

UNIVERSITÉ HASSAN 1<sup>er</sup>  
FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
SETTAT-MAROC

UNIVERSITÉ DE LIMOGES  
FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
LIMOGES-FRANCE

N° attribué par la bibliothèque

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--

## THÈSE

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE SETTAT**

Spécialité : **Sciences physiques**

et

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE LIMOGES**

Spécialité : **Céramiques et Traitement de Surfaces**

présentée et soutenue publiquement

par

**Soumia ADDAKIRI**

le 11 décembre 2010

Titre:

**Développement de schémas hybrides de type Lattice Boltzmann/Volumes Finis pour la Modélisation des transferts de chaleur et de masse en projection thermique.**

Jury

M. Abdelhak ANBARI,	Professeur, ENSAM, Angers	Président du jury
M. Najib LARAQI,	Professeur, Université de Paris 10	Rapporteur
M. Mostafa EL ALAMI,	Professeur, Université Hassan II, Casablanca	Rapporteur
M. Rachid BENNACER,	Professeur, ENS - Cachan	Examineur
M. Mohamed BAHAJ,	Professeur, Université Hassan 1 <sup>er</sup> , Settati	Examineur
M. Mostafa NAJAM,	Professeur, Université Hassan II, Casablanca	Examineur
M. Bernard PATEYRON,	Docteur ès Sciences physiques, CNRS, Limoges	Co-directeur
M. El Alami SEMMA ,	Professeur, Université Hassan 1 <sup>er</sup> , Settati	Directeur de thèse
M. ELGANAOUI,	Professeur, Université Henri Poincaré, (Nancy 1)	Directeur de thèse



À mes parents  
pour leur amour et leurs sacrifices.

À mes frères,  
mes soeurs,  
et mon mari  
pour leur amour et leur soutien.

À toute ma famille...



# Remerciements

عَنِ التُّعْمَانِ بْنِ بَشِيرٍ رَضِيَ اللَّهُ عَنْهُمَا قَلَّ : قَلَّ رَسُولُ اللَّهِ صَلَّى اللَّهُ عَلَيْهِ وَسَلَّمَ (مَنْ لَمْ يَشْكُرِ الْقَلِيلَ لَمْ يَشْكُرِ الْكَثِيرَ، وَمَنْ لَمْ يَشْكُرِ النَّاسَ لَمْ يَشْكُرِ اللَّهَ عَزَّ وَجَلَّ، وَالتَّحَدُّثُ بِنِعْمَةِ اللَّهِ شُكْرٌ وَتَرْكُهَا كُفْرٌ وَالْجَمَاعَةُ رَحْمَةٌ وَالْفُرْقَةُ عَذَابٌ). رَوَاهُ أَحْمَدُ .

Les travaux de recherche présentés dans cette thèse ont été réalisés en cotutelle entre le laboratoire de Mécanique (LM) de la faculté des sciences et techniques, Université Hassan 1<sup>er</sup>, Settat (Maroc) et, le laboratoire de Science des Procédés Céramiques et de Traitements de Surface (SPCTS) de l'Université de Limoges (France).

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et ma sincère reconnaissance à mes encadrants qui ont supervisé mes travaux de recherche durant ces années de thèse. Monsieur El Alami SEMMA, professeur à la faculté des sciences et technique de Settat et directeur de LM, qui par sa compétence, sa patience, ses précieux conseils, et sa grande disponibilité a su m'introduire à de nouveaux concepts, m'initier à la recherche, et me laisser une grande autonomie pour mener à bien ce travail. Monsieur Mohammed ELGANAOU, maître de conférence (HDR) à l'université de Limoges, pour son expertise, sa rigueur scientifique, sa disponibilité, ses recommandations et pour avoir porté de l'intérêt à l'avancée de mes travaux. Monsieur Bernard PATEYRON, ingénieur de recherche CNRS (HDR), pour m'avoir accueilli au sein de son équipe à Limoges, pour les discussions fructueuses que j'ai eu avec lui, pour sa modestie inégalée et surtout pour avoir gardé une attitude positive, malgré l'incendie qui a frappé son laboratoire CNRS trentenaire..., cette attitude qui nous a inspiré pour mener nos travaux avec succès malgré l'importante perte des documents manuscrits et informatisés...

Je remercie Monsieur Najib LARAQI, professeur à l'Université de Paris 10 et Monsieur Mostafa EL ALAMI, professeur à l'Université Hassan II, Casablanca pour avoir accepté de rapporter sur cette thèse.

Je remercie également Monsieur Abdelhak AMBARI, professeur à ENSAM d'Angers, Monsieur Mohammed BAHAJ, professeur à la Faculté des Sciences et Techniques de Settat, Monsieur Rachid BENNACER, professeur à ENS-Cachan et Monsieur Mostafa NAJAM, professeur à la Faculté des Sciences, Université Hassan II, Casablanca pour leur participation à l'examen et au jury de cette thèse.

Mes vifs remerciements vont également au Centre National pour la Recherche Scientifique et Technique (CNRST) au Maroc et la région limousine en France pour avoir financé ce travail.

Mes remerciements vont aussi à mes collègues du laboratoire LM ; Charkaoui et Rachid, et du laboratoire (SPCTS) ; Inès, Raed, Ridha, Said et Soufiane et tous mes amis qui n'ont pas vu leurs noms, leur présence m'a aidé à surmonter beaucoup d'épreuves.

Un grand merci à Madame Chantal SUBILEAU, Soutien DOCTORAT-HDR et Madame Nadine TCHEFRANOFF, Secrétaire -Axe 2 "Procédés de traitements de surface" pour leur gentillesse et leur aide précieuse dans les démarches administratives.

Enfin, je ne pourrais terminer cette liste sans adresser des remerciements particuliers, à des personnes particulières qui m'ont soutenu dans l'ombre ; mes parents, mes frères, mes sœurs et mon mari.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>La méthode de Boltzmann sur réseau</b>	<b>9</b>
2.1	Introduction . . . . .	9
2.2	La théorie cinétique . . . . .	10
2.2.1	Mécanique des fluides et théorie cinétique . . . . .	10
2.2.2	Description de la continuité hydrodynamique . . . . .	10
2.2.3	Equation de Navier Stokes . . . . .	12
2.3	Equation de Boltzmann . . . . .	14
2.3.1	Théorie cinétique et équation de Boltzmann . . . . .	14
2.3.2	Fonction de distribution et moments hydrodynamiques . . . . .	15
2.3.3	Equation de Boltzmann . . . . .	16
2.4	Automates cellulaires . . . . .	19
2.4.1	Le modèle HPP (Hardy, Pazzis et Pomeau) de Gaz sur réseau	20
2.4.2	Le modèle FHP (Frisch, Hasslacher et Pomeau) de Gaz sur réseau . . . . .	22
2.4.3	Le modèle FHP sans particules au repos . . . . .	23
2.4.4	Le modèle FHP avec particules au repos . . . . .	23
2.5	Equation de Boltzmann sur réseau . . . . .	26
2.5.1	L'équation linéaire de Boltzmann sur réseau . . . . .	26
2.5.2	L'équation de BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) . . . . .	27

2.6	Mise en œuvre de l'équation de Boltzmann sur réseau . . . . .	29
2.6.1	Le modèle DnQm . . . . .	29
2.6.2	Adimensionnement . . . . .	35
2.6.3	Mise en place des conditions aux limites . . . . .	35
2.7	Conclusion . . . . .	43
<b>3</b>	<b>Résolution de l'équation de diffusion par la méthode de Boltzmann sur réseau</b>	<b>44</b>
3.1	Introduction . . . . .	44
3.2	Equation de diffusion . . . . .	45
3.2.1	Lois de Fick . . . . .	45
3.2.2	Equation de la diffusion de la chaleur . . . . .	46
3.3	Résolution de l'équation de diffusion par la méthode LBM . . . . .	47
3.3.1	Schéma LBM pour l'équation de diffusion . . . . .	47
3.3.2	Modèle monodimensionnel . . . . .	47
3.3.3	Modèle bidimensionnel . . . . .	52
3.4	Conclusion . . . . .	62
<b>4</b>	<b>Nouveau modèle LBM : Application aux phénomènes de transmission à l'interface</b>	<b>63</b>
4.1	Introduction . . . . .	63
4.2	Résistance thermique de contact (RTC) . . . . .	64
4.2.1	Définition de la RTC . . . . .	64
4.2.2	Nouveau modèle LBM : images des particules (IP) . . . . .	65
4.2.3	Résultats numériques . . . . .	68
4.3	Cas d'un flux discontinu à l'interface . . . . .	77
4.3.1	Problème de Stefan . . . . .	77
4.3.2	Application du nouveau modèle LBM au problème de Stefan	84
4.3.3	Résultats numériques . . . . .	86
4.4	Conclusion . . . . .	88



<b>5</b>	<b>Couplage de la méthode de Boltzmann sur réseau non uniforme à la méthode de volumes finis : Application à un problème diphasique solide-liquide</b>	<b>89</b>
5.1	Introduction . . . . .	89
5.2	Changement de phase . . . . .	90
5.2.1	Formulation mathématique du changement de phase . . . . .	90
5.3	La méthode de Boltzmann en réseau non uniforme . . . . .	95
5.3.1	La méthode TLLBM . . . . .	96
5.4	La méthode des volumes finis . . . . .	103
5.4.1	Étapes de résolution par la méthode des volumes finis . . . . .	106
5.5	Couplage LBM non uniforme à la méthode Volumes finis . . . . .	114
5.6	Résultats numériques . . . . .	115
5.6.1	Problème de changement de phase avec conduction . . . . .	115
5.6.2	Problème de changement de phase avec convection . . . . .	118
5.7	Conclusion . . . . .	123
<b>6</b>	<b>Conclusion générale et perspectives</b>	<b>124</b>
	<b>Annexe : Procédure de Chapman Enskog</b>	<b>126</b>
	<b>Nomenclature</b>	<b>132</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>136</b>

# Table des figures

1.1	De la description macroscopique à la description microscopique . . .	5
2.1	Le modèle HPP, fondé sur un réseau de symétrie carrée . . . . .	21
2.2	Le modèle FHP, fondé sur un réseau de symétrie triangulaire . . . .	22
2.3	Les règles de collision pour l'automate FHP 6 bits. Les colonnes de gauche représentent les états d'entrée et celles de droites représentent les états de sortie. . . . .	24
2.4	Les règles de collisions binaires prenant en compte les particules au repos. Les cercles noirs indiquent l'existence d'une particule au repos.	25
2.5	Vecteurs de vitesses discrètes pour quelques modèles dans l'espace 2D et l'espace 3D du réseau. . . . .	30
2.6	Les neuf vitesses du modèle D2Q9 . . . . .	32
2.7	Représentation des faces correspondantes à un nœud réseau . . . . .	36
2.8	Représentation de la condition au limite d'entrée . . . . .	37
2.9	Conditions aux limites de type Dirichlet «type on-grid» . . . . .	38
2.10	Conditions sans glissement, rebond mi-grille «Bounce Back mid-grid».	39
2.11	Représentation d'une surface courbe solide . . . . .	40
3.1	Algorithme de base de la méthode de Boltzmann sur réseau. . . . .	48
3.2	Modèle monodimensionnel à 3 vitesses réseau D1Q3 . . . . .	49
3.3	Cas monodimensionnel . . . . .	50
3.4	Conditions aux limites pour le cas monodimensionnel. . . . .	51
3.5	Comparaison des résultats obtenus en LBM (D1Q3) et en DF. . . .	53

3.6	Modèles bidimensionnels, (a) : D2Q5 et (b) : D2Q9 . . . . .	53
3.7	Modèle D2Q9 . . . . .	54
3.8	Étapes de propagation des particules du modèle D2Q9. . . . .	56
3.9	Géométrie bidimensionnelle . . . . .	57
3.10	Configuration des conditions aux limites . . . . .	59
3.11	Comparaison des résultats obtenus en LBM (D2Q9) et en DF. . . . .	62
4.1	Transfert de chaleur à l'interface de deux solides en contact imparfait	65
4.2	Schéma de la configuration du modèle PBB (Partial bounce back) .	66
4.3	Configuration du nouveau modèle LBM pour le traitement de la RTC.	67
4.4	Diagramme simplifié d'un matériau semi-infini . . . . .	68
4.5	Distribution de la température dans l'espace pour $\tau = 1$ , $R_c = 1000$ , $t = 10000lu$ . . . . .	70
4.6	Distribution de la température dans l'espace pour $\tau = 0.8$ , $R_c =$ $1000$ , $t = 5000lu$ . . . . .	71
4.7	Distribution de la température dans l'espace pour $\tau = 0.8$ , $R_c =$ $1000$ , $t = 10000lu$ . . . . .	71
4.8	Profile de la température pour $\tau = 0.6$ , $R_c = 1000$ , $t = 2000lu$ . . .	72
4.9	Profile de la température pour $\tau = 0.55$ , $R_c = 1000$ , $t = 5000lu$ . . .	73
4.10	Profile de la température à l'instant $t = 5000$ pour différentes valeurs de la résistance de contact pour $\tau = 0.6$ . . . . .	74
4.11	Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour $\tau_1 = \tau_2 = 0.75$ . . . . .	75
4.12	Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour $\tau_1 = 1.0$ et $\tau_2 = 0.55$ . . . . .	75
4.13	Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour $\tau_1 = 1.0$ et $\tau_2 = 0.6$ . . . . .	76
4.14	Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour $\tau_1 = 1.0$ et $\tau_2 = 0.75$ . . . . .	76
4.15	Schéma simplifié du problème de conduction en 2D, avec les condi- tions aux limites. . . . .	77

4.16	Isothermes d'un matériau bicouche pour $\tau = 0.6$ , $R_c = 0$ , $t = 2000$ .	78
4.17	Isothermes d'un matériau bicouche pour $\tau = 0.6$ , $R_c = 100$ , $t = 2000$	79
4.18	Isothermes d'un matériau bicouche pour $\tau = 0.6$ , $R_c = 500$ , $t = 2000$	80
4.19	Digamme espace-temps pour le problème de Stefan . . . . .	82
4.20	Configuration du nouveau modèle LBM pour le traitement du problème de Stefan 1D. . . . .	85
4.21	Géométrie adoptée pour le problème de Stefan 1D. . . . .	86
4.22	Comparaison des résultats LBM aux résultats analytiques pour le problème de Stefan 1D. . . . .	87
4.23	Evolution de la position de l'interface solide-liquide pour différents nombres de Stefan. . . . .	88
5.1	Relation enthalpie-température pour un matériau pur et alliage . .	93
5.2	Configuration des noeuds du maillage uniforme et non uniforme. . .	97
5.3	Configuration des noeuds du maillage non uniforme avec six noeuds voisins . . . . .	100
5.4	Coordonnées des noeuds entourant le noeud (i,j) . . . . .	101
5.5	Configurations utilisées pour le maillage non uniforme avec six points d'interpolation. . . . .	101
5.6	Configuration des noeuds du maillage non uniforme avec neuf points voisins. . . . .	102
5.7	Configurations utilisées pour le maillage non uniforme avec neuf points d'interpolation. . . . .	104
5.8	Schéma du volume de contrôle dans le cas bidimensionnel. . . . .	105
5.9	Configuration du maillage en 1D en volumes finis. . . . .	107
5.10	Position du noeud du côté amont 1D. . . . .	113
5.11	Géométrie adoptée pour le problème de Stefan . . . . .	115
5.12	Comparaison des résultats numériques LBM-VF aux résultats analytiques . . . . .	116
5.13	Evolution de la position du front de solidification en fonction du temps pour différentes valeurs du nombre de Stefan . . . . .	117

5.14	Géométrie adoptée pour le problème convectif . . . . .	118
5.15	Evolution globale de la température maximale . . . . .	119
5.16	Evolution temporelle de la fraction liquide totale . . . . .	120
5.17	Interfaces et champs de vitesses en différents instants de la solidification pour $Ra = 10^8$ . . . . .	120
5.18	Interfaces et champs de vitesses en différents instants de la solidification pour différents nombres de Stefan . . . . .	121
5.19	Evolution temporelle de la fraction liquide pour différents nombres de Stefan. . . . .	122

# Liste des tableaux

4.1	Hypothèses adoptées pour le problème de Stefan . . . . .	81
4.2	Propriétés physiques et paramètres utilisés pour le problème de Stefan	84

# Chapitre 1

## Introduction générale

Les méthodes de calcul et le développement de l'informatique ont largement contribué à une progression rapide de l'ensemble des techniques numériques. En moins de cinquante ans, le paysage algorithmique a été complètement transformé. Aujourd'hui, la plupart des logiciels que nous employons font appel à des méthodes de plus en plus efficaces. Dans les simulations, comme dans les modélisations, l'analyse numérique occupe une place centrale. Elle intervient dans le développement de codes de calcul (météorologie, physique des particules...), mais aussi dans les problèmes de simulations (aéronautique, industrie nucléaire...) ou d'expérimentations mathématiques. Elle entretient des liens étroits avec l'informatique. Si sa partie théorique relève plus des mathématiques, sa mise en pratique aboutit généralement à l'implémentation d'algorithmes sur ordinateur. Ses méthodes se fondent à la fois sur la recherche de solutions exactes comme dans le cas de l'analyse matricielle ou du calcul symbolique, et sur des solutions approchées qui résultent le plus souvent de processus de discrétisation comme dans le traitement des équations aux dérivées partielles.

Différentes méthodes numériques ont été conçues pour le traitement des équations aux dérivées partielles et ainsi pour la résolution des problèmes réels d'ingénierie. La méthode des éléments finis a été appliquée pour la première fois en 1956 par Turner, Clough, Martin et Topp[107], en vue de résoudre les problèmes de la mécanique des structures. Elle repose sur une base mathématique rigoureuse sur laquelle on se base pour établir d'abord la formulation variationnelle (ou faible) du système d'équations aux dérivées partielles, par la suite la forme faible est transformée en un système d'équations algébriques. Cette transformation est obtenue aux prix d'une double discrétisation : celle du domaine géométrique étudié via une

triangulation du domaine et celle des champs inconnus. La résolution du système algébrique fournit alors une solution approchée du problème, elle peut être obtenue par des méthodes directes (LU, Cholesky,..) ou par des méthodes itératives (Gradient conjugué, préconditionnements, GMRES,..). Il est clair que la précision, voire la validité, de la solution calculée dépendent du maillage utilisé comme support et la méthode de résolution. Vers la fin de 1960, cette méthode est devenue une technique puissante permettant la résolution des équations aux dérivées partielles, des problèmes de transfert de la chaleur et de la dynamique des fluides [43, 53, 15]. Aussi, dans la même période, la méthode des différences finies a été proposée pour la résolution des problèmes de la mécanique des fluides [67]. Cette méthode consiste à remplacer les dérivées apparaissant dans le problème continu par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage. En 1980, la méthode des volumes finis a été conçue spécialement pour traiter les problèmes de la dynamique des fluides [36, 11, 85]. Par la suite elle a été développée par Spalding et Patankar [87] pour traiter les phénomènes de transport. Les méthodes des volumes finis se basent sur deux catégories principales :

- Les méthodes ayant une formulation proche des différences finies et qui sont définies sur des maillages rectangulaires.
- Les méthodes ayant une formulation proche des éléments finis et utilisant des fonctions interpolantes.

L'idée principale de la méthode des volumes finis se base sur l'intégration sur des volumes élémentaires, de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation, et fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives et est donc particulièrement bien adaptée aux équations de la mécanique des fluides. En effet, ces trois méthodes se basent sur le même concept des méthodes de résidus pondérés, la seule différence entre elles réside dans la nature des fonctions de pondération utilisées pour chaque méthode.

Contrairement aux méthodes de simulation numérique basées sur la résolution des équations aux dérivées partielles liant les propriétés macroscopiques des fluides, la méthode des automates de gaz sur réseau permet de retrouver les variables macroscopiques telles que les champs de vitesse, pression ou température, par simulation des interactions entre molécules. Le terme "gaz sur réseau" désigne une famille d'automates cellulaires [82, 81, 1, 106] qui ont été proposés en tant qu'une nouvelle technique pour l'étude numérique des équations de Navier Stokes et sont basés sur des systèmes microscopiques simples substituant l'intégration directe des équations aux dérivées partielles dont le but est de modéliser le mouvement de fluides ou de



gaz. Le principe est d'exprimer le système en termes d'interactions locales entre des particules fictives, et de faire en sorte que ces interactions respectent les lois physiques définies par les équations qui régissent le système.

Le modèle HPP proposé par Hardy, de Pазzy et Pomeau en 1973 [45] est le premier représentant de la famille des gaz sur réseau. Le but pour ce modèle est de modéliser l'écoulement d'un fluide en termes d'interactions entre les particules constituant ce fluide. Les caractéristiques essentielles qui sont empruntées aux interactions microscopiques réelles sont les lois de conservation de la masse et des moments. Cependant les premières simulations d'écoulements à l'échelle microscopique de l'automate HPP sont très approximatives et ne permettent pas d'obtenir des résultats correspondant à ceux obtenus pour les équations de Navier-Stokes.

En 1986, Frish, Hasslacher et Pomeau ont proposé le modèle FHP [39] en vue d'apporter des améliorations au modèle HPP. Ce modèle n'est pas très différent de celui de HPP dans le sens que les deux modèles possèdent les mêmes lois de conservation et le même processus d'évolution : collision et advection. La seule différence entre HPP et FHP est la symétrie imposée par la structure triangulaire de lattice, qui détermine alternativement la symétrie du tenseur de la structure du modèle et par conséquent assure l'isotropie.

Malgré les avantages offerts par la modélisation par automates de gaz sur réseau, ces derniers restent limités par les défauts suivants :

- Bruit intrinsèque dû à la large fluctuation relative des nombres de particules ;
- Non respect de l'invariance galiléenne ;
- Difficulté d'étendre les modèles HPP et FHP pour résoudre les problèmes tridimensionnels ;
- ...

En 1988, la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) a été introduite par McNamara et Zanetti [71], pour réduire ces limitations relatives aux simulations par automates sur réseau (Lattice Gaz Automata, LGA). Le modèle de Boltzmann a été proposé pour retrouver les propriétés hydrodynamiques de telle sorte que les variables booléennes dans les automates cellulaires soient représentées par des nombres réels compris entre 0 et 1 représentant leurs valeurs moyennes et dont l'évolution en temps est contrôlée par l'équation de Boltzmann [25] dérivée du modèle Gaz sur réseau. Cependant avec cette méthode les règles de collision entre particules limitaient toujours les simulations car les changements de viscosité du fluide simulé étaient impossibles.

Higuera et Jiménez [48] ont proposé alors d’exprimer les relations de collision par un opérateur linéarisé afin d’améliorer la prise en compte du type de fluide en modifiant la viscosité de ce dernier en fonction des paramètres de simulation. Ensuite les distributions de type Fermi-Dirac furent remplacées par des distributions de Boltzmann et l’opérateur de collision définissant l’interaction entre les particules a été remplacé par le modèle BGK, Bhatnagar, Gross et Krook [20]. Cet opérateur à temps de relaxation simple suggéré par Chen et al. [26], Koelman [58] et Qian, D’Humières et Lallemand [89] permet de définir en permanence la collision sur chaque nœud en fonction des caractéristiques du fluide et des distributions de Boltzmann au lieu d’utiliser des tables exprimant l’ensemble des possibilités comme avec les modèles HPP ou FHP.

Ainsi, la méthode LBM a connu de grands progrès et est devenue une méthode alternative pour la résolution des problèmes de la dynamique des fluides et a défié les méthodes traditionnelles de mécanique de fluides dans beaucoup de secteurs. Dans les méthodes classiques, les équations de Navier Stokes sont résolues en des points discrets. Autrement dit, les équations aux dérivées partielles non linéaires sont transformées en un ensemble d’équations algébriques non linéaires qu’on résout de façon itérative. Contrairement à ces méthodes conventionnelles basées sur la discrétisation des équations macroscopiques, la méthode LBM est basée sur des modèles microscopiques et des équations mésoscopiques issus de la théorie cinétique des gaz.

L’idée fondamentale de LBM, est de construire des modèles cinétiques simplifiés qui permettent d’incorporer les bases physiques essentielles des processus microscopiques ou mésoscopiques de telle sorte que les propriétés macroscopiques moyennes obéissent aux équations désirées. La raison principale de l’utilisation de ces méthodes cinétiques simplifiées pour l’étude des écoulements des fluides est que la dynamique d’un système est le résultat d’un comportement collectif de l’ensemble de particules constituant ce système et que la dynamique macroscopique n’est pas sensible aux détails fondamentaux dans la physique microscopique [54].

Le modèle de Boltzmann sur réseau avec l’opérateur de collision de BGK, ou le modèle de BGK, est le modèle classique de LBM pour l’étude de la dynamique des fluides. Historiquement, le succès de la méthode de Boltzmann sur réseau est en grande partie fondé sur BGK. Ce modèle est le plus employé pour résoudre l’équation incompressible de Navier-Stokes. Dans ce cas, il emploie une approche quasi-compressible, dans laquelle le fluide est conçu pour adopter un comportement légèrement compressible pour résoudre l’équation de pression. La méthode BGK peut également être employée pour simuler des écoulements compressibles pour un faible nombre de Mach, mais la viscosité et la vitesse du bruit sont des

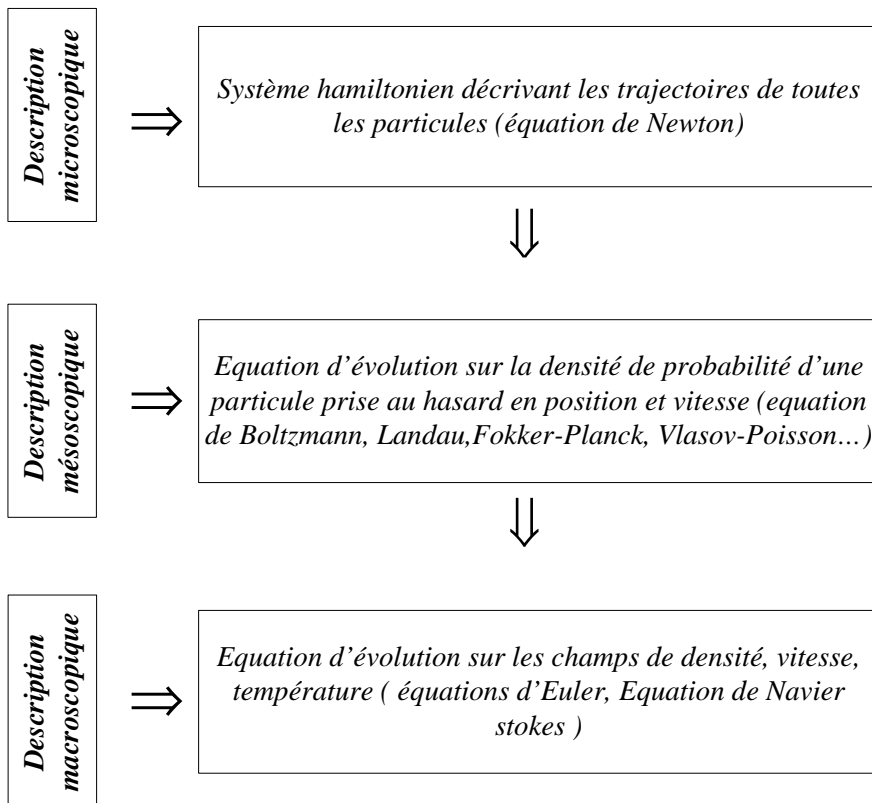


FIG. 1.1 – De la description macroscopique à la description microscopique

constantes du réseau qui ne peuvent pas être ajustées. Ce modèle BGK a été amélioré à partir de nombreuses tentatives pour augmenter la stabilité et l'exactitude numériques pour des problèmes spécifiques, ou pour représenter des phénomènes physiques additionnels. Cependant on se rend compte que tandis que ces améliorations apportent de nouveaux aspects pour le modèle BGK, ils présentent également de nouveaux problèmes. BGK reste donc le modèle du choix dans beaucoup de situations, en raison de sa facilité d'exécution aussi bien que de son efficacité [27].

Malgré sa facilité d'implémentation (simplicité des expressions), le modèle BGK souffre de quelques limitations telles que le nombre de Prandtl fixe ( $Pr = 1$  pour le modèle BGK) et le rapport fixe entre la viscosité cinématique et celle du volume (bulk viscosity) [52]. Pour réduire ces limitations et performer ainsi la méthode LBM en améliorant la stabilité numérique [61], la méthode LBM à temps de relaxation multiples (MRT, Multiple Relaxation Time) a été développée par d'Humières [51]. La méthode MRT de Boltzmann sur réseau aussi appelée l'équation généralisée de Boltzmann sur réseau (GLBM) ou la méthode des moments, contrairement au modèle BGK basé sur un temps de relaxation simple (aussi appelé SRT, Simple Relaxation Time), se diffère par le choix de multiples temps de relaxation.

Le modèle entropique de Boltzmann sur réseau (ELB) est semblable au modèle BGK. L'opérateur de collision est encore une relaxation simple vers un équilibre. Les différences principales sont l'évaluation de la fonction de distribution d'équilibre et une modification locale du temps de relaxation. L'équilibre n'est pas pris comme une discrétisation de la distribution continue d'équilibre de Maxwell-Boltzmann mais plutôt comme extremum de l'entropie discrétisée. Le temps de relaxation est accordé localement afin d'éviter une diminution d'entropie pendant la collision. Ce dernier procédé est montré pour empêcher les fonctions de distribution d'adopter des valeurs négatives, ce qui assure la stabilité numérique sans conditions. Malheureusement, il a également un coût informatique élevé puisqu'on doit résoudre une équation implicite à chaque noeud de réseau pour chaque pas de temps [56, 8, 9].

La méthode LBM a prouvé son efficacité dans le domaine d'écoulements classiques de fluides et particulièrement dans les géométries complexes et milieux poreux. Elle a attirée l'attention des mécaniciens des fluides pour la simulation d'écoulements dans différentes applications. Lallemand et al. ont proposé la méthode de Boltzmann sur réseau pour étudier les problèmes à frontières mobiles[62]. Bouzidi et al. ont développé une nouvelle méthode de traitement de conditions aux limites pour les interfaces solide/fluide[23]. Mezrhab et al. ont développé un couplage entre la méthode de Boltzmann sur réseau à celle des différences finis pour simuler des écoulements convectifs[73]. Semma et al. ont étudié les écoulement en présence de changement de phase[94]. Mohammad et al. se sont intéressés à la si-

mulation de la convection naturelle dans une cavité ouverte[77]. Bennacer et al. ont considéré une cavité entraînée[18]. El Ganaoui et Djebali ont simulé des transitions d'écoulement[40]. Addakiri et al. ont développé une méthode hybride couplant la méthode de Boltzmann sur réseau et celle des volumes finis pour le traitement des problèmes de changement de phase[4].

Dans ce travail de thèse, on se propose de modéliser numériquement le transfert de chaleur et de masse par la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM). Pour ce faire, dans ce **premier chapitre** une revue bibliographique a été présentée pour situer la méthode de Boltzmann sur réseau par rapport aux méthodes basées sur la résolution des équations de Navier-Stokes.

Dans le **deuxième chapitre** nous avons étudié les fondements de base de cette méthode, principalement sa dérivation de la théorie cinétique des gaz, notamment de l'équation pertinente de Boltzmann, sa relation avec la mécanique des fluides, l'approximation BGK, les différents schémas LBM et les différents types de conditions aux limites.

Le **troisième chapitre** présente la mise en application de la méthode de Boltzmann sur réseau pour la résolution des problèmes de diffusion mono et bidimensionnels. En effet, on a explicité la méthodologie d'application de la méthode LBM et des conditions aux limites relatives en résolvant l'équation de diffusion par un schéma monodimensionnel (D1Q3) et un schéma bidimensionnel (D2Q9), comme on a implémenté et validé nos calculs avec des résultats existants.

Dans le **quatrième chapitre**, on a abordé les problèmes de transmission à l'interface, on a considéré le cas d'un flux discontinu à l'interface, cas du problème classique de Stefan qu'on a validé par comparaison à la solution analytique existante et le cas du problème de changement de phase avec convection dont les résultats numériques obtenus sont satisfaisants. Ensuite par un schéma LBM, on a développé un nouveau modèle bidimensionnel de traitement de la résistance thermique de contact (RTC) par la méthode de Boltzmann sur réseau(LBM). Ce modèle basé sur la modélisation de la RTC à l'interface entre deux milieux juxtaposés est validé analytiquement par comparaison avec des calculs monodimensionnels. En comparaison avec les modèles existants, le présent modèle permet de tenir compte de la résistance de contact en régime instationnaire comme il permet de bien prédire le comportement thermique interfacial.

Dans le **cinquième chapitre**, on a développé un couplage hybride de la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) et de la méthode des volumes finis (VF) pour étudier les problèmes de changement de phase solide/liquide. La méthode LBM est utilisée pour déterminer le champ des vitesses tandis que la technique des volumes

finis est appliquée pour discrétiser l'équation de conservation de l'énergie. Ce modèle est validé en comparaison avec des résultats de référence concernant une cavité carrée différentiellement chauffée sans changement de phase puis pour la fusion du Gallium dans une cavité allongée.

Enfin une **conclusion générale** clôt notre présentation en mettant l'accent sur l'ensemble des travaux effectués dans ce mémoire ainsi que sur les perspectives de ce travail.

# Chapitre 2

## La méthode de Boltzmann sur réseau

### 2.1 Introduction

Généralement, pour traiter des systèmes physiques, on a recours à résoudre des équations aux dérivées partielles de ces systèmes soit de façon analytique ou numérique. Dans la description de ces équations, on considère la plupart du temps un système physique comme continu alors qu'en réalité il peut être discret (par exemple l'étude des interactions entre particules), donc le concept de continuité n'est qu'une idéalisation.

