

Une équation de coagulation

1 Modélisation

1.1 Equation de Smoluchowski complète

On considère un ensemble de particules de masse $1, 2, 3, \dots$ ou tout autre masse entière. On note $u_i(t)$ le nombre de particules de masse $i \in \mathbb{N}^*$ au temps t . On suppose que deux particules de tailles respectives i et j ont une probabilité proportionnelle à $a(i, j)$ de fusionner en une particule de masse $i + j$. Notons qu'il est naturel de supposer $a(i, j) = a(j, i)$. La variation de u_n est donnée par la fusion de particules de taille i et j avec $i + j = n$ et par la disparition de particules de taille n suite à une fusion avec une autre particule. On obtient donc l'équation suivante appelée équation de Smoluchowski :

$$\forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \partial_t u_n(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} a(i, n-i) u_i(t) u_{n-i}(t) - u_n(t) \sum_{i=1}^{\infty} a(i, n) u_i(t), \quad (1)$$

avec $u_n(0) = u_n^0$ donné. On s'intéresse bien sûr au cas physique où $u_n(t)$ est positif ou nul pour tous n et t . Une constatation triviale est que si $(u_n)(0)$ ne contient que des masses multiples de k , alors $(u_n)(t)$ ne contient que des masses multiples de k . De même, il est clair qu'on ne peut créer de masses plus petites que la plus petite des masses initiales.

Suivant le modèle considéré, plusieurs types de noyaux a peuvent être utilisés. Par exemple, considérons une solution remplie de polymères qui sont de longues molécules filiformes. L'indice n correspond à la longueur de la chaîne polymère (i.e. du nombre de monomères dont elle est formée). On peut considérer que la probabilité de fusion de deux chaînes polymères est proportionnel à leur probabilité de rencontre, elle-même proportionnelle à la somme des longueurs. On aurait donc $a(i, j) = i + j$.

1.2 Modélisation de la pluie

Dans le cas de gouttes d'eau en chute libre, on sait qu'une goutte de masse i tombe avec une vitesse proportionnelle à $i^{1/3}$. En effet, la force de frottement de l'air s'opposant à la force de gravité est proportionnelle au produit de la surface de frottement et de la vitesse. Dans un instant dt , une particule de masse i fusionnera avec une particule de masse j si elles se rattrapent dans l'axe vertical (distance au plus $|i^{1/3} - j^{1/3}|dt$) et si elles se superposent sur le plan horizontal (distance au plus $i^{1/3} + j^{1/3}$). Au total, on délimite ainsi un volume de choc

proportionnel à $a(i, j)dt = (i^{1/3} + j^{1/3})^2|i^{1/3} - j^{1/3}|dt$. En outre, la taille des gouttes d'eau est limitée : si elles sont trop grandes, la vitesse les explose en plus petites gouttes. Pour modéliser cela, nous supposons qu'il existe un volume maximum N pour les gouttes et que $a(i, j) = 0$ si $i + j > N$. On obtient donc l'équation

$$\forall n = 1, \dots, N, \quad \partial_t u_n(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} a(i, n-i) u_i(t) u_{n-i}(t) - u_n(t) \sum_{i=1}^{N-n} a(i, n) u_i(t), \quad (2)$$

avec $a(i, j) = (i^{1/3} + j^{1/3})^2|i^{1/3} - j^{1/3}|$.

2 Existence de solutions dans le cas a borné

On cherche à montrer l'existence et l'unicité des solutions de (1). On supposera pour cela dans toute cette partie qu'il existe $M > 0$ tel que $a(i, j) \leq M$ pour tous i et j . On note U la suite $(u_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$. On introduit $X = \ell^1(\mathbb{N}^*)$ l'ensemble des suites $U = (u_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ telles que $\sum_{n \geq 1} |u_n|$ est finie. On munit X de la norme $\|U\| = \sum |u_n|$. On note X_+ le fermé de X composé des suites U telles que $u_n \geq 0$ pour tout n .

On peut tout d'abord constater que le nombre total de particules décroît en temps.

