

III. Méthode de Boltzmann sur réseau et modélisation numérique

III.1. Introduction

L’investissement fait dans le domaine de la simulation et modélisation 3D des matériaux est justifié d’important en raison de difficultés rencontrées lors des mesures directes délicates, souvent couteuses et parfois impossibles, et d’autre part par la croissance rapide des outils informatiques qui permettent des résolutions fiables. La simulation, permet de comprendre le rôle des paramètres étudiés. Les méthodes d’évaluations indirectes par simulation sont donc attrayantes et leur utilisation est justifiée.

La résolution des problèmes en mécanique de fluides (i.e. les équations aux dérivées partielles) est fondée sur des schémas de différences finis (DF) [1], d’éléments finis (EF) [2] et de volumes finis (VF) [3]. Il s’agit d’une discréétisation spatiale et temporelle des équations macroscopiques telles que l’équation de Navier-Stokes. Ces méthodes sont efficaces mais leur inconvénient principal est la mise en œuvre des conditions aux limites quand le problème à résoudre devient complexe.

La méthode de Boltzmann sur réseau (BR), [en anglais *Lattice Boltzmann Method* (LBM)] est une méthode mésoscopique pour décrire la dynamiques des fluides et modéliser la physique de fluide dont le principe est la résolution de l’équation de Boltzmann sous forme discréétisée [4] à l’échelle microscopique afin d’obtenir une solution à l’échelle macroscopique. Youngseuk Keehm [5] explique ce concept en Figure III–1. Le schéma en Figure III–2 regroupe les différentes méthodes utilisées pour la simulation d’un écoulement.

Dans cette méthode, le fluide est traité comme un ensemble des particules se déplaçant selon des règles simplifiées dans un réseau composé de nœuds solides et fluides. Pendant un pas de temps, les particules se propagent vers les nœuds de voisinage et échangent leur quantité de mouvement pendant la collision. Chaque pas de temps l’application de forces externes au fluide, peut être prise en compte s’il y a lieu, ainsi que les différentes conditions

aux limites.

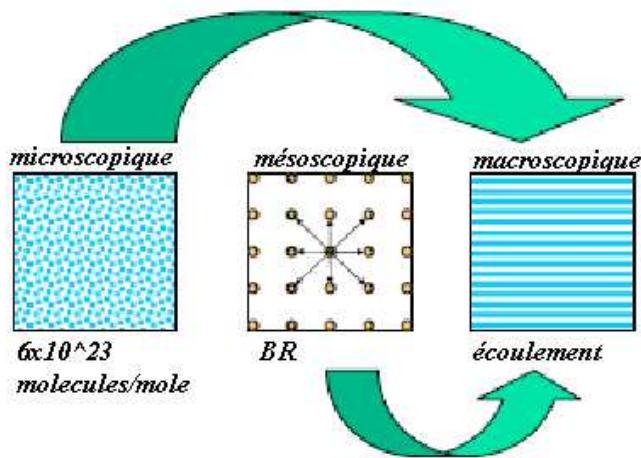


Figure III–1 : Position de la méthode BR dans les différentes échelles d'études (Selon [5]).

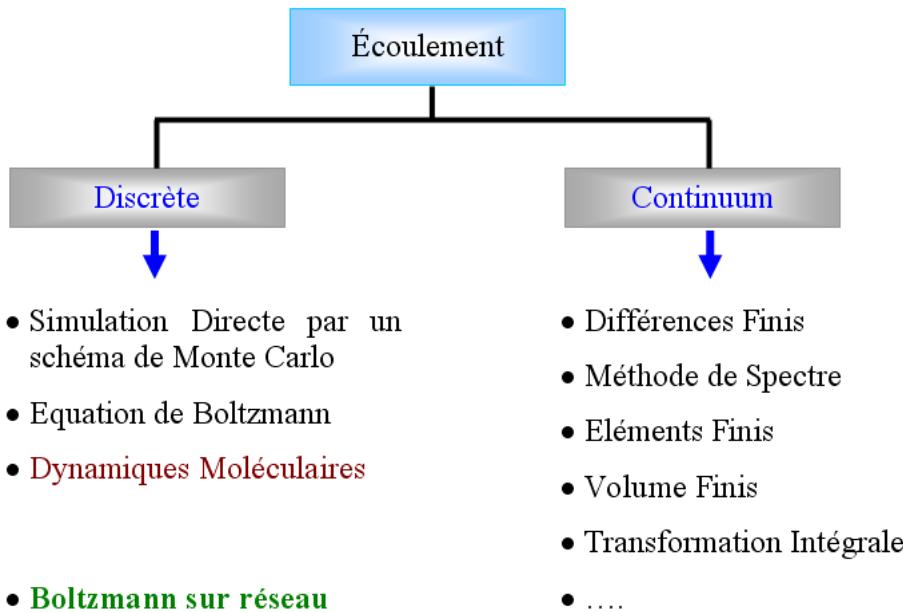


Figure III–2 : Classification des méthodes de simulation d'un écoulement (d'après [6]).

Ce schéma numérique alternatif pour la simulation de l'écoulement de fluide est d'importance particulière dans un média poreux avec des conditions aux limites de géométrie complexe. Cette représentation a montré son efficacité à décrire un écoulement fluide,

particulièrement dans le domaine d'écoulements classiques de fluides et dans les géométries complexes et les milieux poreux [4, 7, 8]. Elle a retenu l'attention des mécaniciens des fluides pour la simulation d'écoulements [9, 10, 11]. Elle a l'avantage d'être parallélisable [12, 13, 14] et d'utiliser des expressions simples pour décrire les conditions aux limites, ce qui permet d'envisager le cas des milieux poreux obtenus par frittage ou déposés par projection en jets plasmas thermiques, ce qui est l'objectif principal de ce travail. La méthode est aussi exploitée pour la résolution de l'équation d'énergie [15, 16, 17] en utilisant l'analogie entre la concentration des espèces et la température. La Figure III–3 montre une statistique élaborée à partir du site www.sciencedirect.com pour les publications et les domaines d'intérêt des chercheurs qui utilise cette méthode.

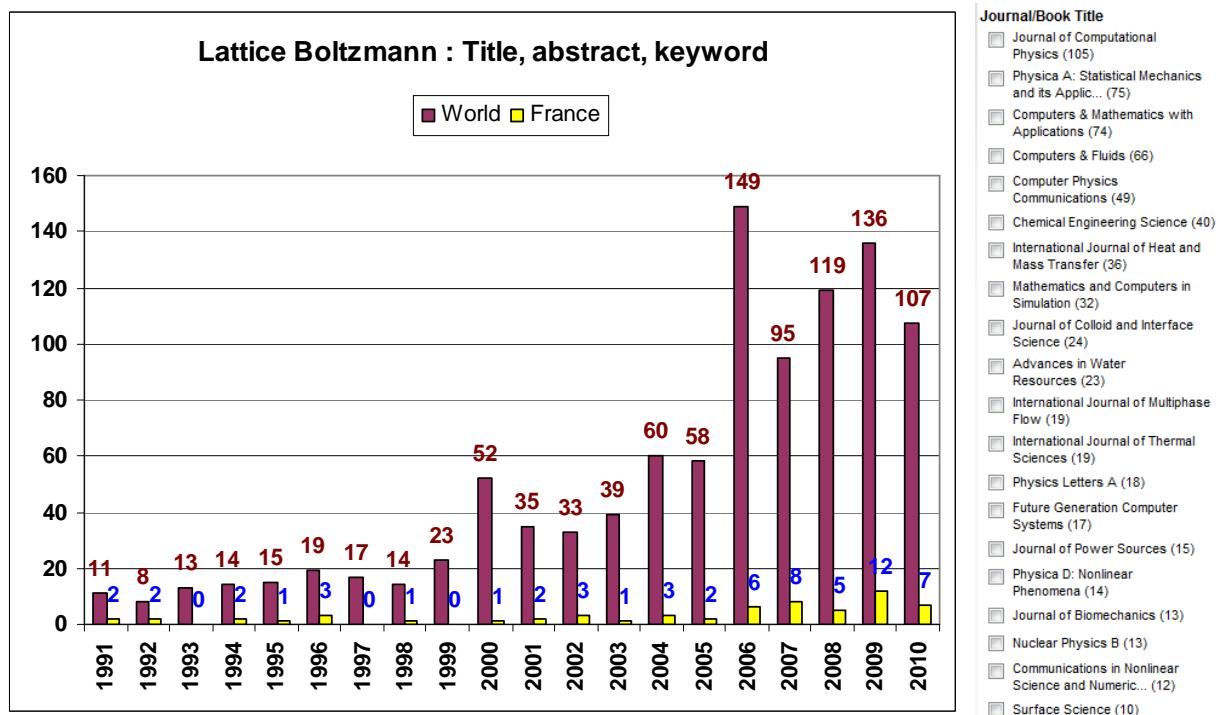


Figure III–3 : Statistique extraite du site www.sciencedirect.com au mois d'avril 2010 sur le nombre de publications sur la méthode ainsi que le domaine d'application.

Dans ce chapitre, la méthode BR sera présentée en détail et comparée à des schémas connus. L'application des différents types de condition aux limites est également présentée.

III.2. Origine de la méthode Boltzmann-sur-réseau

Cette méthode découle logiquement de la méthode Gaz sur réseau (GR) (en anglais Lattice Gas Automata (LGA)), appelée aussi Automates cellulaires [18] détaillée dans la référence [19]. Une telle exploitation d'un schéma ainsi discrétisé remonte à 1976, quand Hardy et al. [20] ont étudié les propriétés de transport des fluides. La méthode BR peut aussi être conçue comme un schéma particulier de différences finies pour l'équation cinétique de la fonction de distribution de vitesse-discrétisée [21]. Récemment, BR est aussi dérivée directement de l'équation de Boltzmann [22, 23] à l'aide du développement de Chapman-Enskog.

III.2.1. Schéma Gaz sur réseau

A son apparition, en 1973 [18], cette méthode avait pour but de disposer d'un simulateur de programmation sur ordinateur, le plus simple possible, afin de représenter les écoulements fluides.