Pour plusieurs systèmes physiques, les équations aux dérivées partielles sont non linéaires, et leurs solutions analytiques ne sont pas abordables. Pour ce fait il s'avère essentiel d'opter pour des solutions numériques. Cependant pour certaines équations aux dérivées partielles qui sont non linéaires, il est difficile d'obtenir aussi la solution numérique que celle analytique. Or cette difficulté est principalement liée à la non linéarité de ces équations, donc on ne peut en faire face sans procéder par des approximations de ces équations de point de vue continuité.

Parmi les méthodes d'approximation des équations aux dérivées partielles, on trouve les méthodes des « gaz sur réseau » et la méthode de Boltzmann sur réseau qui présentent un grand intérêt pour l'amélioration de l'étude des systèmes complexes, ces méthodes sont complètement différentes de celle traditionnelles vu que le concept de continuité est abandonné. Dans le domaine de la théorie cinématique et dynamique des molécules, ces deux méthodes fournissent non seulement

une simple méthode pour l'étude théorique des systèmes physiques mais offre aussi des algorithmes pour des simulations réelles en pratique.

## 2.2 La théorie cinétique

### 2.2.1 Mécanique des fluides et théorie cinétique

La mécanique classique des fluides repose sur les lois fondamentales de la dynamique ou équations de Newton. D'une part l'application de ces lois à un ensemble de particules en interaction aboutit à un système Hamiltonien dans l'espace des phases, des positions et des vitesses de chaque particule. D'autre part l'application de ces lois aux éléments infinitésimaux de volume d'un fluide aboutit aux équations hydrodynamiques : Les équations d'Euler pour un fluide non visqueux et de Navier Stokes pour un fluide visqueux.

Entre le niveau de description microscopique associé aux équations sur les trajectoires des particules et le niveau de description macroscopique associé aux équations d'hydrodynamique, la théorie cinétique fournit un niveau intermédiaire, ou mésoscopique du fluide.

### 2.2.2 Description de la continuité hydrodynamique

La dynamique des fluides est l'étude des mouvements des fluides, qu'ils soient liquides ou gazeux. La résolution d'un problème de dynamique des fluides demande normalement de calculer diverses propriétés macroscopiques des fluides comme par exemple la vitesse, la pression, la densité et la température en tant que fonctions de l'espace et du temps.

Les gaz sont composés de molécules qui se heurtent entre elles comme des objets pleins. L'hypothèse de continuité, cependant, considère les fluides comme étant continus. C'est-à-dire que l'on admet que des propriétés telles que la densité, la pression, la température, et la vitesse sont prises pour étant bien définies à des points infiniment petits, et ne changent pas d'un point à un autre. La nature discrète et moléculaire d'un fluide est donc ignorée.

Les équations d'Euler pour un fluide idéal s'écrivent comme suit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho V = 0 \quad (2.1a)$$



$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho(V \cdot \nabla)V = -\nabla P \quad (2.1b)$$

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho(V \cdot \nabla)\varepsilon = -P(\nabla v) \quad (2.1c)$$

où  $P$  est la pression hydrodynamique,  $\rho$ ,  $v$  et  $\varepsilon$  sont la densité de masse, la vitesse (macroscopique) et la densité d'énergie interne par unité de masse, respectivement. Ces champs représentent les variables thermodynamiques fondamentales spécifiant un système.

Les équations (2.1) sont les formes différentielles des lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour les fluides idéaux (non dissipatifs).

Pour les fluides dissipatifs (visqueux), l'équation de continuité (2.1a) reste la même alors que les deux autres diffèrent.

Remarquons que l'équation (2.1b) peut s'écrire en fonction du tenseur de la densité de flux, tel que :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v_i) = -\frac{\partial \Pi_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.2)$$

Avec  $\Pi_{ij} = P\delta_{ij} + \rho v_i v_j$  est le tenseur de densité de flux, qui représente le moment réversible dû aux forces de pression exercées sur le fluide.

Pour les fluides visqueux, cette viscosité implique une irréversibilité du moment dans la direction opposée à celle des gradients de vitesse. Donc l'équation de mouvement pour un fluide visqueux est obtenue par l'ajout d'un terme de viscosité  $-\sigma'_{ij}$ , au tenseur de densité de flux.

$$\Pi_{ij} = P\delta_{ij} + \rho v_i v_j - \sigma'_{ij} = \rho v_i v_j - \sigma_{ij} \quad (2.3)$$

avec  $\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + \sigma'_{ij}$ .

Pour les fluides Newtoniens, en utilisant les hypothèses de symétrie, le tenseur de contraintes visqueux s'écrit, en coordonnées cartésiennes comme suit :

$$\begin{aligned}\sigma'_{ij} &= \eta_1 \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{D} \delta_{ij} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) + \eta_2 \delta_{ij} \frac{\partial v_l}{\partial x_l} \\ &= (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_k}{\partial x_l}\end{aligned}\quad (2.4)$$

où  $\delta_{ijkl} = \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{D} \delta_{ij} \delta_{kl}$  et  $D$  représente le coefficient de diffusion.

$\eta_1$  et  $\eta_2$  sont les coefficients de viscosité :  $\eta_1$  est la viscosité dynamique de cisaillement et  $\eta_2$  la viscosité de dilatation.

### 2.2.3 Equation de Navier Stokes

A partir de l'équation (2.2) et en tenant compte de la formule du tenseur de flux de densité pour un fluide visqueux, c'est à dire :  $\Pi_{ij} = P \delta_{ij} + \rho v_i v_j - \sigma'_{ij}$ , la forme générale de l'équation de Navier Stokes est obtenue :

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_k}{\partial x_l} \quad (2.5)$$

De façon similaire on retrouve l'équation d'énergie pour les fluides visqueux :

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho (v \cdot \nabla) \varepsilon &= -P \nabla \cdot v + (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_l} + \nabla \cdot (k \nabla T) \\ &= \sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \nabla \cdot (k \nabla T)\end{aligned}\quad (2.6)$$

Où  $k$  est la conductivité thermique et  $Q = k \nabla T$  le flux de chaleur.

- $\sigma_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$  représente le travail des forces de surface.
- $\nabla \cdot (k \nabla T)$  représente le transfert d'énergie dû à la conduction de chaleur.
- $-P \nabla \cdot v$  représente le transfert réversible d'énergie dû à la compression.

Les deux termes restants en  $\eta_1$  et  $\eta_2$  mesurent le taux pour lequel l'énergie mécanique se transforme de façon irréversible en énergie thermique.

Donc, pour un fluide visqueux, une fonction de dissipation  $\phi$  est définie telle que :

$$\begin{aligned}
\phi &= \sigma'_{ij} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_l} \\
&= (\eta_2 - \frac{2}{D} \eta_1) (\nabla \cdot v)^2 + \eta_1 \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \\
&= (\eta_2 - \frac{2}{D} \eta_1) (\nabla \cdot v)^2 + \frac{1}{2} \eta_1 \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right)^2
\end{aligned} \tag{2.7}$$

qui est une fonction positive pour les fluides Newtoniens. La positivité de cette fonction de dissipation se manifeste par le fait que le transfert d'énergie dû à la viscosité est en effet irréversible.

Pour récapituler, nous avons obtenu un ensemble d'équations partielles dans l'espace euclidien :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i) = 0 \tag{2.8a}$$

$$\rho \frac{\partial v_i}{\partial t} + \rho v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_k}{\partial x_l} \tag{2.8b}$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho v_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} = -P \frac{\partial v_i}{\partial x_i} + (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_l} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \tag{2.8c}$$

Ce sont les équations gouvernant le mouvement des fluides Newtoniens. Dans le cas où les variations de  $\rho$ ,  $P$  et  $T$  sont négligeables, les coefficients de transport peuvent être traités, approximativement, comme constants, et les équations (2.8b) et (2.8c) se simplifient :

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho (v \cdot \nabla) v = -\nabla P + \eta_1 \nabla^2 v + \left( \eta_2 + \frac{(D-2)}{D} \eta_1 \right) \nabla (\nabla \cdot v) \tag{2.9a}$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho v \cdot \nabla \varepsilon = -P \nabla \cdot v + (\eta_1 \delta_{ijkl} + \eta_2 \delta_{ij} \delta_{kl}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_k}{\partial x_l} + k \nabla^2 T \tag{2.9b}$$

Pour un fluide incompressible satisfaisant  $\frac{D\rho}{Dt} \equiv \frac{\partial\rho}{\partial t} + v \cdot \nabla\rho = 0$  avec  $\nabla \cdot v = 0$ , l'équation de la quantité de mouvement se réduit à l'équation incompressible de Navier Stokes :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)v = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu \nabla^2 v \quad (2.10)$$

Où  $\nu = \frac{\eta_1}{\rho}$  est la viscosité cinématique.

Si  $\rho$  est constante, la divergence de l'équation (2.10) mène à l'équation de Poisson pour la pression :

$$\nabla^2 P = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (2.11)$$

Cette équation peut être utilisée pour éliminer le terme de la pression des équations ci-dessus.

## 2.3 Equation de Boltzmann

### 2.3.1 Théorie cinétique et équation de Boltzmann

Par opposition à l'approche des champs continus, la théorie cinétique suppose qu'un fluide est constitué d'un grand nombre de particules dont les mouvements obéissent aux lois de la mécanique newtonienne. Résoudre directement le système avec un grand nombre de particules de degré de liberté de l'ordre du nombre d'Avogadro ( $10^{23}$ ), est impossible. D'autant que, l'objectif n'est pas de connaître le mouvement de chaque particule, mais d'évaluer le comportement collectif du système. Donc une statistique descriptive du système s'avère très importante. La théorie cinétique des fluides appartient à une branche de la physique, qui se propose d'expliquer les propriétés macroscopiques des fluides à partir d'une analyse statistique des mouvements des particules qui les constituent.

Le point de départ de la théorie cinétique est l'analyse des collisions binaires. Pour cela deux types de collisions sont considérés :

- Collisions élastiques : pas de modification de l'état interne des particules ;
- Collisions inélastiques : modification de l'état d'au moins une des particules qui entrent en jeu dans la collision (gain ou perte d'énergie interne).

Une hypothèse fondamentale de la théorie cinétique est que l'information complète pour la statistique descriptive d'un fluide, à l'équilibre thermique ou à proximité, est contenue dans la fonction de distribution d'une particule singulière  $f_1(r, \Gamma, t)$  pour les molécules constituant le système [22, 19], où  $r$  et  $\Gamma$  notent les coordonnées de l'espace de phase (espace à six dimensions : 3 coordonnées de position  $r$  et 3 coordonnées de mouvement  $\Gamma$ ) et  $t$  note le temps.

La théorie cinétique repose sur un certain nombre d'hypothèses :

- Les interactions moléculaires entre molécules (autres que les chocs) sont négligeables ;
- Le nombre  $N$  de molécules par unité de volume est grand et constant (homogénéité du fluide à l'échelle microscopique) ;
- Entre deux chocs supposés élastiques, le mouvement de chaque particule est rectiligne et uniforme) ;
- La direction des vecteurs vitesses des diverses particules obéit à une répartition spatiale uniforme ;
- Le module des vecteurs vitesses répond à une loi de distribution (à déterminer) qui ne dépend pas du temps lorsque les variables d'état macroscopiques sont fixes.

Le problème majeur de la théorie cinétique est de formuler et résoudre l'équation de transport, qui est une équation de la fonction de distribution pour différents processus de collisions selon la nature de collisions entre molécules. La solution de l'équation de transport fournit les équations de moments, qui sont des équations macroscopiques telles que celles de Navier Stokes.

### 2.3.2 Fonction de distribution et moments hydrodynamiques

Le gaz, représenté par un système de  $N$  particules ponctuelles classiques indiscernables, est décrit par un Hamiltonien  $H$  fonction des coordonnées et des vitesses de toutes les particules. La fonction de distribution dans l'espace des phases dépend, outre le temps, de  $6N$  variables coordonnées et vitesses. Dans le cas d'un gaz dilué, il n'est cependant pas nécessaire de connaître la fonction de distribution complète pour rendre compte de la plupart des propriétés macroscopiques.

Beaucoup de ces propriétés, que le gaz soit ou non en équilibre thermodynamique, sont en effet convenablement décrites au moyen de la fonction de distribution d'une particule. Nous allons chercher à établir une équation d'évolution pour cette fonction de distribution, à partir de l'idée fondamentale selon laquelle, une

molécule n'interagit jamais avec plus d'une autre molécule à la fois et se meut librement entre deux collisions successives. Chaque collision a une durée beaucoup plus courte que le temps "moyen" ( temps typique ou temps de collision) qui sépare deux collisions successives. Ainsi, dans un gaz dilué, les molécules, pour l'essentiel du temps, n'interagissent pas avec d'autres molécules. C'est l'une des raisons pour lesquelles les propriétés macroscopiques d'un tel gaz dépendent seulement de la fonction de distribution d'une particule.

En considérant  $N$  le nombre de particules et  $m_0$  la masse d'une particule, il est possible de définir :

$$\text{La densité numérique : } n(r, \Gamma, t) = NF_1(r, \Gamma, t) \quad (2.12)$$

$$\text{La densité massique : } f(r, \Gamma, t) = m_0 NF_1(r, \Gamma, t) = m_0 n(r, \Gamma, t) \quad (2.13)$$

Les quantités macroscopiques suivantes sont les moments hydrodynamiques :

$$\text{La densité de masse : } \rho(r, t) = \int f(r, \Gamma, t) d\Gamma \quad (2.14)$$

$$\text{La vitesse macroscopique : } v(r, t) = \frac{1}{\rho} \int \xi f(r, \Gamma, t) d\Gamma \quad (2.15)$$

$$\text{La densité d'énergie interne : } \varepsilon(r, t) = \frac{1}{\rho} \int (\xi - v)^2 f(r, \Gamma, t) d\Gamma \quad (2.16)$$

tel que  $\xi$  représente la vitesse microscopique.

### 2.3.3 Equation de Boltzmann

L'équation basique de la théorie cinétique est l'équation d'évolution de  $f(r, \Gamma, t)$  en présence des collisions des molécules. La conservation du volume de l'espace de phase (théorème de Liouville) mène à l'équation de transport :

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \nabla f = C(f) \quad (2.17)$$

$C(f)$  est l'opérateur de collision qui représente le taux de changement de la fonction de distribution  $f(r, \Gamma, t)$ , dû aux collisions.

D'une manière tout à fait générale, le but de la théorie cinétique est de trouver l'équation d'évolution – ou équation cinétique – pour la fonction de distribution

d'une particule. Il existe ainsi diverses équations cinétiques, chacune étant relative à un système physique particulier. La forme spécifique des équations cinétiques est déterminée par la nature du système (gaz, solide, liquide, plasma, . . .), la nature des interactions entre les particules (forme du potentiel, intensité et portée des interactions, . . .) et la valeur des paramètres fixant l'état macroscopique du système (densité, température).

Dans le cas des gaz classiques dilués, l'équation cinétique pertinente, qu'il est possible d'établir sous certaines hypothèses, est l'équation de Boltzmann (L. Boltzmann, 1872) [28, 70]. Le gaz considéré est supposé admettre un état d'équilibre local au voisinage de chaque point de l'espace. Un certain nombre de champs sont ainsi supposés bien définis :

- *La température locale  $T(r,t)$  du gaz ;*
- *La densité de particule locale  $\rho(r,t)$  du gaz ;*
- *La pression locale  $p(r,t)$  du gaz.*

L'équation de Boltzmann permet notamment d'étudier la relaxation du gaz vers l'équilibre global en décrivant l'évolution de la fonction de distribution  $f(r, \Gamma, t)$  d'un système de particules. Boltzmann admet le choc moléculaire, l'implication immédiate de cette hypothèse est que les molécules n'ont pas de corrélation entre elles dans un processus de collisions, donc la factorisation suivante est légitime :

$$F_2(r_1, r_2, \Gamma_1, \Gamma_2, t) = F_1(r_1, \Gamma_1, t) F_1(r_2, \Gamma_2, t) \quad (2.18)$$

Pour justifier cette hypothèse du chaos des molécules, nous devons admettre :

1. *La densité est suffisamment faible, donc seules les collisions entre deux particules sont considérées ;*
2. *La dépendance spatiale des propriétés du gaz est suffisamment lente, donc les collisions puissent être considérées comme localisées dans l'espace physique ;*
3. *La portée des particules est suffisamment courte, donc l'hypothèse de densité faible a un sens.*

Avec toutes ces hypothèses, et avec les limites du gaz de Boltzmann (BGL) nous avons :

$$\begin{aligned} N &\rightarrow +\infty \\ m_0 &\rightarrow 0 \\ r_0 &\rightarrow 0 \\ Nm_0 &\rightarrow cste \end{aligned}$$

$$Nr_0^2 \rightarrow cste$$

Tel que  $r_0$  est la portée de l'interaction.

L'équation de Boltzmann qui est une équation integro-différentielle non linéaire, peut être obtenue :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{1}{m_0} \int ds d\xi_1 \|\xi_1 - \xi\| (f' f'_1 - f f_1) \quad (2.19)$$

Avec  $f' \equiv f(r, \xi', t)$ ,  $f'_1 \equiv f_1(r, \xi', t)$ ,  $f_1 \equiv f_1(r, \xi, t)$ ,  $f \equiv f(r, \xi, t)$  et  $ds$  note la section que traverse une collision, ici c'est l'élément de surface d'un disque de rayon  $r_0$  perpendiculaire au vecteur  $(\xi_1 - \xi)$ ;  $\xi'$  et  $\xi'_1$  sont les vitesses avant collision de deux particules qui deviennent  $\xi$  et  $\xi_1$  après collision. Les vitesses avant et après collisions sont liées par la conservation d'énergie et des moments.

Les équations d'Euler peuvent facilement être ressorties de l'équation de transport, indépendamment des détails de l'opérateur de collision. Aussi longtemps certaines symétries, telles que les lois de conservation, sont préservées. Le moment d'ordre 0 de l'équation au-dessus correspond à l'équation de continuité, le moment d'ordre 1 correspond à l'équation d'Euler.

Puisque  $r$ ,  $\xi$  et  $t$  sont indépendants, on peut commuter les signes suivants :  $\int$ ,  $\nabla$  et  $\frac{\partial}{\partial t}$ .

Le moment d'ordre 0 de l'équation de transport mène à l'équation de continuité de masse :

$$\int \left( \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \nabla f \right) d\xi = \frac{\partial}{\partial t} \int f d\xi + \nabla \int \xi f d\xi = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (2.20)$$

Nous calculons alors le moment du premier ordre de l'équation de transport pour obtenir l'équation de la quantité de mouvement :

Décomposons  $\xi$  telle que :  $\xi = \xi_0 + v$

$$\int \xi \frac{\partial f}{\partial t} d\xi = \frac{\partial}{\partial t} \int \xi f d\xi = \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} \quad (2.21)$$

$$\int \xi (\xi \cdot \nabla) f d\xi = \nabla \left[ (\rho v v) d\xi + \int \xi_0 \xi_0 f d\xi \right] \quad (2.22)$$

$\int \xi_0 \xi_0 f d\xi$  peut être identifié à  $-\sigma_{ij}$ , tel que  $\sigma_{ij}$  est le tenseur de contraintes.



Si  $f(r, \Gamma, t)$  est la fonction de distribution locale de Maxwell- Boltzmann (annexe),

$$f_L = \rho \left[ \frac{m_0}{2\pi K_B T} \right] \exp\left(-\frac{m_0}{2K_B T}(\xi - v^2)\right) \quad (2.23)$$

Alors  $\int \xi_0 \xi_0 f d\xi$  est en effet égal à  $p\delta_{ij}$ , où  $p$  est la pression hydrodynamique, par conséquent le moment du second ordre de  $f_L$  est le moment du tenseur de flux  $\Pi_{ij}$ , d'où l'équation d'Euler.

De façon semblable, le moment du second ordre de l'équation de transport est :

$$\frac{1}{2} \int \xi^2 \frac{\partial f}{\partial t} d\xi = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \varepsilon \right) \quad (2.24)$$

$$\frac{1}{2} \int \xi^2 (\xi \cdot \nabla) f d\xi = \nabla \cdot \left[ \rho v \left( \frac{1}{2} v^2 + \varepsilon \right) + v \cdot \int \xi_0 \xi_0 f d\xi + \frac{1}{2} \int \xi_0 \xi_0^2 f d\xi \right] \quad (2.25)$$

Dans cette équation, il est évident que le terme  $\frac{1}{2} \int \xi_0 \xi_0^2 f d\xi$  peut être identifié au flux de chaleur  $Q$  qui disparaît si  $f = f_L$  (à cause de la symétrie de l'intégrale).

Par conséquent, l'équation de l'énergie est retrouvée :

$$\frac{1}{2} \int \xi^2 (\xi \cdot \nabla) f_L d\xi = \nabla \cdot \left[ \rho v \left( \frac{1}{2} v^2 + \varepsilon \right) + Pv \right] \quad (2.26)$$

Jusqu'à ici, les équations d'Euler ont été dérivées du point de vue de la théorie cinétique. Il est beaucoup plus difficile d'obtenir les équations de Navier Stokes à partir de cette théorie. En utilisant la procédure de Chapman- Enskog [49], une dérivation des équations de Navier Stokes est possible (annexe).

## 2.4 Automates cellulaires

Les automates cellulaires et les techniques de simulation associées constituent des outils puissants pour décrire, comprendre et simuler le comportement de systèmes complexes [68]. Le principe est une discrétisation du temps et de l'espace afin de modéliser le système en termes d'interactions locales entre les composants. Ceux-ci peuvent prendre un nombre fini d'état.

Le concept d'automate cellulaire est apparu à la fin des années 1940. Von Neumann, dont le nom est traditionnellement associé à l'architecture des ordinateurs

séquentiels, a en effet posé les bases de cette approche en définissant les propriétés qu'un système devrait posséder pour être auto répliquant. Il imaginait alors un univers rempli de cellules caractérisées par un état interne qui évolue de façon synchrone en fonction de l'état des cellules voisines. Le concept d'automate cellulaire était né. Il n'a cessé de se développer au cours des décennies, permettant ainsi de modéliser des systèmes complexes et variés comme l'écoulement de fluides, les processus de réaction- diffusion chimique, la propagation d'ondes ou encore la modélisation du trafic urbain.

Avant d'aborder en détails les modèles d'automates cellulaires HPP et FHP, nous devons souligner la motivation d'utiliser les automates cellulaires simples pour l'étude des systèmes hydrodynamiques. La possibilité d'utiliser des modèles simples tels que l'automate de gaz sur réseau pour simuler les systèmes hydrodynamiques qui sont fortement non linéaires et complexes, est fondée sur les observations suivantes :

- L'étude de la dynamique moléculaire démontre que l'hydrodynamique s'applique qualitativement sur l'échelle microscopique, donc seulement entre  $10^3$  à  $10^8$  particules vont être utilisées pour la simulation du système hydrodynamique à la place de  $10^{24}$  particules ;
- Nul besoin de résoudre l'ensemble des équations exactes du mouvement, mais plutôt choisir d'étudier ou de résoudre un système simplifié. La forme des équations hydrodynamiques est bien déterminée par la symétrie de la mécanique newtonienne et les lois de conservation ;
- De telles symétries, sont par exemple, l'invariance de translation spatiale-temporelle continue, l'invariance rotationnelle (isotropie), l'invariance de parité et l'invariance galiléenne doivent être préservées dans la microdynamique fondamentale, du système régi par l'hydrodynamique.

### **2.4.1 Le modèle HPP (Hardy, Pazzis et Pomeau) de Gaz sur réseau**

En 1972, J. Hardy, Y. Pomeau et O. de Pazzis [45], ont proposé l'automate « Gaz sur réseau » à deux dimensions pour étudier l'hydrodynamique bidimensionnelle. Leur justification était d'étudier les questions fondamentales de la mécanique statistique tel que l'ergodicité et la divergence des coefficients de transport en deux dimensions.

Le modèle HPP consiste à travailler sur l'espace carré à deux dimensions avec une constante de réseau unitaire et un temps discret. Chaque particule a la masse

unité et la vitesse unité. Les quatre directions possibles lors du mouvement d'une particule sont celles en liaison avec les sites les plus proches. L'évolution d'un système a deux étapes : *collision* et *advection* à chaque instant du temps, les interactions entre particules se produisent par des collisions locales : le processus de collision implique des particules dans le même site  $x$  et instant  $t$ . Les règles de collision sont désignées pour conserver le nombre de particules, la quantité de mouvement et l'énergie cinétique, localement et de façon exacte.

Pour le modèle HPP, les règles de collision sont particulièrement simples : Il y a seulement des collisions frontales de deux corps. Quand la collision frontale se produit, les vitesses relatives des deux corps font une rotation de  $\frac{\pi}{2}$  et  $(-\frac{\pi}{2})$ . Après collision, les particules se déplacent vers les sites proches suivant les directions de leurs mouvements (figure (2.1)).

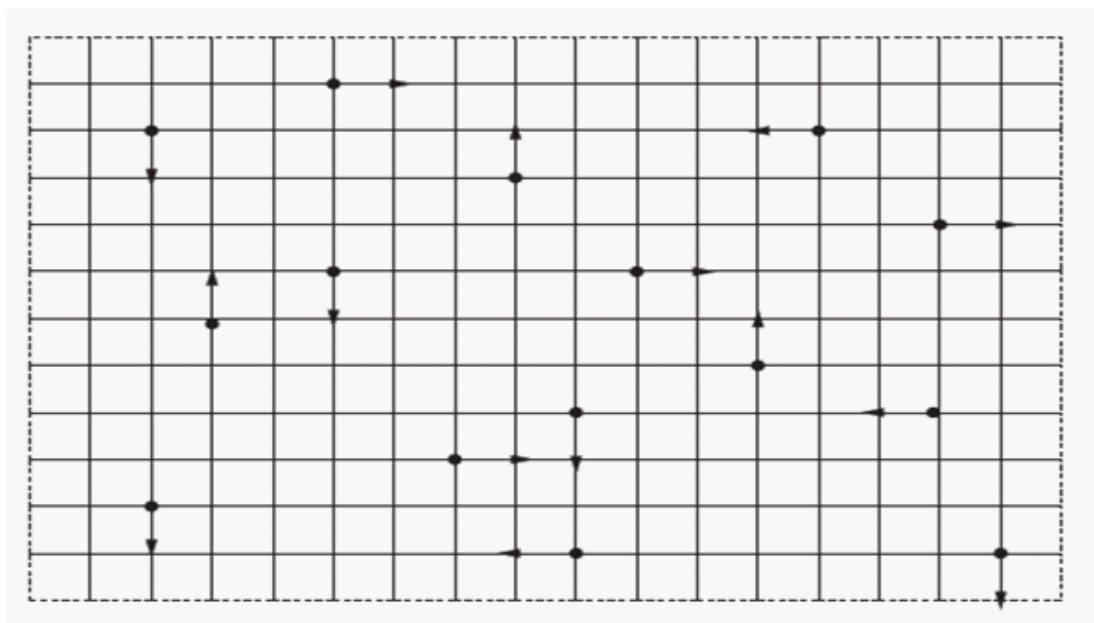


FIG. 2.1 – Le modèle HPP, fondé sur un réseau de symétrie carrée

### 2.4.2 Le modèle FHP (Frisch, Hasslacher et Pomeau) de Gaz sur réseau

Vu que l'espace triangulaire de réseau possède des symétries suffisantes, Frisch, Hasslacher et Pomeau [39] ont proposé un autre modèle de gaz sur réseau avec une structure triangulaire, dit modèle FHP (figure (2.2)).

Le modèle FHP n'est pas très différent de celui de HPP dans le sens où les deux modèles possèdent les mêmes lois de conservation et le même processus d'évolution : collision et advection. La seule différence entre HPP et FHP est la symétrie imposée par la structure du réseau, qui détermine alternativement la symétrie du tenseur de la structure du modèle.

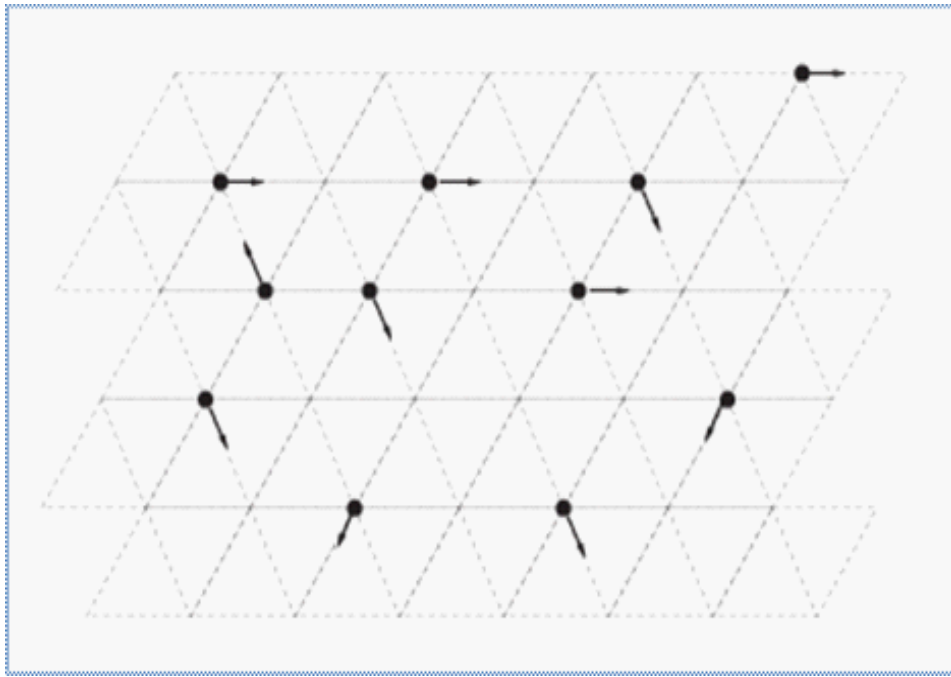


FIG. 2.2 – Le modèle FHP, fondé sur un réseau de symétrie triangulaire

### 2.4.3 Le modèle FHP sans particules au repos

Le modèle FHP de gaz sur réseau opère sur un espace bidimensionnel, triangulaire avec une constante de réseau unité. Chaque site du réseau est relié à ses voisins par des liens correspondants aux vecteurs (figure (2.3)) :

$$\hat{e}_\alpha = \left( \cos\left(\frac{2\pi(\alpha-1)}{6}\right), \sin\left(\frac{2\pi(\alpha-1)}{6}\right) \right), \alpha \in \{1, 2, \dots, 6\} \quad (2.27)$$

L'indice  $\alpha$  est de 1 à 6 (nombre de directions dans l'espace triangulaire de lattice), ou bien de 0 à 6 pour les particules au repos.

Supposant que la masse et le temps d'une particule sont unitaires, l'évolution du système se fait en deux étapes : collision et advection ; à chaque instant, sur chaque site les particules se heurtent et après s'éparpillent suite à un nombre de règles qui conservent la masse, la quantité de mouvement et l'énergie exactement et localement. Les collisions sont élastiques et instantanées avec une portée de l'interaction qui est nulle, donc toutes les particules ont la même énergie cinétique et une énergie potentielle nulle.

L'évolution de l'automate de gaz sur réseau de FHP dans l'espace bidimensionnel triangulaire, avec une constante unité du réseau à un temps discret  $t \in \{0, 1, 2, \dots\}$  est gouvernée par l'équation :

$$n_\alpha(x + \hat{e}_\alpha, t + 1) = n_\alpha(x, t) + C_\alpha(\{n_\alpha\}) \quad (2.28)$$

où  $n_\alpha(x, t)$  est le nombre de particules occupant le site  $x$  à l'instant  $t$  à une vitesse  $\hat{e}_\alpha$ .  $\{n_\alpha\}$  note l'ensemble de tous les  $n_\alpha(x, t)$  ;  $\{n_\alpha(x, t)/\alpha = 1, 2, \dots, 6\}$  et  $C_\alpha(\{n_\alpha\})$  est l'opérateur de collision représentant soit la création ou la suppression des  $n_\alpha(x, t)$  dues aux collisions. Puisque  $n_\alpha(x, t)$  est booléen, on a  $C_\alpha(\{n_\alpha\}) \in \{-1, 0, 1\}$ .

Les règles de collision des particules pour l'automate FHP conservent le nombre de particules, la quantité de mouvement et l'énergie cinétique pour chaque collision.

### 2.4.4 Le modèle FHP avec particules au repos

Ce deuxième modèle prend en considération les particules au repos (les particules à vitesses nulles), les mécanismes de ce modèle sont illustrés dans la figure (2.4).

L'existence d'autres types de collisions n'est pas exclue, à côté des collisions paires, on peut trouver les collisions triples avec des particules au repos.

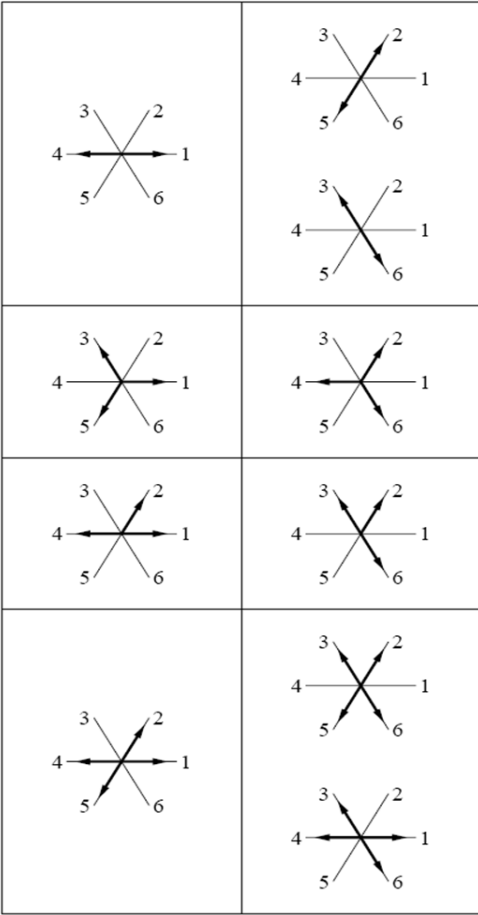


FIG. 2.3 – Les règles de collision pour l'automate FHP 6 bits. Les colonnes de gauche représentent les états d'entrée et celles de droites représentent les états de sortie.

