positions, domaine mobile.



Plan de la présentation

① Contexte

② Un modèle fluide-cinétique

③ Simulation numérique

Approximation numérique

Simulations en domaine mobile

④ Analyse mathématique

Cadre d'étude

- Étude du système en dimension 3.
- Conditions périodiques en espace (sur le tore \mathbb{T}^3).
- On prend $\rho_{\text{air}} = 1$, $D = r$, $m = 1$, $\nu = 1$ et on introduit l'espace $\mathbb{L} = L^1_{\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}}((1 + |\boldsymbol{\xi}|^2) \, d\mathbf{x} \, d\boldsymbol{\xi})$.

Résultat

Théorème (DIE 2009) *L. Boudin, L. Desvillettes, C. Grandmont, A.M.*

Si $f_{\text{in}} \in L_{\mathbf{x}, \xi}^{\infty} \cap \mathbb{L}$, $\mathbf{u}_{\text{in}} \in H_{\text{div}}^1$, alors il existe un couple de solutions faibles, périodiques en espace, au système Vlasov/Navier-Stokes incompressible, et ces solutions vérifient

Résultat

Théorème (DIE 2009) *L. Boudin, L. Desvillettes, C. Grandmont, A.M.*

Si $f_{\text{in}} \in L_{\mathbf{x},\xi}^{\infty} \cap \mathbb{L}$, $\mathbf{u}_{\text{in}} \in H_{\text{div}}^1$, alors il existe un couple de solutions faibles, périodiques en espace, au système Vlasov/Navier-Stokes incompressible, et ces solutions vérifient

- $f \in L_{t,\mathbf{x},\xi}^{\infty} \cap L_t^{\infty}(\mathbb{L})$,
- $\mathbf{u} \in L_t^{\infty}(L_{\mathbf{x}}^2) \cap L_t^2(H_{\text{div}_{\mathbf{x}}}^1) \cap \mathcal{C}_t(H_{\text{div}_{\mathbf{x}}}^{-1})$,
- principe du maximum pour f ,
- estimation d'énergie pour le système total.

Système et estimation formelle

$$(VNS) \begin{cases} \partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\boldsymbol{\xi} f) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot [(\mathbf{u} - \boldsymbol{\xi}) f] = 0, \\ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} p - \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u} = \int_{\mathbb{R}^3} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) f d\boldsymbol{\xi}, \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}) = 0. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|\mathbf{u}\|_{L^2(\mathbb{T}^3)}^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3} f(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) |\boldsymbol{\xi}|^2 d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{x} \\ + \|\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}\|_{L^2(\mathbb{T}^3)}^2 + \int_{\mathbb{T}^3 \times \mathbb{R}^3} f |\mathbf{u} - \boldsymbol{\xi}|^2 d\boldsymbol{\xi} d\mathbf{x} = 0. \end{aligned}$$

Le système VNS approché

On perturbe le système précédent :

$$(VNS) \begin{cases} \partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \boldsymbol{\xi}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot ((\mathbf{u} - \boldsymbol{\xi})f) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{x}} \rho = \int_{\mathbb{R}^3} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) f d\boldsymbol{\xi} + \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}) = 0. \end{cases}$$

Le système VNS approché

On perturbe le système précédent :

$$(VNSA) \begin{cases} \partial_t f + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f \boldsymbol{\xi}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot ((\mathbf{u} \star \boldsymbol{\varphi} - \boldsymbol{\xi})f) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \star \boldsymbol{\varphi} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \boldsymbol{\beta}(\mathbf{u}) + \nabla_{\mathbf{x}} p = \int_{\mathbb{R}^3} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}) f \boldsymbol{\gamma}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} + \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u} \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}) = 0. \end{cases}$$

Construction d'une suite convergente

On utilise le schéma :

$$(VNSA_n) \begin{cases} \partial_t f^n + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f^n \boldsymbol{\xi}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot ((\mathbf{u}^n \star \varphi - \boldsymbol{\xi}) f^n) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u}^{n+1} + (\mathbf{u}^n \star \varphi \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \beta(\mathbf{u}^n) + \nabla_{\mathbf{x}} p^{n+1} = \mathbf{F}_s^{\gamma, n} + \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{n+1} \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \end{cases}$$

Construction d'une suite convergente

On utilise le schéma :

$$(VNSA_n) \begin{cases} \partial_t f^n + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f^n \boldsymbol{\xi}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot ((\mathbf{u}^n \star \varphi - \boldsymbol{\xi}) f^n) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u}^{n+1} + (\mathbf{u}^n \star \varphi \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \beta(\mathbf{u}^n) + \nabla_{\mathbf{x}} p^{n+1} = \mathbf{F}_s^{\gamma, n} + \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{n+1} \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \end{cases}$$

- $\mathbf{u}^0 := (\mathbf{u}_0 \star \theta)$

Construction d'une suite convergente

On utilise le schéma :

$$(VNSA_n) \begin{cases} \partial_t f^n + \nabla_x \cdot (f^n \xi) + \nabla_\xi \cdot ((\mathbf{u}^n \star \varphi - \xi) f^n) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u}^{n+1} + (\mathbf{u}^n \star \varphi \cdot \nabla_x) \beta(\mathbf{u}^n) + \nabla_x p^{n+1} = \mathbf{F}_s^{\gamma, n} + \Delta_x \mathbf{u}^{n+1} \\ \operatorname{div}_x(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \end{cases}$$

- $\mathbf{u}^0 := (\mathbf{u}_0 \star \theta)$
- f^n obtenue par la méthode des caractéristiques

Construction d'une suite convergente

On utilise le schéma :

$$(VNSA_n) \begin{cases} \partial_t f^n + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f^n \boldsymbol{\xi}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot ((\mathbf{u}^n \star \varphi - \boldsymbol{\xi}) f^n) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u}^{n+1} + (\mathbf{u}^n \star \varphi \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \beta(\mathbf{u}^n) + \nabla_{\mathbf{x}} p^{n+1} = \mathbf{F}_s^{\gamma, n} + \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{n+1} \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \end{cases}$$

- $\mathbf{u}^0 := (\mathbf{u}_0 \star \theta)$
- f^n obtenue par la méthode des caractéristiques
- $\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}$ par la résolution de Stokes

Construction d'une suite convergente

On utilise le schéma :

$$(VNSA_n) \begin{cases} \partial_t f^n + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (f^n \boldsymbol{\xi}) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}} \cdot ((\mathbf{u}^n \star \varphi - \boldsymbol{\xi}) f^n) = 0 \\ \partial_t \mathbf{u}^{n+1} + (\mathbf{u}^n \star \varphi \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) \beta(\mathbf{u}^n) + \nabla_{\mathbf{x}} p^{n+1} = \mathbf{F}_s^{\gamma, n} + \Delta_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{n+1} \\ \operatorname{div}_{\mathbf{x}}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \end{cases}$$

- $\mathbf{u}^0 := (\mathbf{u}_0 \star \theta)$
- f^n obtenue par la méthode des caractéristiques
- $\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}$ par la résolution de Stokes

⇒ Existence de (\mathbf{u}^n, f^n) pour tout n , solutions *régulières*

Un lemme technique classique

Lemme

Soit $(a_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de fonctions continues et positives définies sur $[0, T]$ vérifiant

$$a_{n+1}(t) \leq C_1 + C_2 \int_0^t a_n(s) ds + C_3 \int_0^t a_{n+1}(s) ds.$$

Alors il existe une constante K telle que $a_n(t) \leq Ke^{Kt}$. Si $C_1 = 0$, on a même $a_n(t) \leq K^n t^n / n!$.

Merci de votre attention !