Dans le schéma général, l'espace des phases est discrétisé par un réseau nœuds. De même l'espace des vitesses est discrétisé par un certain nombre de vecteurs vitesse (selon le modèle choisi). Il y a 0 ou 1 particule au nœud déplacée dans la direction du réseau. Après un pas de temps, chaque particule se déplace vers le nœud voisin dans la direction de propagation. Si plusieurs particules, venant de différentes directions, se rencontrent au même nœud elles se heurtent et changent leurs directions selon des règles de collision [4, 24] en sorte qu'elles conservent leur masse, leur quantité de mouvement et leur énergie après la collision, voir Figure III-4. L'équation générale du schéma s'écrit :

$$n_j(x_i + c_j, t+1) = n_j(x_i, t) + C_j(n_k) \quad (\text{Eq. III-1})$$

où $n_j(x_i, t)$ est le nombre de particules de vitesse c_j au nœud x_i à l'instant t . Le terme C_j désigne le terme de collision.

Ce schéma souffre essentiellement du non-respect de l'invariance Galiléenne à savoir " les lois de la Physique sont identiques (on dit covariantes) dans tous les référentiels en translation uniforme les uns par rapport aux autres ", et d'un bruit statistique dû à la nature booléenne de la méthode. La raison principale de la transition de l'algorithme de Gaz sur Réseau à celui de Boltzmann sur Réseau est l'élimination du bruit statistique en remplaçant

les tirages de particules booléenne dans une direction par une fonction de distribution moyenne, et les règles de collision par un opérateur de collision.

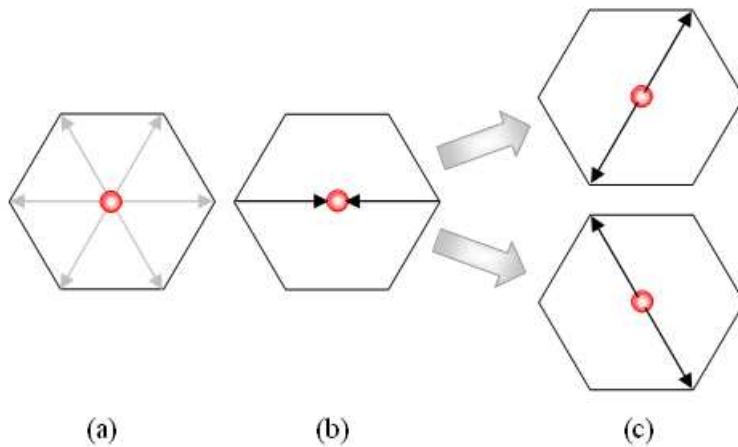


Figure III-4 : (a) Réseau hexagone de Frisch-Hasslacher-Pomeau (FHP), (b) exemple de pré-collision et (c) post-collision possible.

III.2.2. Equation de Boltzmann

En 1872, Ludwig Boltzmann, un physicien autrichien, avait proposé une équation intégro-différentielle de la théorie cinétique des gaz pour décrire l'évolution d'un gaz peu dense hors équilibre [25]. Cette équation de physique statistique décrit le comportement du gaz à l'échelle microscopique. Elle introduit une fonction pour décrire l'état du gaz par la définition de la position et la vitesse de chaque molécule dans le gaz. Le problème de cette approche, au niveau du calcul numérique, est la capacité de mémoire requise. Par exemple pour le cas de l'air (il contient $2,7 \cdot 10^{19}$ mol/cm³), ce qui conduit aussi à l'instabilité de la solution [26]. L'écriture de l'équation de Boltzmann est fondée sur trois approximations :

- Les collisions entre les particules sont binaires. Cette hypothèse limite l'application de l'équation au cas des gaz dilués.
- Les particules sont considérées comme des points, et donc les vitesses, avant et après la collision, ne sont pas corrélées.
- Il n'y a pas d'influence des forces externes lors de la collision.

Selon la théorie cinétique des gaz, et en l'absence de forces externes, l'évolution de la distribution de la quantité de mouvement d'une seule particule dans un fluide suit l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{c} \frac{\partial f}{\partial x} = \Omega(f) \quad (\text{Eq. III-2})$$

où f est la fonction de distribution, \vec{c} est la vitesse macroscopique, et l'opérateur $\Omega(f)$ prend en charge les interactions entre les particules, *i.e.* les collisions.

L'équation de Boltzmann a les propriétés suivantes :

- L'équation d'évolution spatio-temporelle est discrétisée.
- Les équations de conservation sont discrétisées.
- Une fonction de distribution à l'équilibre conduit aux équations de Navier-Stokes.

III.3. Méthode de Boltzmann sur réseau

III.3.1. Boltzmann sur réseau de l'équation de Boltzmann

La méthode BR est fondée sur la fonction de la distribution $f(x, e, t)$ qui exprime la probabilité de trouver une particule du fluide de vitesse e , à la position x à l'instant t .

L'équation discrétisée de Boltzmann sur réseau est écrite dans l'approximation « Bhatnagar-Gross-Krook » (BGK) [22], appelée aussi (BGK-W) « Bhatnagar-Gross-Krook »-« Welander » [27] :

$$f_i(x + \Delta x e_i, t + \Delta t) - f_i(x, t) = \Omega_i(x, t) \quad (\text{Eq. III-3})$$

où, $\Omega_i(x, t)$ est le terme de collision, linéarisé autour d'un état d'équilibre, qui représente la variation de la fonction de distribution due aux collisions entre les particules :

$$\Omega_i(x, t) = -\frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (\text{Eq. III-4})$$

$f_i^{eq}(x, t)$ est la fonction de distribution à l'équilibre définie par la forme générale de la

distribution de Boltzmann-Maxwell [28] afin de produire le comportement voulu du fluide :

$$f^{eq} \equiv \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(e-u)^2}{2RT}\right) \quad (\text{Eq. III-5})$$

où, R la constante du gaz parfait ($\text{J.mole}^{-1}.\text{K}^{-1}$), T la température (K) qui est constante dans cette approximation, ρ la masse volumique (kg.m^{-3}), u la vitesse macroscopique (m.s^{-1}) et D la dimension de l'espace.

τ est le temps de relaxation "adimensionnel" dû à la collision. La valeur de ce temps dépend en principe de propriétés du fluide mais dans cette approximation elle a une seule valeur. L'équation Eq. III-3 s'écrit:

$$f_i(x + \Delta x e_i, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) \quad (\text{Eq. III-6})$$

Pour un pas de temps Δt et un espacement entre les nœuds Δx la vitesse en réseau d'une population peut être évaluée par :

$$c_i = e_i \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (\text{Eq. III-7})$$

e_i est le vecteur d'unité en réseau.

III.3.2. De la micro dynamique à l'hydrodynamique macroscopique

Les quantités hydrodynamiques comme la masse volumique du fluide, la vitesse macroscopique et l'énergie interne sont évaluées par la fonction de distribution $f_i(x, t)$:

$$\rho = \int f_i(x, t) d\vec{c} \quad (\text{Eq. III-8})$$

$$\rho \vec{u} = \int \vec{c} f_i(x, t) d\vec{c} \quad (\text{Eq. III-9})$$

$$\rho \epsilon = \int \frac{1}{2} (\vec{c} - \vec{u}) f_i(x, t) d\vec{c} \quad (\text{Eq. III-10})$$

$$\text{ici } \varepsilon = \frac{D}{2} T.$$

En fait, l'équation discrétisée de Boltzmann sur réseau est une équation partielle différentielle qui peut remplacer l'équation de Navier-Stokes dans le domaine de dynamiques de calcul du fluide [en anglais *Computational Fluid Dynamics* (CFD)]. Pour rétablir la solution de l'équation de Navier-Stokes, les quantités hydrodynamiques, comme la masse volumique du fluide et la vitesse macroscopique, sont évaluées pour chaque nœud par les fonctions de la distribution $f_i(x, t)$. Eq. III-8 et Eq. III-9 peuvent être exprimées pour des vitesses discrètes de la façon suivante [22] :

$$\rho(x, t) = \sum_i f_i(x, t) = \sum_i f_i^{eq} \quad (\text{Eq. III-11})$$

$$\rho(x, t)u(x, t) = \sum_i e_i f_i(x, t) = \sum_i e_i f_i^{eq} \quad (\text{Eq. III-12})$$

III.3.3. Modèles BR isothermes

Les schémas DdQq, fondés sur l'approximation de BGK avec un seul temps de relaxation, sont les schémas les plus répandus. Il y a aussi le schéma avec des temps de relaxation multiples MRT [29].

III.3.3.1. Modèles à un seul temps de relaxation

Les modèles DdQq sont fondés sur le schéma BGK. Ces modèles dépendent de la nature du domaine étudié (1D, 2D ou 3D) avec ou sans particule de repos au nœud.

III.3.3.1.1. Modèle monodimensionnel

La Figure III-5 illustre le réseau utilisé pour la description du modèle D1Q3 avec un nœud rattaché à deux voisins. Les vecteurs de vitesse de ce modèle sont donnés par $e_0 = (0,0)c$, $e_1 = (1,0)c$ et $e_2 = (-1,0)c$. Les poids nodaux sont $w_0 = \frac{2}{3}$, $w_{1,2} = \frac{1}{6}$.

On parle du modèle D1Q2 quand la particule (0) au repos n'est pas considérée.

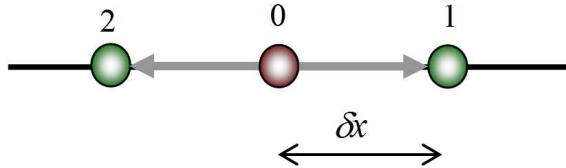


Figure III-5 : Réseau du modèle D1Q3.

III.3.3.1.2. Modèle bidimensionnel

En deux dimensions, le modèle BGK-D2Q9, avec huit voisins (liens) par nœud, est le plus répandu. Un réseau orthogonal est considéré avec huit populations mobiles (en mouvement) $f_i : i = 1, \dots, 8$ et une population en repos f_0 .