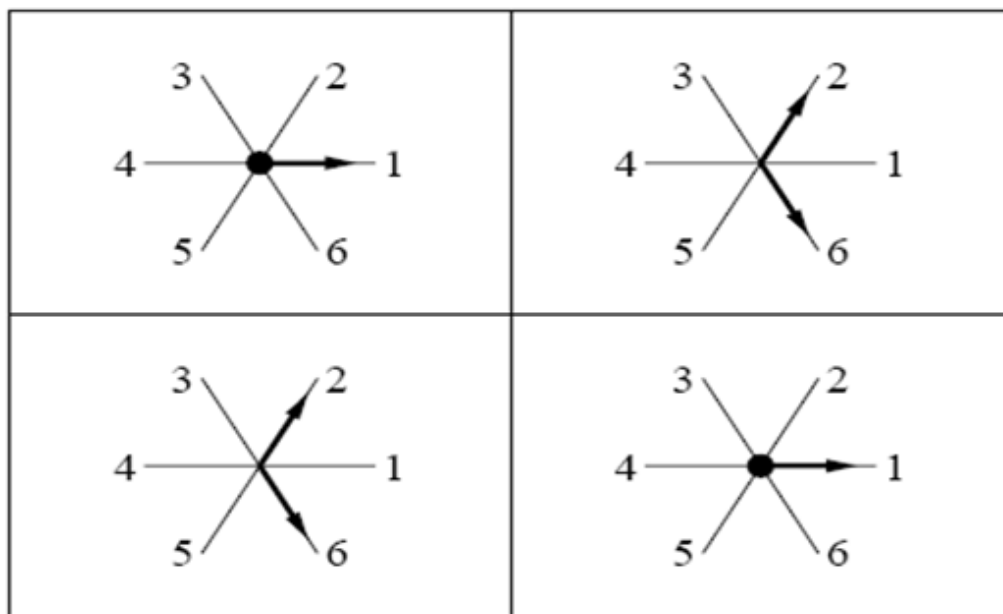


FIG. 2.4 – Les règles de collisions binaires prenant en compte les particules au repos. Les cercles noirs indiquent l'existence d'une particule au repos.

Le raisonnement d'introduire des collisions paires avec des particules au repos est que, lorsque la densité des particules est faible, la probabilité des collisions triples est inférieure à celle des collisions paires. Ainsi, l'existence des particules au repos augmente efficacement la probabilité des collisions enlevant les fausses quantités conservées le long des lignes de réseau. En outre, l'augmentation de la probabilité de collision réduit la viscosité cinématique  $\nu$ , et augmente le nombre de Reynolds,  $Re$ . Il est à noter que l'énergie cinétique n'est pas conservée pour les collisions impliquant les particules au repos, alors que la masse et la quantité de mouvement le sont.

## 2.5 Equation de Boltzmann sur réseau

En se basant sur l'ensemble moyen de l'équation régissant le modèle FHP ;

$$n_\alpha(x + \hat{e}_\alpha, t + 1) = n_\alpha(x, t) + C_\alpha(\{n_\alpha\})$$

avec l'approximation de Boltzmann [103], nous pouvons dériver l'équation de Boltzmann sur réseau :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha, t + 1) = f_\alpha(x, t) + \Omega_\alpha(\{f_\alpha\}) \quad (2.29)$$

où  $f_\alpha(x, t)$  est la fonction de distribution de la densité de masse pour une particule simple.  $\{f_\alpha\}$  note toutes les  $f_\alpha(x, t)$  et le terme  $\Omega_\alpha(\{f_\alpha\})$  est équivalent à l'opérateur de collision.

### 2.5.1 L'équation linéaire de Boltzmann sur réseau

Pour l'équation de Navier Stokes dérivée de la méthode LGA « Lattice Gaz Automata », nous trouvons au moins deux effets indésirables. Le premier est la perte de l'invariance galiléenne en raison du fait que le facteur  $g(\rho)$  est différent de 1, le deuxième est la dépendance entre l'équation d'état et la vitesse. Ces deux contraintes surviennent en raison de la forme de la distribution de Fermi Dirac. Si nous pouvons ajuster les coefficients des termes quadratiques dans la fonction de distribution, ces effets indésirables seront éliminés.

Nous écrivons l'équation linéaire de Boltzmann sur réseau comme suit :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha, t + 1) = f_\alpha(x, t) + J_{\alpha\beta}(f_\beta - f_\beta^{(eq)}) \quad (2.30)$$



où  $f_\beta^{(eq)}$  est une distribution d'équilibre à déterminer et  $J_{\alpha\beta}$  représente une matrice de passage qui dépend des états des particules avant et après collision, ainsi que de la densité d'équilibre autour de la quelle la linéarisation de l'opérateur de collision s'est faite.

La construction de cette équation consiste en deux choses. La première ; l'opérateur de collision est construit de telle sorte qu'il conserve la symétrie de l'opérateur de collision linéarisé pour  $\rho = \rho_0$ . La deuxième, est la construction de la fonction de distribution à l'équilibre,  $f_\alpha^{(eq)}$ , de telle sorte que,  $g(\rho)$  vaille l'unité et que la dépendance entre l'équation d'état et la vitesse soit éliminée.

Ainsi, la fonction de distribution à l'équilibre peut être explicitée sous la forme suivante :

$$f_\alpha^{eq} = \begin{cases} \frac{\rho}{\sigma}(\sigma_0 - \frac{\sigma_1}{Dc_s^2}\delta_{ij}v_iv_j), & \alpha = 0 \\ \frac{\rho}{\sigma}(1 + \frac{\delta_x}{c_s^2}\hat{e}_{\alpha,i}v_i + \frac{(D+2)}{2c_s^2}(Q_{\alpha,ij} + \frac{2}{D(D+2)}\delta_{ij})v_iv_j), & \alpha \neq 0 \end{cases} \quad (2.31)$$

où  $\sigma_0$  et  $\sigma_1$  représentent le nombre maximal de particules respectivement au repos et en mouvement, avec une vitesse unité pour chaque site.  $\sigma = \sigma_0 + \sigma_1$  est le nombre maximal de particules par site.  $D$  la dimension,  $c_s = \delta_x \sqrt{\frac{\sigma_1}{\sigma D}}$  est la vitesse du son qui peut être ajustée en variant  $\sigma_0$  (avec  $\sigma_1$  fixé) et  $Q_{\alpha,ij}$  le tenseur défini par  $Q_{\alpha,ij} = \begin{cases} 0, & \alpha = 0 \\ e_{\alpha,i}e_{\alpha,j} - \frac{1}{D}\delta_{ij}, & \alpha \neq 0 \end{cases}$ .

Ainsi, l'équation linéaire de Boltzmann sur réseau approche l'équation de Navier Stokes incompressible :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha, t + 1) = f_\alpha(x, t) + J_{\alpha\beta}f_\beta^{(neq)} \quad (2.32)$$

où  $f_\beta^{neq}$  est la fonction de distribution en non-équilibre :

$$f_\alpha^{(neq)} = f_\alpha - f_\alpha^{(eq)} \quad (2.33)$$

## 2.5.2 L'équation de BGK (Bhatnagar-Gross-Krook)

### Approximation simple du temps de relaxation

L'opérateur de collision peut être simplifié par l'approximation du temps de relaxation et l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \nabla f = C(f, f) \quad (2.34)$$

où l'opérateur de collision est explicité sous la forme :

$$C(f, f) = \int ds d\xi_1 (f' f'_1 - f f_1) \quad (2.35)$$

Le système tend vers l'état local de Maxwell- Boltzmann proche de l'équilibre. De plus, la fonction de distribution après collision est plus proche de l'équilibre que la fonction de distribution avant collision. Par conséquent nous pouvons appliquer l'approximation :

$$\int ds d\xi_1 f' f'_1 \approx \int ds d\xi_1 f^{(0)} f_1^{(0)} \quad (2.36)$$

car  $f^{(0)}$  est la solution de  $C(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$ , donc :

$$\int ds d\xi_1 f^{(0)} f_1^{(0)} = \int ds d\xi_1 f^{(0)} f_1^{(0)} = f^{(0)} \int ds d\xi_1 f_1^{(0)} \quad (2.37)$$

où nous utilisons le fait que  $f^{(0)}$  est indépendant de  $\xi_1$ . De ces deux dernières équations :

$$\int ds d\xi_1 f' f'_1 \approx f^{(0)} \int ds d\xi_1 f_1^{(0)} \quad (2.38)$$

Aussi, en raison des contraintes du développement de Chapman- Enskog (**Annexe**), qui imposent que les moments hydrodynamiques de  $f$  sont égaux à ceux de  $f^{(0)}$  :

$$\int ds d\xi_1 f f_1 = f \int ds d\xi_1 f_1 = f \int ds d\xi_1 f_1^{(0)} \quad (2.39)$$

Par suite le terme de collision dans l'équation de Boltzmann peut être approché par :

$$C(f, f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}) \quad (2.40)$$

où :  $\frac{1}{\tau} = \int ds d\xi_1 f_1^{(0)}$

$\tau$  est la caractéristique du temps de relaxation du processus de collision, et  $w = \frac{1}{\tau}$  est la caractéristique de la fréquence.

Donc l'équation de Boltzmann avec l'approche BGK devient :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \nabla f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{(0)}) \quad (2.41)$$

Cette équation est nommée l'équation BGK des noms de Bhatnagar, Gross et Krook.

## Le modèle réseau BGK

L'application de l'approximation simple du temps de relaxation sur l'équation de Boltzmann sur réseau mène à l'équation de réseau BGK [89] :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha, t + 1) = f_\alpha(x, t) - \frac{1}{\tau}(f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{(eq)}) \quad (2.42)$$

où  $f_\alpha^{(eq)}$  est donnée par l'équation 2.31.

La viscosité de réseau BGK est liée au temps de collision, par :

$$v = \frac{2\tau - 1}{2(D + 2)} \quad (2.43)$$

## 2.6 Mise en œuvre de l'équation de Boltzmann sur réseau

Pour les écoulements 2D, le modèle de Boltzmann sur réseau à 9 vitesses dans l'espace carré du réseau, noté par D2Q9, est le plus utilisé. Pour simuler les écoulements 3D, il y a différents modèles de réseaux cubiques tels que : D3Q15, D3Q19, D3Q27 ... etc. La figure (2.5) présente quelques exemples des modèles de Boltzmann sur réseau.

Pour expliciter la façon d'appliquer la méthode de Boltzmann sur réseau, le modèle D2Q9 est détaillé, de telle sorte que l'obtention des autres modèles 2D ou 3D se fonde sur les mêmes procédures, avec un changement soit au niveau de l'espace du réseau, soit au niveau du nombre de vitesses discrètes.

### 2.6.1 Le modèle DnQm

Commençant par l'équation de Boltzmann avec l'approximation BGK (équation (2.42)). Dans cette équation,  $f^{(0)}$  satisfait l'équation de distribution de Maxwell-Boltzmann. Les variables hydrodynamiques représentent les moments de la fonction

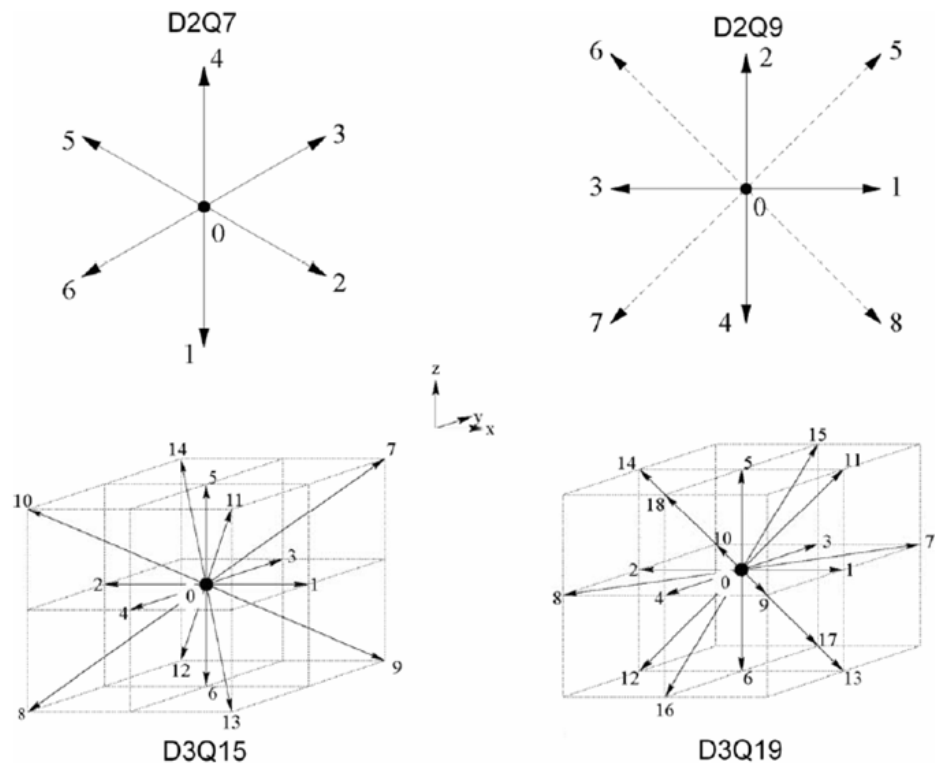


FIG. 2.5 – Vecteurs de vitesses discrètes pour quelques modèles dans l'espace 2D et l'espace 3D du réseau.

de distribution  $f$  :

$$\begin{aligned}\rho &= \int f d\xi \\ \rho u &= \int \xi f d\xi = \int \xi f^{(0)} d\xi \\ \rho \varepsilon &= \frac{1}{2} \int (\xi - u)^2 f d\xi = \frac{1}{2} \int (\xi - u)^2 f^{(0)} d\xi\end{aligned}\tag{2.44}$$

où  $\varepsilon = \frac{1}{2} D_0 RT$ , avec  $D_0$  est le nombre de degrés de liberté d'une particule.

En intégrant l'équation (2.42) par rapport au temps entre ( 0 et  $\delta t$  ) :

$$f(x + \xi \delta t, \xi, t + \delta t) = e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} f(x, \xi, t) + \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} \int_0^{\delta t} e^{\frac{t'}{\lambda}} f^{(0)}(x + \xi t', \xi, t + t') dt' \tag{2.45}$$

En supposant que  $\delta t$  est relativement petit et en négligeant les termes de l'ordre  $O(\delta t^2)$  dans le dernier terme de cette équation, le développement en séries de Taylor de  $e^{-\frac{\delta t}{\lambda}}$  donne :  $e^{-\frac{\delta t}{\lambda}} = 1 - \frac{\delta t}{\lambda}$ .

Avec une interpolation linéaire pour  $0 < t' < \delta t$ , nous obtenons :

$$f(x + \xi \delta t, \xi, t + \delta t) - f(x, \xi, t) = -\frac{1}{\tau} [f(x, \xi, t) - f^{(0)}(x, \xi, t)] \tag{2.46}$$

où,  $\tau = \frac{\lambda}{\delta t}$  le temps de relaxation sans dimension.

Nous développons la fonction de distribution à l'équilibre  $f^{(0)}$ , en série de Taylor de  $u$  :

$$f^{(0)} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \left(1 + \frac{(\xi \cdot u)^2}{RT} + \frac{(\xi \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right) + O(u^3) \tag{2.47}$$

Pour obtenir l'équation de Navier Stokes, le développement à l'ordre 2 est suffisant, et par suite :

$$f^{(eq)} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{D}{2}}} e^{\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right)} \left(1 + \frac{(\xi \cdot u)^2}{RT} + \frac{(\xi \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right) \tag{2.48}$$

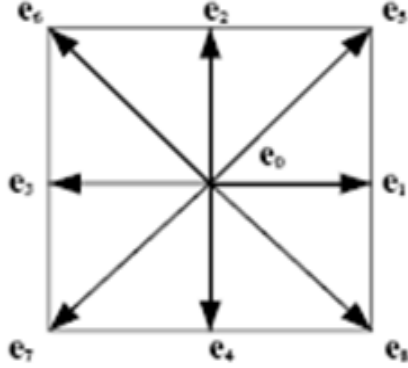


FIG. 2.6 – Les neuf vitesses du modèle D2Q9

Pour évaluer numériquement les variables hydrodynamiques de l'équation (2.44), nous avons besoin de discrétiser, proprement, l'espace des moments. Pour le modèle  $DnQm$ ,  $n$  désigne la dimension de l'espace et  $m$  le nombre de vitesses utilisées pour discrétiser l'espace. Par exemple la discrétisation du modèle le plus utilisé D2Q9 (modèle bidimensionnel à 9 vitesses discrètes) se fait de la manière suivante :

Dans cette discrétisation, l'intégration de l'équation (2.44) peut être approchée par :

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{\alpha} f_{\alpha} & (2.49) \\ \rho u &= \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} f_{\alpha} = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} f_{\alpha}^{eq} \\ \rho \varepsilon &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\xi_{\alpha} - u)^2 f_{\alpha} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (\xi_{\alpha} - u)^2 f_{\alpha}^{eq} \end{aligned}$$

où :  $f_{\alpha} \equiv f_{\alpha}(x, t) \equiv W_{\alpha} f(x, \xi_{\alpha}, t)$  et  $f_{\alpha}^{eq} \equiv f_{\alpha}^{eq}(x, t) \equiv W_{\alpha} f^{eq}(x, \xi_{\alpha}, t)$ .

$W_{\alpha}$  représente les coefficients de poids de la quadrature suivant chaque direction  $\alpha$ .

L'approximation ci-dessus indiquée, peut être écrite sous la forme suivante :

$$\int \psi(\xi) f^{eq}(x, \xi, t) = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \psi(\xi_{\alpha}) f^{eq}(x, \xi_{\alpha}, t) \quad (2.50)$$

$\psi(\xi)$  est le polynôme de  $\xi$ . L'intégrale ci-dessus, peut être évaluée par la quadrature de Gauss :

$$I = \int e^{(-\frac{\xi^2}{2RT})} \psi(\xi) d\xi = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \psi(\xi_{\alpha}) e^{(-\frac{\xi_{\alpha}^2}{2RT})} \quad (2.51)$$

Nous avons besoin, de discrétiser l'espace des phases de façon à ce que l'équation d'évolution (2.46) puisse être évaluée numériquement dans l'espace discrétisé dans le temps et dans l'espace. Pour ce faire considérons deux facteurs. Premièrement, l'espace des moments discrétisé est couplé avec l'espace physique pour obtenir la structure du réseau. Deuxièmement, une structure réseau de la symétrie exigée doit satisfaire aux contraintes de conservation dans l'équation (2.44) et aussi vérifier les équations de Navier Stokes.

Un système de coordonnées cartésiennes est utilisé pour le modèle D2Q9. Nous pouvons poser :  $\psi(\xi) = \xi_x^m \xi_y^n$  où  $\xi_x$  et  $\xi_y$  sont les composantes de  $\xi$ .

L'intégrale de l'équation (2.51) peut être écrite ainsi :

$$I = \left( \sqrt{2RT} \right)^{m+n+2} I_m I_n \quad (2.52)$$

où  $I_m = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\zeta^2} \zeta^m d\zeta$ ,  $\zeta = \frac{\xi_x}{\sqrt{2RT}}$  et  $\zeta = \frac{\xi_y}{\sqrt{2RT}}$ .

Pour l'évaluer, nous utilisons la formule d'Hermite du troisième ordre :  $I_m = \sum_{j=1}^3 w_j \zeta_j^m$ .

Les trois abscisses de la quadrature sont :  $\xi_1 = -\sqrt{\frac{3}{2}}$ ,  $\xi_2 = 0$ ,  $\xi_3 = \sqrt{\frac{3}{2}}$ , et les coefficients de poids correspondants sont :  $w_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}$ ,  $w_2 = \frac{2\sqrt{\pi}}{3}$ ,  $w_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{6}$ .

Par suite l'intégrale de l'équation (2.52) devient :

$$I = 2RT w_2^2 \psi(0) + \sum_{\alpha=1}^4 w_1 w_2 \psi(\xi_{\alpha}) + \sum_{\alpha=5}^8 w^2 \psi(\xi_{\alpha}) \quad (2.53)$$

$\xi_{\alpha}$  est l'ensemble des vitesses discrètes, avec :

- *un vecteur de vitesse nul pour  $\alpha = 0$ ;*
- *des vecteurs de vitesses :  $\sqrt{3RT}(\pm 1, 0)$  et  $\sqrt{3RT}(0, \pm 1)$  pour  $1 \leq \alpha \leq 4$ ;*
- *des vecteurs de vitesses :  $\sqrt{3RT}(\pm 1, \pm 1)$  pour  $1 \leq \alpha \leq 4$ .*

Après avoir discrétisé l'espace des moments avec ces neuf vitesses, l'espace physique, en conséquence doit être discrétisé dans un réseau carré avec une constante de réseau  $\delta x = \sqrt{3RT}\delta t$ .

Dans un modèle isotherme, la température n'a aucune signification physique dans ce cas. Alors, nous pouvons choisir  $\delta x$  comme grandeur fondamentale, i.e. :  $\sqrt{3RT} = c = \frac{\delta x}{\delta t}$ . Or  $RT = c_s^2 = \frac{1}{3}c^2$ , où  $c_s$  est la vitesse du son du modèle et  $c$  représente la vitesse de réseau. En général, la vitesse de réseau est fixée à 1, donc pour le modèle D2Q9 :  $c_s^2 = \frac{1}{3}$ .

En comparant les équations (2.51) et (2.53) nous pouvons identifier les poids dans l'équation (2.51) comme suit :

$$W_\alpha = 2\pi RT \exp\left(-\frac{\xi_\alpha^2}{2RT}\right)w_\alpha \quad (2.54)$$

$$\text{où : } w_\alpha = \begin{cases} \frac{4}{9} & \text{pour } \alpha = 0 \\ \frac{1}{9} & \text{pour } \alpha = 1, 2, 3, 4 \\ \frac{1}{36} & \text{pour } \alpha = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

Par suite on a bien la fonction de distribution à l'équilibre pour le modèle D2Q9 :

$$f_\alpha^{eq} = W_\alpha f^{eq}(x, \xi_\alpha, t) = w_\alpha \rho \left[ 1 + \frac{3(\hat{e}_\alpha \cdot u)}{c^2} + \frac{9(\hat{e}_\alpha \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right] \quad (2.55)$$

Où  $\hat{e}_\alpha$  représentent les vecteurs des vitesses discrètes citées précédemment.

L'équation d'évolution est finalement discrétisée sous la forme :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{eq}(x, t)] \quad (2.56)$$

Cette équation est l'équation discrète de Boltzmann sur réseau avec l'approximation BGK et elle est dite modèle LBGK. Elle est souvent résolue numériquement suivant deux étapes :

$$\text{Étape de collision : } \quad \tilde{f}_\alpha(x, t) = f_\alpha(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{eq}(x, t)] \quad (2.57a)$$

$$\text{Étape de dispersion : } \quad f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = \tilde{f}_\alpha(x, t) \quad (2.57b)$$

Où  $f_\alpha$  et  $\tilde{f}_\alpha$  représentent l'état de la fonction de distribution avant et après collision, respectivement. Nous pouvons voir que l'étape de collision est purement locale, alors que l'étape de dispersion donne naissance à un décalage uniforme de données et exige un calcul informatique important. L'équation (2.57) est explicite, facile à mettre en place et directe pour le calcul parallèle. La viscosité dans l'équation de Navier Stokes peut être dérivée de l'équation (2.56) comme suit :  $\nu = (\tau - \frac{1}{2})c_s^2\delta t$ .



## 2.6.2 Adimensionnement

Relativement à l'approche fondée sur la résolution directe des équations de Navier Stokes, où les valeurs des nombres adimensionnels sont calculées et la simulation exécutée à partir de ces valeurs, la simulation des écoulements fondée sur la méthode LBM est effectuée directement dans l'espace réseau. C'est un avantage, puisque nous n'avons pas besoin de changer, à chaque fois, les équations de base dans la résolution du problème.

La paramétrisation réseau s'appuie sur la valeur du pas de temps réseau  $\delta t^*$ , la valeur du pas d'espace réseau  $\delta x^*$ , et la densité du fluide  $\rho^*$ .

$$\begin{aligned}\delta t^* &= \frac{\Delta t}{\Delta t} = 1 \\ \delta x^* &= \frac{\Delta x}{\Delta x} = 1 \\ \rho^* &= \frac{\rho}{\rho} = 1\end{aligned}\tag{2.58}$$

À partir de ces valeurs réseau, les valeurs relatives de la viscosité cinématique du fluide, de la vitesse et des forces externes sont évaluées :

La viscosité cinématique $v \left[ \frac{m^2}{s} \right]$	$v^* = v \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
La vitesse $u \left[ \frac{m}{s} \right]$	$u^* = u \frac{\Delta t}{\Delta x}$
La gravité $g \left[ \frac{m}{s^2} \right]$	$g^* = g \frac{\Delta t^2}{\Delta x}$
La force $F [N]$	$F^* = F \frac{\Delta t^2}{\rho \Delta x^4}$

Notons que la vitesse du son qui est caractéristique dans la méthode de Boltzmann sur réseau, ne correspond pas à la vitesse réelle du son, mais représente la vitesse avec laquelle l'information est transmise dans l'espace réseau.

## 2.6.3 Mise en place des conditions aux limites

La dynamique des écoulements des fluides est très dépendante de l'environnement. Cette influence est décrite mathématiquement par la prescription des conditions aux limites appropriées. Ces conditions aux limites jouent un rôle crucial puisqu'elles permettent de choisir des solutions compatibles avec les contraintes extérieures. La compatibilité de ces contraintes peut être insignifiante dans des conditions idéalisées (écoulements périodiques).

La méthode LBM est basée sur le calcul des fonctions de distribution des particules  $f$  dans l'espace des phases tandis que les variables hydrodynamiques sont exprimées dans l'espace physique. Par conséquent, les conditions aux limites dans la méthode LBM sont exprimées en termes de fonction de distribution plutôt que de variables d'écoulement comme dans les méthodes de calcul classique utilisées en hydrodynamique (CFD).

Pour cette raison, nous trouvons différents types de conditions aux limites pour la méthode de Boltzmann sur réseau, à savoir : les conditions périodiques, d'imperméabilité, de surface libre, de flux constant.

### Conditions aux limites périodiques

Les conditions aux limites périodiques sont les conditions les plus simples à mettre en place avec la méthode de Boltzmann sur réseau. Elles sont adéquates pour des phénomènes physiques où l'effet de surface joue un rôle négligeable.

L'application de ces conditions se fonde sur le fait que la fonction de distribution sortante d'une frontière (après collision), rentre sur la frontière équivalente (sens opposé) sur la ligne réseau[103, 104]. Pour expliciter cela, nous allons travailler sur le modèle D2Q9. Considérons la figure ci-dessous :

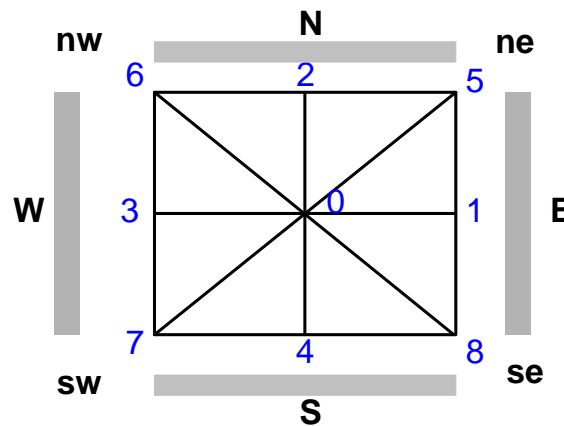


FIG. 2.7 – Représentation des faces correspondantes à un nœud réseau

Où N représente le Nord de la structure réseau, S le Sud, E l'Est et W l'Ouest.

Si nous notons par «*in*» la population entrante sur un site de la structure et par «*out*» celle sortante, nous avons :

$$\begin{aligned}\{\text{in}, w\} &= \{1, 5, 8\} \text{ et } \{\text{out}, w\} = \{3, 6, 7\} \\ \{\text{in}, E\} &= \{3, 7, 6\} \text{ et } \{\text{out}, E\} = \{1, 5, 8\}\end{aligned}$$

En termes de fonctions de distribution, pour le modèle D2Q9 nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}f(\text{in}, nw) &= f(\text{out}, se) \implies f_6 = f_8 \\ f(\text{in}, sw) &= f(\text{out}, ne) \implies f_5 = f_7 \\ f(\text{in}, W) &= f(\text{out}, E) \implies f_3 = f_1 \\ f(\text{in}, S) &= f(\text{out}, N) \implies f_2 = f_4\end{aligned}$$

Dans le cas d'un écoulement Poiseuille où la vitesse d'entrée est spécifiée, la frontière d'entrée est placée entre le nœud d'entrée et le premier nœud fluide (figure (2.8)). La vitesse horizontale d'entrée est connue. Le schéma standard du rebond «*BounceBack*» est appliqué pour calculer les fonctions de distribution d'entrée :

$$\tilde{f}_{\bar{\alpha}}_{\text{entrée}} = \tilde{f}_{\alpha} + 2w_{\alpha}\rho_{\text{fluide}}\frac{3}{c^2}e_{\bar{\alpha}}\cdot u_{\text{entrée}} \quad (2.59)$$

avec  $w_{\alpha}$  le facteur de pondération,  $e_{\alpha}$  et  $e_{\bar{\alpha}}$  notent les directions opposées  $e_{\alpha} = -e_{\bar{\alpha}}$ .

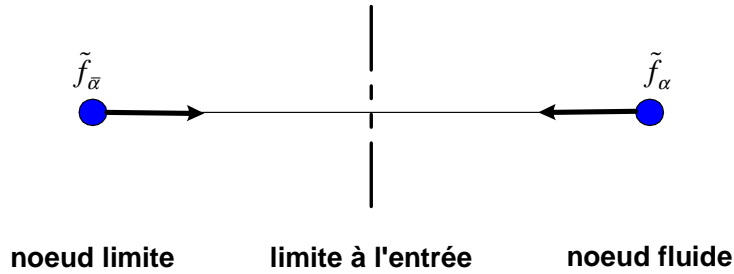


FIG. 2.8 – Représentation de la condition au limite d'entrée

## Les conditions aux limites sans glissements «no- slip»

Un autre type simple de conditions aux limites est les conditions sans glissement correspondant à une vitesse du fluide nulle sur les frontières[103, 104]. Ces conditions sont physiquement appropriées quand la frontière solide possède une régularité suffisante pour empêcher le mouvement du fluide sur la surface de la frontière.

Pour la mise en place de ce type de conditions, nous distinguons deux types de traitement selon la position de la frontière par rapport à la grille réseau :

- On- grid
- Mid- grid

D'une part, la conditions «on-grid» signifie que les lignes frontières du domaine coïncident avec les noeuds de la ligne réseau (figure (2.9)). Ce type se met en place de la même façon que les conditions périodiques, on les appelle aussi conditions de rebond «Bounce-Back», puisque après collision, il y'a un rebond des particules.

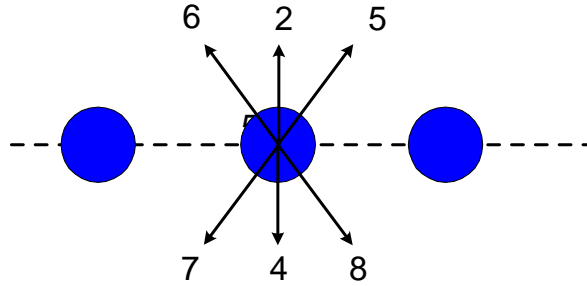


FIG. 2.9 – Conditions aux limites de type Dirichlet «type on-grid»

D'autre part, la condition «Mid-grid» sur la paroi Nord est montrée dans la figure (2.10), les noeuds remplis sont des noeuds fluides, les noeuds vides sont des noeuds solides et la ligne en pointillées indique la limite paroi/fluide. Après l'opération d'advection, quelques populations se trouvent hors la zone fluide. Elles doivent être retournées vers la zone fluide. Ainsi, les populations 7, 4 et 8 adjacentes à la paroi recevront les populations 5, 2 et 6. L'implémentation de cette condition sera de la même manière que la condition correspondante à une surface courbe avec ( $\Delta=1/2$ ), traitée ci-dessous.

En termes d'écriture matricielle, nous pouvons écrire ceci comme suit :

$$\begin{bmatrix} f_6(x, y) \\ f_2(x, y) \\ f_5(x, y) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} f_8(x, y) \\ f_4(x, y) \\ f_7(x, y) \end{bmatrix} \quad (2.60)$$

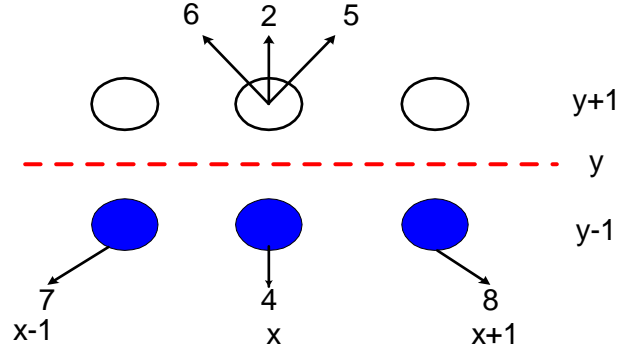


FIG. 2.10 – Conditions sans glissement, rebond mi-grille «Bounce Back mid-grid».