Proposition 2.1. *Si $U(t)$ est une solution de (1) sur un intervalle $[0, T[$ telle que $U \in X_+$ pour tout t , alors $\|U\|(t) = \sum_{n \geq 1} u_n(t)$ est une fonction décroissante du temps.*

Démonstration : Tout d'abord, on démontre que si a est borné et si la suite $U(t) = (u_n(t))_{n \in \mathbb{N}^*}$ est positive et sommable, alors les séries

$$\sum_{n \geq 1} \left(\sum_{i=1}^{n-1} a(i, n-i) u_i u_{n-i} \right) \quad \text{et} \quad \sum_{n \geq 1} \left(u_n \sum_{i \geq 1} a(n, i) u_i \right)$$

sont absolument convergentes. Cela permet de justifier le calcul suivant.

$$\begin{aligned} \partial_t \|U\|(t) &= \sum_{n \geq 1} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} a(i, n-i) u_i u_{n-i} - u_n \sum_{i \geq 1} a(n, i) u_i \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n \geq 1} \sum_{i=1}^{n-1} a(i, n-i) u_i u_{n-i} - \sum_{n \geq 1} u_n \sum_{i \geq 1} a(n, i) u_i \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \geq 1} \sum_{n=i+1}^{+\infty} a(i, n-i) u_i u_{n-i} - \sum_{n \geq 1} \sum_{i \geq 1} a(n, i) u_i u_n \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n \geq 1} \sum_{i \geq 1} a(n, i) u_i u_n \end{aligned} \quad (3)$$

□

On en déduit l'existence de solutions physique globale en temps.

Théorème 2.1. *Pour tout $U^0 \in X_+$, il existe une unique solution globale $(U(t))_{t \geq 0}$ de (1) dans X vérifiant $U(0) = U^0$. Cette solution est en outre bornée dans X et appartient à X_+ pour tout $t \geq 0$.*

Démonstration : Soit $U^0 \in X_+$. On écrit (1) sous la forme $\partial_t U(t) = F(U(t))$ avec F une fonction de X dans X . On montre facilement que F est lipschitzienne sur le borné $B = \{V \in X, \|V\| \leq 2\|U^0\|\}$. Par le théorème de Cauchy-Lipschitz, il existe donc un temps $\varepsilon > 0$ tel que pour tout $V^0 \in B' = \{V \in X, \|V\| \leq \|U^0\|\}$, il existe une unique solution locale $V(t)$ sur $[0, \varepsilon[$ de (1) vérifiant $V(0) = V^0$. On obtient en particulier l'existence d'une unique solution locale $U(t)$ sur $[0, \varepsilon[$ de (1) vérifiant $U(0) = U^0$.

On constate qu'à n fixé, $u_n(t)$ vérifie une équation différentielle de la forme $\partial_t u_n(t) = a(t) - b(t)u_n(t)$, dont la solution s'écrit

$$u_n(t) = u_n(0)e^{-\int_0^t b(s)ds} + \int_0^t e^{-\int_\tau^t b(s)ds} a(\tau)d\tau. \quad (4)$$

On en déduit que $u_n(t) \geq 0$ pour tout $t \in [0, \varepsilon]$ et donc que $U(t) \in X_+$. D'après la proposition 2.1, la norme de $U(t)$ décroît en temps et la solution locale reste donc dans B' . En choisissant $V^0 = U(\varepsilon/2)$ et en appliquant le théorème de Cauchy-Lipschitz, on peut prolonger notre solution sur l'intervalle $[0, 3/2\varepsilon[$ puis sur $[0, 2\varepsilon[$ et ainsi de suite sur tout \mathbb{R} . \square

Remarque : Dans le cas de (2), on peut refaire les mêmes arguments dans l'espace \mathbb{R}^N en voyant (2) comme une simple équation différentielle ordinaire.

3 Conservation de la masse et gélation

Suivant la logique de la modélisation conduisant à (1), la masse totale des particules

$$m(t) = \sum_{n \geq 1} nu_n(t)$$

devrait être une quantité constante au cours du temps. Formellement, on peut conduire le calcul suivant.

$$\begin{aligned} \partial_t m(t) &= \sum_{n \geq 1} n \partial_t u_n(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n \geq 1} \sum_{i=1}^{n-1} na(i, n-i)u_i(t)u_{n-i}(t) - \sum_{n \geq 1} \sum_{i \geq 1} na(i, n)u_i(t)u_n(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \geq 1} \sum_{n=i+1}^{+\infty} na(i, n-i)u_i(t)u_{n-i}(t) - \sum_{n \geq 1} \sum_{i \geq 1} na(i, n)u_i(t)u_n(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \geq 1} \sum_{k \geq 1} (k+i)a(i, k)u_i(t)u_k(t) - \sum_{n \geq 1} \sum_{i \geq 1} na(i, n)u_i(t)u_n(t) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i \geq 1} \sum_{k \geq 1} ka(i, k)u_i(t)u_k(t) + \frac{1}{2} \sum_{i \geq 1} \sum_{k \geq 1} ia(i, k)u_i(t)u_k(t) - \sum_{n \geq 1} \sum_{i \geq 1} na(i, n)u_i(t)u_n(t) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Bien évidemment, dans le cas du modèle des gouttes de pluie, les calculs précédents sont corrects et la masse totale des gouttes est conservée. Malheureusement, nous ne pouvons justifier rigoureusement les sommations dans le cas général. En refaisant le même calcul pour la masse partielle, on peut au moins avoir un résultat rigoureux.