Dans un tel modèle, chaque particule, représentée par un nœud, a huit possibilités de propagation comme le montre la Figure III-6. Les vecteurs de vitesse n'ont pas le même poids (masse) et pour un modèle isotrope: $w_0 = \frac{4}{9}$, $w_{1,2,3,4} = \frac{1}{9}$ et $w_{5,6,7,8} = \frac{1}{36}$. Ces constantes sont choisies de manière à conserver l'isotropie du réseau [12] :

$$\sum w_i = 1 \quad (\text{Eq. III-13})$$

Les poids nodiaux remplissent cette relation pour n'importe quel type de réseau.

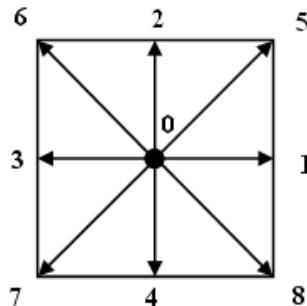


Figure III-6 : Réseau du modèle D2Q9.

Les vecteurs de vitesse de ce modèle sont donnés par :

$$e_i = \begin{cases} (0,0)c & i=0 \\ (\pm 1,0), (0,\pm 1)c & i=1,2,3,4 \\ (\pm 1,\pm 1)c & i=5,6,7,8 \end{cases} \quad (\text{Eq. III-14})$$

La Figure III–7 montre un nœud avec ces vecteurs avant et après la propagation. La Figure III–8 montre quatre nœuds différents : (gauche) avant la propagation et après la collision (pas de temps t) et (droite) après la propagation (temps $t+1$) imaginés par Nils [26]. D'autres modèles bidimensionnels sont présentés dans le Tableau III–1. Il y a aussi le modèle D2Q7 (ou D2Q6) qui nécessite un réseau hexagonal ressemble au réseau présenté en Figure III–4.

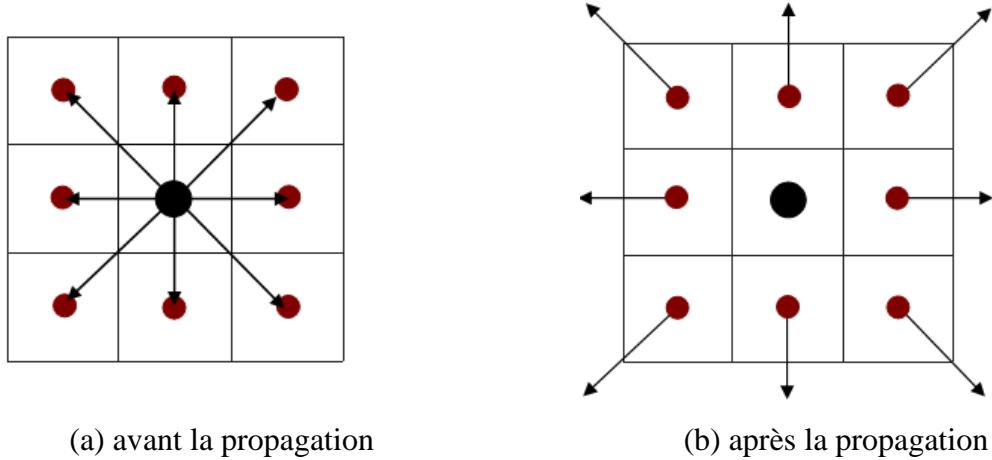


Figure III–7 : Nœud du réseau D2Q9 avec ces vecteurs de propagation.

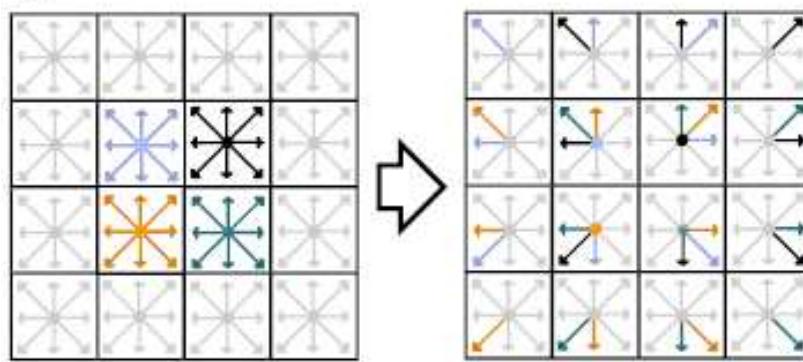


Figure III–8 : Quatre nœuds différents : (gauche) avant la propagation et après la collision (pas de temps t) et (droite) après la propagation (temps $t+1$) imaginés par Nils [26].

Equilibre local

Le choix de la fonction f^{eq} dépend du modèle. Ici on présente cette fonction pour un modèle D2Q9 compressible [30]. Elle est donnée pour chaque direction par la relation :

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u \cdot u}{2c_s^2} \right] \quad (\text{Eq. III-15})$$

où, $c_s = 1/\sqrt{3}$ est la célérité adimensionnelle du son en réseau. La viscosité du fluide simulé en réseau est donnée par l'expression :

$$\nu = c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (\text{Eq. III-16})$$

En fait, la valeur de τ est limitée par la condition :

$$\tau \in]0.5 : 2[\quad (\text{Eq. III-17})$$

Tableau III-1 : Modèles D2Qq en réseau orthogonal

Modèles	Vecteurs considérés (voir Figure III-6)
D2Q4	f_1, f_2, f_3, f_4
D2Q5	f_0, f_1, f_2, f_3, f_4
D2Q8	$f_1, f_2, f_3, f_4, f_5, f_6, f_7, f_8$

La variation de la masse volumique autour de sa valeur moyenne donne l'estimation de la pression du fluide $P(\vec{x}, t)$ selon l'équation de l'état pour les gaz parfaits :

$$P(\vec{x}, t) = c_s^2 (\rho(\vec{x}, t) - \langle \rho \rangle) \quad (\text{Eq. III-18})$$

ce qui est considéré comme un avantage important de cette méthode car il n'est pas nécessaire de résoudre l'équation de Poisson, procédure qui engendre des difficultés numériques [8].

Pour le modèle incompressible, l'équation Eq III-15 s'écrit :

$$f_i^{eq} = w_i \left[\rho + \rho_0 \left(\frac{e_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(e_i \cdot u)^2}{2c_s^4} - \frac{u \cdot u}{2c_s^2} \right) \right] \quad (\text{Eq. III-19})$$

III.3.3.1.3. Modèle BR tridimensionnel

Le modèle D3Q19 est utilisé pour les simulations BR en 3D. Dans ce modèle, chaque nœud est connecté à six voisins de premier ordre et douze voisins de deuxième ordre avec une particule en état de repos comme le montre Figure III-9.

On peut citer deux autres modèles : D3Q15 et D3Q27. Le modèle D3Q15, présentée en Figure III-10, porte l'instabilité numérique et il cause l'oscillation spatiale dans le cas de simulations d'écoulements turbulents [31], quant à D3Q27, présenté en Figure III-11, il requiert 27 estimations de la fonction de distribution pour chaque nœud de fluide et donc il nécessite beaucoup de temps de calcul et un espace de mémoire important pour le stockage des résultats. En définitive, on peut estimer que le modèle D3Q19 représente un bon compromis entre la fiabilité et l'efficacité de calcul.

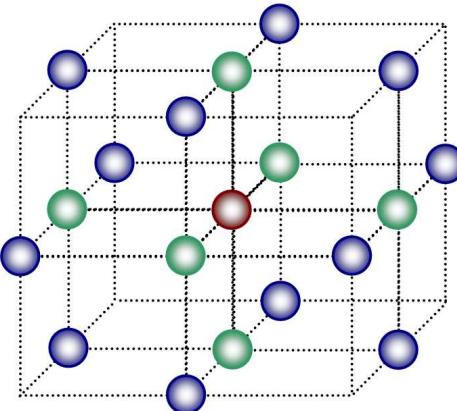


Figure III-9 : Réseau du modèle D3Q19.

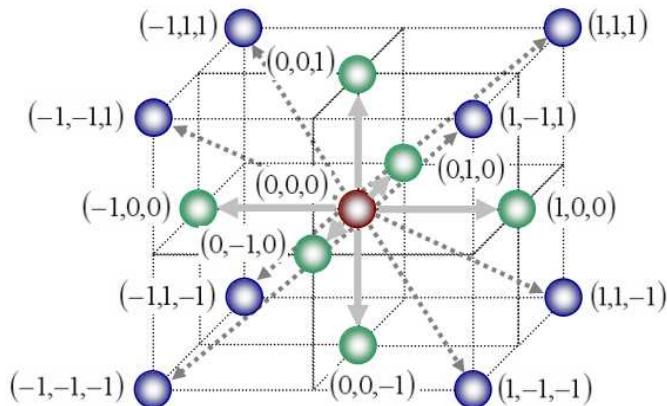


Figure III-10 : Réseau du modèle D3Q15 avec ces vecteurs de vitesse.

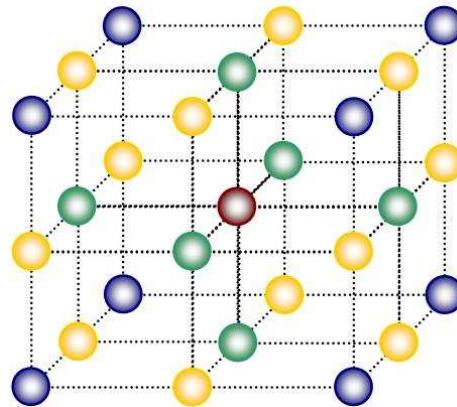


Figure III-11 : Réseau du modèle D3Q27. Ici, ● est le centre du réseau, ● de premier ordre, ● de 2^{ième} ordre et ● de 3^{ième} ordre.