La réflexion complète des particules garantit que les deux vitesses du fluide, tangentielle et normale à la surface frontière s’annulent. Selon la technique proposée par Zou and He [116], les populations inconnues sur les nœuds de la face Nord sont définies comme suit :

$$f_4 = f_2, \quad f_7 = f_5 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3), \quad f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) \quad (2.61)$$

Ces relations assurent une vitesse nulle sur la face Nord :

$$\begin{aligned} \rho u &= (f_5 + f_1 + f_8) - (f_6 + f_3 + f_7) = 0 \\ \rho v &= (f_6 + f_2 + f_5) - (f_7 + f_4 + f_8) = 0 \end{aligned} \quad (2.62)$$

Les populations inconnues pour le nœud sur la face Sud sont définies de la même manière :

$$f_2 = f_4, \quad f_5 = f_7 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3), \quad f_6 = f_8 + \frac{1}{2}(f_1 - f_3) \quad (2.63)$$

Pour les conditions «mid-grid», elles signifient que les coordonnées des nœuds de la frontière se trouvent au milieu des nœuds de la ligne réseau. Ce type de conditions constitue un cas particulier de la condition de présence de surface courbe traitée par la suite.

### Conditions aux limites sur une surface courbe

La plupart des conditions de frontière de type Neumann pour une frontière pleine utilisée dans la méthode LBM sont fondées sur la technique de rebond en arrière

«Bounce-Back» : Une particule heurtant un mur stationnaire inverse simplement sa quantité de mouvement. Une grande partie des travaux de recherche sur les conditions aux limites de la méthode LBM est consacrée à l'analyse et l'amélioration des conditions aux limites de «Bounce-Back» [115, 42, 46, 47, 69]. La technique de «Bounce-Back» peut atteindre une précision d'ordre 2 si la frontière est placée à mi-chemin entre deux noeuds. C'est-à-dire, la précision de second ordre de la condition aux limites de rebond peut seulement être réalisée quand les frontières sont situées au milieu de deux réseaux voisins ( $\Delta = 0,5$ ). Pour surmonter cette difficulté Mei et Shyy [72] ont résolu l'équation de Boltzmann sur réseau pour des coordonnées curvilignes. Dans des travaux récents [72, 38] les coordonnées cartésiennes ont été adoptées avec interpolation utilisée seulement aux frontières. Ces techniques se fondent sur la liberté d'employer des méthodes d'interpolation.

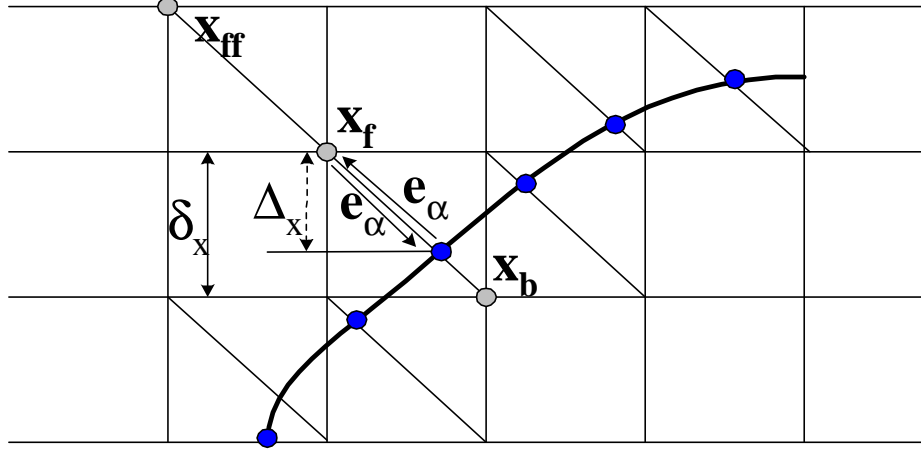


FIG. 2.11 – Représentation d'une surface courbe solide

Comme représenté sur la figure (2.11), l'étape d'advection nécessite la connaissance de  $\tilde{f}_{\bar{\alpha}}(x_b, t)$  pour laquelle on a  $e_{\bar{\alpha}} = -e_{\alpha}$  en  $x_b$  sur le côté solide afin de calculer  $\tilde{f}_{\bar{\alpha}}(x_f, t)$  pour le noeud réseau localisé sur le côté fluide en  $x_f = x_b + e_{\bar{\alpha}}\delta t$ . Définissons le paramètre  $\Delta$  :  $\Delta = \left\| \frac{x_f - x_w}{x_f - x_b} \right\|$ . On remarque bien que  $0 \leq \Delta \leq 1$  et la distance horizontale ou verticale entre  $x_b$  et  $x_w$  est  $(1 - \Delta)\delta x$ . On pose :

$$\tilde{f}_{\bar{\alpha}}(x_b, t) = (1 - \chi)\tilde{f}_{\bar{\alpha}}(x_f, t) + \chi f_{\alpha}^{(*)}(x_b, t) + 2w_{\alpha}\rho\frac{3}{2c^2}(e_{\bar{\alpha}} \cdot u_w) \quad (2.64)$$

avec  $u_w = u(x_w, t)$  la vitesse sur la paroi, et  $\chi$  le facteur d'interpolation qui contrôle l'interpolation linéaire entre  $\tilde{f}_{\bar{\alpha}}(x_f, t)$  et  $f_{\alpha}^{(*)}(x_b, t)$ .  $f_{\alpha}^{(*)}(x_b, t)$  est donnée

par la fonction de distribution fictive à l'équilibre :

$$f_\alpha^{(*)}(x_b, t) = w_\alpha \rho \left[ 1 + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u_{bf} + \frac{9}{2c^4} (e_\alpha \cdot u_f)^2 - \frac{3}{2c^2} (u_f \cdot u_f) \right] \quad (2.65)$$

La vitesse  $u_{bf}$  est donnée par :

$$\begin{aligned} u_{bf} &= \frac{\Delta - 1}{\Delta} u_f + \frac{1}{\Delta} u_w & \text{et} & \quad \chi = \frac{1}{\tau} (2\Delta - 1) & \text{pour} & \quad \Delta \geq \frac{1}{2} \\ u_{bf} &= u_{ff} = u_f(u_f + e_\alpha \delta t, t) & \text{et} & \quad \chi = \frac{1}{\tau} \left( \frac{2\Delta - 1}{\tau - 2} \right) & \text{pour} & \quad \Delta < \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.66)$$

La stabilité est améliorée lorsque le choix de  $u_{bf}$  et  $\chi$  est tel que  $\tau < 1$  et  $\Delta < \frac{1}{2}$ . Cette technique permet aussi de traiter des corps solides en mouvements dans un fluide.

### Conditions aux limites conservant la masse

La technique évoquée dans la section précédente permet de traiter la surface courbe mais ne garantit pas une conservation totale de la masse aux frontières. Cette condition de conservation de masse dans un système donné est très importante pour des simulations par LBM. Pour cela nous avons adopté une amélioration portée à la technique précédente appelée «mass conserving solid wall boundary condition». L'idée fondamentale est d'utiliser toujours une interpolation linéaire entre  $\tilde{f}_\alpha(x_f, t)$  et  $f_\alpha^{(*)}(x_b, t)$  pour trouver  $f_\alpha(x_f, t)$  afin de garantir une conservation de masse parce que  $\tilde{f}_\alpha(x_f, t)$  est responsable de la fuite de masse à travers les frontières. Ainsi  $f_\alpha^{(*)}(x_b, t)$  est défini par :

$$f_\alpha^{(*)}(x_b, t) = w_\alpha \rho(x_w, t) \left[ 1 + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u_{bf} + \frac{9}{2c^4} (e_\alpha \cdot u_f)^2 - \frac{3}{2c^2} (u_f \cdot u_f) \right] \quad (2.67)$$

où  $\rho(x_w, t)$  est appelé la densité de paroi. Sa valeur doit être déterminée tout en assurant la conservation de masse à la paroi.

Les populations sortantes sont  $f_4, f_7, f_8$  (connues) et les entrantes sont  $f_2, f_5, f_6$  (inconnues). La conservation de masse nécessite que :  $f_4 + f_7 + f_8 = f_2 + f_5 + f_6$ .

Il est supposé que les populations sortantes satisfont l'équation (2.67) avec le terme  $\rho(x_w, t)$ .

En sommant ces deux relations nous trouvons :

$$f_4 + f_7 + f_8 = \frac{1}{6}\rho(x_w, t)(1 - 3u_{bf}^y + 3u_f^y) \quad (2.68)$$

avec  $u_{bf}^y$  la composante suivant  $y$  de  $u_f$  et  $u_f^y$  la composante suivant  $y$  de  $u_f$ . Ainsi  $\rho(x_w, t)$  peut être exprimée par :

$$6 \frac{f_4 + f_7 + f_8}{(1 - 3u_{bf}^y + 3u_f^y)} = \rho(x_w, t) \quad (2.69)$$

En substituant l'expression de  $\rho(x_w, t)$  dans l'équation (2.68), les fonctions de distribution inconnues  $f_2, f_5, f_6$  peuvent être facilement calculées. Notons que cette technique de traitement de conditions aux limites satisfait la condition de conservation de masse :  $\sum_{sor \tan t} f = \sum_{entrant} f$ .

### Conditions avec forces volumiques

Généralement, les fluides sont soumis soit à des forces de surface ou de volume. Les forces de surface sont introduites comme conditions aux frontières du domaine alors que les forces volumiques sont intégrées directement dans l'équation de Navier-Stokes. Soit  $F$  une force de volume externe qui représente par exemple la poussée d'Archimède dans le cas des fluides où la densité est une fonction de la température. L'équation de Boltzmann sur réseau s'écrit alors sous la forme :

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + e_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = \Omega_\alpha(f_\alpha(x, t)) + F_\alpha \quad (2.70)$$

Le terme  $F_\alpha$  donne naissance à la force de volume défini comme étant :

$$\sum_{\alpha} F_\alpha e_\alpha = F \quad (2.71)$$

En tenant compte de la conservation de masse, les composantes de la force sont soumises à la contrainte :

$$\sum_{\alpha} F_\alpha = 0 \quad (2.72)$$

Dans le cas où  $F$  est uniforme dans la direction  $y$ , les  $F_\alpha$  sont données par :

$$F_2 = F_5 = F_6 = C, \quad F_4 = F_7 = F_8 = -C, \quad F_0 = F_1 = F_3 = 0$$



avec  $C$  une constante qui sera calculée par la suite en substituant la distribution choisie dans l'équation (2.71) :

$$\sum_{\alpha} F_{\alpha} e_{\alpha} = 6C \frac{\delta x}{\delta t} \hat{x} = F = |F| \hat{x} \quad (2.73)$$

avec  $\hat{x}$  le vecteur unitaire dans la direction  $x$ . L'équation discrète de Boltzmann sur réseau est discrétisée spatialement et temporellement, et écrite comme suit :

$$f_{\alpha}(x + \hat{e}_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = f_{\alpha}(x, t) - \frac{\delta t}{\tau'} [f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{eq}(x, t)] + F_{\alpha} \delta t \quad (2.74)$$

En introduisant la forme adimensionnelle du temps de relaxation  $\tau = \frac{\delta t}{\tau'}$  et le terme simplifié de la force :  $F'_{\alpha} = F_{\alpha} \delta t$  dans l'équation d'évolution de Boltzmann sur réseau (équation (2.74)), nous aurons :

$$f_{\alpha}(x + \hat{e}_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = f_{\alpha}(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{eq}(x, t)] + F'_{\alpha} \quad (2.75)$$

avec :  $F'_2 = F'_5 = F'_6 = \frac{\|F\|(\delta t)^2}{6\delta x}$ ,  $F'_4 = F'_7 = F'_8 = -\frac{\|F\|(\delta t)^2}{6\delta x}$ ,  $F'_0 = F'_1 = F'_3 = 0$ .

Avec cette technique, l'effet des forces volumiques sur le mouvement mésoscopique des fluides est pris en compte. Cette technique peut être adaptée facilement au cas des forces fonction des deux directions de l'espace.

## 2.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté une étude détaillée sur la méthode de Boltzmann sur réseau. Nous avons commencé par une introduction sur la théorie cinétique et sa relation avec la mécanique des fluides. Par suite l'équation cinétique de transport, les hypothèses de Boltzmann ainsi que l'équation pertinente de Boltzmann ont été traitées. Aussi nous avons mis l'accent sur les méthodes des automates cellulaires à savoir les automates HPP et FHP, comme nous avons introduit l'équation de Boltzmann sur réseau et l'équation de Boltzmann sur réseau linéarisée. Enfin, nous avons détaillé le modèle D2Q9 de la méthode de Boltzmann sur réseau ainsi que les différents types de conditions aux limites relatifs à cette méthode.

# Chapitre 3

## Résolution de l'équation de diffusion par la méthode de Boltzmann sur réseau

### 3.1 Introduction

La diffusion de la chaleur est un processus par lequel la chaleur est transportée d'une partie d'un système à une température élevée à une autre partie du même système à une faible température ou par contact entre deux systèmes à des températures différentes. Le processus de diffusion prend place au niveau moléculaire et implique ainsi un transfert d'énergie des particules possédant une grande énergie vers les particules dont l'énergie est moins grande. Ce phénomène est bien illustré dans le cas des gaz où l'énergie cinétique moyenne des molécules dans la région à haute température est plus élevée à celle existante dans les régions à basse température. Pour les liquides, malgré que les particules soient faiblement liées, le processus de transfert d'énergie est qualitativement semblable à celui des gaz. Le transfert d'énergie pour les solides est dû aux mouvements des électrons libres qui se meuvent de la même façon que les particules dans un gaz.

## 3.2 Equation de diffusion

### 3.2.1 Lois de Fick

La théorie de diffusion est basée sur les deux équations de Fick (1855) dérivées de l'équation mathématique de conduction de la chaleur donnée par Fourier (1822)[30] :

$$Q = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.2)$$

Où  $Q$  représente le taux de transfert par unité de surface d'une section,  $C$  la concentration de la substance diffusée et  $D$  le coefficient de diffusion. Le signe négatif dans l'équation (3.1) est une conséquence du fait que la substance est diffusée dans la direction des concentrations décroissantes. La théorie mathématique de diffusion dans des substances isotropes est basée sur le fait que le taux de transfert de la substance diffusée par unité de surface d'une section  $S$  est proportionnel au gradient de la concentration normale à cette section.

Les deux équations (3.1) et (3.2) sont toujours référées par la première et la seconde loi de diffusion de Fick respectivement, puisqu'elles étaient formulées pour la première fois par Fick par une analogie directe avec les équations de la conduction de la chaleur.

Dans le cas de la diffusion de la chaleur, les deux équations correspondantes sont données par :

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.4)$$

Où  $T$  représente la température,  $k$  est la propriété de transport nommée conductivité thermique, et qui est une caractéristique du matériel et  $\alpha$  la diffusivité thermique du milieu. Le flux de chaleur  $q$ , représentant le taux de transfert de chaleur par unité de surface normale à la direction de l'écoulement, est proportionnel au gradient de la température.

### 3.2.2 Equation de la diffusion de la chaleur

Considérons un système monodimensionnel, ne contenant aucune source de chaleur. On suppose un transfert thermique selon l'axe  $(Ox)$ , on a :

$$\begin{cases} \vec{q} = q(x, t)\vec{u}_x \\ T = T(x, t) \end{cases} \quad (3.5)$$

Soient :

$h$  l'enthalpie massique du milieu

$\rho$  sa masse volumique

$k$  sa conductivité thermique

$c$  sa capacité massique ( $dh = cdT$ )

L'augmentation d'enthalpie du système est due aux transferts thermiques à travers les deux parois en  $x$  et  $x + dx$  :

$$dh\rho Sdx = S[q(x) - q(x + dx)] dt \quad (3.6)$$

$$\rho cdT = -\frac{\partial q}{\partial x} dt \quad (3.7)$$

Or d'après la loi de fourrier, on a :  $q = -k\frac{\partial T}{\partial x}$

D'où :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho c} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.8)$$

Notons que :  $\alpha = \frac{k}{\rho c}$  est la diffusivité thermique du milieu (en  $m^2.s^{-1}$ ).

Ainsi, l'équation de diffusion de la chaleur (équation de la chaleur) est donnée par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (3.9)$$

La résolution de ce type d'équation n'est pas élémentaire en général, et on se propose de la résoudre par la méthode de Boltzmann sur réseau.

## 3.3 Résolution de l'équation de diffusion par la méthode LBM

### 3.3.1 Schéma LBM pour l'équation de diffusion

L'équation de base pour la méthode LBM est l'équation discrétisée de Boltzmann sur réseau avec l'approximation BGK (chapitre 2, équation (2.56)) :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(x, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{eq}(x, t)] \quad (3.10)$$

La forme générale de cette équation LBGK, en tenant en compte les forces extérieures, s'écrit comme suit :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_\alpha \delta t, t + \delta t) = f_\alpha(x, t) - \frac{\Delta t}{\tau} [f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{eq}(x, t)] + \Delta t \hat{e}_\alpha \cdot F_\alpha \quad (3.11)$$

Où  $\tau$  est le temps de relaxation vers l'état d'équilibre de maxwell-boltzmann et  $F_\alpha$  la force extérieure dans la direction des vitesses réseau  $\hat{e}_\alpha$ .

La fonction de distribution à l'équilibre local détermine le type du problème à résoudre. Le point fort de cette fonction est sa simplicité et sa facilité d'application pour différents problèmes physiques en spécifiant les différents états d'équilibres pour ces fonctions.

Pour mettre l'accent sur la méthodologie de résolution des problèmes physiques par la méthode LBM, on se propose de résoudre par la suite l'équation de la diffusion dans les cas mono et bidimensionnels. Sur la figure (3.1), on présente l'algorithme de base de l'application de cette méthode.

### 3.3.2 Modèle monodimensionnel

Dans le cas monodimensionnel deux modèles sont distingués. D1Q2 (DnQm : n indique la dimension du modèle et m indique le nombre de vitesses discrètes prises en compte pour ce modèle) et D1Q3 dont la différence avec le premier modèle est que les particules au repos sont considérées.

La figure (3.2) schématise la discrétisation de ce modèle représenté par un nœud rattaché à deux nœuds voisins. Les vecteurs de vitesses relatifs à ce modèle sont donnés par :

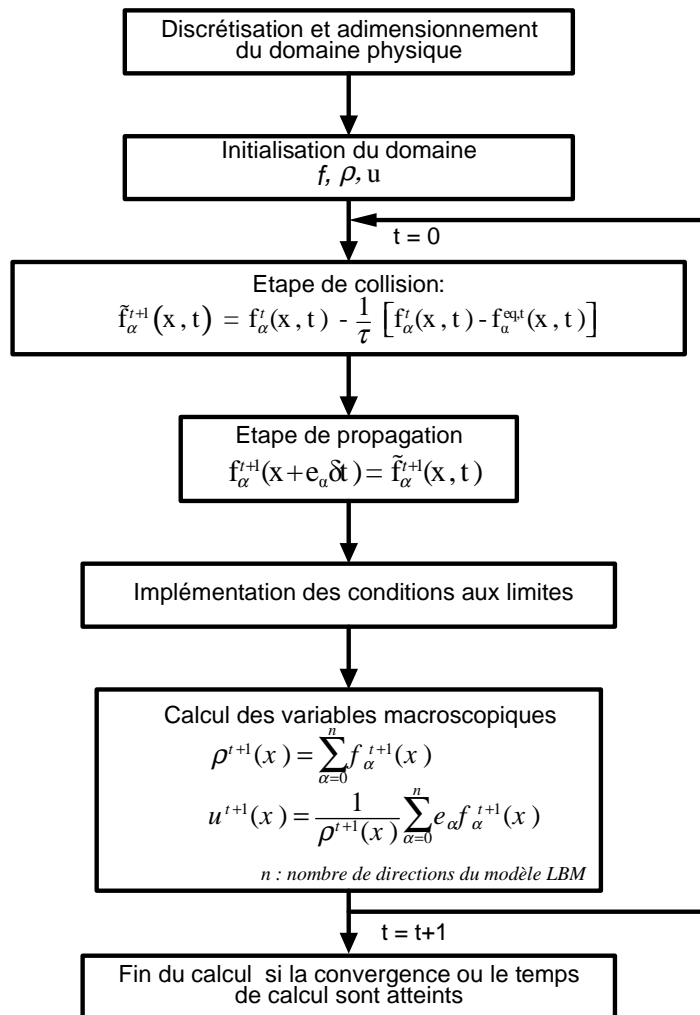


FIG. 3.1 – Algorithme de base de la méthode de Boltzmann sur réseau.

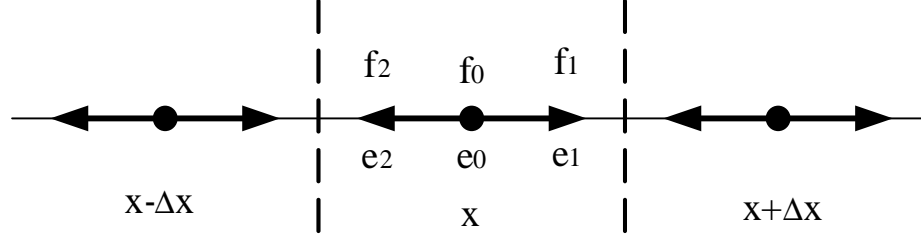


FIG. 3.2 – Modèle monodimensionnel à 3 vitesses réseau D1Q3

$$\begin{cases} e_0 = 0 & (\text{particule au repos, site } x) \\ e_1 = 1 & (\text{particule occupant le site } x+\Delta x \text{ après collision}) \\ e_2 = -1 & (\text{particule occupant le site } x-\Delta x \text{ après collision}) \end{cases}$$

Les facteurs de poids nodaux correspondant à ce modèle, et vérifiant  $\sum_{\alpha=0}^2 w_\alpha = 1$ , sont donnés par :

$$\begin{cases} w_0 = \frac{2}{3} \\ w_1 = \frac{1}{6} \\ w_2 = \frac{1}{6} \end{cases} \quad (3.12)$$

Par suite la fonction de distribution à l'équilibre est obtenue pour le modèle D1Q3 (équation (2.55)), notons que  $f^{eq}$  est calculée en terme des vitesses  $u^{eq}$ , qui sont des vitesses ajustables où on peut incorporer des forces extérieures. Pour ce cas il est supposé qu'il n'y a pas de forces agissant sur les particules autres que le choc entre particules :

$$f_\alpha^{eq} = w_\alpha \rho \left[ 1 + \frac{3(\hat{e}_\alpha \cdot u)}{c^2} + \frac{9(\hat{e}_\alpha \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right], \alpha = 0, \dots, 2 \quad (3.13)$$

La variable macroscopique, soit une variable  $\varphi(t)$  (température dans le cas de la diffusion), est reliée à la fonction de distribution par :

$$\varphi(t) = \sum_{\alpha=0}^2 f_\alpha^{eq} \quad (3.14)$$

La diffusivité thermique est reliée au temps de relaxation par l'équation :

$$\alpha = \frac{\Delta x^2}{D \Delta t} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3.15)$$

Où D est la dimension du problème.

### Schéma LBM (D1Q3)

Considérons une barre initialement à une température  $T = T_0$  (figure (3.3)). La face gauche de la barre est maintenue à une température chaude  $T = T_c$  et celle de droite à une température froide  $T = T_f$ . Il est proposé de calculer la distribution de la température dans une barre de  $n$  nœuds.

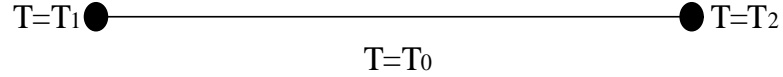


FIG. 3.3 – Cas monodimensionnel

Les domaines d'intégration temporelle et spatiale sont divisés en incréments  $\Delta x = 1$  et  $\Delta t = 1$ .

Ainsi, la diffusivité thermique est reliée au temps de relaxation  $\tau$  par :

$$\alpha = \left(\tau - \frac{1}{2}\right) \quad (3.16)$$

En se basant sur l'équation (3.14), la variable macroscopique qui n'est que le champ de température dans ce cas est obtenue par la relation :

$$T(x, t) = \sum_{\alpha=0}^2 f_{\alpha}(x, t) \quad (3.17)$$

Ainsi, pour résoudre notre problème, les étapes suivantes sont suivies :

- **Initialisation du problème :**

A l'état initial qui correspond à un état d'équilibre, nous pouvons écrire :

$$T(x, t) = \sum_{\alpha=0}^2 f_{\alpha}(x, t) = \sum_{\alpha=0}^2 f_{\alpha}^{eq}(x, t) \quad (3.18)$$

Puisque  $\sum_{\alpha=0}^2 w_{\alpha} = 1$ , nous avons :

$$\sum_{\alpha=0}^2 f_{\alpha}^{eq}(x, t) = \sum_{\alpha=0}^2 w_{\alpha} T(x, t) \quad (3.19)$$



Ainsi :

$$\begin{cases} f_0^{eq}(x, t) = w_0 T(x, t) \\ f_1^{eq}(x, t) = w_1 T(x, t) \\ f_2^{eq}(x, t) = w_2 T(x, t) \end{cases} \quad (3.20)$$

En remplaçant les facteurs de poids par leurs valeurs (équation (3.12)), les valeurs initiales des fonctions de distribution correspondantes à la température initiale sont définies par :

$$\begin{cases} f_0(x, t) = f_0^{eq}(x, t) = \frac{2}{3}T_0 \\ f_1(x, t) = f_1^{eq}(x, t) = \frac{1}{6}T_0 \\ f_2(x, t) = f_2^{eq}(x, t) = \frac{1}{6}T_0 \end{cases} \quad \text{pour } t = 0 \text{ et } 0 \leq x \leq n \quad (3.21)$$

• **Conditions aux limites**

Aux points  $x = 0$  et  $x = n$ , les conditions aux limites sont appliquées. Pour la position  $x = 0$ ,  $f_2$  peut être obtenu à travers le processus de propagation et l'inconnue est  $f_1$ . Et pour la position  $x = n$ ,  $f_1$  est obtenu par le processus de propagation alors que  $f_2$  est l'inconnue comme illustré sur la figure (3.4).

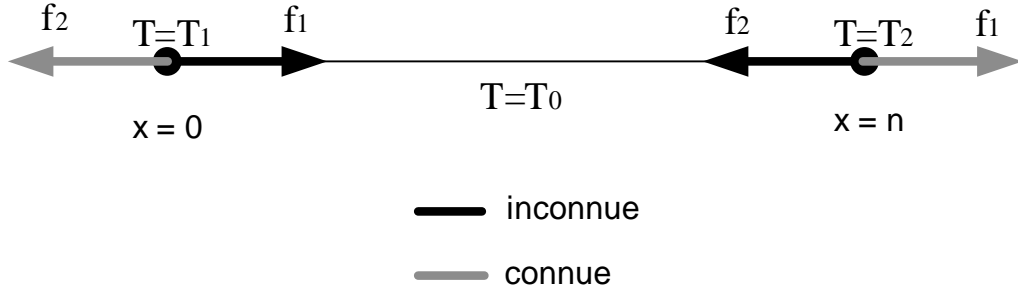


FIG. 3.4 – Conditions aux limites pour le cas monodimensionnel.

Deux températures constantes différentes (condition de Dirichlet) sur les extrémités de la barre sont imposées :

$$\begin{cases} T(0, t) = T_1 \\ T(n, t) = T_2 \end{cases} \quad (3.22)$$

Par exemple, pour la position  $x=0$  :

$$\begin{aligned} T(0, t) &= \sum_{\alpha=0}^2 f_{\alpha}(0, t) \\ &= f_0(0, t) + f_1(0, t) + f_2(0, t) \end{aligned} \quad (3.23)$$

La valeur de l'inconnue  $f_1$  est donnée par :

$$f_1(0, t) = T_1 - (f_0(0, t) + f_2(0, t)) \quad (3.24)$$

De même pour  $x = n$  :

$$\begin{aligned} T(n, t) &= \sum_{\alpha=0}^2 f_{\alpha}(n, t) \\ &= f_0(n, t) + f_1(n, t) + f_2(n, t) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Ainsi, la valeur de l'inconnue  $f_2$  est donnée par :

$$f_2(n, t) = T_2 - (f_0(n, t) + f_1(n, t)) \quad (3.26)$$

La figure (3.5) montre les résultats obtenus par la méthode LBM comparés à ceux de la méthode des différences finies pour  $Lx=100$  et  $t=200$  [76]. En effet, ces résultats obtenus à l'aide d'un code développé sous Matlab sont en bon accord avec les résultats fondés sur la méthode des différences finies.

### 3.3.3 Modèle bidimensionnel

Dans le cas bidimensionnel, pour la méthode LBM, différents modèles sont distingués. D2Q4 (le modèle bidimensionnel à 4 vitesses discrètes), D2Q5, D2Q8 et D2Q9.

Le modèle le plus répandu pour les problèmes bidimensionnels est le modèle D2Q9 où chaque particule, représentée par un noeud, a huit possibilités de propagation comme le montre la figure (3.6). Pour ce modèle on considère un réseau orthogonal avec huit populations en mouvement  $f_i, i = 1, \dots, 8$  et une population au repos  $f_0$ .

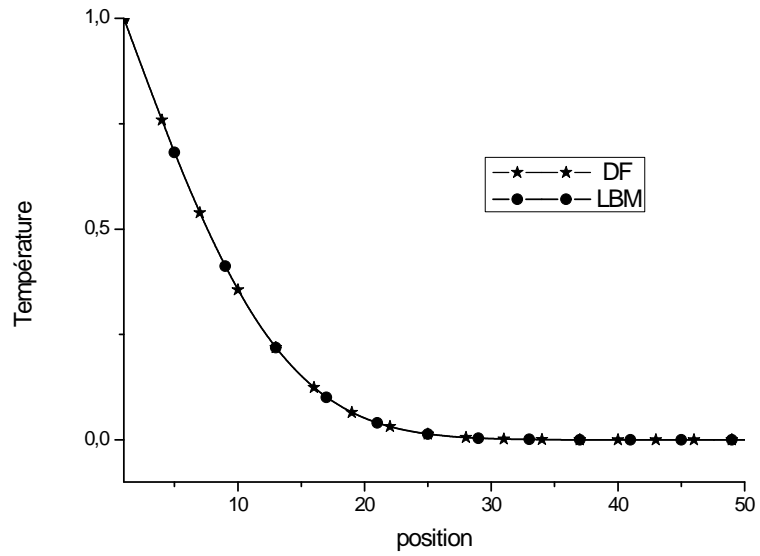


FIG. 3.5 – Comparaison des résultats obtenus en LBM (D1Q3) et en DF.

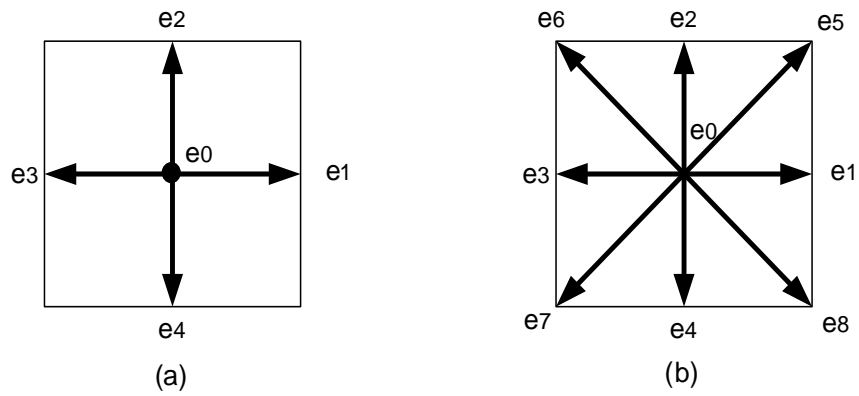


FIG. 3.6 – Modèles bidimensionnels, (a) : D2Q5 et (b) : D2Q9

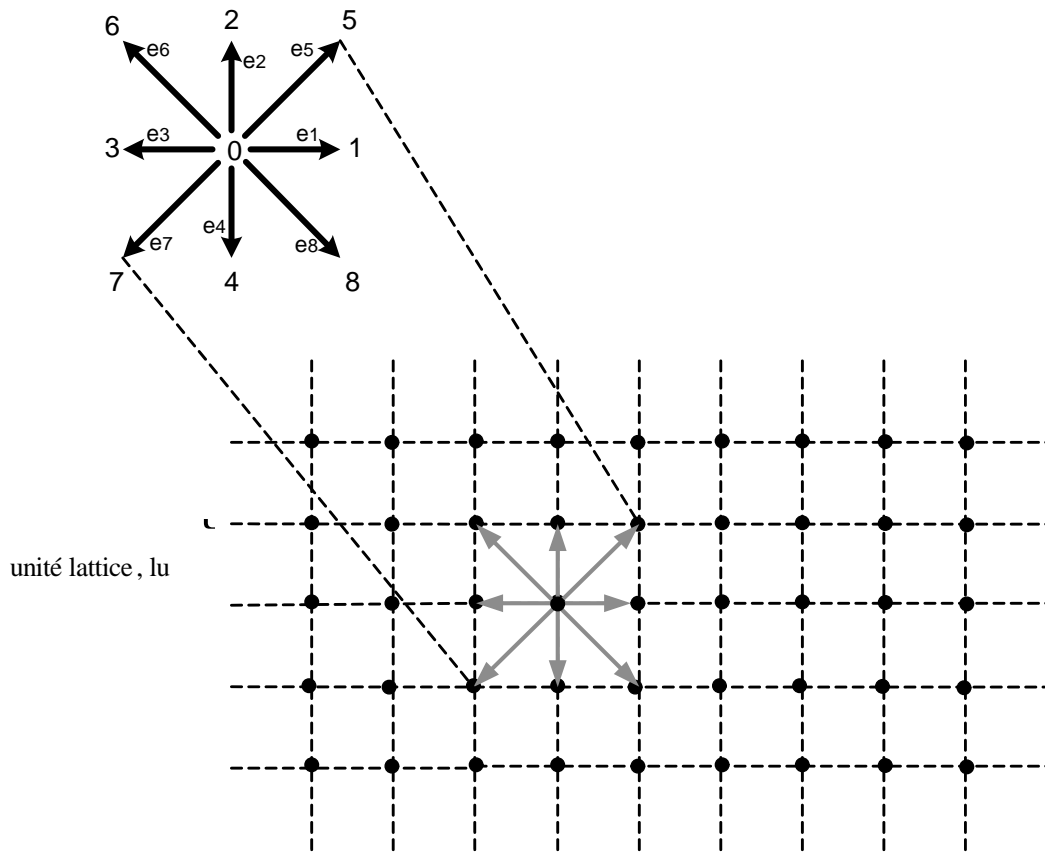


FIG. 3.7 – Modèle D2Q9

Les vecteurs de vitesse relatifs à ce modèle sont donnés par :

$$e_\alpha = \begin{cases} 0, & \text{pour } \alpha = 0 \\ c(\pm 1, 0) \text{ et } c(0, \pm 1), & \text{pour } 1 \leq \alpha \leq 4 \\ c(\pm 1, \pm 1), & \text{pour } 5 \leq \alpha \leq 8 \end{cases} \quad (3.27)$$

où  $c = \sqrt{3RT}$ .