Proposition 3.1. *Pour tout $n \geq 1$, la masse partielle $m_n(t) = \sum_{k=1}^n ku_k(t)$ est une fonction décroissante du temps. En conséquence, si $m(0)$ existe, alors $m(t)$ existe pour tout $t \geq 0$ et c'est une fonction décroissante du temps. Si $a(i, j) > 0$ pour tout i et j , alors $u_n(t)$ tend vers 0 quand t tend vers $+\infty$.*

Démonstration : On peut mener un calcul rigoureux donnant

$$\partial_t m_n(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-i} ka(i, k)u_i(t)u_k(t) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-i} ia(i, k)u_i(t)u_k(t) - \sum_{k=1}^n \sum_{i \geq 1} ka(i, k)u_i(t)u_k(t) .$$

On en déduit que $m_n(t)$ décroît en temps. Donc si $m(0)$ est bien définie, alors on peut borner les masses partielles $m_n(t)$ et obtenir à la limite que $m(t)$ existe et est plus petit que $m(0)$. En outre, si $a(i, j) > 0$ pour tout i et j alors $m_n(+\infty) = 0$ est la seule limite possible pour $m_n(t)$. \square

Contrairement à l'intuition, on peut trouver des cas où la masse n'est pas conservée. Pour cela il suffit de prendre $a(i, j) = ij$ (on admettra l'existence de solutions positives pour ce noyau a).

Proposition 3.2. *Si $a(i, j) = ij$ alors $m(t) \leq \sqrt{2\|U(0)\|/t}$.*

Démonstration : D'après (3), on a

$$\|U(t)\| - \|U(0)\| = -\frac{1}{2} \int_0^t m(s)^2 ds .$$

Comme $m(t)$ décroît, on trouve $tm(t)^2 \leq 2\|U(0)\|$. \square

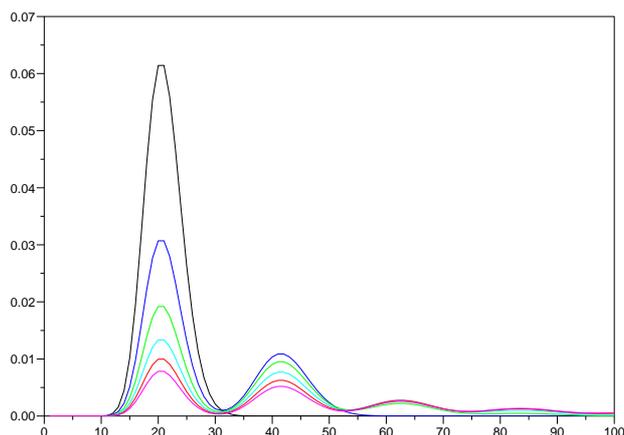
Ce phénomène est appelé gélation. Il correspond à l'apparition en temps fini de particules de masse infinie. Bien sûr, ceci n'est pas très physique, mais on peut l'interpréter d'un point de vue de la modélisation comme l'apparition en temps fini de particules assez grosses pour que le modèle utilisé ne soit plus valide (passage du microscopique au macroscopique par exemple).

4 Simulation numérique

On souhaite réaliser une simulation numérique de (1). Pour cela, on envisage un schéma d'Euler. Cela conduit à considérer en fait la version en temps discret de l'équation de Smoluchowski.

$$u_n(k+1) = u_n(k) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n-1} a(i, n-i)u_i(k)u_{n-i}(k) - u_n(k) \sum_{i=1}^{\infty} a(i, n)u_i(k) . \quad (5)$$

