Avant-propos

La Nature est complexe, il faut s'y faire. L'élaboration d'un concept ou d'une théorie peut être réalisée à partir d'expériences reproductibles, de principes établis, d'expériences de pensée cohérentes, etc. Cette théorie est ensuite soumise à des vérifications, le plus souvent expérimentales, répétées qui permettront de valider ou non l'ensemble des hypothèses, postulats, et principes de celle-ci. La plupart des faits marquants de l'histoire des sciences ont été compris par leurs auteurs avant d'être formalisés sous la forme d'équations ; ces dernières peuvent être modifiées au cours du temps en fonction des progrès en mathématiques. C'est vrai pour la loi de la dynamique de Newton qui a pris la forme que l'on connaît aujourd'hui grâce à Euler.

Certains phénomènes échappent encore à une compréhension complète, c'est le cas de la turbulence ; il est impossible de décrire précisément *a priori* les mécanismes d'interactions des tourbillons, la dissipation ou la production qui leur est associée. Aujourd'hui seule la simulation permet, pour des cas relativement accessibles, d'accéder à toutes les échelles de la turbulence et d'analyser finement le comportement physique de l'écoulement. Cela n'est possible que grâce aux équations de la mécanique des fluides issues de la seconde loi de Newton. Cette vision peut être érigée en méthode : on dérive une équation que l'on valide sur des cas simples et on résout cette équation pour explorer le comportement de phénomènes plus complexes. Par une suite de simulations et d'explorations le modèle est ainsi affiné et la compréhension du phénomène s'améliore à son tour. L'équation devient alors plus « intelligente » que son auteur.

Pour la mécanique, la loi de la dynamique ou sa version actuelle, l'équation du mouvement reste pourtant un mystère, elle recèle encore bien des surprises à qui l'observe attentivement. Elle permet de décrire le comportement d'un grand nombre de problèmes de fluides, de solides ou d'ondes. Toutefois, l'unification n'est pas encore réalisée, par exemple les formulations en solide et en fluide ne sont pas les mêmes alors que la mécanique des milieux continus est censée en assurer la cohérence. Les équations de la mécanique des milieux continus recèlent un certain nombre de défauts structurels mis en évidence dans cet ouvrage ; les causes en sont multiples mais la principale porte sur la notion même de milieu continu. Les résultats obtenus ne sont pas à remettre en cause globalement, ils sont conformes aux observations expérimentales ; toutefois certains défauts sont couverts par la redondance de principes ou de lois.

La mécanique discrète abandonne la notion de milieu continu, le principe d'équilibre thermodynamique local, l'utilisation de lois d'état et de lois de comportement, l'utilisation de tenseurs du second ordre, la dérivation en un point, l'analyse, etc. À partir des idées de Galilée, le principe d'équivalence et la notion de relativité, l'approche discrète de la mécanique définit une base géométrique de l'espace qui ne peut être réduite en un point. Un ensemble d'hypothèses, de postulats et de principes permettent d'établir une équation du mouvement discrète.

Introduction

Les lois de la physique ont été généralement été élaborées à partir d'observations expérimentales et de relations simples proposées pour les décrire ; par exemple la linéarité supposée entre les flux et les forces établie comme un concept général en thermodynamique. La relation choisie, il faut définir le coefficient de proportionnalité adopté comme une propriété physique intrinsèque alors qu'elle dépend directement de la loi proposée ainsi que des variables du problème. L'adoption de lois simplistes introduit des incohérences lors de la généralisation à des intervalles de paramètres plus larges que ceux étudiés initialement. Heureusement, la complexité des comportements physiques observés permet de retrouver la cohérence nécessaire pour couvrir un large spectre de l'espace des paramètres. Par exemple, pourquoi introduire une loi de gaz parfait entre des variables, alors que seuls les coefficients thermodynamiques ont une réelle signification, si ce n'est que par commodité ?