Les facteurs de poids nodaux correspondant à ce modèle, et vérifiant toujours la condition pour conserver l'entropie  $\sum_{\alpha=0}^8 w_\alpha = 1$ , sont donnés par :

$$w_\alpha = \begin{cases} \frac{4}{9} & \text{pour } \alpha = 0 \\ \frac{1}{9} & \text{pour } 1 \leq \alpha \leq 4 \\ \frac{1}{36} & \text{pour } 5 \leq \alpha \leq 8 \end{cases} \quad (3.28)$$

La fonction de distribution à l'équilibre pour le modèle D2Q9 (équation (2.55)), dépend toujours de la vitesse  $u^{eq}$  et s'écrit comme suit :

$$f_\alpha^{eq} = w_\alpha \rho \left[ 1 + \frac{3(\hat{e}_\alpha \cdot u)}{c^2} + \frac{9(\hat{e}_\alpha \cdot u)^2}{2c^4} - \frac{3u^2}{2c^2} \right], \alpha = 0, \dots, 8 \quad (3.29)$$

La variable macroscopique, soit une variable  $\varphi(t)$ , est reliée à la fonction de distribution par :

$$\varphi(t) = \sum_{\alpha=0}^8 f_\alpha^{eq} \quad (3.30)$$

La diffusivité thermique est reliée au temps de relaxation par l'équation :

$$\alpha = \frac{\Delta x^2}{3\Delta t} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3.31)$$

Comme déjà indiqué, la méthode LBM consiste en deux étapes ; collision et propagation. L'étape de collision est une étape locale dont l'équation est :

$$f_\alpha(x, y, t + \Delta t) = f_\alpha(x, y, t) - \frac{1}{\tau} (f_\alpha(x, y, t) - f_\alpha^{eq}(x, y, t)), \alpha = 0, \dots, 8 \quad (3.32)$$

Et l'équation désignant l'étape de propagation des particules ou le streaming est :

$$f_\alpha(x + \Delta x, y + \Delta y, t + \Delta t) = f_\alpha(x, y, t + \Delta t), \alpha = 0, \dots, 8 \quad (3.33)$$

L'étape de propagation caractérise le déplacement des particules ; par exemple la particule occupant la position  $(i, j)$  dans la direction 1, dont la fonction de distribution est  $f_1(i, j)$ , après propagation se déplace vers la position  $(i + 1, j)$  de la même direction 1,  $f_1(i + 1, j)$  comme le montre la figure (3.8).

propagation

$$\begin{aligned}
 f_1(i, j) & \Longrightarrow f_1(i+1, j) \\
 f_2(i, j) & \Longrightarrow f_2(i, j+1) \\
 f_3(i, j) & \Longrightarrow f_3(i-1, j) \\
 f_4(i, j) & \Longrightarrow f_4(i, j-1) \\
 f_5(i, j) & \Longrightarrow f_5(i+1, j+1) \\
 f_6(i, j) & \Longrightarrow f_6(i-1, j+1) \\
 f_7(i, j) & \Longrightarrow f_7(i-1, j-1) \\
 f_8(i, j) & \Longrightarrow f_8(i+1, j-1)
 \end{aligned}$$

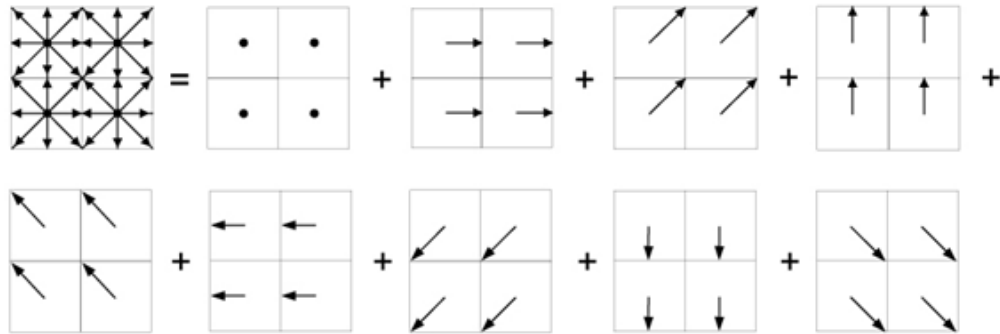


FIG. 3.8 – Etapes de propagation des particules du modèle D2Q9.

### Schéma LBM (D2Q9)

Pour ce cas une cavité carrée initialement à une température  $T = T_0$  est considérée (figure (3.9)). La paroi verticale gauche de la cavité est maintenue à une température chaude, celle de droite à une température froide et les parois horizontales sont adiabatiques. Il est proposé de calculer la distribution de la température dans une cavité de  $n \times n$  nœuds.

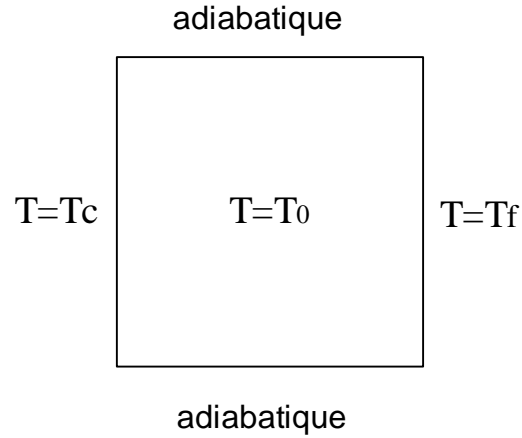


FIG. 3.9 – Géométrie bidimensionnelle

Comme pour le cas monodimensionnel, les pas de temps et d'espace sont pris égaux à l'unité :  $\Delta x = \Delta t = 1$ . Ainsi, la diffusivité thermique est reliée au temps de relaxation par :

$$\alpha = \frac{1}{3} \left( \tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3.34)$$

En se basant sur l'équation (3.30), la variable macroscopique qui est toujours le champ de température dans un cas bidimensionnel est obtenue par la relation :

$$T(x, y, t) = \sum_{\alpha=0}^8 f_{\alpha}(x, y, t) \quad (3.35)$$

Pour résoudre ce problème de diffusion dans le cas bidimensionnel, les étapes suivantes sont suivies :

- **Initialisation du problème**

A l'état initial qui correspond à un état d'équilibre :

$$T(x, y, t) = \sum_{\alpha=0}^8 f_{\alpha}(x, y, t) = \sum_{\alpha=0}^8 f_{\alpha}^{eq}(x, y, t) \quad (3.36)$$

Puisque  $\sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} = 1$ , on peut aussi écrire :

$$\sum_{\alpha=0}^8 f_{\alpha}^{eq}(x, y, t) = \sum_{\alpha=0}^8 w_{\alpha} T(x, y, t) \quad (3.37)$$

Ainsi :

$$f_{\alpha}^{eq}(x, y, t) = w_{\alpha} T(x, y, t), \quad \alpha = 0, \dots, 8 \quad (3.38)$$

En remplaçant les facteurs de poids par les valeurs relatives au modèle D2Q9 (équation (3.28)), les valeurs initiales des fonctions de distribution correspondantes à la température initiale supposée sont définies comme suit :

$$\begin{cases} f_{\alpha}(x, y, t) = f_{\alpha}^{eq}(x, y, t) = \frac{4}{9}T_0, & \alpha = 0 \\ f_{\alpha}(x, y, t) = f_{\alpha}^{eq}(x, y, t) = \frac{1}{9}T_0, & 1 \leq \alpha \leq 4 \\ f_{\alpha}(x, y, t) = f_{\alpha}^{eq}(x, y, t) = \frac{1}{36}T_0, & 5 \leq \alpha \leq 8 \end{cases}, t = 0, 1 \leq x, y \leq n \quad (3.39)$$

#### • Conditions aux limites

Pour ce cas bidimensionnel, deux types de conditions aux limites sont distingués, conditions de Neumann pour les parois horizontales et conditions de Dirichlet pour les parois verticales. Considérant les quatre faces Ouest, Est, Sud et Nord de la cavité (figure (3.10)). Pour la face Ouest où une température est imposée, les inconnues sont  $f_1, f_5, f_8$  et les connues sont  $f_3, f_6, f_7$  dont les valeurs sont obtenues par le processus de propagation. Pour la face Est, les inconnues sont  $f_3, f_6, f_7$  et les connues sont  $f_1, f_5, f_8$  toujours obtenues par le processus de propagation. Aussi pour la face Sud de la cavité, les inconnues sont  $f_2, f_5, f_6$  et les connues sont  $f_4, f_7, f_8$  et pour la face Nord, les inconnues sont  $f_4, f_7, f_8$  et les connues sont  $f_2, f_5, f_6$ .

Les valeurs des fonctions de distributions inconnues peuvent être déterminées en fonction des conditions imposées.

#### • Conditions de Dirichlet (T=Cste)

Pour la face West correspondant à  $(x = 1, y = 1, \dots, n)$ , on a imposé une température  $T(1, y, t) = T_c$  et les inconnues sont les fonctions de distribution  $f_1, f_5, f_8$ .



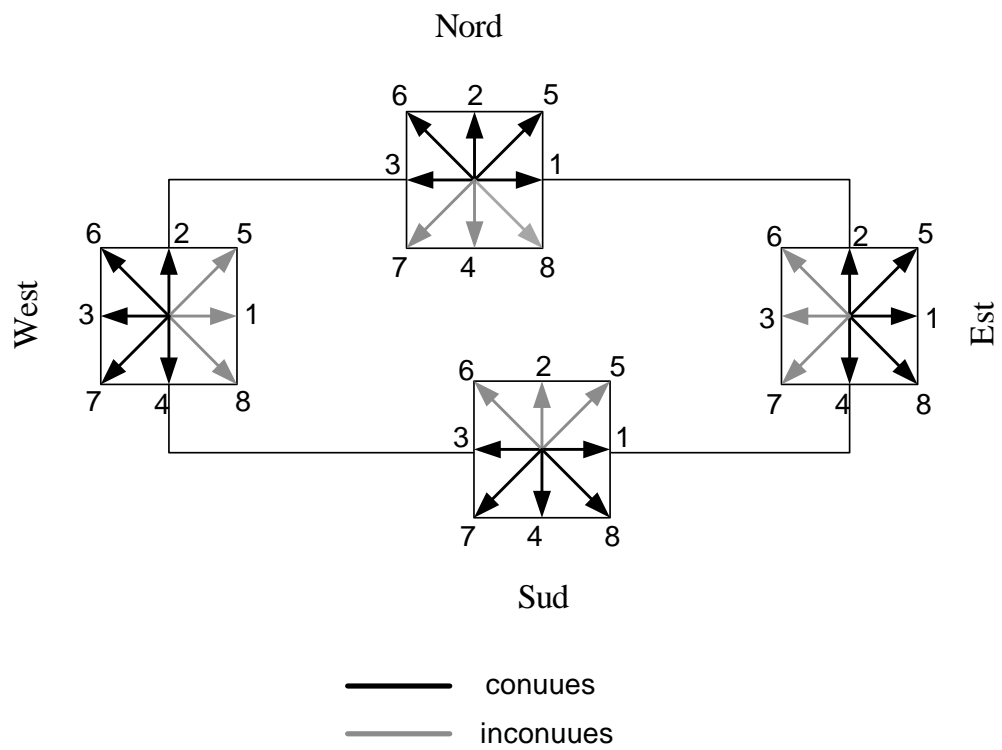


FIG. 3.10 – Configuration des conditions aux limites

Or :

$$\begin{aligned}
T(1, y, t) &= \sum_{\alpha=0}^8 f_{\alpha}(1, y, t) & (3.40) \\
&= f_0(1, y, t) + f_1(1, y, t) + f_2(1, y, t) + f_3(1, y, t) \\
&\quad + f_4(1, y, t) + f_5(1, y, t) + f_6(1, y, t) + f_7(1, y, t) + f_8(1, y, t)
\end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned}
T_c &= f_0(1, y, t) + f_1(1, y, t) + f_2(1, y, t) + f_3(1, y, t) & (3.41) \\
&\quad + f_4(1, y, t) + f_5(1, y, t) + f_6(1, y, t) + f_7(1, y, t) + f_8(1, y, t)
\end{aligned}$$

Et :

$$\begin{aligned}
\underbrace{f_1(1, y, t) + f_5(1, y, t) + f_8(1, y, t)}_{\text{inconnues}} &= T_c - (f_0(1, y, t) + f_2(1, y, t)) & (3.42) \\
&\quad + f_3(1, y, t) + f_4(1, y, t) + f_6(1, y, t) + f_7(1, y, t)
\end{aligned}$$

Sur la base du traitement de Bao et al [13], consistant à la détermination d'un variable fictive (densité) selon les lois de conservation, il s'écrit :

$$\begin{cases} f_1(1, y, t) = w_1 \rho_0 \\ f_5(1, y, t) = w_5 \rho_0 \\ f_8(1, y, t) = w_8 \rho_0 \end{cases} \quad (3.43)$$

Ce qui permet de retrouver la valeur de la constante  $\rho_0$  tel que :

$$\begin{aligned}
\rho_0 &= \frac{1}{(w_1 + w_5 + w_8)} (T_c - (f_0(1, y, t) + f_2(1, y, t) + f_3(1, y, t) + f_4(1, y, t) \\
&\quad + f_6(1, y, t) + f_7(1, y, t))) & (3.44)
\end{aligned}$$

Et ainsi les inconnues peuvent être déterminées en remplaçant l'équation (3.44) dans l'équation (3.43).

Les mêmes calculs permettent d'évaluer les inconnues de la face Est.

- **Conditions de Neumann** ( $\frac{\partial T}{\partial n} = 0$ )

Les conditions de Neumann sont imposées sur le terme du flux de telle sorte à avoir une frontière adiabatique ( où il n'y a pas de transfert de chaleur par conduction dans la direction normale à travers cette frontière).

Par exemple pour la face Nord ( $x = 1, \dots, n, y = n$ ), une condition de Neumann est imposée.

( $\frac{\partial T}{\partial n} = \mathbf{0}$ ), et les inconnues sont les fonctions de distribution  $f_4, f_7, f_8$ .

Donc :

$$\sum_{\alpha=0}^8 e_{\alpha} f_{\alpha} = 0 \quad (3.45)$$

Ce qui implique que :

$$f_2 + f_5 + f_6 - f_4 - f_7 - f_8 = 0 \quad (3.46)$$

Et donc :

$$\underbrace{f_4 + f_7 + f_8}_{\text{inconnues}} = f_2 + f_5 + f_6 \quad (3.47)$$

Or :

$$\begin{cases} f_4(x, n, t) = w_4 \rho_0 \\ f_7(x, n, t) = w_7 \rho_0 \\ f_8(x, n, t) = w_8 \rho_0 \end{cases} \quad (3.48)$$

Ce qui nous permet de retrouver la valeur de la constante  $\rho_0$  tel que :

$$\rho_0 = \frac{1}{(w_4 + w_7 + w_8)} (f_2(x, n, t) + f_5(x, n, t) + f_6(x, n, t)) \quad (3.49)$$

Et ainsi les inconnues peuvent être déterminées en remplaçant l'équation (3.49) dans l'équation (3.48).

Les mêmes calculs se font pour évaluer les inconnues de la face Sud.

La figure (3.11) montre les résultats obtenus par la méthode LBM comparés à ceux de la méthode des différences finies pour  $(Lx, Ly) = 100x100$  et  $t = 600$ [76]. Aussi, pour ce cas bidimensionnel on remarque une bonne concordance entre les deux méthodes, ce qui permettra de valider, dans un premier temps, l'application de la méthode LBM pour des problèmes classiques tels que celui de la diffusion de la chaleur.

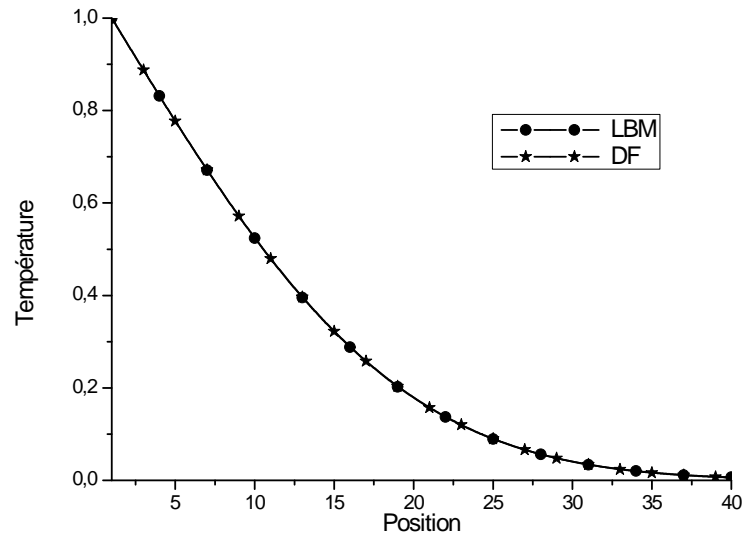


FIG. 3.11 – Comparaison des résultats obtenus en LBM (D2Q9) et en DF.

### 3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'application de la méthode de Boltzmann sur réseau pour résoudre les problèmes de diffusion de chaleur. La méthode d'application de LBM dans les cas mono et bidimensionnels est explicitée. Le schéma D1Q3 a été utilisé dans le cas monodimensionnel et le schéma D2Q9 dans le cas bidimensionnel.

# Chapitre 4

## Nouveau modèle LBM : Application aux phénomènes de transmission à l'interface

### 4.1 Introduction

Les transferts aux interfaces présentent une importance particulière dans de nombreux problèmes appliqués et posent des défis numériques dans leur modélisation, qui dans la plupart des études, est basée sur des raccordements à base d'éléments discrets (méthodes numériques classiques de type différences finies DF, volumes finis VF, éléments finis EF,...).

Par ailleurs les méthodes de Boltzmann sur réseau (LBM) émergent comme une alternative sérieuse aux méthodes conventionnelles (EF, VF, ..). Les développements se focalisent sur les problèmes d'écoulements isothermes[33, 32, 74, 83, 10, 91] puis aux couplages avec les transferts[79] mais un potentiel important est possible pour des problèmes particuliers (interfaces, contact, milieux multiphasiques, poreux, ..). Des développements spécifiques pour les conditions aux limites sont requis, cette partie s'inscrit dans cette perspective.

En effet, dans ce chapitre on présente une nouvelle approche, basée sur la méthode LBM, pour traiter quelques phénomènes de transmission à l'interface. Cette nouvelle approche est basée sur le calcul de l'image des fonctions de distribution lors du passage d'un milieu à un autre (IP). On l'applique pour la modélisation de la résistance thermique de contact ainsi que pour l'étude d'un problème de changement de phase, le problème de Stefan.

## 4.2 Résistance thermique de contact (RTC)

### 4.2.1 Définition de la RTC

Dans la plupart des études théoriques, le contact physique entre deux milieux isotropes est supposé thermiquement parfait[78, 80, 91], alors que dans la réalité, une résistance thermique de contact non négligeable existe du fait de la présence d'une fine couche de transition, due aux irrégularités, à la rugosité et à la non planéité des surfaces de matériaux en contact, ainsi que la présence éventuelle d'une phase interstitielle, ou d'impuretés, qui constituent une barrière à la circulation normale du flux thermique. Cette résistance est d'autant plus importante lorsqu'il s'agit de solides en contact, où le contact ne s'effectue jamais sur toute la surface apparente, mais seulement en certaines zones de surface très faibles devant la surface apparente.

Ainsi, L'analyse du champ de température s'établissant entre deux milieux accolés, traversés par un flux de chaleur, révèle une importante perturbation dans une région extrêmement localisée de part et d'autre de l'interface. La température subit une brusque variation dont l'importance dépend du flux de chaleur qui traverse l'interface, des caractéristiques thermophysiques ainsi que de la qualité du contact entre les deux milieux.

Dans ce cas deux modes de transfert thermiques se superposent (figure (4.1)) :

- Un transfert par conduction au niveau des zones de contact ;
- Un transfert complexe à travers le milieu interstitiel.

Entre les zones de contact existe un espace interstitiel qui constitue un frein au transfert de chaleur, qui de ce fait passe de manière préférentielle au niveau des contacts directs là où le passage de la chaleur est facilité. Le champ de température se trouve donc considérablement perturbé dans la région localisée de part et d'autres de l'interface. Il en résulte une constriction des lignes de flux responsable de la résistance thermique de contact (RTC)[12].

En régime permanent, la résistance thermique de contact est définie par :

$$R_c = \frac{\Delta T}{q} \quad (4.1)$$

Où  $\Delta T$  la différence de températures entre les deux zones de contact et  $q$  le flux de chaleur à travers l'interface.

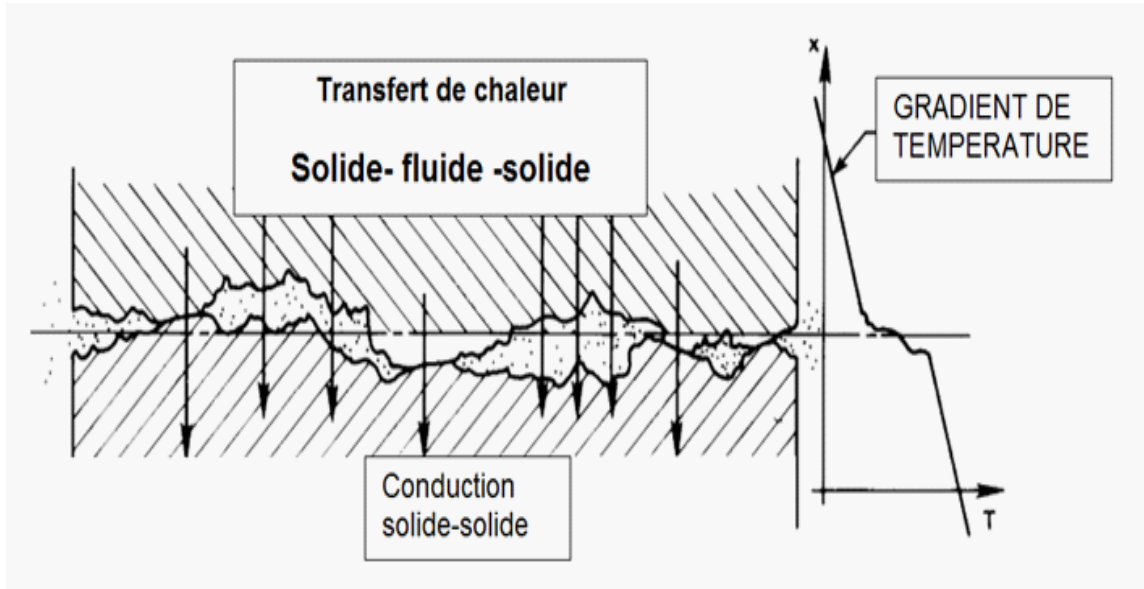


FIG. 4.1 – Transfert de chaleur à l’interface de deux solides en contact imparfait

## 4.2.2 Nouveau modèle LBM : images des particules (IP)

### Modèle du rebond partiel << Partial Bounce Back (PBB)>>

Récemment, Han et al[44] ont utilisé la technique de réflexion partielle (PBB) pour représenter la résistance de contact par la méthode de Boltzmann sur réseau. Deux corps en contact  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  sont considérés ;  $I$  et  $J$  deux nœuds adjacents de l’interface dans les deux corps  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  respectivement. La surface de contact avec résistance thermique de contact est placée au milieu entre les deux nœuds  $I$  et  $J$  comme illustré sur la figure (4.2).

L’idée dans ce modèle PBB consiste à déterminer les fonctions de distribution lors du passage d’un milieu à un autre en considérant une réflexion partielle de l’énergie de la particule sur l’interface de contact. Seulement une partie de l’énergie interne d’un nœud de frontière du corps  $\Omega_1$  peut se propager à son nœud adjacent de frontière du corps  $\Omega_2$  et la partie restante rebondit de nouveau au nœud lui-même dans la direction opposée. Par exemple, si  $f_\alpha^{I,\Omega_1}$  est la fonction de distribution interne d’énergie du nœud  $I$  de la frontière du corps 1 dans la direction  $\alpha$  et si on note par  $\delta$  le paramètre de contrôle variant dans l’intervalle  $[0, 1]$ , la quantité  $(1 - \delta)f_\alpha^{I,\Omega_1}$  est la quantité qui se propage au nœud  $J$  de la frontière du corps 2 et la

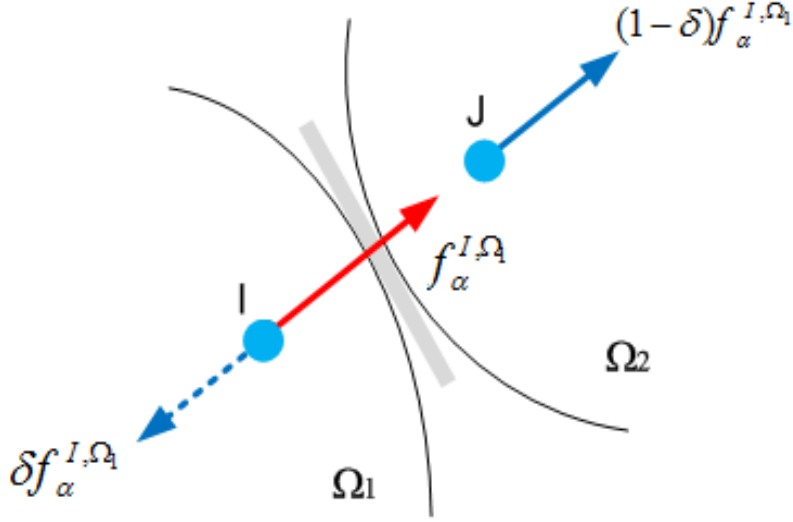


FIG. 4.2 – Schéma de la configuration du modèle PBB (Partial bounce back)

quantité  $\delta f_\alpha^{I, \Omega_1}$  rebondit de nouveau au nœud  $I$  dans la direction  $\bar{\alpha}$ . Le choix de  $\delta$  est conçu de manière à ce que la résistance de contact soit correctement représentée.

La relation liant le paramètre du modèle PBB  $\delta$  et la résistance de contact  $R_c$  est donnée par[44] :

$$R_c = \frac{3\delta}{1 - \delta} \quad (4.2)$$

### Nouveau modèle IP (images des particules)

Dans le cadre de la modélisation de la résistance thermique de contact par la méthode de Boltzmann sur réseau, une nouvelle approche basée sur l'image des fonctions de distribution lors du passage d'un milieu à un autre (IP) est proposée.

Le principe de traitement de ce modèle par un schéma LBM est présenté sur la figure (4.3), pour la transmission entre deux milieux en vue d'une application à un bicouche. Afin de tenir compte du régime transitoire pour une large gamme du temps de relaxation, supposons que les deux frontières en contact sont juxtaposées et que leurs fonctions de distribution sont proportionnelles lors de la propagation. Le coefficient de proportionnalité est indépendant de la direction de propagation (hypothèse d'isotropie) mais dépend du milieu considéré.



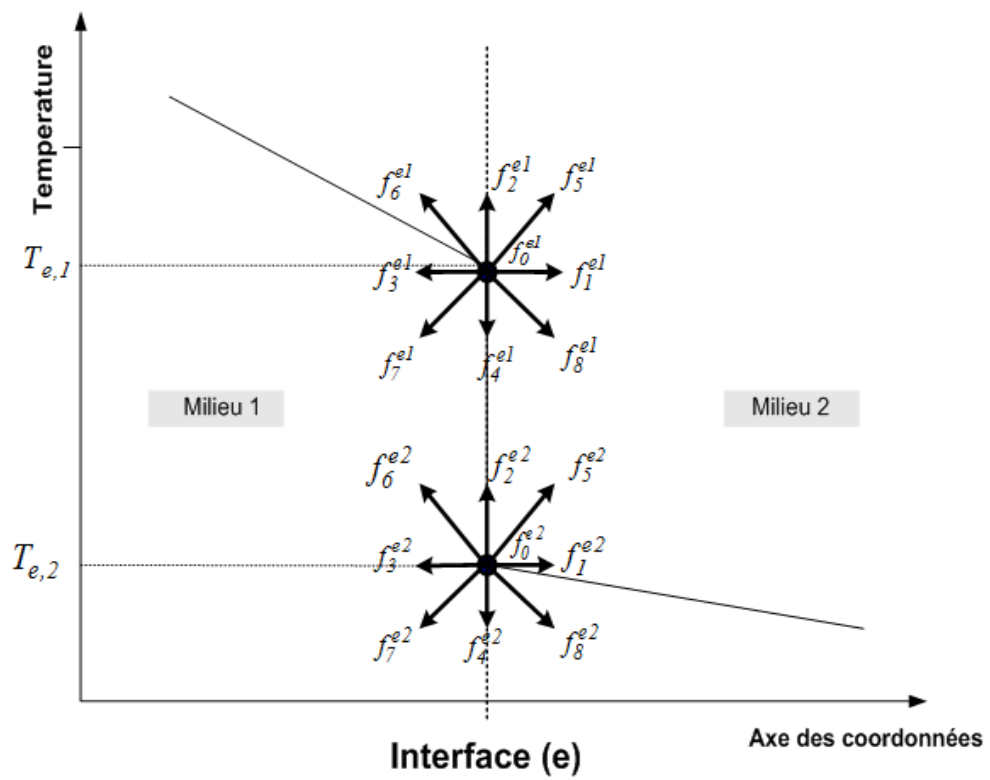


FIG. 4.3 – Configuration du nouveau modèle LBM pour le traitement de la RTC.

La figure (4.3) représente les fonctions de distribution des deux côtés de l'interface de sorte que les fonctions de distribution provenant d'un milieu à un autre doivent être corrigées. Dans le cas isotrope, les fonctions de distribution sont liées par la relation :

$$\begin{pmatrix} f_3^{e1} \\ f_6^{e1} \\ f_7^{e1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_3^{e2} \\ f_6^{e2} \\ f_7^{e2} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} f_1^{e2} \\ f_5^{e2} \\ f_8^{e2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1^{e1} \\ f_5^{e1} \\ f_8^{e1} \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

Le modèle propose de calculer les valeurs de  $\alpha$  et  $\beta$  en considérant les deux relations de passage :

$$\begin{array}{ll} \text{Conservation de flux} & q = q_{e1} = q_{e2} \\ \text{Condition de résistance thermique de contact} & R_c = \frac{\Delta T}{q} \end{array} \quad (4.4)$$

Ces deux conditions donnent un système de deux équations linéaires permettant de calculer les inconnues  $\alpha$  et  $\beta$ .

### 4.2.3 Résultats numériques

#### • Validation du modèle IP

Pour valider ce nouveau modèle de traitement de la résistance thermique de contact, une comparaison avec la solution analytique[16] ainsi qu'avec les résultats du modèle PBB[44] est utilisée, pour cela, considérons le cas d'un matériau bicouche en contact imparfait (figure (4.4)). Les deux couches sont portées à deux températures initiales différentes. L'interface de contact est localisée au point  $x=0$ , les parois horizontales sont adiabatiques et celles verticales sont maintenues à des températures différentes.