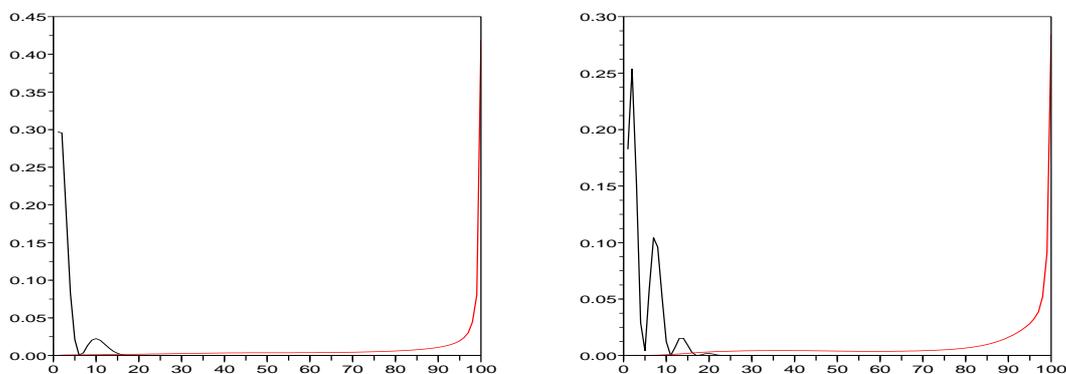
On note que si a est trop grand (ie le pas de temps pas assez petit), alors u_n peut devenir négatif ce qui peut déstabiliser le schéma et faire exploser rapidement la solution. Si on fait en sorte que $\sum_{i \geq 1} a(i, n)u_i(k)$ reste plus petit que 1, alors $u_n(k)$ reste toujours positif pour tout n et k . La simulation de (5) donne le résultat suivant.



On note que si la donnée initiale est concentrée autour de m_0 , des pics autour des multiples de m_0 apparaissent.

La discrétisation (5) de (1) est toutefois discutable pour plusieurs raisons. On notera en particulier que l'information se propage à vitesse finie dans (5) et donc que le phénomène de gélation n'a aucune chance d'être observé.

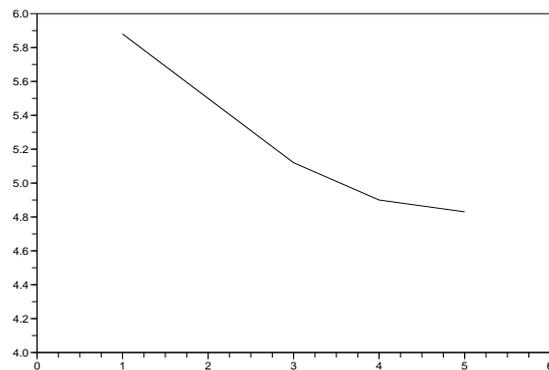
On réalise maintenant des simulations numériques pour le modèle de formation des gouttes de pluie (2). On s'intéresse à la répartition finale des gouttes en fonction de la répartition initiale. La forme de la pluie dépend-elle des conditions initiales dans le nuage ? On représente ci-dessous deux répartitions finales de la masse (i.e. le graph de nu_n) pour deux répartitions initiales différentes.



On note qu'après un temps assez long, la répartition des gouttes ne dépend plus réellement de la répartition initiale.

On cherche maintenant à savoir si la vitesse de formation des grosses gouttes dépend beaucoup de la taille des gouttelettes initiales. Pour cela on simule le modèle (2) avec $N = 100$. Pour un $i \geq 1$ donné, on répartit la masse initiale en gouttes de taille i et $i + 1$ et on cherche le temps $t(i)$ à partir duquel la moitié de la masse consiste en gouttes de taille supérieure à 95. On obtient le tableau suivant.

i	1	2	3	4	5
$t(i)$	5,88	5,5	5,12	4,9	4,83



Il semble que la vitesse de formation des gouttes dépend exponentiellement de la taille des gouttes initiales mais varie finalement assez peu si la taille de départ est petite.

Suggestions de développement :

- Ecrire une version continue de l'équation de Smoluchowski où u dépend d'une masse $x \in \mathbb{R}_+^*$.
- Critiquer le modèle de la partie 1.2. Proposer un modèle où les gouttes trop grandes se scindent en particules de tailles plus petites, par exemple en explosant en n gouttes de masse 1.
- Détailler les arguments de la partie 2 prouvant l'existence de solutions à (1). On pourra dans un premier temps se limiter au cas de l'équation différentielle ordinaire (2).
- Détailler les arguments de la partie 3. Que se passe-t-il dans le cas du modèle (2) ?
- Observer numériquement les masses totales et partielles.