Les lois de la mécanique sont parmi les plus anciennes ; Galileo Galilei, Issac Newton et Albert Einstein ont marqué de leurs immenses empreintes, à différentes époques, la compréhension de notre univers. Les notions de force, de masse et d'accélération associées dans la seconde loi de Newton sont encore celles de la mécanique actuelle. De nombreux physiciens, mathématiciens, ingénieurs se sont succédés au cours de ces trois derniers siècles pour finaliser des lois, des équations qui sont considérées comme immuables. Léonard Euler, Maurice Couette, Daniel Bernoulli, Ernst Mach, George Gabriel Stokes, Henri Navier, Clifford Truesdell et bien d'autres ont contribué à la formalisation des lois de la mécanique dans une structure mathématique moderne. Des ouvrages consacrés à des approches épistémologiques permettent en partie de comprendre les liens entre les différentes théories et quelquefois les interactions directes entre ces personnalités. Le cheminement de la pensée au cours du temps paraît naturel et cohérent lorsque l'on examine la forme des lois, de la mécanique classique à la mécanique relativiste. Il nous manque parfois la genèse des idées émises par chacun, surtout à des époques où la publication n'était pas la règle et où la religion et le pouvoir interféraient sur la diffusion des nouvelles théories. Tous ces travaux ont conduit à des équations de la mécanique qui sont figées depuis des décennies voire des siècles ; elles permettent aujourd'hui de simuler de manière très réaliste les mouvements de toute nature dans les solides, les fluides, la propagation des ondes, etc. En revanche, elles sont différentes même si la mécanique des milieux continus est censée unifier la représentation des phénomènes physiques dans un même corpus d'équations.

Comment aurions-nous envisagé d'établir les lois de la mécanique à partir des seules observations historiques ? L'objectif de cet ouvrage est de tenter de répondre à cette question. Le point de départ est lié à la question suivante : alors qu'il connaissait l'équivalence entre la masse associée à l'inertie et celle associée à la gravité, pourquoi Isaac Newton a-t-il établi sa loi fondamentale de la dynamique comme une égalité de forces ? Ce principe d'équivalence est l'une des pierres angulaires de la théorie de la relativité générale d'Albert Einstein. La mécanique discrète est fondée sur ce principe, en éliminant la masse qui ne joue aucun rôle en dynamique pour écrire une égalité entre accélérations. Pour autant, les notions de masse en mouvement et de masse au repos qui sont au cœur de la mécanique relativiste décrivent évidemment l'équivalence entre masse et énergie. La loi fondamentale de la dynamique est ainsi formulée comme une égalité entre l'accélération d'une particule et la somme des accélérations appliquées sur elle.

La notion d'accélération possède un caractère intrinsèque que n'a pas celle de vitesse ; ainsi on peut appliquer une accélération absolue alors que la vitesse absolue d'un corps n'est pas connue. Pour l'obtenir il faudrait considérer un repère galiléen ou inertiel, c'est la voie classique. Il faut se faire une raison et abandonner toute velléité d'appréhender cette notion de vitesse absolue et comme pour les expériences de pensée du siècle dernier, des histoires de train et de chef de gare ou bien encore d'ascenseurs, et remarquer que nous ne pouvons détecter de mouvements uniformes. L'accélération est en revanche mesurée aujourd'hui avec une très grande précision qui conforte de plus en plus l'égalité des masses comme un véritable principe.

La notion de milieu continu est aussi abandonnée ; le calcul différentiel et la dérivation introduits par Gottfried Wilhelm Leibniz et par Isaac Newton lui-même ont permis d'écrire les lois de la mécanique sous la forme différentielle que nous connaissons aujourd'hui. Cette réduction de toutes les variables en un point nécessite en effet de construire un référentiel galiléen pour permettre le calcul des dérivées suivant les directions de l'espace considéré. L'abandon du concept de milieu continu induit donc celui de la dérivation et de l'intégration classiques. Cela n'empêche pas de réduire une topologie discrète de manière homothétique jusqu'à des ordres de grandeur géométriques compatibles avec une vision macroscopique de la matière. Les opérations de dérivation et d'intégration sont remplacées par des opérateurs basés sur la géométrie différentielle discrète. Le concept de repère galiléen ou inertiel est remplacé par celui de repère local, un point du domaine ne perçoit que son voisinage immédiat formé d'autres points, de segments et de faces dont les distances et les orientations sont connues. Ainsi, tous les points sont connectés par des liens de causalité définis au sein de l'espace-temps. Les exemples de comportement d'ensembles ne manquent pas dans la nature : banc de sardines, vols d'étourneaux, etc. La présence de limites ou d'obstacles n'est perçue qu'à travers le comportement du voisinage de ceux-ci dans un laps de temps basé sur le lien de causalité existant entre eux.

La distinction entre vitesse matérielle du milieu et célérité des ondes est reprise en considérant la célérité fixée par les conditions locales, alors que la vitesse ne sera qu'une variable secondaire définie à un champ de vitesse correspondant à un mouvement uniforme près. La célérité de l'onde est limitée à la vitesse de la lumière dans le vide d'après le postulat d'Albert Einstein, mais dans le cas général, la célérité dépendra des conditions locales. La vitesse quant à elle n'aura pas de limite *a priori* puisque aucun principe ne permet d'en imposer une. Même si les lois de la mécanique discrète seront évoquées pour des problèmes issus de la cosmologie, elles seront surtout appliquées aux domaines de la mécanique classique où le lien de cause à effet sera associé à des ondes de célérité finie.