Les poids noraux pour le modèle D3Q19 se sont donnés par :

$$w_i = \begin{cases} 1/3 & i=0 \\ 1/18 & i=1,..,6 \\ 1/36 & i=7,..,18 \end{cases} \quad (\text{Eq. III-20})$$

et les vecteurs de vitesse :

$$e_i = \begin{cases} (0,0,0) & i=0 \\ (\pm 1,0,0)_c, (0,\pm 1,0)_c, (0,0,\pm 1)_c & i=1,..,6 \\ (\pm 1,\pm 1,0)_c, (\pm 1,0,\pm 1)_c, (0,\pm 1,\pm 1)_c & i=7,..,18 \end{cases} \quad (\text{Eq. III-21})$$

La fonction de distribution à l'équilibre est exprimée par la même relation en Eq. III-15. La viscosité cinématique et la pression se sont évaluées par les équations Eq. III-16 et Eq. III-18.

III.3.3.2. Modèle à plusieurs temps de relaxation

Les travaux de Qian, d'Humières et Lallemand [32, 33, 34] et Succi et al. [35] sont à l'origine de ce modèle (En anglais *Multiple-Relaxation-Time* (LB-MRT)), appelé aussi le modèle de d'Humière [18], basé sur une loi de distribution polynomiale en vitesse pour la fonction de distribution à l'équilibre f^{eq} et un opérateur de relaxation $S_{j,k}$ diagonal. Sans entrer dans le détail, consultable dans les références citées ci-dessus, l'équation générale d'un modèle DdQq s'écrit alors:

$$f_i(x + \delta x e_i, t + \delta t) - f_i(x, t) = \Omega_i(x, t) \\ = -M^{-1} \cdot \hat{S} \cdot [m - m^{(eq)}] \quad (\text{Eq. III-22})$$

où M est une matrice de taille $q \times q$ qui transforme en linéaire les fonctions de distribution f aux moments m :

$$m = M \cdot f, \quad f = M^{-1} \cdot m \quad (\text{Eq. III-23})$$

\hat{S} étant la matrice diagonale de relaxation.

Ainsi la relaxation n'est autre que la relaxation des différents moments. Grâce à l'interprétation physique des moments, leur paramètre de relaxation sera directement liée aux différents coefficients de transport hydrodynamique. Ce mécanisme permet alors de contrôler indépendamment chaque moment au moyen de son paramètre de relaxation. Si l'on prend le même paramètre de relaxation pour tous les moments on retrouve le modèle BGK [18].

III.3.4. Schéma BR thermique

Les schémas BR ont connu progrès croissant dans le domaine de la simulation des écoulements isothermes et dans les problèmes thermiques. Dans la suite, les propositions faites dans la littérature sont indiquées.

Pour un écoulement monophasique, plusieurs schémas sont proposés que l'on peut placer dans une de deux catégories : les schémas dits « multispeed » [36] qui incluent les dérivées de vitesse d'ordre élevé dans les fonctions de distribution à l'équilibre. Cette

approche souffre de problème de l'instabilité [37]. Dans les schémas dits « scalaire passif» [38] le champs de la température est passivement affecté par l'écoulement du fluide et peut être simulé comme un composant additionnel du système. Cette approche est choisie pour simuler le transfert thermique dans notre problème.

III.3.4.1. Modèle BR pour la convection thermique

Il est important de pouvoir simuler simultanément les effets thermiques et l'écoulement de fluide. En fait, la distribution de la température dans un champ d'écoulement est d'importance cruciale dans les problèmes de transfert de chaleur. C'est pour cela que le développement d'un modèle thermodynamique apparaît nécessaire.

L'équation Eq III-6 décrit le fluide par un seul paramètre τ qui correspond au temps moyen entre deux collisions successives d'une particule. Dans l'approximation BGK la température est considérée constante et il n'est pas possible de fixer indépendamment la conductivité thermique et la viscosité.

La simulation des effets thermiques n'est pas immédiate et plusieurs propositions sont faites [17, 39, 40]. Les travaux de Yoshino et al. [15] fondés sur l'analogie entre le transfert de masse et le transfert de chaleur ont permis de résoudre l'équation de l'énergie. Un deuxième fluide fictif **B** est donc intégré au modèle. C'est alors la concentration du fluide **B** qui représente la température. Ainsi :

$$g(x + e_i \Delta x, t + \Delta t) - g(x, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g(x, t) - g^{eq}(x, t)) + F_b \quad (\text{Eq. III-24})$$

$g(x, t)$ est la fonction de distribution représentative de la température, τ_g est le temps de relaxation thermique, g^{eq} est la fonction de distribution simplifiée à l'équilibre. Elle est définie dans ce travail par l'expression :

$$g^{eq} = w_i T \left[1 + \frac{e_i \cdot u}{c_s^2} \right] \quad (\text{Eq. III-25})$$

ici T est la valeur macroscopique de la température. Le terme F_b représente la force d'Archimède (en anglais *Buoyancy force*) due à la variation de la température qui est définie

sous l'approximation de Boussinesq par :

$$F_b = 3w_i g \beta \Delta T \quad (\text{Eq. III-26})$$

le terme $g\beta$ est déterminé par les nombres adimensionnels de Prandtl et de Rayleigh. La diffusivité thermique est exprimée par la relation :

$$\alpha = \frac{1}{3}(\tau_g - 0.5)c_s^2 \Delta t \quad (\text{Eq. III-27})$$

Ce modèle est surtout utilisé pour simuler la convection naturelle dans des cavités. Les résultats de validation seront présentés dans le chapitre suivant.

III.3.4.2. Modèle BR pour la conduction thermique

Pour un modèle D2Q9, He et al. ont proposé pour les populations thermiques une fonction de distribution à l'équilibre de l'énergie interne de la forme discrète suivante [17] :

$$g_0^{eq} = -\frac{\rho \epsilon}{3} \frac{u^2}{c^2} \quad (\text{Eq. III-28})$$

$$g_{1,2,3,4}^{eq} = \frac{\rho \epsilon}{9} \left[\frac{3}{2} + \frac{3}{2} \frac{e_i u}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_i u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right] \quad (\text{Eq. III-29})$$

$$g_{5,6,7,8}^{eq} = \frac{\rho \epsilon}{36} \left[3 + 6 \frac{e_i u}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_i u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right] \quad (\text{Eq. III-30})$$

Le fait que le transfert de chaleur par conduction est dominant dans les milieux solides permet de réduire ces équations en choisissant une valeur de vitesse macroscopique $u = 0$.

M. Wang et al. ont proposé un modèle simplifié pour simuler le transfert de chaleur par conduction dans un milieu hétérogène [41, 42, 43, 44]. Ce modèle ne prend pas en considération l'effet de l'écoulement sur le champ thermique et il est fondé sur les hypothèses suivantes :

1. Il n'y a pas de convection ni de rayonnement dans le domaine à étudier: cette hypothèse est valide quand la taille des pores est très petite [45].

2. Il n'y a pas de changement de phase : le cas du changement de phase est étudié séparément [38, 46].
3. Il n'y a pas d'effets de résistance thermique de contact [47, 48] entre les surfaces en contact.

Les équations à résoudre pour le problème de transfert de chaleur selon une direction n et sans considération de source de chaleur :

$$(\rho c_p)_f \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right) = \kappa_f \nabla^2 T \quad (\text{Eq. III-31})$$

$$(\rho c_p)_s \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right) = \kappa_s \nabla^2 T \quad (\text{Eq. III-32})$$

où : κ_s, k_f sont les conductivités thermiques de deux phases [$\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$], et les indices s, f désignent le solide et la région non solide dans le cas d'un milieu poreux. c_p est la chaleur spécifique à pression constante [$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$].

Les contraintes de continuité à l'interface solide/fluide (solide1/solide2) imposent :

$$T_s = T_f \quad (\text{Eq. III-33})$$

$$\kappa_s \frac{\partial T}{\partial n} = \kappa_f \frac{\partial T}{\partial n} \quad (\text{Eq. III-34})$$

Pour conserver la continuité au niveau des interfaces le terme ρc_p est maintenu à la même valeur pour les deux phases. Cette hypothèse abaisse le coût de l'application des conditions aux limites qui est imposé par d'autres méthodes (i. e. *CFD*), et elle n'a aucune influence sur les résultats finaux [49].

L'équation de Boltzmann discrétisée a toujours la même forme :

$$g_i(x + e_i, t + 1) - g_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_g} (g_i(x, t) - g_i^{eq}(x, t)) \quad (\text{Eq. III-35})$$

Cette équation est appliquée pour chaque phase (constituant), cela veut dire qu'il faut définir deux temps de relaxation pour prendre en considération les différentes valeurs de la

diffusivité thermique. Dans le cas où le milieu est considéré poreux, il vient :

$$\tau_s = \frac{3}{2} \frac{\kappa_s}{(\rho c_p)_s} \frac{1}{c^2 \Delta t} + \frac{1}{2} \quad (\text{Eq. III-36})$$

$$\tau_f = \frac{3}{2} \frac{\kappa_s}{(\rho c_p)_f} \frac{1}{c^2 \Delta t} + \frac{1}{2} \quad (\text{Eq. III-37})$$

Δt est le pas du temps et c est la vitesse de propagation $\Delta x / \Delta t$: Δx est l'espacement entre deux nœuds choisi de manière de garder une valeur pour le temps de relaxation entre]0.5, 2]. La fonction de distribution à l'équilibre définie pour un modèle D2Q9 par :

$$g_0^{eq} = 0 \quad (\text{Eq. III-38})$$

$$g_{1,2,3,4}^{eq} = \frac{1}{6} T \quad (\text{Eq. III-39})$$

$$g_{5,6,7,8}^{eq} = \frac{1}{12} T \quad (\text{Eq. III-40})$$

La température locale de chaque nœud :

$$T = \sum_i g_i \quad (\text{Eq. III-41})$$

et le flux thermique est calculé pour chaque phase :

$$q = \left(\sum_i g_i e_i \right) \frac{\tau_n - 0.5}{\tau_n} \quad (\text{Eq. III-42})$$

Ce modèle est suivi dans cette thèse, et il est validé dans le chapitre suivant pour les problèmes en régime stationnaire [50].

III.3.4.3. Problème conjugué solide-fluide

Dans certains cas, il faut résoudre le problème du transfert de chaleur par conduction dans le solide et le transfert de chaleur par convection dans le fluide (voir les explications sur le phénomène de transfert de chaleur dans le chapitre suivant).