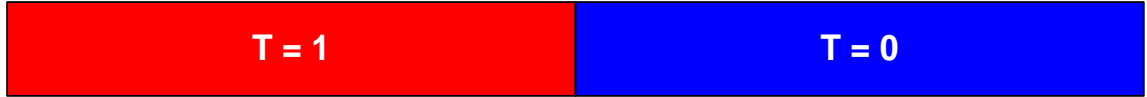


FIG. 4.4 – Diagramme simplifié d'un matériau semi-infini

La solution analytique de ce problème basée sur la méthode de la transformée de laplace est donnée par :

$$T_1(y, t) = T_{10} + \frac{A}{B} \left[ \operatorname{erf} c\left(\frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{\alpha_1 t}}\right) - \exp\left(\frac{x B}{\sqrt{\alpha_1}} + B^2 t\right) \operatorname{erf} c\left(\frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{\alpha_1 t}} + B \sqrt{t}\right) \right] \quad (4.5)$$

$$T_2(y, t) = T_{20} + \frac{C}{B} \left[ \operatorname{erf} c\left(-\frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{\alpha_2 t}}\right) - \exp\left(-\frac{xB}{\sqrt{\alpha_2}} + B^2 t\right) \operatorname{erf} c\left(-\frac{1}{2} \frac{x}{\sqrt{\alpha_2 t}} + B\sqrt{t}\right) \right] \quad (4.6)$$

$$\text{Avec : } A = \frac{-T_e \sqrt{\alpha_1}}{k_1 R_c}, B = \left( \frac{k_2 \sqrt{\alpha_1} + k_1 \sqrt{\alpha_2}}{k_1 k_2 R_c} \right), C = \frac{\sqrt{\frac{\alpha_2}{\alpha_1}} T_e \sqrt{\alpha_1}}{k_2 R_c}.$$

$T_e = T_{10} - T_{20}$ , où  $T_{10}$  et  $T_{20}$  sont les températures initiales respectivement dans la 1<sup>ère</sup> et la 2<sup>ème</sup> couche.

Afin d'effectuer une comparaison entre les résultats issus des deux modèles, considérons les variables sous forme adimensionnelle. Les deux couches sont soumises aux températures respectives  $T_{10} = 1$  et  $T_{20} = 0$ . Les deux matériaux sont de même nature. Ainsi,  $\tau_1 = \tau_2 = \tau$  et par conséquent les coefficients de diffusion adimensionnels :  $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{3}(\tau - \frac{1}{2})$ .

L'étude comparative est portée sur une large gamme de temps de relaxation allant de 0.55 à 1.

La figure (4.5) présente la distribution de la température dans l'espace à l'instant  $t = 10000lu$  pour  $\tau = 1$  et  $R_c = 1000$ , les deux modèles donnent le même comportement thermique avec une bonne précision en référence de la solution analytique. Les résultats générés par le modèle PBB pour  $\tau = 1$  sont expliqués par les hypothèses de bases adoptées par Han et al[78] qui supposent :

$$f_2 = f_4 = f_2^{eq} = \frac{1}{6}T \quad (4.7)$$

Cette condition n'est vérifiée que pour les régimes permanents ou un temps de relaxation égal à 1.

Les figures (4.6) et (4.7) présentent le profile de la température à l'instant  $t = 5000lu$  et  $t = 10000lu$  pour  $\tau = 0.8$ ,  $R_c = 1000$ . Le profile obtenu avec le modèle PBB n'est plus proche de la solution analytique. Ce qui peut être expliqué par le fait que lorsque le temps de relaxation s'éloigne de la valeur 1, le modèle est éloigné des hypothèses adoptées en régime transitoire et la sous estimation de ces deux fonctions  $f_2$  et  $f_4$  introduit des imprécisions au niveau du calcul pas seulement du gradient thermique sur l'interface mais aussi de la distribution de température dans les deux corps et justifie d'où la différence entre les résultats numériques correspondants et le modèle analytique.

Pour mieux vérifier la validité de notre approche, nous considérons des temps de relaxation encore plus faibles  $\tau = 0.6$  et  $\tau = 0.55$ . Les figures (4.8) et (4.9) comparent la solution analytique et le modèle PBB. En effet, le profile du modèle présenté est très proche de la solution analytique tandis que le modèle PBB s'éloigne

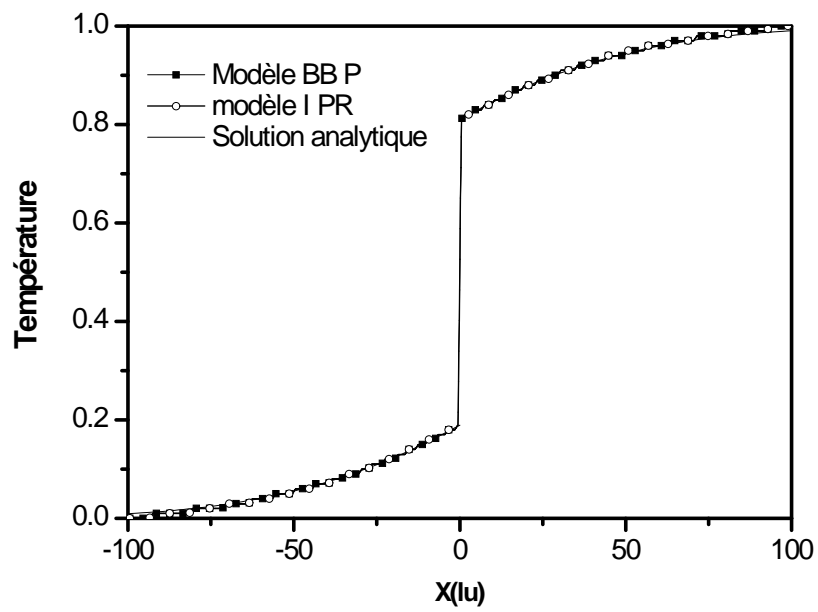


FIG. 4.5 – Distribution de la température dans l'espace pour  $\tau = 1$ ,  $R_c = 1000$ ,  $t = 10000lu$

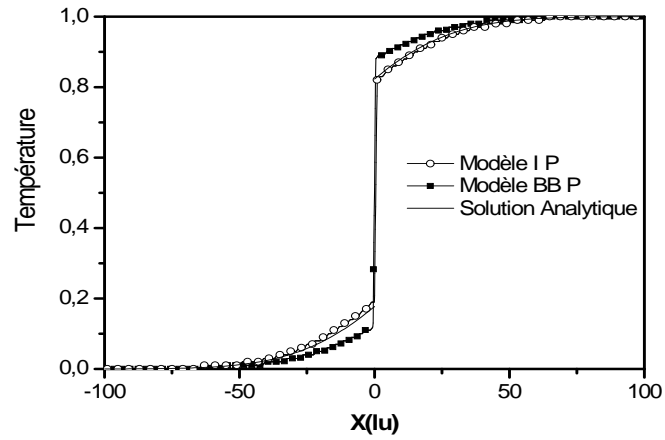


FIG. 4.6 – Distribution de la température dans l’espace pour  $\tau = 0.8$ ,  $R_c = 1000$ ,  $t = 5000lu$

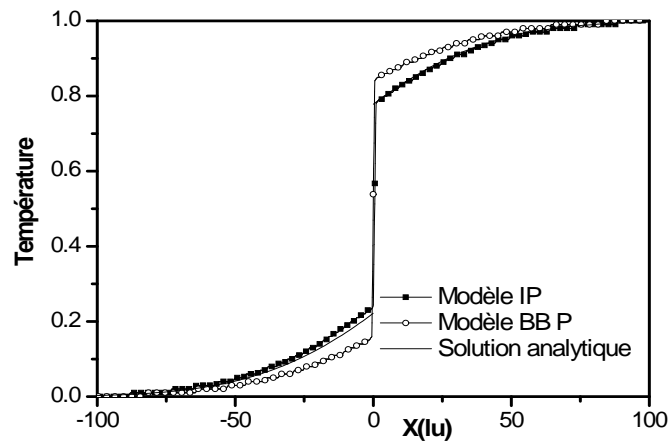


FIG. 4.7 – Distribution de la température dans l’espace pour  $\tau = 0.8$ ,  $R_c = 1000$ ,  $t = 10000lu$

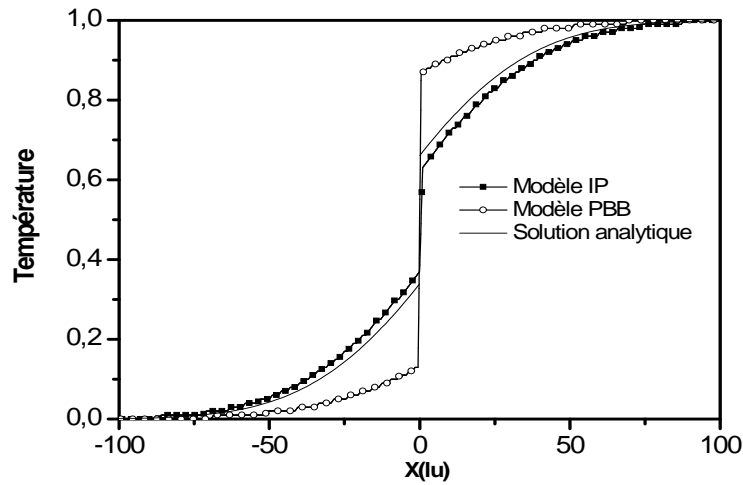


FIG. 4.8 – Profile de la température pour  $\tau = 0.6$ ,  $R_c = 1000$ ,  $t = 2000lu$

de la solution analytique. Afin de bien illustrer la capacité du modèle présenté de traiter une large gamme de résistance de contact, nous avons tracé dans la figure (4.10) la distribution de la température le long de la direction de variation pour des valeurs de la résistance de contact entre 0 et 10000. Ce qui montre bien que les faibles valeurs de la résistance de contact représentent un contact parfait. Plus la résistance augmente plus le saut de température à l'interface devient important.

- **Application du modèle IP à des matériaux de différentes conductivités**

Par ce modèle IP, nous proposons de comparer les deux solutions analytique et numérique dans le cas d'un matériau dont les conductivités sont les mêmes et dans le cas où les conductivités sont différentes.

Dans le cas où les conductivités sont les mêmes on adopte un maillage 200x10. On prend une résistance thermique de contact  $R_c = 500$ , et  $\tau_1 = \tau_2 = 0.75$ . On remarque une bonne concordance entre les deux solutions comme montré sur la figure (4.11).

Dans le cas où les conductivités sont différentes, gardons le même maillage 200x10 et la même résistance thermique de contact  $R_c = 500$  et prenons différentes conductivités. Une bonne concordance a été relevé pour ce cas et remarquons que plus le temps de relaxation est élevé, c'est-à-dire que la conductivité est élevée, plus

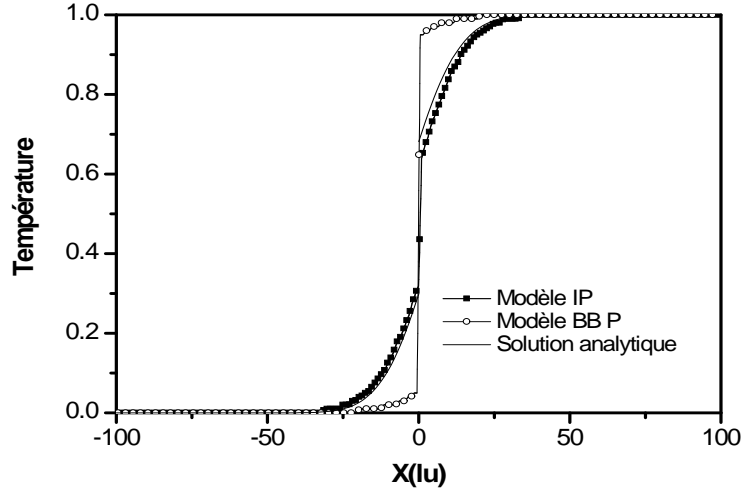


FIG. 4.9 – Profile de la température pour  $\tau = 0.55$ ,  $R_c = 1000$ ,  $t = 5000lu$

le temps assurant une bonne concordance entre le résultat analytique et numérique est élevé. En effet pour  $\tau_1 = 1.0$  et  $\tau_2 = 0.55$  (figure (4.12)), le temps permettant cette bonne concordance est de l'ordre de  $t \approx 1000$ , pour  $\tau_1 = 1.0$  et  $\tau_2 = 0.6$ , le temps nécessaire est de l'ordre de  $t \approx 5000$  (figure (4.13)) alors que pour  $\tau_1 = 1.0$  et  $\tau_2 = 0.75$ , le temps est de l'ordre de  $t \approx 6000$  (figure (4.14)).

Aussi, afin de valider notre modèle, on se ramène au problème de contact thermique parfait, établi par De Monte[80]. Dans la même configuration, considérons un matériau bicouche dont les 4 parois sont soumises à la température initiale  $T_{init}$  (figure (4.15)).

Dans le cas d'un contact parfait, comme illustré sur la figure (4.16), remarquons une continuité de lignes isothermes au niveau de la surface de contact entre les deux couches ce qui est en accord avec les résultats de De monte [80].

Dans le cas où le contact thermique entre les deux couches est imparfait ( $R_c \neq 0$ ), les figures (4.17)et (4.18) montrent clairement l'apparition d'une discontinuité au niveau de l'interface, cette discontinuité devient si importante lorsque la valeur de la résistance thermique de contact  $R_c$  est importante.

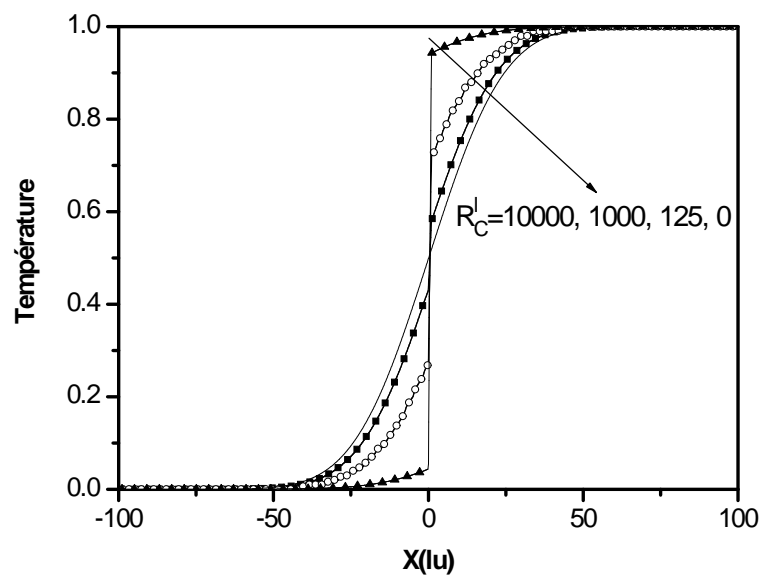


FIG. 4.10 – Profile de la température à l’instant  $t = 5000$  pour différentes valeurs de la résistance de contact pour  $\tau = 0.6$



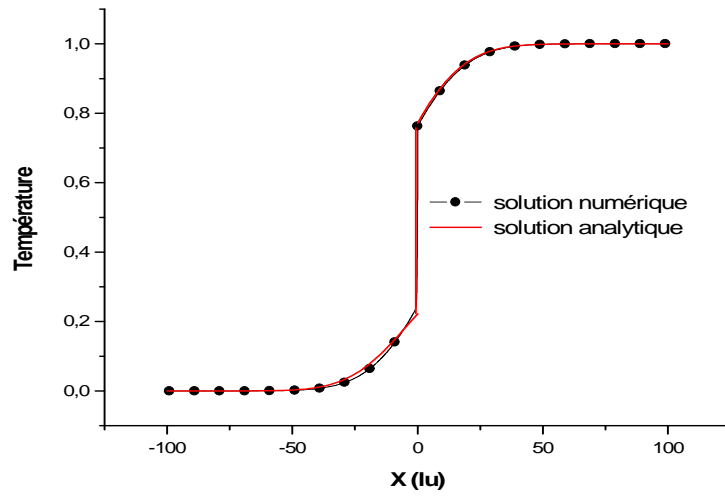


FIG. 4.11 – Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour  $\tau_1 = \tau_2 = 0.75$

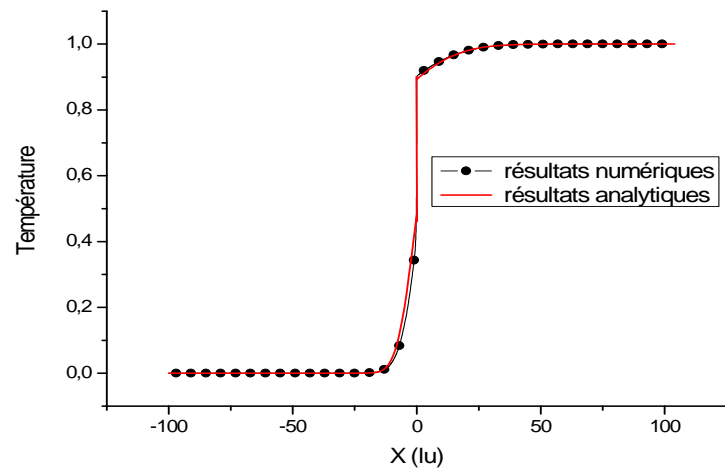


FIG. 4.12 – Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour  $\tau_1 = 1.0$  et  $\tau_2 = 0.55$ .

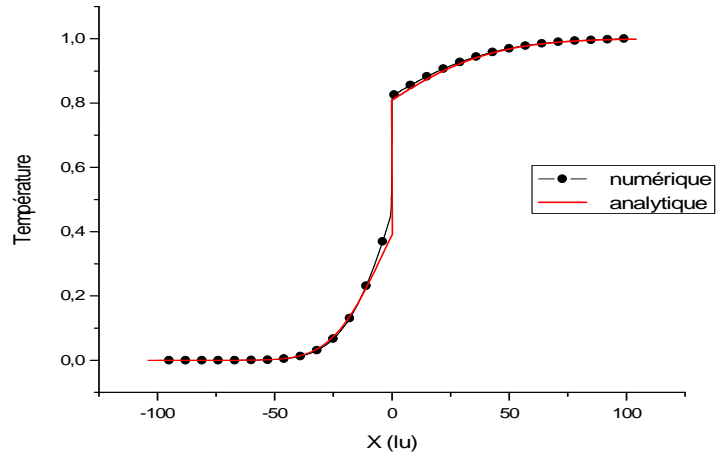


FIG. 4.13 – Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour  $\tau_1 = 1.0$  et  $\tau_2 = 0.6$ .

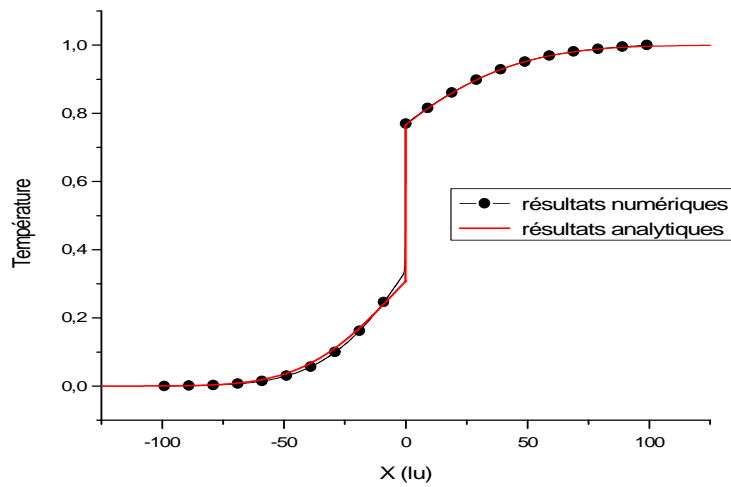


FIG. 4.14 – Comparaison entre la solution analytique et la solution numérique pour  $\tau_1 = 1.0$  et  $\tau_2 = 0.75$ .

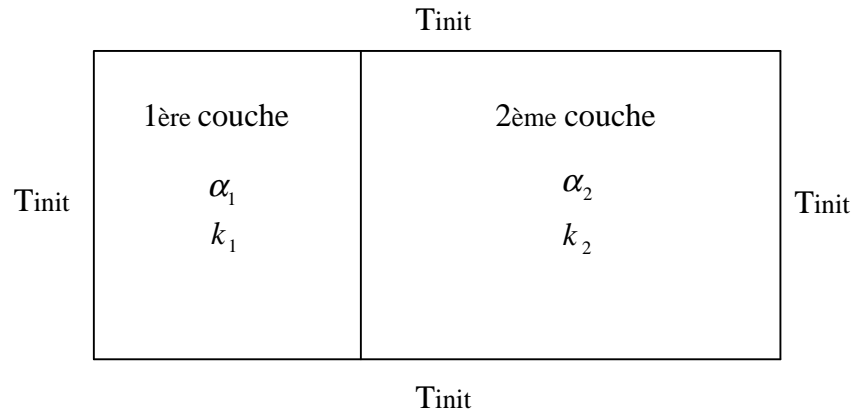


FIG. 4.15 – Schéma simplifié du problème de conduction en 2D, avec les conditions aux limites.

## 4.3 Cas d'un flux discontinu à l'interface

### 4.3.1 Problème de Stefan

Le modèle le plus simple des phénomènes de changements de phase est le problème de la frontière mobile ou problème de Stefan [7]. Ce modèle constitue la base sur laquelle de modèles complexes ont été étudiés en intégrant quelques effets ignorés auparavant. La caractéristique des problèmes de changement de phase est que, en plus du champ de la température, la position de l'interface est inconnue. Ce sont des problèmes avec des conditions aux limites en mouvements. L'étude de ces cas remonte à 1831 avec Lamé et Clapeyron[63]. Stefan fut le premier à étudier l'interface entre les deux phases [101, 102], et par la suite le traitement de ce genre de problèmes a été dénommé problème de Stefan.

Le problème de Stefan classique est l'un des rares problèmes de changement de phase dont les solutions analytiques existent (solidification ou fusion d'un lac gelé). Cette solution de base permet la validation des solutions analytiques obtenues pour des problèmes semblables, dans le cas de dimensions finies de conditions aux limites inhomogènes. Il s'agit de la modélisation du changement de phase solide-liquide ou liquide - solide dans un domaine semi-infini. Bart et Hoogendoorn [14], ont établi que les solutions analytiques (exactes) sont connues seulement pour un petit nombre de problèmes physiques, et l'un des modèles les plus connus et les plus utilisés, est la solution exacte appelée la solution de Neumann pour le problème de

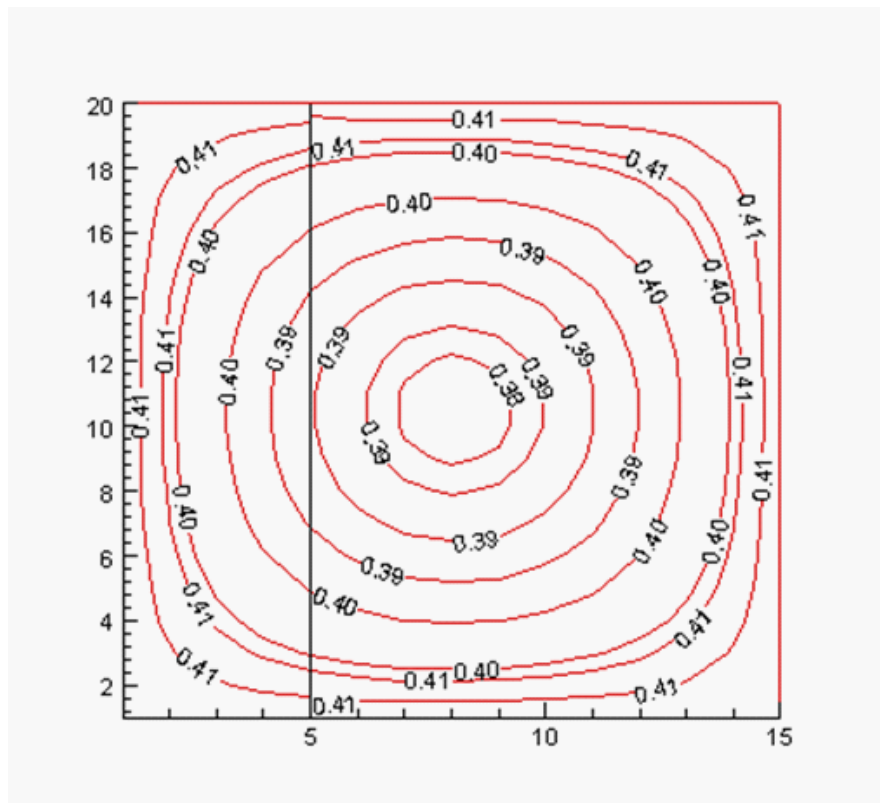


FIG. 4.16 – Isothermes d'un matériau bicouche pour  $\tau = 0.6$ ,  $R_c = 0$ ,  $t = 2000$

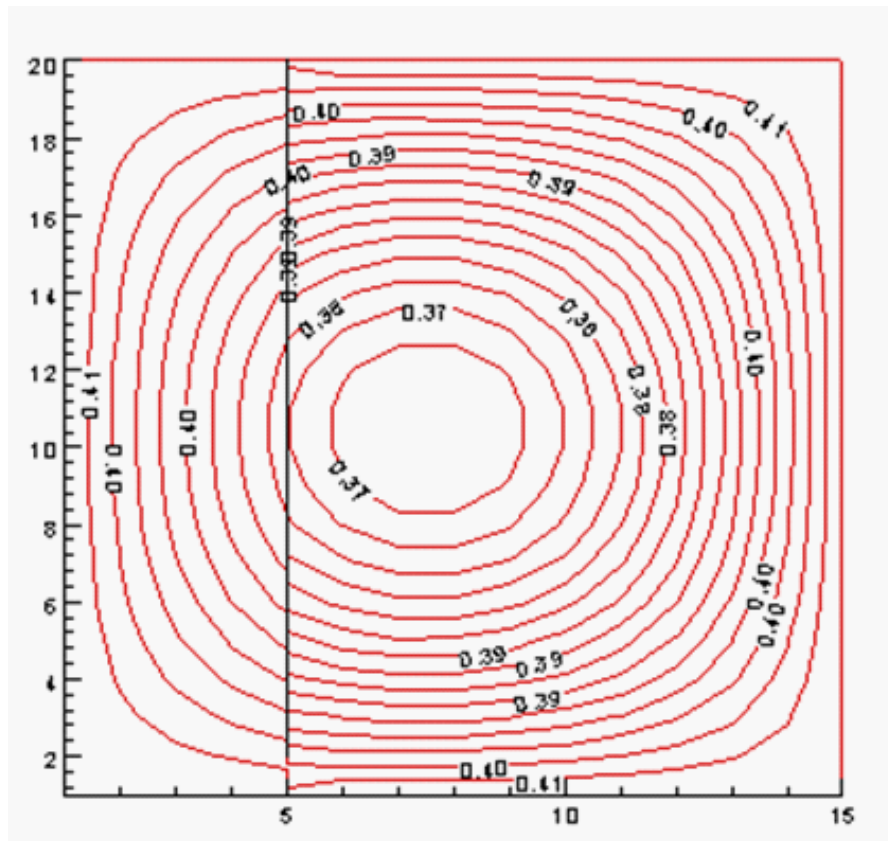


FIG. 4.17 – Isothermes d'un matériau bicouche pour  $\tau = 0.6$ ,  $R_c = 100$ ,  $t = 2000$

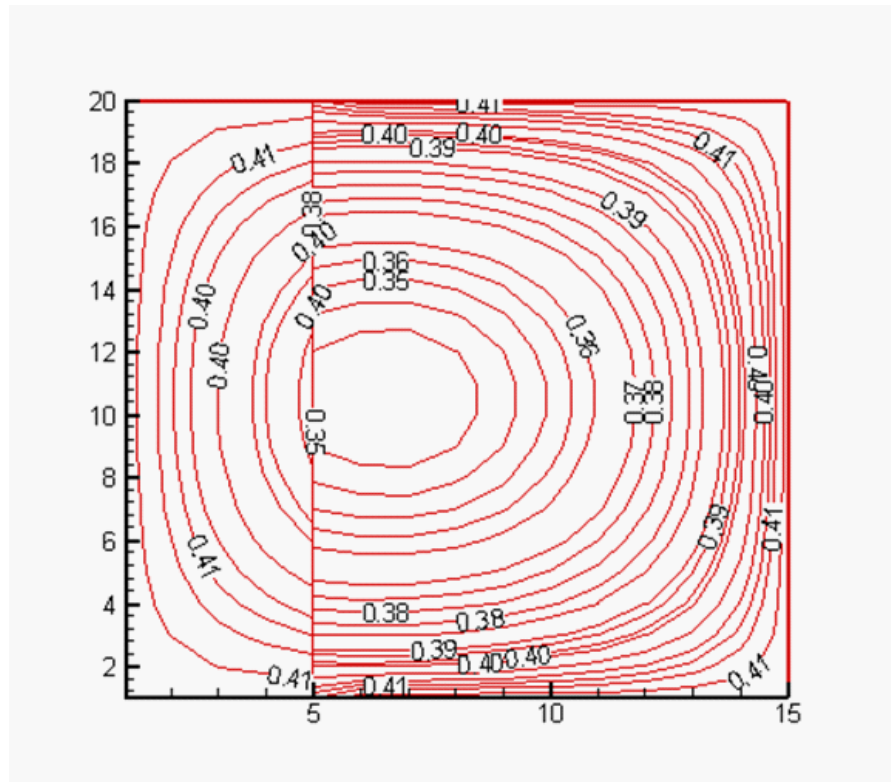


FIG. 4.18 – Isothermes d'un matériau bicouche pour  $\tau = 0.6$ ,  $R_c = 500$ ,  $t = 2000$

Stefan, qui est la solution analytique de fusion ou de solidification dans un domaine semi-infini, avec une condition au limite de type température imposée. Le milieu est caractérisé par un point de transition, la densité est la même dans les deux phases, et les autres propriétés sont considérées constantes et indépendantes de la température [31]. La conduction est le seul mode de transfert considéré.

## Hypothèses

La formulation de base de ce problème de Stefan comporte plusieurs hypothèses qui sont, pour la plupart du temps, acceptables. Pour mettre l'accent sur ces hypothèses, présentons un récapitulatif (tableau 4.1) des facteurs physiques impliqués dans le phénomène de changement de phase et des hypothèses simplifiées qui mènent au problème classique de Stefan.

<b>Facteurs physiques impliqués dans le processus de changement de phase</b>	<b>Hypothèses simplifiées pour le problème de Stefan</b>
1. Transfert de chaleur par conduction, convection et radiation.	Transfert de chaleur isotrope par conduction seulement.
2. Emission ou absorption de la chaleur latente	La chaleur latente est constante ; elle est émise ou absorbée à la température de changement de phase.
3. Variation de la température de changement de phase.	La température de changement de phase est connue, propriété du matériau.
4. Finesse de l'interface et la structure	La surface séparant deux phases est supposée fine à la température de changement de phase.
5. Variation des propriétés thermophysiques	Supposées constantes pour chaque phase.
6. Changement de la densité	Supposée constante.

TAB. 4.1 – Hypothèses adoptées pour le problème de Stefan

## Formulation mathématique du problème de Stefan

En se fondant sur les hypothèses citées ci-dessus, formulons mathématiquement le problème de Stefan classique.

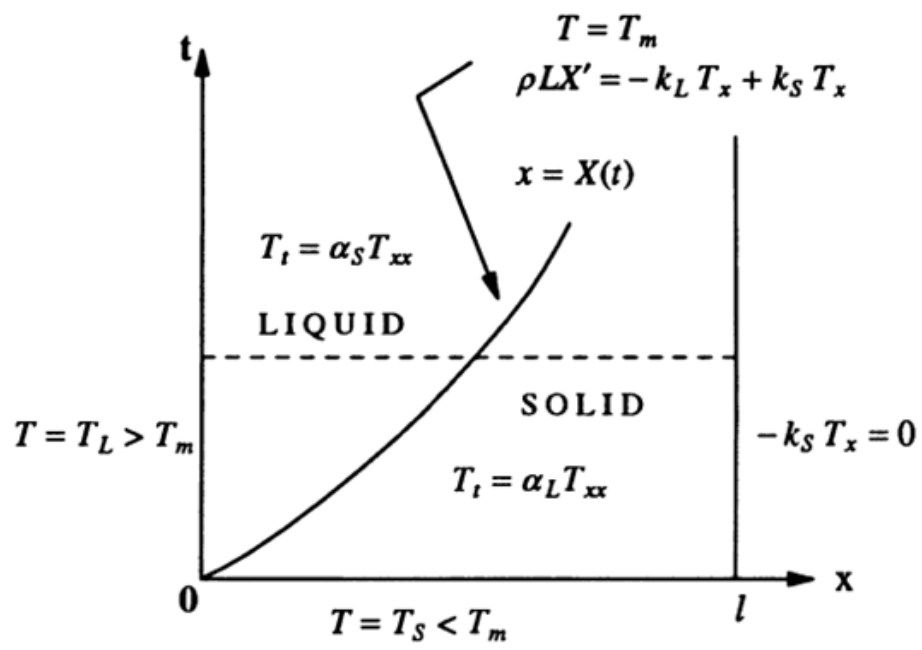


FIG. 4.19 – Diagramme espace-temps pour le problème de Stefan



La formulation de Stefan d'un problème de changement de phase liquide solide se fonde sur l'écriture dans chacune des phases de l'équation de diffusion de l'énergie par conduction (formulation de Stefan à deux phases) (figure (4.19)). Dans le cas bidimensionnel, les équations aux dérivées partielles régissant la conduction thermique dans les deux phases s'écrivent :

*Dans la phase solide :*

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_s \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), T < T_f \quad (4.8)$$

*Dans la phase liquide :*

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_l \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), T > T_f \quad (4.9)$$

Telle que  $\alpha$  représente la diffusivité thermique et s'écrit en fonction de la conductivité du matériau  $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$ . Les indices  $s$  et  $l$  représentent respectivement les phases solide et liquide.