L'hypothèse de l'équilibre local ne sera pas retenue ; il n'y a aucun principe permettant d'affirmer qu'un milieu est en équilibre local et de multiples exemples prouvant le contraire existent. La loi d'état en tant que telle devient donc inutile, son utilisation conduit en plus à des artefacts et à la faillite des lois de conservation, celle de la masse en particulier. En mécanique des milieux continus, la loi d'état est généralement utilisée pour fermer le système d'équations avec autant d'équations que de variables. Cette vision paraît aujourd'hui simpliste et recouvre une incompréhension sur l'autonomie de l'équation du mouvement. Seules certaines propriétés physiques doivent être connues par quelque moyen que ce soit ; celles-ci affectent bien sûr la solution, mais par le lien existant entre les variables au sein des lois de conservation. Les autres lois constitutives, comme la rhéologie qui décrit le comportement des matériaux, n'ont pas plus de légitimité à exister au sein des lois de la mécanique. Comme pour les autres propriétés, elles doivent être simplement connues localement et de manière instantanée même si elles dépendent des variables du problème. Une distinction drastique entre propriétés et équations de conservation sera donc respectée.

La forme tensorielle des équations de la mécanique est-elle une obligation ? Les tenseurs introduits par Woldemar Voigt sous sa forme actuelle et utilisés par bien d'autres personnalités du siècle dernier ont notamment servi à Albert Einstein pour établir sa théorie de la relativité avec l'aide de Marcel Grosmann. Auparavant, des physiciens et des mécaniciens ont trouvé une justification légitime de représenter les propriétés de certains matériaux qui dépendent de la direction considérée. Pour autant, son intégration au sein des lois de la mécanique est-elle justifiée ? Après tout, les équations de Maxwell s'écrivent indifféremment sous forme vectorielle ou tensorielle. C'est la définition de la contrainte, écrite comme le produit du gradient des vitesses ou déplacements et un coefficient, qui a nécessité ce choix. La symétrisation du tenseur des vitesses par Cauchy n'a rien amélioré. La notion de tenseur est bien sûr une généralisation de celle de vecteur qui se justifie notamment en mathématiques. Dans le cas de l'équation du mouvement, son utilisation conduit à des artefacts avérés qui nécessitent la satisfaction de contraintes supplémentaires pour lever les indéterminations introduites. C'est le cas en mécanique du solide où, pour calculer les déplacements à partir des contraintes, il est nécessaire de satisfaire des conditions de compatibilité. D'autres artefacts de même nature ont été introduits pendant les deux derniers siècles au sein des équations de la mécanique des milieux continus. La vision de la notion de contrainte est différente en mécanique discrète, un cisaillement dans un plan par exemple peut être créé par une contrainte de rotation dans une direction normale à celui-ci ; la mécanique des milieux continus décrit ce cisaillement comme une contrainte dans le plan lui-même. La suppression des tenseurs dans la formulation de l'équation du mouvement est un élément fondateur de la mécanique discrète. La disparition du référentiel et celle de la dimensionnalité de l'espace permettent ainsi d'introduire les opérateurs de géométrie différentielle *ad hoc*.

L'utilisation à mauvais escient de certaines lois recouvre des incohérences du système d'équations ; c'est ainsi qu'en mécanique des fluides l'équation du mouvement est nécessairement associée à la conservation de la masse. L'équation de Navier-Stokes ne conserve donc pas la masse si elle est utilisée de manière autonome. La raison en est simple : il y manque la contrainte du relèvement de la pression en fonction de la vitesse. L'équation de Navier-Stokes est incomplète alors que l'équation de Navier-Lamé pour les solides est auto-suffisante. L'utilisation de la loi de conservation de la masse permet de pallier cette lacune alors que cette équation ne devrait pas servir dans ce contexte.

Il est habituel en mathématiques et en mécanique d'assortir les équations de conditions aux limites et initiale. Un problème est bien posé selon Jacques Hadamard (1902) lorsqu'il satisfait certaines conditions de force ou de déplacement exprimées par des dérivées partielles aux bords du domaine. Il note en particulier que le champ de déplacement ne s'exprime qu'à une mouvement rigidifiant près. Cette vision est non conforme à celle de la mécanique discrète, et il est en effet difficile d'appliquer des conditions aux limites sur le déplacement ou la vitesse lorsque celle-ci n'est définie qu' à une constante près. Il est donc essentiel d'introduire, au sein de la formulation discrète elle-même, des conditions sur le bord ou dans le domaine, à partir des seuls quantités persistantes que sont les contraintes ; celles-ci sont appliquées par l'intermédiaire d'opérateurs discrets qui filtrent les mouvements uniformes de translation et de rotation. Les conditions aux limites font partie intégrante de la formulation mathématique et ne sont plus des conditions externes comme en mécanique des milieux continus. De même, la condition initiale ne peut porter sur la variable vitesse pour les mêmes raisons. L'état initial d'un système est complètement défini par son état de contraintes et correspond à un état d'équilibre mécanique. Celui-ci est justement défini comme celui qui satisfait exactement à l'équation du mouvement ; l'évolution d'un système physique correspondra à une succession d'états d'équilibre.