Supposons qu'un écoulement dans un tuyau avec des bords épais, la conduction à

travers ces bords n'est pas négligée. La diffusivité thermique du solide est différente de celle du fluide. Une des propositions pour simuler les différents phénomènes dans ce milieu est d'appliquer le rebond pur au niveau de l'interface solide-liquide et de définir un temps de relaxation dans le milieu solide différent de celui du milieu fluide. La continuité semble être assurée à l'interface [27, 51].

III.3.4.4. Modèle BR pour le rayonnement thermique

Le transfert de chaleur par rayonnement est souvent couplé avec la conduction ou bien la convection [52, 53]. Les travaux qui prennent en considération l'effet de rayonnement sont peu nombreux et les schémas BR proposés sont souvent hybrides [54, 55, 56, 57]. Dans cette thèse, le rayonnement n'est pas envisagé.

III.3.4.5. Extension du modèle BR à l'évaluation des propriétés mécaniques

Dans une publication récente [58], M. Wang et N. Pan ont montré que le comportement mécanique lié au module de l'élasticité d'un matériau biphasique est susceptible d'être évalué par la méthode de Boltzmann sur réseau. Dans leur travail, et pour un modèle BR-D2Q9 ils ont exploité les équations Eq. III-35 – Eq. III-42 en remplaçant le terme T par le terme U qui exprime le déplacement ou la déformation linéaire et le terme q par le terme F qui exprime la force ou la contrainte. Enfin, le module de Yong effectif se calcule par l'expression :

$$E_{eff} = \frac{H \int F dL}{\Delta U \int dL} \quad (\text{Eq. III-43})$$

où H la largeur du domaine et L sa longueur. Ce modèle est extensible en 3D comme le modèle thermique sur lequel est calqué.

III.4. Conditions aux limites

L'application de conditions aux limites est très importante. Avoir des conditions aux limites correctes et précises est important car elles modifient les résultats ainsi que la stabilité de la solution [59].

Une des raisons qui ont répandu la méthode de BR sont ses conditions aux limites

faciles à appliquer dans les géométries complexes. Plusieurs études sont consacrées aux développements des conditions aux limites qui varient selon la complexité du cas traité de conditions simples pour les géométries simples et les réseaux réguliers [60, 61, 62], jusqu'aux conditions pour les géométries complexes du façon à obtenir plus de précision [63, 64].

Les conditions rencontrées pour traiter les différents cas et géométries sont abordées: la condition de non glissement, la condition des limites périodiques et les conditions d'entrée-sortie de fluide. Ces conditions sont établies pour le cas d'un écoulement isotherme ; ainsi, d'autres conditions seront attendues, quand le sujet du modèle thermique sera abordé.

III.4.1. Condition aux limites périodiques

L'implantation de la condition aux limites « périodiques » [en anglais *Periodic Boundary Conditions* (PBCs)] se fait simplement en permettant aux particules qui quittent le réseau d'un côté d'y rentrer par la frontière de la direction opposée. Figure III–12 illustre l'application de cette condition.

L'avantage de cette condition apparaît dans les problèmes périodiques avec une périodicité connue L dans une direction. Dans ce cas, le calcul peut être fait pour un seul intervalle. L'implémentation de cette condition dans un code numérique est très simple :

If $index < 1$ then $new_index = L$

If $index > L$ then $new_index = 1$

III.4.2. Condition de non glissement

Appelée en anglais « no-slip condition », cette condition imposée aux interfaces solide-fluide ou bien fluide-bords est d'habitude présentée par le schéma dite rebondissement en arrière (en anglais *Bounce-Back rule*), appelé aussi la condition de rebond pur [18]. C'est grâce à ce schéma que les méthodes de BR sont devenues populaires parmi les différents modèles proposés pour la simulation d'écoulements dans un domaine complexe y compris les milieux poreux.

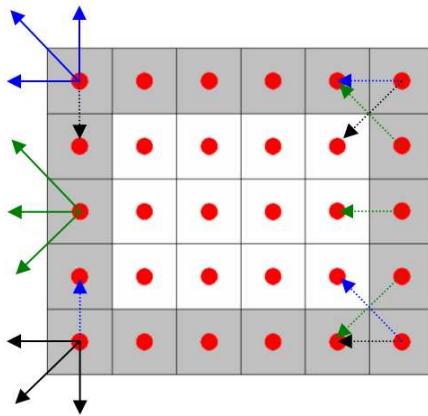


Figure III-12 : Condition périodique appliquée aux bords (les carrés en gris). La flèche continue représente le vecteur lors de sa propagation tandis que la flèche intermittente est son état après la propagation.

Figure III-13 schématise l'application de cette condition. Une fois les nœuds solides sont définis, et après la collision, la particule de la fonction de distribution, qui vient d'un nœud défini comme fluide, rebondit dans la direction opposée, en gardant sa quantité de mouvement, vers son nœud de provenance.

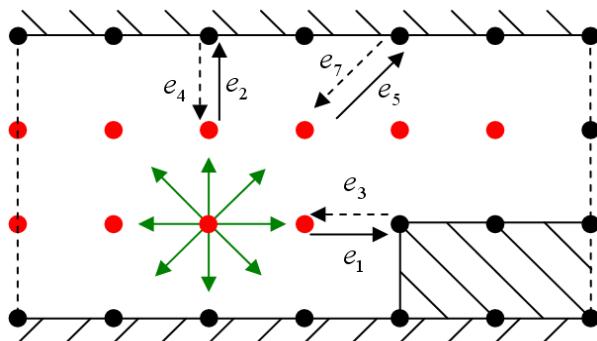


Figure III-13 : Condition de rebond pur. Un disque noir est un obstacle (solide) et le disque rouge est un site vide (passage de fluide). Une flèche continue représente l'état de la particule avant la collision, et la flèche intermittente représente l'état de la particule après la collision.

Cette condition se rencontre soit à la surface solide soit à mi distance entre le nœud solide et celui liquide. La différence entre les deux chemins n'a pas une grande influence sur les résultats, et donc le chemin entier est utilisé. La mise en place de cette condition dans le code du calcul se fait comme suit .

Après l'étape de la collision les nouveaux sites sont vérifiés, et si la fonction f_i se

heurte à un nœud défini comme solide ou bien à un bord, elle rebondi vers le site d'origine $f_{i,opp}$ selon la règle générale pour un modèle D2Q9 (voir Figure III–6) :

Lors de la collision	f_0	f_1	f_2	f_3	f_4	f_5	f_6	f_7	f_8
	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑	↑↑
Après la collision (sens opposé)	f_0	f_3	f_4	f_1	f_2	f_7	f_8	f_5	f_6

L'avantage de cette condition est la simplicité, la facilité d'implémentation et la conservation automatique de masse dans le domaine de calcul. Elle peut traiter n'importe quelle géométrie.

III.4.3. Condition de glissement

Il est, généralement, admis que le mur possède une vitesse de glissement non nulle et donc le schéma de rebond en arrière n'est pas totalement correct. Le schéma de réflexion spéculaire est donc appliqué dans ce cas. Il est expliqué dans la Figure III–14 où :

$$f_{+i} = f_{-i} \quad (\text{Eq. III-44})$$

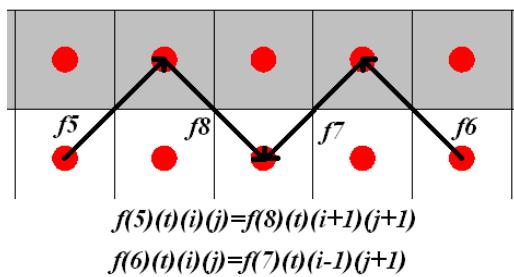


Figure III–14 : Condition de réflexion spéculaire

III.4.4. Conditions entrée/sortie

On peut distinguer à l'entrée et/ou à la sortie d'un réseau (domaine de calcul) deux types d'écoulements : un écoulement dirigé par un gradient de pression ou par des forces externes, et un écoulement dirigé par une vitesse ou par un flux de matière. Dans la suite, on considère un écoulement isotherme monophasique qui s'étale depuis l'ouest vers l'est et un

modèle BR BGK D2Q9. On va en déduire les relations qui permettent de calculer les valeurs de populations inconnues. Figure II–15 schématise le bord et le nœud concerné.

III.4.4.1. Ecoulement régi par la vitesse

Ce cas constitue la condition de Neumann [65, 66]. Une vitesse est imposée à l'entrée du domaine de calcul ce qui permet de calculer les valeurs des variables inconnues. Elles sont, après l'application de l'étape de propagation, la densité (et donc la pression à travers l'équation de l'état) et les composants f_1, f_5, f_8 résultants de l'application de rebond pur, voir Figure III–15. On a besoin de construire 4 équations pour trouver ces 4 valeurs. Les valeurs des autres composants $f_0, f_2, f_3, f_4, f_6, f_7$ sont connues car ces composants sont venus d'autres nœuds de l'intérieur du réseau.

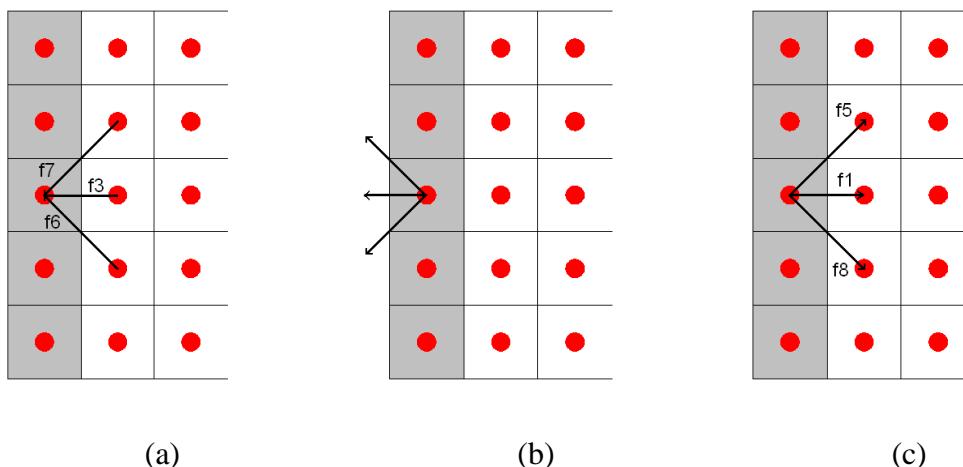


Figure III–15 : Populations inconnues lors de l'application d'une quantité imposée aux bords.
(a) avant la propagation et à l'instant $t = t_i$, (b) après la propagation et à l'instant $t = t_i + 1$ et (c) rebondissement en arrière et à l'instant $t = t_i + 1$.