## La solution de Neumann

Une solution analytique de l'évolution de la position du front de solidification en fonction du temps existe, et peut se mettre sous la forme :

$$X(t) = 2\lambda\sqrt{\alpha t} \quad (4.10)$$

Où  $X(t)$  est la position de l'interface solide-liquide et  $\lambda$  une constante donnée par la relation suivante :

$$\frac{K_l}{K_s} \sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}} \left[ \frac{T_f - T_h}{T_f - T_c} \right] \frac{e^{-\lambda^2(\frac{\alpha_s}{\alpha_l})}}{\operatorname{erfc} c(\lambda\sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}})} = \frac{\lambda h_f \sqrt{\pi}}{c(T_f - T_c)} \quad (4.11)$$

Et :

$$T(X, t) = \begin{cases} T_0 + (T_f - T_0) \frac{\operatorname{erf}(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_s t}})}{\operatorname{erf}(\lambda)}, X < X(t) & \text{(solide)} \\ T_i - (T_i - T_f) \frac{\operatorname{erfc} c(\frac{X}{2\sqrt{\alpha_l t}})}{\operatorname{erfc} c(\lambda\sqrt{\frac{\alpha_s}{\alpha_l}})}, X > X(t) & \text{(liquide)} \end{cases} \quad (4.12)$$

$\operatorname{erf}$  et  $\operatorname{erfc}$  représentent respectivement la fonction d'erreur et la fonction d'erreur complémentaire .

Les paramètres utilisés sont résumés dans le tableau suivant :

Température de fusion	$T_f, ^\circ\text{C}$	0.6
Température de congélation	$T_c, ^\circ\text{C}$	0.0
Température initiale	$T_h, ^\circ\text{C}$	1.0
Densité	$\rho, \text{Kg/m}^3$	1.0
Conductivité thermique	$k_s = k_l, \text{W/mK}$	1.0
Chaleur spécifique	$c, \text{J /kg K}$	1.0
Chaleur latente	$h_f, \text{J/ kg}$	0.5
Longueur caractéristique	$L, \text{m}$	1.0
Pas du temps	$\Delta t, \text{s}$	0.0001
Nombre de Stefan	—	1.2

TAB. 4.2 – Propriétés physiques et paramètres utilisés pour le problème de Stefan

### 4.3.2 Application du nouveau modèle LBM au problème de Stefan

Appliquons ce nouveau modèle LBM pour le traitement d'un problème de changement de phase, le problème de Stefan dans le cas monodimensionnel. Le principe de traitement de ce modèle par un schéma LBM, pour décrire l'évolution du front de solidification entre les deux phases en contact ; solide et liquide, est présenté sur la figure (4.20).

La figure (4.20) représente les fonctions de distribution des deux côtés de l'interface de contact entre les deux milieux solide et liquide. L'idée pour ce modèle est de pouvoir corriger les valeurs des fonctions de distribution lors du passage d'un milieu à un autre. Dans ce cas monodimensionnel, les fonctions de distribution sont liées par la relation suivante :

$$\begin{cases} f_2^l = \alpha f_2^s \\ f_1^s = \beta f_1^l \end{cases} \quad (4.13)$$

Ce modèle consiste à déterminer les paramètres de correction  $\alpha$  et  $\beta$  en considérant la relation de passage à l'interface, relative au problème de Stefan et donnée par :

$$\begin{cases} T_s = T_l \\ q_l = q_s + \rho L \frac{\partial X}{\partial t} \end{cases} \quad (4.14)$$

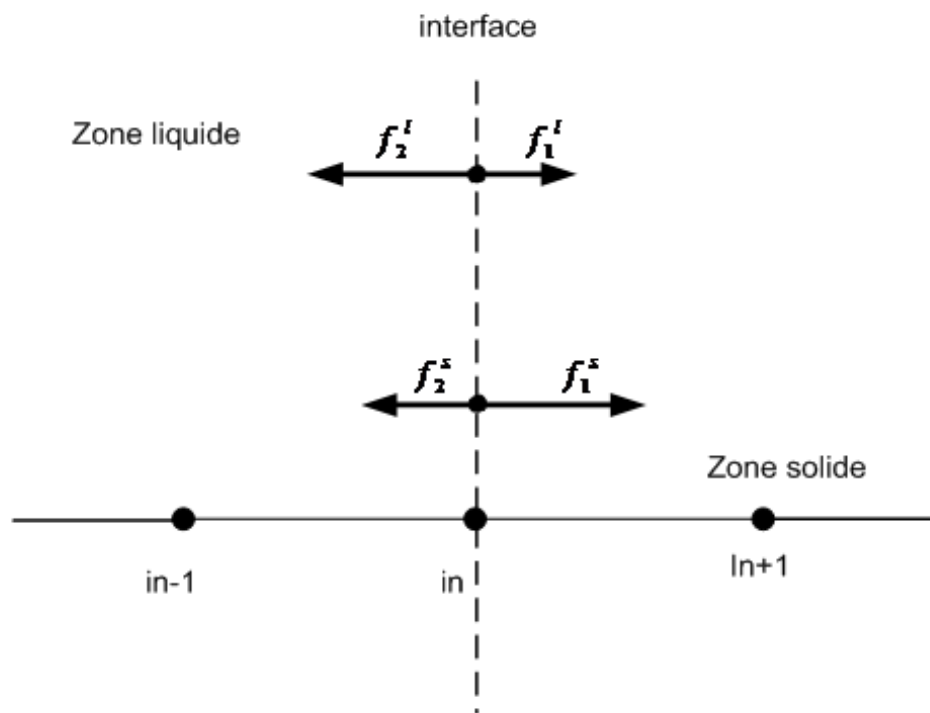


FIG. 4.20 – Configuration du nouveau modèle LBM pour le traitement du problème de Stefan 1D.

Dans l'équation (4.14),  $T_s$  et  $T_l$  ( $q_s$  et  $q_l$ ) décrivent respectivement les températures (flux) à l'interface des deux milieux solide et liquide et  $X$  la position de l'interface.

### 4.3.3 Résultats numériques

Pour mettre en évidence l'application de notre modèle (IP) aux phénomènes de changement de phase, on se propose de l'appliquer au problème monodimensionnel de Stefan. Considérons une barre semi infinie, initialement à une température froide ( $T = -0.1$ ) et appliquons une température chaude ( $T = 1.0$ ) sur le côté gauche de cette barre, comme indiqué sur la figure (4.21).

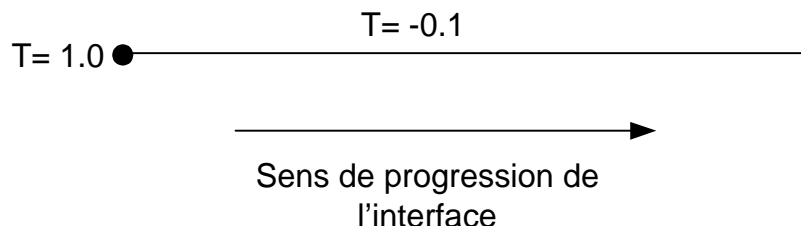


FIG. 4.21 – Géométrie adoptée pour le problème de Stefan 1D.

Un maillage du réseau  $Lx=200$  est considéré. Le transfert de chaleur est purement conductif.

En traçant l'évolution de la position du front de solidification en fonction du temps, on a pu comparer les résultats numériques à ceux analytiques. En effet, la figure (4.22) montre une bonne concordance des résultats numériques (LBM) avec les estimations analytiques pour une valeur de Stefan  $Ste = 2.5$ . Ainsi, cette validation montre la capacité du nouveau modèle LBM (IP) à décrire avec précision l'évolution de l'interface solide-liquide en mode conductif.

Aussi, on s'est intéressé aux effets de la variation de la chaleur latente sur l'évolution de la position de l'interface solide-liquide. Cette évolution qu'on a tracée pour différents nombres de Stefan.

La figure (4.23) montre bien que la progression du front de solidification est accélérée par l'augmentation du nombre de Stefan (diminution de la chaleur latente). en effet, plus le nombre de Stefan augmente, plus l'évolution de l'interface solide-liquide s'accélère .

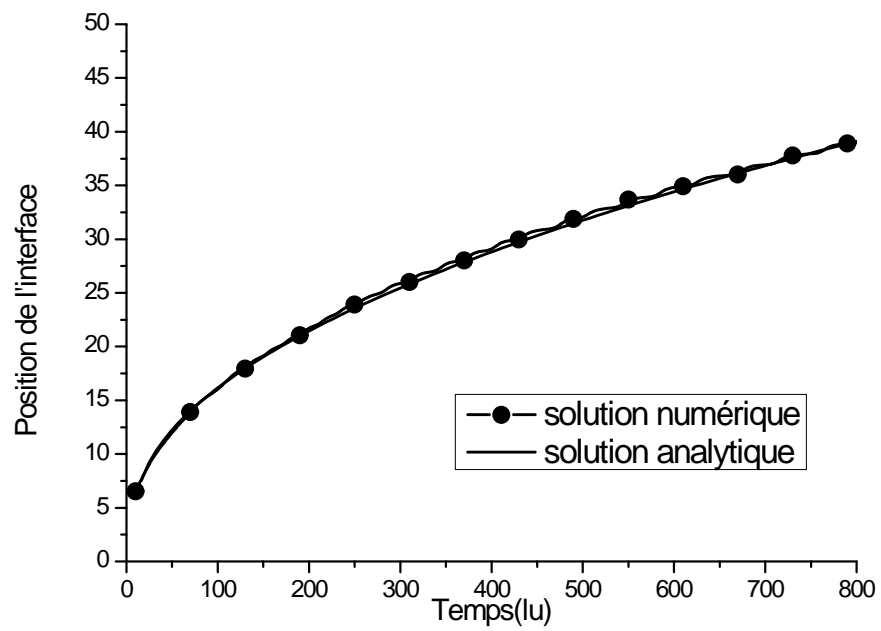


FIG. 4.22 – Comparaison des résultats LBM aux résultats analytiques pour le problème de Stefan 1D.

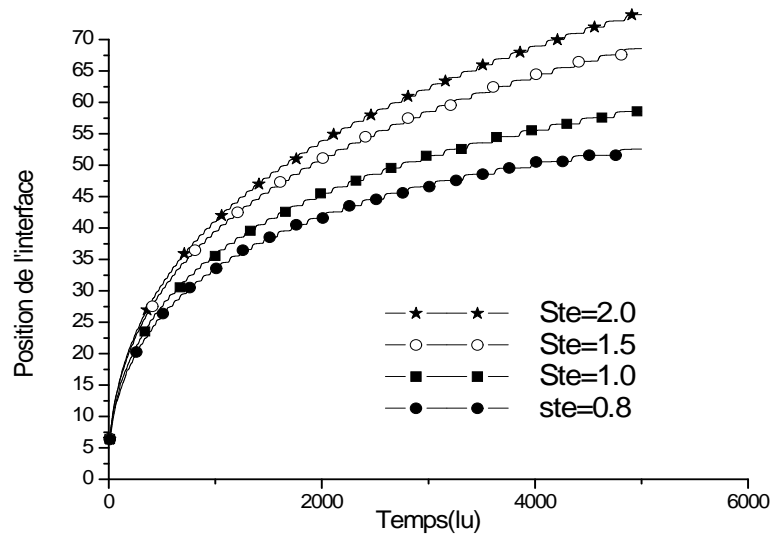


FIG. 4.23 – Evolution de la position de l'interface solide-liquide pour différents nombres de Stefan.

## 4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons simulé quelques problèmes de transmission à l'interface par une nouvelle approche fondée sur le calcul de l'image des fonctions de distribution lors du passage d'un milieu à un autre. Nous avons commencé par établir le traitement de la résistance thermique de contact. Cette nouvelle approche donne des résultats satisfaisants aussi bien dans le cas stationnaire que dans le cas instationnaire. Puis nous l'avons appliqué pour simuler le problème de Stefan, et les résultats obtenus sont comparables à ceux de la solution analytique.

# Chapitre 5

## Couplage de la méthode de Boltzmann sur réseau non uniforme à la méthode de volumes finis : Application à un problème diphasique solide-liquide

### 5.1 Introduction

Les problèmes de transfert de chaleur impliquant une transition de phase (solidification ou fusion) sont en général des problèmes de frontières libres ou mobiles. L'écoulement du fluide et les effets thermiques associés durant le changement de phase, sont d'un grand intérêt dans différentes applications d'ingénierie telles que les systèmes de stockage d'énergie par chaleur latente, l'étude de phénomènes géophysiques comme la fonte des glaciers, la solidification et le gel des lacs, ou les éruptions volcaniques, la congélation d'aliments et la préservation des matières organiques, la fusion de la glace ou le gel de l'eau, l'étude de la sécurité des réacteurs nucléaires, le refroidissement des composants électroniques, le contrôle thermique des stations et engins spatiaux, l'utilisation dans les procédés de purification des métaux, etc[75, 95, 96, 113].

Ces problèmes de changement de phase évoquent généralement une frontière déformable séparant les deux phases solide et liquide, qui se développe et progresse dans le matériau au cours du processus. Les propriétés thermophysiques peuvent

être considérablement différentes entre les deux phases. De plus un couplage important est mis en jeu au niveau de l'interface avec le transport de masse et d'énergie d'une phase à l'autre. Dans ce type de problèmes, la position et la forme de l'interface ne peuvent pas être identifiées à priori et sont des inconnues du problème.

Dans ce chapitre nous proposons un couplage hybride associant à la fois la méthode de Boltzmann sur réseau non uniforme à la méthode des volumes finis. La méthode LBM est utilisée pour la détermination du champ de vitesses tandis que la méthode des volumes finis est appliquée pour déterminer le champ de température.

## 5.2 Changement de phase

### 5.2.1 Formulation mathématique du changement de phase

#### Formulation empirique

Dans la formulation empirique, l'effet de la convection thermique sur le processus de changement de phase est pris en compte, en exprimant une valeur de la conductivité thermique effective qui inclut la dispersion due à l'écoulement. Cette méthode demande une connaissance a priori du processus de transition d'état et de son interaction avec les différents phénomènes en présence. Ce qui ne peut être réalisé qu'à partir des essais expérimentaux ou en ayant recours à des formulations mathématiques complexes pour recueillir les informations nécessaires a priori. Cette approche a été utilisée dans des problèmes de métallurgie[105, 34].

#### Formulation classique

Les méthodes adoptant cette technique sont aussi appelées formulations de suivi de front, l'interface solide-liquide est localisée explicitement et un maillage curviligne épousant la forme de l'interface est généré à chaque pas de temps. Chaque phase est modélisée séparément et un bilan d'énergie est effectué à l'interface entre les deux phases solide et liquide, à partir duquel la position au pas de temps suivant est déduite. Dans un tel cas, des techniques d'adaptation du maillage aux positions de l'interface sont généralement utilisées. D'autres auteurs, utilisent un maillage à référence fixe à l'aide d'une transformation en coordonnées curvilignes généralisées[59].

Pour expliciter cette technique, considérons le problème conductif de changement de phase, le flux de chaleur pour les deux phases solide et liquide, est représenté



par la loi de Fourier :

$$\rho_s C_p^s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \nabla \cdot (k_s \nabla T_s) \quad (5.1)$$

$$\rho_l C_p^l \frac{\partial T_l}{\partial t} = \nabla \cdot (k_l \nabla T_l) \quad (5.2)$$

Les indices  $s$  et  $l$  représentent respectivement la phase solide et la phase liquide,  $\rho$  la masse volumique du fluide,  $C_p$  la chaleur spécifique et  $k$  la conductivité thermique.

A l'interface entre les deux phases, les deux équations ci-dessus doivent satisfaire aux conditions de continuité du champ thermique  $T_s = T_l$ , et la condition de la conservation de l'énergie à l'interface (condition de Stefan) traduite par le saut de flux thermique dégagé par chaleur latente à l'interface s'écrit sous la forme :  $k_s \frac{\partial T_s}{\partial n} - k_l \frac{\partial T_l}{\partial n} = \rho L_f V_f \cdot n$  tel que  $L$  est la chaleur latente de fusion-solidification,  $V$  est la vitesse de déplacement de l'interface solide-liquide et  $n$  le vecteur unitaire normal à la surface.

## Formulation enthalpique

Contrairement aux méthodes de suivi de front, les méthodes enthalpiques aussi nommées, méthodes à maillage fixe, ne nécessitent pas une génération de maillage à chaque pas de temps, ce qui présente un gain important en temps de calcul. Elles peuvent être mises en place facilement dans des codes de calculs (CFD) existants [24, 35, 50, 21, 57, 84, 108, 60, 109, 110, 55, 92].

La formulation enthalpique permet de reformuler les équations de Navier-Stokes relatives à la phase fluide et d'en faire l'extension à l'ensemble du domaine y compris la phase solide. La vitesse dans la phase solide est annulée par l'introduction d'un terme source dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. L'énergie libérée ou absorbée par chaleur latente est isolée par le biais d'un terme source dans l'équation de conservation de l'énergie ou d'une chaleur spécifique équivalente. Les équations ainsi modifiées sont alors résolues sur l'ensemble du domaine physique [2, 3, 6, 29, 88].

La formulation enthalpique a été proposée initialement par Eyres et al. [37] en remplaçant les équations aux dérivées partielles non linéaires par des équations différentielles ordinaires dans un but d'application de l'équation de la conduction de la chaleur. Après, différentes études ont été menées pour évaluer les performances de la formulation enthalpique [90]. Bell et Wood [17] ont étudié la fusion dans un domaine monodimensionnel semi-infini contenant un matériau initialement à sa température de fusion et en appliquant une température chaude à sa frontière. Voller

et Cross[109] ont obtenu un bon accord entre la solution obtenue par volumes finis associée au modèle enthalpique pour le problème de Stefan et la solution analytique. Leur méthode permet de traiter l'évolution de la température et la progression du front de solidification.

L'ensemble de ces travaux se sont limités à des configurations de changement de phase totalement contrôlées par la conduction thermique. La prise en compte de la convection thermique dans le liquide nécessite un traitement spécifique de l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour décrire l'écoulement dans le liquide et l'absence de tout mouvement dans le solide. Voller et al.[112] ont proposé une formulation générale de type enthalpique fondée sur des termes sources convenables pour modéliser l'évolution de la chaleur latente et de l'écoulement dans la zone de transition solide-liquide (mushy zone ou zone pâteuse).

### 1. Enthalpie

La différence d'enthalpie volumique totale  $\Delta H = H(T) - H_{ref}$  d'un corps est définie comme la somme de la chaleur sensible et de la chaleur latente par :

$$H(T) = \rho_p \varepsilon L_f + \int_{T_{fusion}}^T \rho_p C_p dT \quad (5.3)$$

Tel que  $\rho_p$  représente la masse volumique de la particule,  $C_p$  sa chaleur spécifique,  $L_f$  la chaleur latente du matériau et  $\varepsilon$  la fraction du liquide.

### 2. Formulation enthalpique de l'équation de conservation d'énergie

Dans cette formulation, le domaine physique d'étude est constitué de trois régions ; la région qui correspond à la phase solide, celle qui correspond à la phase liquide et une région intermédiaire où coexistent les deux phases, appelée « mushy zone » ou zone pâteuse.

A l'échelle macroscopique, les propriétés thermodynamiques du matériau varient continûment depuis la phase solide jusqu'à la phase liquide à travers la zone de changement de phase. Ainsi, il est possible d'établir une formulation homogène des équations de conservation sur l'ensemble du domaine d'étude. Les propriétés thermodynamiques du matériau dans la zone de changement de phase sont calculées en fonction de la fraction massique des phases solide et liquide en présence.

La formulation enthalpique consiste à introduire la fonction d'enthalpie  $H$  du milieu, en tant que la somme de l'enthalpie latente et l'enthalpie sensible. Ainsi nous pouvons écrire :

Pour la région où règne la phase solide,  $T < T_s$  :

$$H_s(T) = \int_T^{T_s} \rho C_p^s dT \quad (5.4)$$

Pour la région où règne la phase liquide,  $T > T_l$  :

$$H_l(T) = \int_{T_l}^T \rho C_p^l dT + \rho L_f \quad (5.5)$$

Pour la zone où coexistent les deux phases,  $T_s \leq T \leq T_l$  :

$$H_s(T) \leq H_f(T) \leq H_l(T) \quad (5.6)$$

Dans le cas d'un changement de phase isotherme, la relation enthalpie température d'un matériau pur est représentée schématiquement sur la figure (5.1a) :

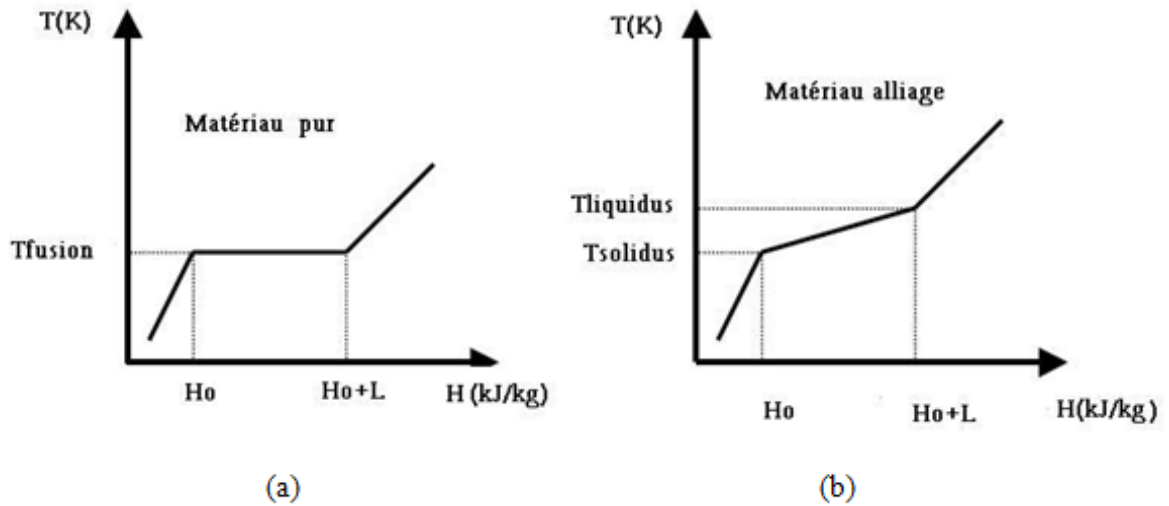


FIG. 5.1 – Relation enthalpie-température pour un matériau pur et alliage

Alors que pour un alliage, représenté sur la figure (5.1b), le changement de phase est non isotherme et s'effectue dans une plage de température comprise entre  $T_s \leq T \leq T_l$ , cet intervalle qui représente, pour le processus de fusion-solidification, une zone dynamique qui dépend de l'évolution du système suivant un diagramme

d'équilibre thermodynamique du matériau. Dans ce cas, la chaleur latente cumulée devient fonction de la température et varie de la valeur zéro (solidus) à la valeur 1 (liquidus).

Ainsi, le saut thermique au voisinage de la température de fusion peut être régularisé par une fonction linéaire explicitée sous la forme suivante :

$$H_f(T) = \rho C_p^l T + \rho L_f \left( \frac{T - T_s}{T_l - T_s} \right) \quad (5.7)$$

A partir de cette régularisation, nous pouvons définir un paramètre qui joue le rôle d'indicateur de phase, et qui permet de faciliter l'écriture des variables thermiques. Ce paramètre est la fraction massique de matériau solidifié,  $f_s$ , qui s'exprime en fonction de la température comme suit :

$$f_s = \left( \frac{T_l - T}{T_l - T_s} \right) \quad (5.8)$$

Notons que ce paramètre prend la valeur 1 dans les zones purement solides, la valeur 0 dans les zones liquides et des valeurs comprises entre 0 et 1 pour les zones où coexistent les deux phases solide et liquide. Par suite, la fraction massique de la phase liquide est donnée par :  $1 - f_s$ .

En introduisant le terme de la fraction massique de la phase solide, l'enthalpie  $h$  a pour expression :

$$h = f_s h_s + (1 - f_s) h_l \quad (5.9)$$

où :

$$\begin{cases} h_s = C_p^s(T)T \\ h_l = C_p^l(T)T + L_f \end{cases} \quad (5.10)$$

Ainsi, l'équation de la conservation locale de l'énergie dans un élément de volume  $dV$  d'un corps solide est donnée par :

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V h) = \nabla \cdot (k \nabla T) + S_h \quad (5.11)$$

Tel que  $S_h$  est le terme source qui permet de tenir compte de l'énergie libérée ou absorbée correspondant à la chaleur latente,  $k$  la conductivité thermique et  $V$  le vecteur vitesse.

### 3. Formulation enthalpique de l'équation de la quantité de mouvement

La formulation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement lors du changement de phase, doit tenir compte du saut de vitesses dans la zone de transition. En effet, ce saut de vitesse est dû à la variation de la vitesse d'une valeur non nulle dans la phase liquide, sous l'effet de la convection thermique, à une valeur nulle dans la phase solide. Voller et Prakash[111] ont considéré la région de changement de phase comme un milieu poreux de porosité  $\varepsilon$ . Avec  $\varepsilon = 1$  dans la phase liquide,  $\varepsilon = 0$  dans la phase solide et  $0 < \varepsilon < 1$  dans la zone de changement de phase.

En tenant compte du terme de porosité  $\varepsilon$  qui peut être exprimé en fonction de la fraction solide par :  $\varepsilon = 1 - f_s$ , la vitesse est exprimée sous la forme :

$$V = \begin{cases} V_l & \text{Dans la phase liquide} \\ (1 - f_s)V_l & \text{Dans la 'mushy zone'} \\ 0 & \text{Dans la phase solide} \end{cases} \quad (5.12)$$

Tel que  $V_l$  est la vitesse de filtration dans la phase fluide.

En supposant que le fluide est newtonien et incompressible et en prenant en considération l'équation (5.11), l'équation de la conservation de la quantité de mouvement s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V u) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \nabla \cdot \left( \mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla u \right) + S^u \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V v) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \nabla \cdot \left( \mu_l \frac{\rho}{\rho_l} \nabla v \right) + S^v \quad (5.14)$$

Tel que  $p$  est la pression,  $u$  et  $v$  représentent respectivement les composantes de la vitesse suivant les directions  $x$  et  $y$ ,  $\mu_l$  est la viscosité du liquide et  $S$  représente le terme source qui dépend de la force de la poussée d'Archimède ainsi que d'un terme représentant la transition de phase.

### 5.3 La méthode de Boltzmann en réseau non uniforme

La méthode de Boltzmann sur réseau s'est récemment révélée comme une méthode efficace pour la simulation des écoulements complexes (chapitre 2). Cependant la restriction de l'équation standard de Boltzmann sur réseau à un maillage régulier limite cette méthode. Dans plusieurs cas, il est plus intéressant d'opter

pour un maillage non uniforme adapté à la nature des écoulements et aux types de frontières, ce qui permet un temps de réponse plus rapide et des résultats plus précis.

Cette restriction de la méthode LBM à un maillage uniforme dérive de la méthode des automates cellulaires Gas sur réseau (LGCA, Lattice Gas Cellular Automata) [39, 114]. Pour la méthode LCGA, la condition essentielle pour représenter les équations de Navier Stokes est la symétrie du réseau, cette symétrie garantit l'isotropie du tenseur du quatrième ordre composé des vitesses des particules. En effet, la condition de l'uniformité de la méthode LBM se traduit par le fait qu'une particule à un nœud du réseau doit pouvoir se mouvoir vers les nœuds voisins dans le même pas du temps. Bien que la méthode LBM [58, 89] dans le modèle Bhatnagar-Gross-Krook (BGK)[20] ait fait de grands progrès pour la LGCA, elle hérite la fonction uniformité des méthodes d'automates cellulaires Gaz sur réseau.

Théoriquement, dans l'équation standard de Boltzmann sur réseau, il n'est pas nécessaire de garder l'uniformité de l'espace de réseau puisque les fonctions de distributions des particules restent continues dans l'espace physique. Ainsi, pour mettre en place la méthode de Boltzmann sur réseau dans une géométrie quelconque, nous nous proposons d'utiliser la méthode TLLBM (Taylor series expansion and least square-based Lattice Boltzmann Method)[99, 97, 98]. Cette méthode est fondée sur la méthode LBM, le développement en séries de Taylor, la méthode de Runge-Kutta et la méthode d'optimisation des moindres carrés.

### 5.3.1 La méthode TLLBM

Cette méthode est fondée sur ce que la fonction de distribution est continue dans l'espace physique et peut être définie dans n'importe quel maillage.

Dans le cas bidimensionnel l'équation BGK de réseau s'écrit :

$$f_\alpha(x + \hat{e}_{\alpha x}\delta t, y + \hat{e}_{\alpha y}\delta t, t + \delta t) = f_\alpha(x, y, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(x, y, t) - f_\alpha^{eq}(x, y, t)] \quad (5.15)$$

Où :

$\tau$  est le temps simple de relaxation ;

$f_\alpha$  est la densité de la fonction de distribution suivant la direction  $\alpha$  ;

$f_\alpha^{eq}$  est la densité d'équilibre ;

$e_\alpha(e_{\alpha x}, e_{\alpha y})$  est le vecteur vitesse d'une particule suivant la direction  $\alpha$ .

Cette équation se résout selon deux étapes : collision et advection. Les variables macroscopiques telles que la masse volumique  $\rho$  et la densité des moments  $\rho u$  s'écrivent :

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha}, \quad \rho u = \sum_{\alpha=0}^N e_{\alpha} f_{\alpha} \quad (5.16)$$

Supposons une particule initialement au point  $(x, y, t)$  du maillage, suivant la direction  $\alpha$ . Après collision cette particule se trouvera à la position  $(x + \hat{e}_{\alpha x} \delta t, y + \hat{e}_{\alpha y} \delta t, t + \delta t)$ .

Si le maillage est uniforme, nous aurons :  $\partial x = \hat{e}_{\alpha x} \delta t$  et  $\partial y = \hat{e}_{\alpha y} \delta t$ . Cette deuxième position se trouve sur les grilles du maillage. Dans le cas où le maillage est non uniforme, cette position ne va pas être raccordée sur les grilles du maillage (figure (5.2)). Pour déterminer la nouvelle fonction de distribution à cette position, un développement en séries de Taylor est proposé.

Soit le schéma suivant :

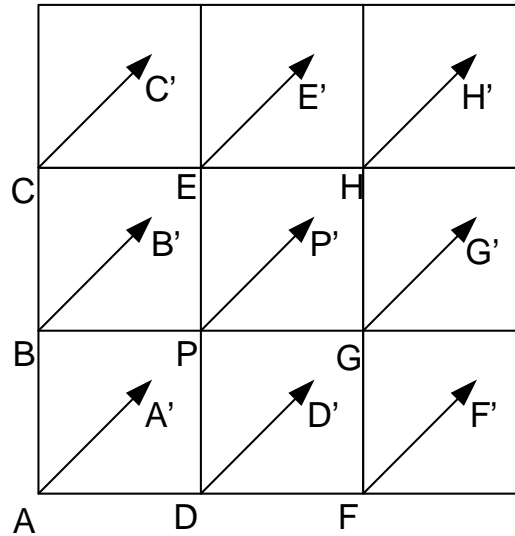


FIG. 5.2 – Configuration des noeuds du maillage uniforme et non uniforme.

Le point  $A$  (point du maillage uniforme) a pour coordonnées  $(x_A, y_A, t)$

Le point  $P$  (point du maillage uniforme) a pour coordonnées  $(x_P, y_P, t)$

Le point  $A'$  (point du maillage non uniforme) a pour coordonnées  $(x_A + \hat{e}_{\alpha x} \partial t, y_A + \hat{e}_{\alpha y} \partial t, t + \partial t)$ .

La fonction de distribution au point  $A'$  s'écrit selon l'équation (5.15) :

$$f_\alpha(A', t + \delta t) = f_\alpha(A, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(A, t) - f_\alpha^{eq}(A, t)] \quad (5.17)$$

Remarquons que si le maillage était uniforme,  $A'$  devrait coïncider avec  $P$ .

Pour déterminer la fonction de distribution au point  $A'$ , développons  $f_\alpha(A', t + \delta t)$  en séries de Taylor autour du point  $P$ .

Le développement d'une fonction  $f$ , autour d'un point  $a$  telle qu'elle soit infiniment dérivable en ce point, est donné par :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n \quad (5.18)$$

Ainsi, on a :

$$f_\alpha(A', t + \partial t) = f_\alpha(P, t + \partial t) + (x_{A'} - x_P) \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial x} + (y_{A'} - y_P) \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial y} + \theta(\dots)^2 \quad (5.19)$$

Avec :

$$\begin{aligned} \Delta x_A &= x_{A'} - x_P = x_A + \hat{e}_{\alpha x} \partial t - x_P \\ \Delta y_A &= y_{A'} - y_P = y_A + \hat{e}_{\alpha y} \partial t - y_P \end{aligned}$$

En remplaçant l'équation (5.19) dans (5.17) :

$$\begin{aligned} f_\alpha(P, t + \partial t) + \Delta x_A \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial x} + \Delta y_A \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial y} &= f_\alpha(A, t) \\ &- \frac{1}{\tau} [f_\alpha(A, t) - f_\alpha^{eq}(A, t)] \end{aligned} \quad (5.20)$$

Cette équation est une différentielle du premier ordre, avec trois inconnues, pour la résoudre il faut encore deux équations pour fermer le système. Ainsi, nous prendrons en considération les nœuds voisins.



Pour plus de précision, le développement de Taylor avec une différentielle du deuxième ordre est utilisé, nous nous retrouvons avec une équation à 6 inconnues :

$$\begin{aligned}
f_\alpha(A', t + \partial t) &= f_\alpha(P, t + \partial t) + \Delta x_A \frac{\partial f_\alpha(P, t + \partial t)}{\partial x} + \Delta y_A \frac{\partial f_\alpha(P, t + \partial t)}{\partial y} \\
&+ \frac{(\Delta x_A)^2}{2} \frac{\partial^2 f_\alpha(P, t + \partial t)}{\partial x^2} + \frac{(\Delta y_A)^2}{2} \frac{\partial^2 f_\alpha(P, t + \partial t)}{\partial y^2} \\
&+ \Delta x_A \Delta y_A \frac{\partial^2 f_\alpha(P, t + \partial t)}{\partial x \partial y} + \theta(\dots)^3
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Avec une équation à six inconnues, pour avoir un système fermé nous aurons besoin de prendre en compte les fonctions de distributions aux nœuds voisins.