L'objectif principal de l'établissement d'un modèle physique, d'une équation, est de prévoir l'avenir à partir d'un état actuel fixé. Nous savons que la prévisibilité d'un modèle est limitée par différentes causes liées à la qualité de la connaissance de cet état actuel, à l'évolution immanquablement chaotique puis turbulent de l'évolution d'un système dynamique non linéaire, etc. Toutes ces questions sont maintenant bien comprises par les progrès en mathématiques accomplis au siècle dernier mais il reste des difficultés dues à notre vision actuelle du modèle physique. Comment peut-on prévoir un état dans un voisinage spatio-temporel fixé à partir d'un état parfaitement déterminé ? En mécanique des milieux continus ce n'est pas possible, à moins d'introduire une loi constitutive liant les différentes variables ; c'est par exemple le cas de la loi d'état dont le rôle est de fermer le système d'équations et de permettre de lier temporellement les états alors que ce n'est pas son rôle. En utilisant cette voie, on admet implicitement l'hypothèse de l'équilibre local induisant des défauts de conservation de masse au cours du temps. Pour réaliser une prévision déterministe en accord avec les lois de conservation, il est nécessaire d'assurer une continuité spatiale mais aussi temporelle, une causalité temporelle pour établir l'histoire continue de l'évolution du système. La mécanique discrète introduit le principe d'accumulation des contraintes : les variations de vitesse ou déplacements modifient les contraintes de pression et de cisaillement qui conservent l'histoire continue du système. La variable de l'équation du mouvement, la vitesse, est une quantité instantanée qui contribue uniquement au relèvement des contraintes. Ainsi, l'équation du mouvement discrète est autonome et ne dépend ni d'une loi d'état ni d'une autre loi de conservation, celle de la masse en l'occurrence.

Les notions actuelles de milieu continu, de lois constitutives, de conditions aux limites et de thermodynamique ont permis d'établir un système d'équations aux dérivées partielles qui constitue le modèle physique représentant au mieux la réalité. Qu'en fait-on ? Comme ce système est valable en un point conformément à l'hypothèse de milieu continu, il est nécessaire de l'appliquer à un espace, par exemple à trois dimensions, en discrétisant les dérivées partielles en différences ou en utilisant des formulations variationnelles appropriées. Dans tous les cas, cette étape de discrétisation numérique est nécessaire pour transformer le problème en un système linéaire à résoudre à partir d'une topologie, un maillage mobile ou fixe ; cette étape contribue à intégrer des sources d'erreurs supplémentaires. L'utilisation de schémas numériques d'ordre élevé n'améliore pas toujours le comportement du modèle numérique, ni la précision de la simulation finale. La mécanique discrète n'introduit aucune discrétisation supplémentaire de l'espace, l'équation du mouvement discrète est prête à une utilisation directe. La topologie initiale de la formulation est celle de la discrétisation, les opérateurs discrets sont ceux de l'équation et aussi ceux des conditions aux limites. Les propriétés des opérateurs continus sont aussi celles réalisées par la topologie discrète ; ce n'est généralement pas le cas pour les méthodes numériques classiques associées à des topologies non structurées.

Le principe d'objectivité ou d'indifférence matérielle introduit par Clifford Truesdell exprime l'indépendance de la réaction d'un matériau soumis à une sollicitation suivant la direction de l'observation ; la réponse du matériau est invariante dans un changement de référentiel. Le tenseur de Cauchy est objectif alors que le tenseur des taux de rotation ne l'est pas ; c'est l'une des difficultés apparentes de la formulation utilisant le rotationnel des vitesses. Celle-ci est directement liée aux mouvements de corps rigide de translation et de rotation. Pour un mouvement de rotation en bloc, le tenseur de rotation s'exprime en fonction de son dual, le vecteur rotationnel. Ce point, tout comme l'objectivité de la loi du mouvement discrète, sera discuté plus loin, mais ce problème ne se pose pas de la même manière qu'en mécanique des milieux continus où les réponses sont multiples et la discussion encore ouverte. L'absence de lois constitutives dans l'équation du mouvement et de référentiel global simplifie sensiblement la réponse à cette question.