L'application de principe de conservation de masse donne :

$$\rho = f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 \quad (\text{Eq. III-45})$$

et le principe de la conservation de quantité de mouvement selon les deux directions donne :

$$\rho u_x = f_1 + f_5 + f_8 - f_3 - f_6 - f_7 \quad (\text{Eq. III-46})$$

$$\rho u_y = 0 = f_2 + f_5 + f_6 - f_4 - f_7 - f_8 \quad (\text{Eq. III-47})$$

ici on considère qu'il n'y a pas de vitesse dans la direction verticale de bord. La 4^{ème} équation est établie à l'aide de la condition de rebondissement en arrière maintenue dans la direction horizontale [60] :

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \quad (\text{Eq. III-48})$$

où la seule valeur inconnue est f_1 . La résolution de ces 4 équations donne les relations suivantes :

$$\rho = \frac{f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)}{1 - u_x} \quad (\text{Eq. III-49})$$

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3} \rho u_x \quad (\text{Eq. III-50})$$

$$f_5 = f_7 + \frac{1}{2}(f_4 - f_2) + \frac{1}{6} \rho u_x \quad (\text{Eq. III-51})$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho u_x \quad (\text{Eq. III-52})$$

Les équations (Eq. III-49 - Eq. III-52) seront installées directement dans le code.

III.4.4.2. Ecoulement régi par un gradient de pression

Ce cas constitue la condition de Dirichlet [65, 66]. Un gradient de pression (densité) est maintenu dans le domaine de calcul ce qui permet de calculer les valeurs des variables inconnues. Elles sont, après l'application de l'étape de propagation, la densité (et donc la pression à travers l'équation de l'état) et les composants f_1, f_5, f_8 résultants de l'application de rebond pur, voir Figure III-15. Les équations (Eq. III-49 - Eq. III-52) sont les mêmes, et leur résolution conduit aux relations suivantes :

$$u_x = \rho_{in} - (f_0 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)) \quad (\text{Eq. III-53})$$

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3} u_x \quad (\text{Eq. III-54})$$

$$f_5 = f_7 + \frac{1}{2}(f_4 - f_2) + \frac{1}{6}u_x \quad (\text{Eq. III-55})$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6}u_x \quad (\text{Eq. III-56})$$

Les équations (Eq. III-53 - Eq. III-56) sont installées directement dans le code.

Pour les bords isolés, le flux est zéro et le gradient de la densité est zéro :

$$\frac{\partial \rho}{\partial n} = 0 \quad (\text{Eq. III-57})$$

ici n est la normale sur la surface. Cela est fait pour tous les noeuds aux bords admettant que $f(j) = f(j-1)$. Pratiquement cela revient à copier les valeurs de la surface $j-1$ dans la surface j et donc pour chaque noeud :

$$f_{i,j} = f_{i,j-1} \quad (\text{Eq. III-58})$$

III.4.4.3. Condition de bords ouverts

Cette condition est relative aux conditions appliquées à l'entrée et à la sortie d'un domaine. Par extrapolation [67], pour le cas des noeuds à l'ouest :

$$f_{3,i,j} = 2f_{3,i+1,j} - f_{3,i+2,j} \quad (\text{Eq. III-59})$$

$$f_{6,i,j} = 2f_{6,i+1,j-1} - f_{6,i+2,j-2} \quad (\text{Eq. III-60})$$

$$f_{7,i,j} = 2f_{7,i+1,j+1} - f_{7,i+2,j+2} \quad (\text{Eq. III-61})$$

III.4.4.4. Application d'une force externe

Les forces externes, y compris la force de pesanteur (gravité), peuvent être introduites dans un modèle BR soit pour modifier les valeurs de fonctions de distribution lors de l'étape de collision en ajoutant un terme source dans chaque direction [68], soit par modifier la valeur de vitesse macroscopique \vec{u} calculée à chaque noeud [66] :

$$\vec{u}_{\text{mod}} = \vec{u} + \tau \vec{F} \quad (\text{Eq. III-62})$$

où \vec{F} représente la ou les forces appliquées. La modification des valeurs de vitesse

macroscopique engendre la modification des valeurs f^{eq} . Cette voie se programme dans le code en ajoutant à la vitesse macroscopique calculée par Eq. III-12 la valeur adimensionnelle qui correspond à cette force.

III.4.5. Conditions aux limites thermiques

Peu de travaux ont utilisé les conditions aux limites conjuguées [40, 54, 55]. Le plupart des études considèrent que la température est constante ou que le flux thermique est constant [16]. Ici, des conditions les plus simples sont appliquées. Deux types de conditions aux limites sont discutés : température constante imposée à l'entrée et à la sortie du domaine avec $T_1 > T_2$, et surfaces adiabatiques.

III.4.5.1. Température imposée

Au niveau du réseau, et toujours en référence à la Figure III-15, on applique le principe du rebond arrière :

$$g_{+i} - g_{+i}^{eq} = -(g_{-i} - g_{-i}^{eq}) \quad (\text{Eq. III-63})$$

la population g_1 est une quantité inconnue :

$$g_1 - g_1^{eq} = -(g_3 - g_3^{eq}) \quad (\text{Eq. III-64})$$

$$\Rightarrow g_1 = \frac{1}{3}T_w - g_3 \quad (\text{Eq. III-65})$$

où T_w est la température locale à la surface. De la même façon, les quantités g_5 et g_8 sont calculées :

$$g_5 = \frac{1}{6}T_w - g_7 \quad (\text{Eq. III-66})$$

$$g_8 = \frac{1}{6}T_w - g_6 \quad (\text{Eq. III-67})$$

Le schéma du rebond pur des populations qui ne sont pas à l'équilibre est utile, et peut être exploité en conditions aux limites thermiques.

III.4.5.2. Condition de bords adiabatiques

Un bord adiabatique signifie qu'il n'y a pas de transfert de chaleur par conduction dans la direction normale à travers ce bord. On applique le principe en Eq. III-58 simultanément avec la condition de réflexion spéculaire (Eq. III-44) :

$$\sum flux_i = 0 \quad (\text{Eq. III-68})$$

III.5. De valeurs microscopiques aux valeurs physiques

Dans la méthode mésoscopique BR, les valeurs utilisées pour la simulation sont adimensionnelles, et pour rétablir les valeurs physiques réelles quelques paramètres sont indispensables [69] :

- $\Delta x = L/N - 1$ est la valeur référence de l'espace entre deux noeuds (en mètres). L étant la longueur référence du cas étudié (en mètres) et N est le nombre de noeuds au réseau.
- $\Delta t = (c_s/c'_s)\Delta x$ est la valeur référence du pas de temps entre deux itérations (en secondes).
- Δm est la valeur référence de masse (en kilogrammes).

Ainsi, les autres valeurs peuvent être en déduites à partir de ces trois valeurs références [70].

$$\rho' = (\rho\Delta m)/\Delta x^3 \quad (\text{Eq. III-69})$$

$$u' = u(\Delta x/\Delta t) \quad (\text{Eq. III-70})$$

$$v' = v(\Delta x^2/\Delta t) \quad (\text{Eq. III-71})$$

$$\Delta p' = (\Delta p\Delta m)/(\Delta x\Delta t^2) \quad (\text{Eq. III-72})$$

Les variables $\rho', u', v', \Delta p'$ expriment les valeurs réelles de la masse volumique, la vitesse, la viscosité cinématique et la pression, respectivement. Le choix d'un fluide spécifique va fixer les valeurs de la viscosité et de la masse volumique.

Pour un modèle thermique la température adimensionnelle θ est calculée par :

$$\theta = \frac{T - T_{in}}{\Delta T} \quad (\text{Eq. III-73})$$

III.5.1. Exemple 1

Soit un écoulement de fluide connu (de l'eau) dans une géométrie définie par une longueur de référence $L_x = 320\mu m$:

1. Définir la taille du réseau par $N = 321$ pixels :

$$\Rightarrow \Delta x = \frac{Lx}{N-1} = 1 \times 10^{-6} m.$$

2. Les propriétés ρ', v' de l'eau sont connues: 10^3 kg.m^{-3} et $1 \times 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$, respectivement :

- La valeur du temps de relaxation est limitée $]0,5,2[$: le choix d'une valeur égale à 1 donne une valeur de $v = 1/6$ en réseau.
- $\Rightarrow \Delta t$ est calculé par l'expression $v' = \frac{v \Delta x^2}{\Delta t}$: $\Delta t = 1/6 \times 10^{-6}$ s.
- le choix d'une valeur $\rho = 1$ en réseau va fixer la valeur de référence Δm

$$\Rightarrow \Delta m \text{ est calculé de l'expression } \rho' = \frac{\rho \Delta m}{\Delta x^3} : \Delta m = 1 \times 10^{-15} \text{ kg.}$$

Maintenant, les trois valeurs de référence : $\Delta x, \Delta t, \Delta m$ sont connues. Sachant que le nombre adimensionnel de Knudsen doit être $Kn \ll 1$ [71, 72] pour rapprocher la solution des équations Navier-Stokes.

III.5.2. Exemple 2

Le nombre de Reynolds est défini comme le rapport entre les forces d'inertie et visqueuses. Ce nombre adimensionnel détermine le régime ou le système de l'écoulement et est donné par la relation :

$$\text{Re} = \frac{\rho u L}{\mu} = \frac{uL}{\nu} \quad (\text{Eq. III-74})$$

où L , u sont la longueur et la vitesse à l'échelle caractéristiques de l'écoulement, respectivement. Soit un écoulement de Poiseuille, qui sera validé dans le chapitre suivant, défini par un nombre de Reynolds Re connu :

- Le choix de Re impose ceux de ν, u, L
- La valeur maximum de la vitesse en réseau ne doit pas dépasser 0.1 [27].

$\Rightarrow u_{\max} = 0.1$. À savoir que $u_{\max} = 1.5 \times u_{ave}$ [53].

- Le choix d'une valeur $\tau = 1$ donne une valeur $\nu = 1/6$ (en réseau $\Delta x = \Delta t = 1$).

\Rightarrow La largeur (les nœuds) est calculée : $\text{Re} = \frac{uL}{\nu}$

\Rightarrow Les forces externes (adimensionnelles) sont à calculer.

III.6. Algorithme du calcul BR

Avec la méthode de Boltzmann sur réseau, on imagine que les particules dans le réseau :

- se déplacent entre les sites d'un réseau uniforme.
- Sautent d'un site à l'autre selon des vitesses fixées et discrétisées.
- Se heurtent quand ils se rencontrent dans un site.

Il y a deux schémas généraux selon l'ordre de la séquence propagation/collision [73, 74, 75, 76] :

- le schéma « push » : dans lequel l'étape de collision précède l'étape de propagation.
- le schéma « pull » : dans l'étape de propagation précède l'étape de collision.

Le schéma « pull » est adopté ici dans cette thèse.

La Figure III–16 présente un algorithme général pour un modèle BR classique à travers lequel le calcul est organisé comme suit.

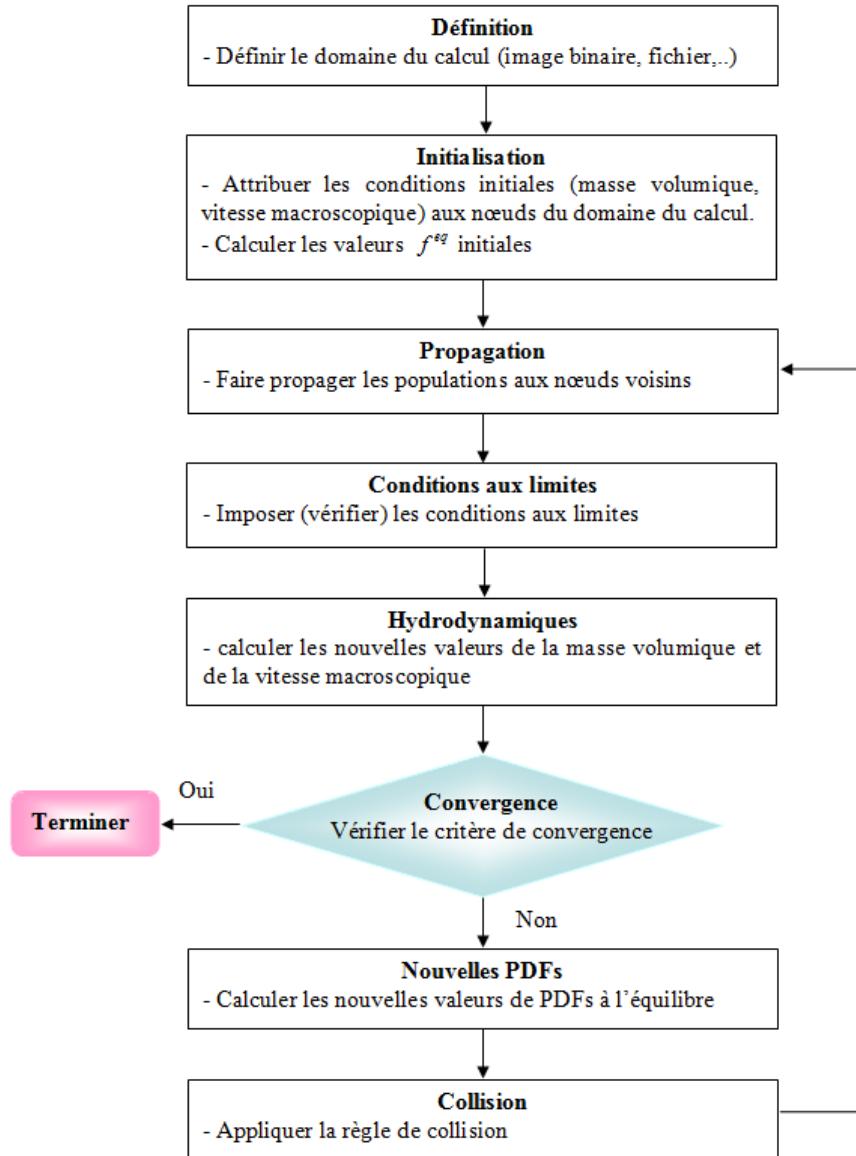


Figure III–16: Schéma de l'algorithme général de calcul dans un modèle BR.

Au départ, les variables du fluide ρ, u_x, u_y sont connues et définies à chaque nœud au temps zéro par des valeurs initiales ce qui permet d'initialiser les populations f_i . Le but est de

calculer ces variables aux pas de temps suivants.

Ensuite, les populations du réseau f_i^{eq} sont utilisées pour calculer les valeurs macroscopiques de ρ, u_x, u_y . Les valeurs résultantes sont la solution numérique à un temps t , et elles sont utilisées pour calculer les valeurs de fonction de distribution à l'équilibre f_i^{eq} qui sont nécessaires pour l'étape de propagation. Les valeurs de f_i^{eq} sont ensuite utilisées pour relaxer les valeurs de f_i lors de l'étape de collision à travers le temps de relaxation. Ces f_i relaxées vont se propager selon l'équation (Eq. III-3) pour produire les populations du réseau au pas de temps suivant $t + \Delta t$. Après, ce cycle se répète jusqu'à ce qu'une condition de convergence soit satisfaite, ce qui arrête le calcul.

III.7. Position de la méthode BR par rapport à d'autres méthodes numériques

III.7.1. BR et la méthode du calcul des différences finies

La méthode de Boltzmann sur réseau peut être vue soit comme une discréétisation de l'équation simplifiée de Boltzmann en utilisant un réseau symétrique soit comme un schéma de différences finies pour l'équation de Navier-Stokes. Dr Mohamad montre dans son livre [27] la similitude et les différences entre les deux schémas. La définition d'un maillage dans la méthode des différences finies signifie que l'écoulement sera traité de façon discrète. Par contre, le schéma hybride consiste dans le traitement de la dynamique de l'écoulement par la méthode BR et à utiliser le schéma DF pour la thermique où on gagne du temps de calcul car on n'a pas de terme de collision [77, 78].

III.7.1.1. Principe de la méthode des différences finies

Le principe de cette méthode numérique repose sur le fait que les dérivées partielles de l'équation différentielle sont approchées par des combinaisons linéaires de valeurs aux points de grille. Pour les dérivées de premier ordre :

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x}(\bar{x}) &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(\bar{x} + \Delta x) - u(\bar{x})}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(\bar{x}) - u(\bar{x} - \Delta x)}{\Delta x} \\ &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(\bar{x} + \Delta x) - u(\bar{x} - \Delta x)}{2\Delta x}\end{aligned}\quad (\text{Eq. III-75})$$

III.7.1.2. Méthode de Dufort-Frankel

C'est un algorithme proposé pour surmonter les problèmes de stabilité de l'algorithme simple [78, 79]. Il s'écrit :

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + a \left\{ u_{j+1}^n - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^n \right\} \quad (\text{Eq. III-76})$$

Cette relation peut être résolue explicitement pour u_j^{n+1} à chaque nœud du réseau :

$$u_j^{n+1} = \left(\frac{1-a}{1+a} \right) u_j^{n-1} + \left(\frac{a}{1+a} \right) (u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) \quad (\text{Eq. III-77})$$

$$\text{où } a = 2 \frac{\kappa \delta t}{\delta x^2}.$$

Par exemple, l'équation aux dérivées partielles du transfert de la chaleur par conduction est de type parabolique:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial \kappa_x}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial \kappa_y}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial \kappa_z}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial z} + \kappa_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \kappa_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \kappa_z \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (\text{Eq. III-78})$$

Le schéma de Dufort-Frankel est une approximation du second ordre et il est inconditionnellement stable. La solution par une méthode de différences finies requiert la discrétisation des dérivées en suivant la règle générale pour une quantité fictive \mathbf{A} :

$$dA/dx = \Delta A / \Delta x = [A(j+1) - A(j-1)] / 2\Delta x \quad (\text{Eq. III-79})$$

et

$$dA^2/dx^2 = [A(j+1) - 2A(j) + A(j-1)] / \Delta x^2 \quad (\text{Eq. III-80})$$

Par application du schéma de Dufort-Frankel pour la résolution de la dérivée temporelle $(T^{n+1} - T^{n-1}) / 2\Delta t$, la relation suivante est déduite :

$$T^{n+1} = \left(\frac{1-3a}{1+3a} \right) T^{n-1} + \left(\frac{2\Delta t / \Delta x^2}{1+a} \right) (D_{x1}T_{x1} + D_{x2}T_{x2} + D_{y1}T_{y1} + D_{y2}T_{y2} + D_{z1}T_{z1} + D_{z2}T_{z2}) \quad (\text{Eq. III-81})$$

où

$$a = 2(D_x + D_y + D_z) \Delta t / 3 \Delta x^2$$

$$D_{x1} = (\kappa_{x1} + \kappa_x)/2 ; D_{x2} = (\kappa_{x2} + \kappa_x)/2 ; D_x = (\kappa_{x1} + 2\kappa_x + \kappa_{x2})/4$$

$$D_{y1} = (\kappa_{y1} + \kappa_y)/2 ; D_{y2} = (\kappa_{y2} + \kappa_y)/2 ; D_y = (\kappa_{y1} + 2\kappa_y + \kappa_{y2})/4$$

$$D_{z1} = (\kappa_{z1} + \kappa_z)/2 ; D_{z2} = (\kappa_{z2} + \kappa_z)/2 ; D_z = (\kappa_{z1} + 2\kappa_z + \kappa_{z2})/4$$

$$\kappa_{n1} = \kappa(n-1) ; \kappa_{n2} = \kappa(n+1) ; \kappa_n = \kappa(n) \quad n \text{ étant } x, y, z. \quad (\text{Eq. III-82})$$

L'équation Eq. III-81 tient compte de l'anisotropie (hétérogénéité) des diffusivités.