La thermodynamique est considérée par certains auteurs comme une science à part entière ; ses prolongements en thermodynamique des processus irréversibles promus par Ilya Prigogine (1977) notamment ont permis une confrontation agitée mais féconde avec les idées sur la mécanique rationnelle émises par Clifford Ambrose Truesdell et Walter Noll. Les propos de Clifford Truesdell sur l'histoire des sciences et en particulier de la mécanique éclairent encore aujourd'hui les aspects actuels de cette science. Certains aspects de cette interaction mécanique-thermodynamique posent des problèmes incompatibles avec une vision déterministe de la dérivation des équations. C'est en particulier le cas de l'inégalité de Clausius-Duhem sur l'entropie qui conduit à une condition sur les coefficients de viscosité, de compression et de cisaillement. Les conditions de symétrie nécessaires à la description du milieu isotrope conduisent d'ailleurs au même résultat, une indétermination sur la viscosité de volume. Le choix de Stokes sur l'hypothèse de nullité de la viscosité de volume s'avère pour le moins inadapté. Ses conséquences ont été complètement réduites par l'utilisation non justifiée à ce niveau de la loi de conservation de la masse associée à l'équation du mouvement. La mécanique discrète permet de lever cette indétermination sur la viscosité de volume en montrant que les contraintes de compression et de cisaillement sont deux notions disjointes où chacune est associée à un coefficient non lié à l'autre par une quelconque loi. Les lois de comportement, les lois constitutives et la thermodynamique sont absentes de la dérivation des lois de conservation en milieu discret. Les propriétés thermophysiques doivent simplement être connues.

Les discontinuités de surface ou de choc représentent une difficulté lors de la modélisation des phénomènes physiques ; elles sont de nature très différente : fissures dans les matériaux solides, failles en milieux poreux, changements de phase, interfaces entre fluides non miscibles, fronts de combustion, ondes de choc dans les écoulements compressibles, etc. La formulation mathématique de ces problèmes est composée d'équations valables dans chaque sous-domaine du milieu et de conditions de saut de certaines variables scalaires ou vectorielles aux interfaces. La mise en œuvre de ces sauts est toujours délicate et souvent liée à la méthodologie numérique utilisée. En mécanique discrète ces sauts sont complètement intégrés à la formulation, au sein des équations de conservation. La discontinuité est formulée comme le gradient d'une fonction de phase dans l'équation du mouvement ou dans l'équation de conservation du flux. Elle permet par exemple de retrouver la solution exacte du problème de Laplace décrivant le saut de pression capillaire dans une goutte. L'équation du mouvement est susceptible de rendre compte d'écoulements compressibles et notamment la propagation d'ondes de choc.

La décomposition de Helmholtz-Hodge n'est pas un principe en soi mais plutôt un théorème mathématique, le théorème fondamental du calcul vectoriel, dû à Hermann Ludwing Ferdinand von Helmholtz, complété par les travaux de William Vallance Douglas Hodge sur la géométrie différentielle. Il précise qu'un vecteur se décompose toujours en une composante à divergence nulle (partie solédoïdale) et en une autre composante à rotationnelle nulle (partie irrotationnelle). Il introduit les notions de potentiel scalaire et de potentiel vecteur ayant une signification physique évidente dans certains domaines de la physique, notamment en électromagnétisme. Curieusement, même si ce théorème est utilisé en mécanique en tant que projecteur sur un champ à divergence nulle, ce théorème n'est jamais considéré comme un principe intangible. Même s'il est assorti de certaines conditions sur la connexité, il peut être utilisé comme un principe pour la dérivation des lois de conservation ; c'est le cas pour la mécanique discrète développée ici. L'équation de Navier-Lamé n'est pas très éloignée de cette forme, la somme d'un gradient et d'un rotationnel mais celle-ci, comme pour l'équation de Navier-Stokes, reste dans le cadre de la mécanique du milieu continu. En mécanique discrète, l'accélération se décompose naturellement en ces deux composantes et l'équation du mouvement se présente alors comme un extracteur de Helmholtz-Hodge des potentiels scalaire et vectoriel.

La mécanique discrète est un nouveau paradigme basé sur le concept de milieu discret où l'espace est formé à toutes les échelles d'observation de segments orientés, abandonnant ainsi les notions de milieu continu, de dérivées et de référentiel global. La dérivation des équations de la mécanique discrète, réalisée à partir de principes reconnus comme tels, conduit à une formulation cohérente unifiant la description de différents domaines de la physique.