III.7.2. Solveurs fondés sur les méthodes d'éléments finis

III.7.2.1. Logiciel libre : OOF

OOF est un logiciel de calcul destiné aux scientifiques des matériaux qui veulent calculer des propriétés macroscopiques à partir d'images de structure [80]. Ce logiciel public est développé au sein de National Institute of Standards and Technology (NIST) à la base de la technique EFs. Figure III-17 montre la fenêtre principale du logiciel.

Dans sa première version, OOF se compose de deux programmes en coopération : ppm2oof et oof. Le premier programme (ppm2oof) lit les images de format *ppm* (Portable Pixel Map) et affecte les propriétés du matériau aux dispositifs dans l'image. La mission du deuxième programme (oof) est de conduire des expériences virtuelles sur les structures de données créées par le ppm2oof pour déterminer les propriétés macroscopiques souhaitées.

On importe l'image dans ppm2oof, et on applique une des méthodes proposées pour déterminer les deux phases : solide et vide si on suppose toujours travailler sur des matériaux poreux.

En fait, le système d'exploitation requis pour ce logiciel (LINUX) impose des

contraintes de travail. L’application des conditions aux limites aussi.

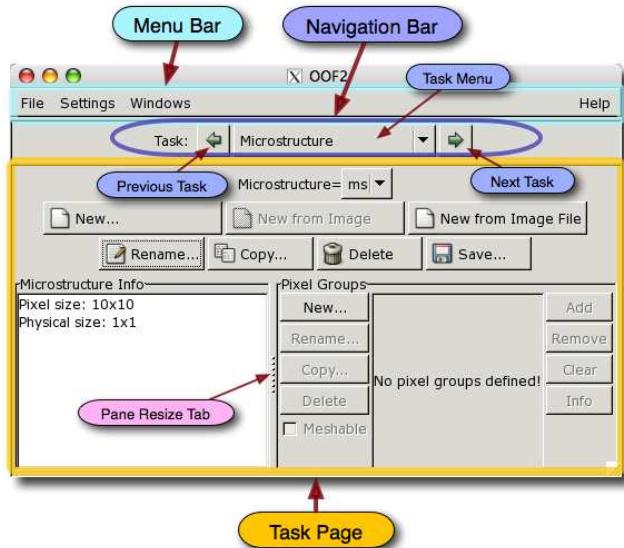


Figure III-17 : Fenêtre principale du logiciel OOF2.

III.7.2.2. Logiciel commercial COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics est un logiciel avancé pour la modélisation et la simulation de phénomènes physiques décrits par des systèmes d’équations aux dérivées partielles (EDP) résolues par éléments finis. Ce logiciel inclut un éditeur CAO complet ainsi que des solveurs performants qui permettent de traiter des problèmes de taille importante tout en convergeant rapidement vers le résultat. Une interface graphique rapide et interactive fournit à l’utilisateur différents moyens pour décrire un problème en 1D, 2D et 3D. Il a en outre l’avantage de permettre un couplage et une résolution simultanée des équations provenant de domaines physiques très différents. S’ajoute à cela des possibilités optimisées de visualisation et de post-traitement des solutions qui font de FEMLAB (ancien nom du logiciel) un outil complet et polyvalent [81]. Un avantage très important de ce logiciel c’est que l’utilisateur peut se concentrer sur le modèle et n’a pas besoin de consacrer du temps à résoudre les équations, construire les lignes de programmation, ou visualiser les résultats.

La Figure III-18 montre la fenêtre principale du logiciel COMSOL.

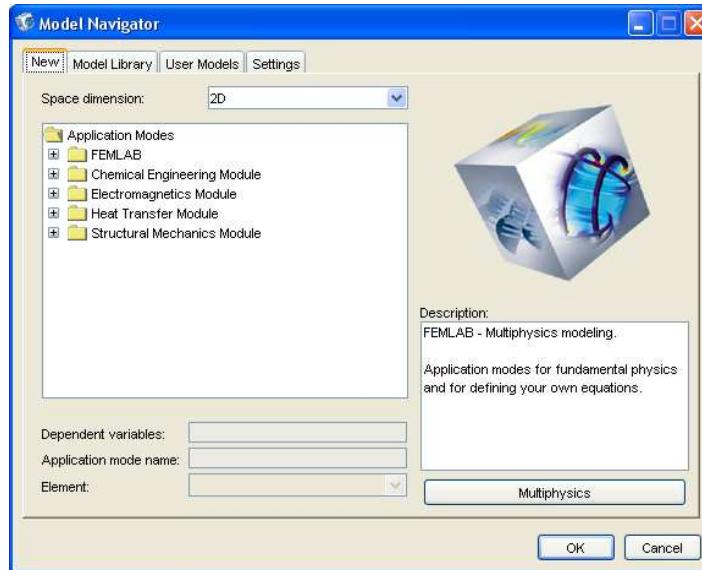


Figure III–18 : Fenêtre principale du logiciel COMSOL Multiphysics.

Dans la version 3.5.a, COMSOL Multiphysics a la capacité de traiter des applications spécifiques à travers ses divers modules déjà fournis sachant que le couplage des différents modules permet de simuler plusieurs phénomènes au même temps et pour le même domaine de calcul [82].

Ce logiciel, au travers ses différentes versions, est très efficace. Le seul problème, pour notre domaine de travail, c'est que l'importation des images de structures réelles n'est pas prévue.

III.7.3. BR et la méthode de calcul en volumes finis

La méthode des volumes finis ou volume de contrôle est une méthode numérique basée sur l'intégration des équations du transport qui gouvernent les écoulements des fluides et les transferts de la chaleur. L'équation générale de transport s'écrit pour une propriété ϕ :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\phi u) = \operatorname{div}(\Gamma_\phi \operatorname{grad}\phi) + S_\phi \quad (\text{Eq. III-83})$$

où Γ_ϕ est le coefficient de diffusion et S_ϕ est le terme source.

Les schémas hybrides BR-VF ont été proposés dans la littérature dans le but de coupler les dynamiques de fluide (en utilisant un schéma BR) simultanément avec les phénomènes thermiques (en utilisant un schéma VF). La Figure III–19 représente un réseau

hybride BR-VF. Ce couplage permet de réduire le temps de calcul engendré par une double population tout en bénéficiant de la souplesse fournie par les méthodes classiques.

Sans entrer dans les détails de la méthode des volumes finis, citons les travaux de Mishra et al. [54, 55, 57] destinés surtout à l'incorporation de l'effet du rayonnement dans le calcul des phénomènes thermiques, et les travaux de Semma et al. [38] qui sont destinés à étudier le problème de solidification (le changement de phase).

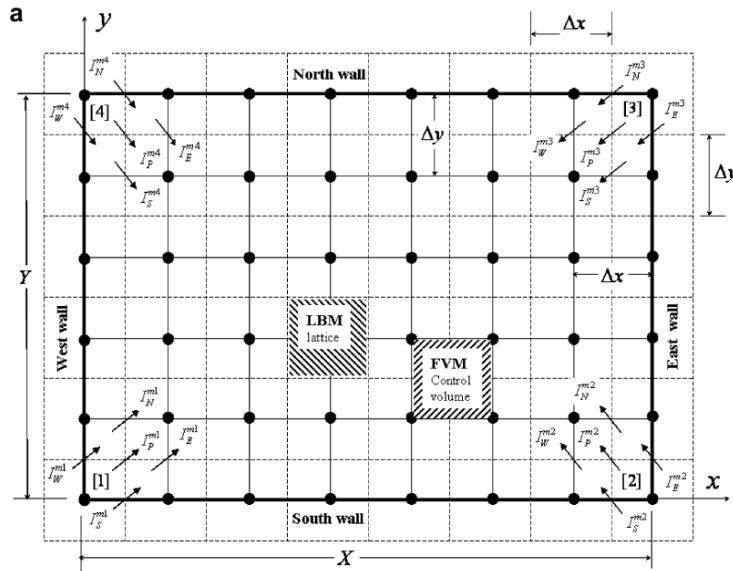


Figure III-19 : Représentation d'un réseau hybride BR-VF. (référence [54].)

III.8. Conclusion partielle

Dans ce chapitre les méthodes numériques de modélisation d'un milieu poreux et notamment la méthode de Boltzmann sur réseau ont été abordées. La méthode BR est une méthode de calcul numérique proposée pour la simulation de dynamiques de fluide et la thermique par l'équation de Boltzmann.

De façon générale, la méthode de Boltzmann sur réseau comporte trois volet distincts :

1. Le réseau : la grille.
2. Les distributions à l'équilibre.

3. L'équation cinématique pour la collision.

Cette méthode a été exposée en détail avec un rappel de l'histoire de la méthode, l'approximation BGK, les différents modèles et conditions aux limites applicables.

Cette méthode prend place parmi les solutions numériques efficaces des problèmes complexes. Son aptitude à la “parallélisation” permet l'optimisation et l'adaptation aux machines de calcul. Certains chercheurs ont déjà développé leur propre logiciel adapté à leur problème spécifique [13, 14, 83, 84, 85, 86].

Cette méthode, qui connaît un développement rapide, génère cependant des erreurs du fait de sa nature numérique. Les sources d'erreurs prévues sont cumulées, lors de la discrétisation temporelle et spatiale [30], l'application des conditions aux limites [87] et la compressibilité.

D'autres méthodes numériques possibles sont les schémas de Différences Finies (DF), Eléments Finis (EF) et Volumes Finis (VF). Le couplage entre la méthode de Boltzmann et une de ces méthodes est possible et permet par exemple de traiter la dynamique d'un fluide par BR et la thermique par un schéma discréteisé.

Il est montré que, pour notre cas d'étude, la méthode BR se prête au traitement de notre problème au prix d'une programmation relativement simple, tout en présentant avec l'avantage de traiter les géométries complexes y compris les milieux poreux et les matériaux bicouche ce qui sera le sujet du chapitre prochain.