Pour ce faire, pour le modèle D2Q9, deux cas sont considérés :

- Cas à six nœuds voisins
- Cas à neuf nœuds voisins

### Interpolation à six nœuds voisins

Pour le cas à six nœuds, parmi les huit nœuds voisins du modèle D2Q9, choisissons six nœuds.

Choisissons les nœuds  $A, B, C, D, E$  (figure (5.3)) :

Configuration des nœuds du maillage non uniforme avec six nœuds voisins.

Après collision, les nœuds  $A, B, C, D, E$  prennent respectivement les positions  $A', B', C', D', E'$ , ainsi en appliquant le développement de Taylor (équation (5.21)) pour chaque nœud autour du point  $P$ , nous obtenons :

$$G^T = P.F^T \tag{5.22}$$

où :

$$\begin{aligned}
G^T &= \{g_i\}^T, \quad g_i = f_\alpha(i, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(i, t) - f_\alpha^{eq}(i, t)], \quad i = P, A, B, C, D, E \\
F^T &= \left\{ f(P, t + \partial t), \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial x}, \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial y}, \frac{\partial^2 f(P, t + \partial t)}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 f(P, t + \partial t)}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 f(P, t + \partial t)}{\partial x \partial y} \right\}^T
\end{aligned}$$

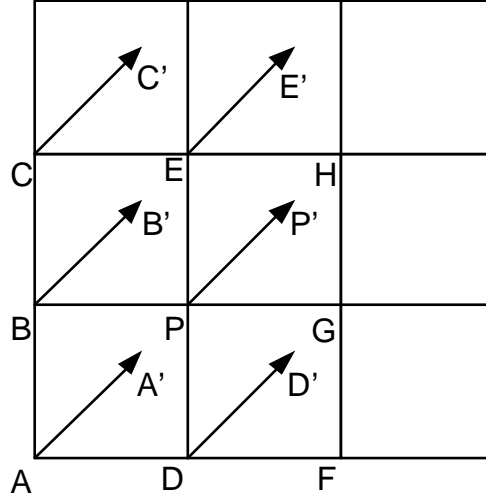


FIG. 5.3 – Configuration des noeuds du maillage non uniforme avec six noeuds voisins

$$P = \begin{pmatrix} 1 & \Delta x_p & \Delta y_p & \left(\frac{\Delta x_p}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_p}{2}\right)^2 & \Delta x_p \Delta y_p \\ 1 & \Delta x_A & \Delta y_A & \left(\frac{\Delta x_A}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_A}{2}\right)^2 & \Delta x_A \Delta y_A \\ 1 & \Delta x_B & \Delta y_B & \left(\frac{\Delta x_B}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_B}{2}\right)^2 & \Delta x_B \Delta y_B \\ 1 & \Delta x_C & \Delta y_C & \left(\frac{\Delta x_C}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_C}{2}\right)^2 & \Delta x_C \Delta y_C \\ 1 & \Delta x_D & \Delta y_D & \left(\frac{\Delta x_D}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_D}{2}\right)^2 & \Delta x_D \Delta y_D \\ 1 & \Delta x_E & \Delta y_E & \left(\frac{\Delta x_E}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_E}{2}\right)^2 & \Delta x_E \Delta y_E \end{pmatrix}$$

Avec :

$$\begin{aligned} \Delta x_i &= x_i + \hat{e}_{\alpha x} \partial t - x_0 \\ \Delta y_i &= y_i + \hat{e}_{\alpha y} \partial t - y_0 \end{aligned}$$

Le choix des positions de ces six nœuds voisins du nœud principal repose sur le fait que la matrice P doit rester inversible. Ainsi les configurations utilisées pour chaque direction du modèle D2Q9 sont schématisées sur la figure (5.5), et le schéma des coordonnées des nœuds est donné comme suit :

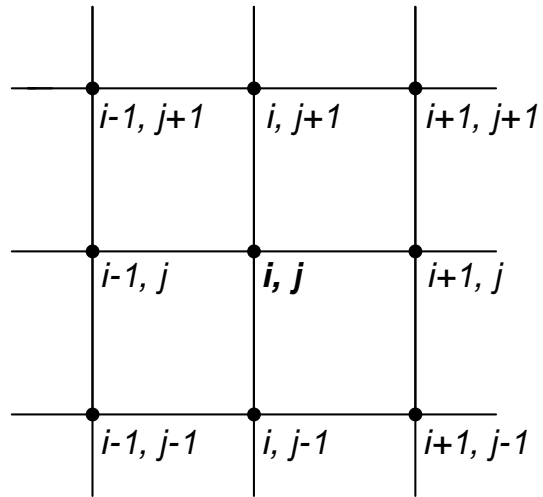


FIG. 5.4 – Coordonnées des nœuds entourant le nœud  $(i,j)$

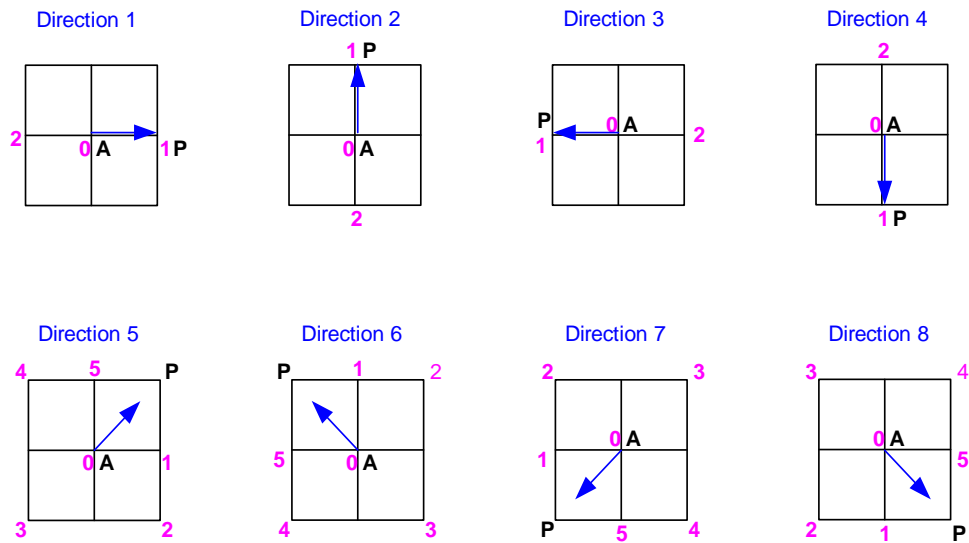


FIG. 5.5 – Configurations utilisées pour le maillage non uniforme avec six points d'interpolation.

## Interpolation à neuf nœuds voisins

Pour le cas à neuf points, on ne va pas s'intéresser seulement à six points parmi les huit entourant un point du modèle, mais pour plus de précision et pour avoir une interpolation beaucoup plus fiable, nous prendrons tous les nœuds en considération (figure(5.6)) .

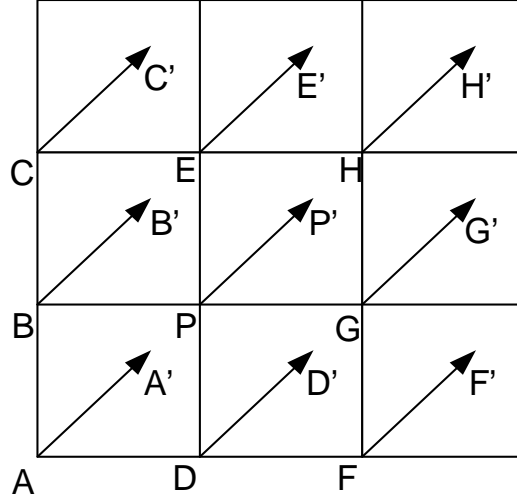


FIG. 5.6 – Configuration des noeuds du maillage non uniforme avec neuf points voisins.

Dans ce cas, la matrice  $P$  n'est plus une matrice d'ordre  $(6, 6)$ , mais une matrice d'ordre  $(9, 6)$ .

Par suite, le système d'équations donné par l'équation (5.22) devient :

$$G^T = P.F^T \quad (5.23)$$

où :  $G^T = \{g_i\}^T$  ,  $g_i = f_\alpha(i, t) - \frac{1}{\tau} [f_\alpha(i, t) - f_\alpha^{eq}(i, t)]$  ,  $i = P, A, B, C, D, E$

et  $F^T = \left\{ f(P, t + \partial t), \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial x}, \frac{\partial f(P, t + \partial t)}{\partial y}, \frac{\partial^2 f(P, t + \partial t)}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 f(P, t + \partial t)}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 f(P, t + \partial t)}{\partial x \partial y} \right\}^T$

$$P = \begin{pmatrix} 1 & \Delta x_p & \Delta y_p & \left(\frac{\Delta x_p}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_p}{2}\right)^2 & \Delta x_p \Delta y_p \\ 1 & \Delta x_A & \Delta y_A & \left(\frac{\Delta x_A}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_A}{2}\right)^2 & \Delta x_A \Delta y_A \\ 1 & \Delta x_B & \Delta y_B & \left(\frac{\Delta x_B}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_B}{2}\right)^2 & \Delta x_B \Delta y_B \\ 1 & \Delta x_C & \Delta y_C & \left(\frac{\Delta x_C}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_C}{2}\right)^2 & \Delta x_C \Delta y_C \\ 1 & \Delta x_D & \Delta y_D & \left(\frac{\Delta x_D}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_D}{2}\right)^2 & \Delta x_D \Delta y_D \\ 1 & \Delta x_E & \Delta y_E & \left(\frac{\Delta x_E}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_E}{2}\right)^2 & \Delta x_E \Delta y_E \\ 1 & \Delta x_F & \Delta y_F & \left(\frac{\Delta x_F}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_F}{2}\right)^2 & \Delta x_F \Delta y_F \\ 1 & \Delta x_G & \Delta y_G & \left(\frac{\Delta x_G}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_G}{2}\right)^2 & \Delta x_G \Delta y_G \\ 1 & \Delta x_H & \Delta y_H & \left(\frac{\Delta x_H}{2}\right)^2 & \left(\frac{\Delta y_H}{2}\right)^2 & \Delta x_H \Delta y_H \end{pmatrix}$$

Avec :

$$\begin{aligned} \Delta x_i &= x_i + \hat{e}_{\alpha x} \partial t - x_0 \\ \Delta y_i &= y_i + \hat{e}_{\alpha y} \partial t - y_0 \end{aligned}$$

Vu que la matrice  $P$  est d'ordre  $(9, 6)$ , on va la multiplier par sa transposée pour pouvoir inverser la matrice carrée  $P^T.P$ , ainsi, on a :

$$P^T.G^T = P^T.P.F^T \quad (5.24)$$

Et par suite, le système à résoudre numériquement est donné par :

$$F^T = (P^T.P)^{-1} P^T.G^T \quad (5.25)$$

Aussi le choix des positions de ces huit nœuds voisins du nœud principal repose sur le fait que la matrice  $P$  doit rester inversible. Ainsi, les configurations utilisées pour chaque direction du modèle D2Q9 sont schématisées sur la figure (5.7) :

## 5.4 La méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis est une méthode de discrétisation bien adaptée pour la simulation numérique de divers types (elliptique, parabolique ou hyperbolique) de lois de conservation ; elle a été intensivement employée dans plusieurs domaines, tels que l'aérodynamique, le transfert de la chaleur et de masse, etc.

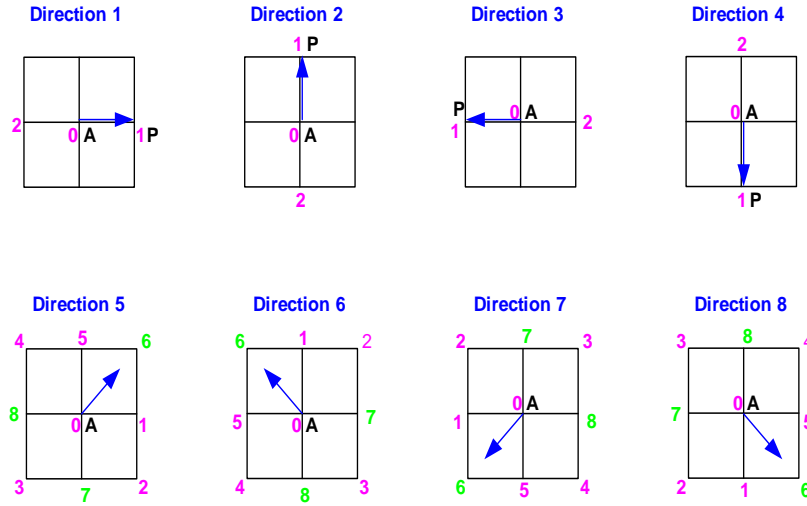


FIG. 5.7 – Configurations utilisées pour le maillage non uniforme avec neuf points d’interpolation.

Cette méthode se distingue des autres méthodes numériques par la conservation locale des flux numériques, ce qui la rend tout à fait attrayante en modélisant les problèmes pour lesquels le flux est d’importance, comme dans les caractéristiques aérodynamiques, simulation de dispositif de semi-conducteur, le transfert de chaleur et de masse...

Dans la partie présentée l’accent est mis sur les modalités d’application de cette méthode qui se fonde sur l’intégration des équations du transport, les différents schémas relatifs à la discrétisation spatiale et temporelle ainsi que les avantages et les limitations de chacun de ces schémas sont explicités.

Dans cette méthode, le domaine de calcul est subdivisé en un nombre fini de sous-domaines élémentaires, appelés volumes de contrôle ou cellules. Cette méthode numérique se fonde sur l’intégration des équations de transport qui gouvernent les écoulements des fluides et les transferts de la chaleur, sur chaque volume de contrôle. Un nœud dit nœud principal ( $P$ ) est enveloppé par ce volume de contrôle (figure (5.8)).

Le principe de cette méthode consiste à établir le bilan des grandeurs physiques (masse, quantité de mouvement, énergie, ...) sur chaque volume de contrôle du maillage considéré. La méthode doit obéir aux quatre conditions suivantes :

- L’ensemble des volumes de contrôle doit couvrir le domaine de calcul dans

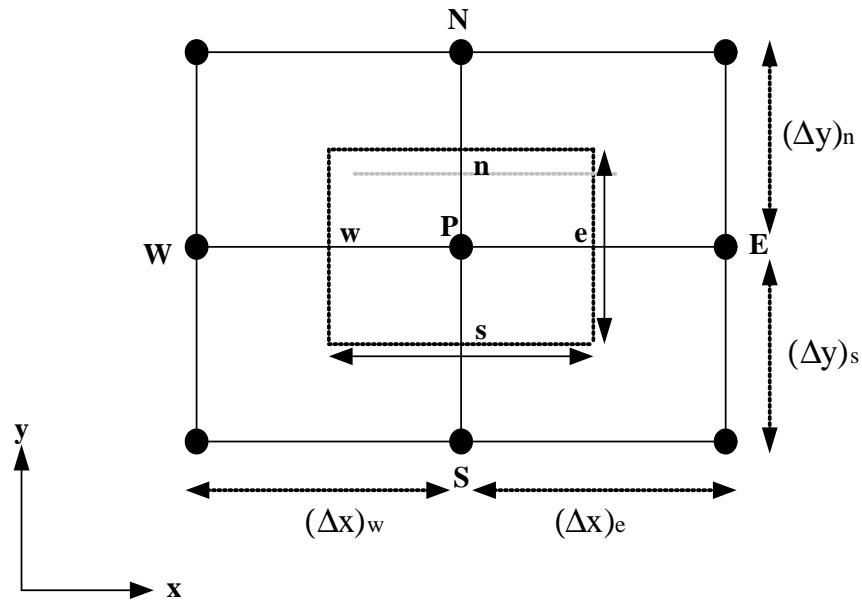


FIG. 5.8 – Schéma du volume de contrôle dans le cas bidimensionnel.

son intégralité ;

- les cellules sont toutes fermées ;
- les flux à travers les faces des cellules doivent être calculés indépendamment des cellules où ils sont considérés ;
- le modèle choisi doit être stable et convergent.

L'avantage de cette méthode de volumes finis par rapport aux autres méthodes numériques est qu'elle est conservative : tout ce qui sort d'un volume de contrôle entre dans un autre.

Pour expliciter l'application de cette méthode, considérons l'équation générale de transport qui s'écrit pour une propriété  $\phi$ , comme suit :

$$\frac{\partial (\rho\phi)}{\partial t} + \text{div} (\rho\phi u) = \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad} \phi) + S_\phi \quad (5.26)$$

En d'autres termes :

$$\underbrace{\left( \text{variation de } \phi \text{ dans un } \right)}_{\text{élément de fluide}} + \underbrace{\left( \text{flux net de } \right)}_{\text{l'élément de fluide}} = \underbrace{\left( \text{variation de } \phi \text{ due } \right)}_{\text{à la diffusion}} + \underbrace{\left( \text{variation de } \phi \text{ due } \right)}_{\text{aux sources}}$$

Tel que  $\Gamma_\phi$  représente le coefficient de diffusion et  $S_\phi$  le terme source.

La résolution de l'équation (5.26) par la méthode des volumes finis, réside essentiellement dans l'intégration de celle ci sur un volume de contrôle :

$$\int_{cv} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dv + \int_{cv} \text{div}(\rho\phi u) dv = \int_{cv} \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad } \phi) dv + \int_{cv} S_\phi dv \quad (5.27)$$

### 5.4.1 Etapes de résolution par la méthode des volumes finis

#### Maillage

Cette étape permet la subdivision du domaine considéré en grilles longitudinales et transversales dont l'intersection représente un nœud. La discrétisation du domaine est obtenue par un maillage constitué d'un réseau de points (nœuds) de telle sorte qu'un élément de volume (volume de contrôle) est défini autour de chacun de ces nœuds. Les frontières du volume de contrôle ( $w$  et  $e$ ) (dans le cas monodimensionnel) sont placées à mi-distance des deux nœuds adjacents ( $W$  et  $E$ ) du nœud  $P$  (figure (5.9)). La distance entre les nœuds  $W$  et  $P$  et celle entre les nœuds  $P$  et  $E$  est notée respectivement par  $\delta x_{WP}$  et  $\delta x_{PE}$ . Aussi, on note par  $\delta x_{wP}$  la distance séparant  $w$  et  $P$  et par  $\delta x_{Pe}$  la distance séparant  $P$  et  $e$ . Chaque volume de contrôle a pour longueur  $\Delta x = \delta x_{we}$ .

#### Discrétisation

Dans le cas bidimensionnel, l'équation de transport s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho\phi u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\phi v)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}) + S_\phi \quad (5.28)$$

Cette équation peut s'écrire sous forme simplifiée :

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(J_x) + \frac{\partial}{\partial y}(J_y) = S_\phi \quad (5.29)$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} J_x = \rho\phi u - \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x} \\ J_y = \rho\phi v - \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial y} \end{cases}$$

$J_x$  et  $J_y$  sont les flux totaux (convection et diffusion) par unité de surface dans les directions  $x$  et  $y$ .



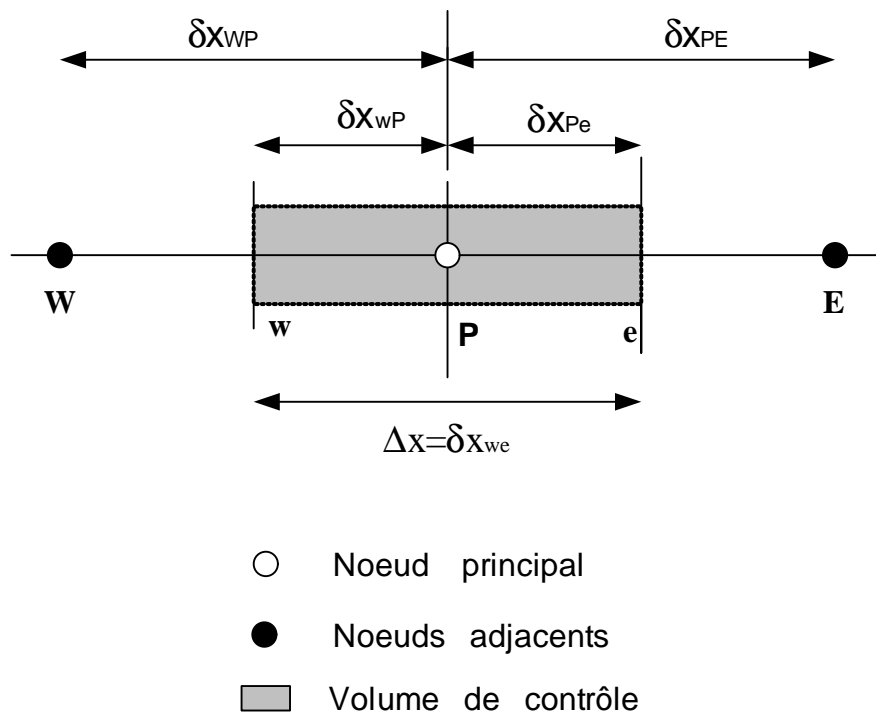


FIG. 5.9 – Configuration du maillage en 1D en volumes finis.

L'idée principale dans cette étape est l'intégration de l'équation de transport permettant ainsi la transformation de l'équation différentielle de transport en un système d'équations algébriques. L'intégration de l'équation (5.29) sur le volume de contrôle et sur un intervalle de temps  $\Delta t$  est donnée par :

$$\underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dx dy dt}_I + \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left( \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} \right) dx dy dt}_{II} = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n S_\phi dx dy dt}_{III} \quad (5.30)$$

L'approximation de cette équation sous forme algébrique impose la prise en compte de quelques hypothèses :

- La variable généralisée  $\phi$  varie linéairement entre les nœuds principaux entre les deux directions ;
- Les termes diffusifs et convectifs sont uniformes à travers les faces correspondantes ;
- Le terme source est uniforme sur le volume de contrôle.

#### • Discrétisation temporelle

Dans l'équation (5.30), le terme de dérivée temporelle ( $I$ ) est intégré entre l'instant  $t$  et  $t + \Delta t$ , pour tout le volume de contrôle, ainsi :

$$I = \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dt \int_w^e \int_s^n dx dy = \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dt \Delta V = [\rho_p \phi_p]_t^{t+\Delta t} \Delta V \quad (5.31)$$

Sachant que l'indice  $P$  représente un nœud principal et ( $W, E, S, N$ ) les facettes entourant ce dernier, l'intégration temporelle des termes ( $II$ ) et ( $III$ ) est approchée selon la formule suivante :

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi_i dt = (\delta \phi_i^{t+\Delta t} + (1 - \delta) \phi_i^t) \Delta t, \quad i = P, E, W, S, N \quad (5.32)$$

Où  $\delta$  est un paramètre compris entre 0 et 1, trois schémas sont distingués suivant la valeur de ce paramètre.

#### \* Schéma explicite

Lorsque  $\delta$  vaut 0, ce schéma permet de calculer la variable  $\phi_p^{t+\Delta t}$  en fonction de la valeur de la variable  $\phi_i^t$  ( $i = E, W, S, N$ ) à l'instant  $t$ . Cette méthode est recommandée pour traiter les écoulements non permanents parce qu'elle est reconnue robuste. Cependant, compte tenu de son faible degré de précision, il est préférable de ne pas employer des pas de temps élevés[79].

#### \* Schéma de Cranck-Nicolson

Lorsque  $\delta$  prend la valeur 0.5 le calcul de la valeur de la variable  $\phi_p^{t+\Delta t}$  dépend aussi bien de  $\phi_i^t$  que de  $\phi_i^{t+\Delta t}$ . Ce schéma impose le respect d'un critère de stabilité comme il nécessite une grande capacité de stockage des données et reste fiable pour des pas de temps relativement petits [86].

\* **Schéma implicite**

Dans le cas où  $\delta$  vaut 1, la valeur de  $\phi_p^{t+\Delta t}$  ne peut être calculée directement et le schéma est dit implicite. Ce schéma est inconditionnellement stable.

• **Discrétisation spatiale**

L'intégration du flux total représentant le terme diffusif et convectif (*terme II*) dans l'équation (5.30) entre les instants  $t$  et  $t + \Delta t$ , pour tout le volume de contrôle est donnée par :

$$\begin{aligned} II &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left( \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} \right) dx dy dt \\ &= \int_t^{t+\Delta t} dt \left( \int_s^n dy \int_w^e \frac{\partial J_x}{\partial x} dx + \int_w^e dx \int_s^n \frac{\partial J_y}{\partial y} dy \right) \\ &= (J_x^e - J_x^w) \Delta y \Delta t + (J_y^n - J_y^s) \Delta x \Delta t \end{aligned} \quad (5.33)$$

En posant :

$$\begin{aligned} J_e &= J_x^e \Delta y & J_n &= J_y^n \Delta x \\ J_w &= J_x^w \Delta y & J_s &= J_y^s \Delta x \end{aligned}$$

La forme intégrale du terme de flux total se réduit à :

$$II = (J_e - J_w + J_n - J_s) \Delta t \quad (5.34)$$

L'intégration du terme source (*III*) de l'équation (5.30) entre  $t$  et  $t + \Delta t$  dans tout le volume de contrôle est donnée par :

$$III = \int_t^{t+\Delta t} \left[ \int_w^e \int_s^n S_\phi dx dy \right] dt \quad (5.35)$$

En admettant l'hypothèse que le terme source est uniforme sur le volume de contrôle, nous trouvons :

$$III = \int_t^{t+\Delta t} S_\phi \left[ \int_w^e \int_s^n dx dy \right] dt = \bar{S}_\phi \Delta V \Delta t \quad (5.36)$$

Où  $\bar{S}_\phi$  est la valeur moyenne du terme source sur le volume du volume de contrôle.

Par suite la forme stationnaire de l'équation (5.30) est donnée par :

$$J_e - J_w + J_n - J_s = \bar{S}_\phi \Delta V \quad (5.37)$$

$$\text{où : } \begin{cases} J_e = \left( \rho\phi u - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_e \\ J_w = \left( \rho\phi u - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_w \\ J_n = \left( \rho\phi v - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right)_n \\ J_s = \left( \rho\phi v - \Gamma \frac{\partial\phi}{\partial y} \right)_s \end{cases}$$

Pour évaluer les termes des flux totaux  $J_i (i = e, w, s, n)$  sur les quatre facettes du volume de contrôle, différents schémas ont été proposés.

- **Schéma aux différences centrées**

Ce schéma permet d'approcher les termes diffusifs par un calcul simple des différences entre les valeurs de la variable sur les faces du volume de contrôle comme il permet d'approcher les termes convectifs par interpolation.

En effet, les termes diffusifs sont donnés par :

$$\begin{cases} \Gamma_e \frac{\partial\phi}{\partial x} |_e = \Gamma_e \frac{\phi_E - \phi_P}{(\delta x)_e} \\ \Gamma_w \frac{\partial\phi}{\partial x} |_w = \Gamma_w \frac{\phi_P - \phi_W}{(\delta x)_w} \\ \Gamma_n \frac{\partial\phi}{\partial y} |_n = \Gamma_n \frac{\phi_N - \phi_P}{(\delta y)_n} \\ \Gamma_s \frac{\partial\phi}{\partial y} |_s = \Gamma_s \frac{\phi_P - \phi_S}{(\delta y)_s} \end{cases} \quad (5.38)$$

Et les termes convectifs sont donnés par :

$$\begin{cases} \phi_e = \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) \\ \phi_w = \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_W) \\ \phi_n = \frac{1}{2}(\phi_N + \phi_P) \\ \phi_s = \frac{1}{2}(\phi_P + \phi_S) \end{cases} \quad (5.39)$$

En remplaçant (5.38) et (5.39) dans l'équation (5.37), nous obtenons un système pentadiagonale et la forme finale de l'équation discrétisée sur chaque volume de contrôle est donnée par :

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (5.40)$$

Où  $a_p, a_E, a_W, a_N$  et  $a_S$  sont les coefficients de convection-diffusion et  $b$  le terme représentant le terme source et les termes explicites issus du schéma, avec :

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S - S_p \Delta V$$

$$\begin{cases} a_E = D_e - \frac{C_e}{2} \\ a_W = D_w + \frac{C_w}{2} \\ a_N = D_n - \frac{C_n}{2} \\ a_S = D_s + \frac{C_s}{2} \end{cases} \quad (5.41)$$

$D_i = \frac{\Gamma}{\delta x_i}$  est un terme positif qui représente la conductance de la diffusion et  $F_i = \rho u_i$  le flux massif convectif par unité de surface.

L'introduction du nombre adimensionnel dit 'Peclet', défini par :

$$P_{ei} = \frac{F_i}{D_i} = \frac{\rho u_i \delta x_i}{\Gamma} \quad (5.42)$$

permet d'examiner la convergence de la solution numérique. Ce nombre représente le rapport entre les flux de convection et de la diffusion dans la maille numérique considérée. C'est un indicateur sur le type d'écoulement traité. C'est un schéma qui est rarement sollicité pour le terme de convection car il n'est pas capable d'identifier la direction de l'écoulement et ne donne des solutions réalistes que dans des conditions bien précises (nombre de Peclet inférieur à 2). En effet, dans le cas des écoulements où la convection domine sur la diffusion, le Peclet peut atteindre des valeurs dont le module est supérieur à 2; dans ce cas les conditions de convergence du schéma seront défavorables.

Les coefficients de l'équation (5.41) exprimés en fonction du nombre de Peclet (Pe) sont donnés par :

$$\begin{cases} a_E = D_e \left(1 - \frac{P_{ee}}{2}\right) \\ a_W = D_w \left(1 + \frac{P_{ew}}{2}\right) \\ a_N = D_n \left(1 - \frac{P_{en}}{2}\right) \\ a_S = D_s \left(1 + \frac{P_{es}}{2}\right) \end{cases} \quad (5.43)$$

- **Schéma de discrétisation amont «upwind»**

L'un des schémas les plus utilisés dit schéma «upwind» est fondé sur un polynôme de premier ordre. Ce schéma est utilisé pour exprimer le flux de convection, les valeurs discrètes de  $\phi$  sur les faces du volume de contrôle, sont exprimées en fonction des valeurs de  $\phi$  aux nœuds voisins, ainsi :

$$\begin{cases} \phi_e = \frac{1}{F_e}(\phi_p \max(F_e, 0) - \phi_E \max(-F_e, 0)) \\ \phi_w = \frac{1}{F_w}(\phi_W \max(F_w, 0) - \phi_P \max(-F_w, 0)) \\ \phi_n = \frac{1}{F_n}(\phi_p \max(F_n, 0) - \phi_N \max(-F_n, 0)) \\ \phi_s = \frac{1}{F_s}(\phi_S \max(F_s, 0) - \phi_P \max(-F_s, 0)) \end{cases} \quad (5.44)$$

Le système à résoudre est :  $a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b$ . Dans ce cas les coefficients de convection-diffusion sont donnés par :

$$\begin{cases} a_E = D_e + \max(-F_e, 0) \\ a_W = D_w + \max(F_w, 0) \\ a_N = D_n + \max(-F_n, 0) \\ a_S = D_s + \max(F_s, 0) \end{cases} \quad (5.45)$$

Le schéma «upwind» est une approximation qui garantit un certain réalisme physique des équations de l'écoulement. Ce schéma favorise les conditions de stabilité et de convergence d'autant plus que le Peclet a son module important. Cependant, l'ordre inférieur du polynôme utilisé peut introduire des erreurs numériques considérables surtout dans le cas des écoulements bidimensionnels ou tridimensionnels [86, 66].

- **Schéma Hybride**

Ce schéma est celui de Spalding [100], il est fondé sur la combinaison des deux schémas de discrétisation «centré» et «upwind». L'approximation de la variable généralisée  $\phi$  aux différentes interfaces du volume de contrôle est donnée par :

$$\begin{cases} \phi_e = \alpha_e \phi_p + (1 - \alpha_e) \phi_E \\ \phi_w = \alpha_w \phi_W + (1 - \alpha_w) \phi_P \\ \phi_n = \alpha_n \phi_p + (1 - \alpha_n) \phi_N \\ \phi_s = \alpha_s \phi_S + (1 - \alpha_s) \phi_P \end{cases} \quad (5.46)$$

Où les coefficients ( $\alpha_i, i = e, w, n, s$ ) sont donnés par :

$$\alpha_i = \begin{cases} 0 & \text{si } P_e < -2 & (\text{Schéma Upwind}) \\ \frac{1}{2} & \text{si } |P_e| \leq 2 & (\text{Schéma centré}) \\ 1 & \text{si } P_e > 2 & (\text{Schéma Upwind}) \end{cases} \quad (5.47)$$

Le système à résoudre reste le même :  $a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b$ , ce sont les coefficients de convection-diffusion qui diffèrent selon le schéma, ainsi :

$$\begin{cases} a_E = \max(-F_e, D_e - \frac{F_e}{2}, 0) \\ a_W = \max(F_w, D_w - \frac{F_w}{2}, 0) \\ a_N = \max(-F_n, D_n - \frac{F_n}{2}, 0) \\ a_S = \max(F_s, D_s - \frac{F_s}{2}, 0) \end{cases} \quad (5.48)$$

Ce schéma est reconnu fiable pour la prédiction pratique des écoulements. Son unique limitation est son ordre de précision de premier ordre.

- **Schéma Loi de Puissance**

Le Schéma Loi de Puissance «Power Law Differencing Sheme»[86] est recommandé seulement dans le cas unidimensionnel où son approximation produit une solution précise et meilleure que celle du schéma hybride. Dans ce schéma lorsque le nombre de Peclet dépasse 10, la diffusion est prise égale à zéro. Lorsque  $0 < P_e < 10$ , le flux est évalué par une expression polynomiale. Par exemple pour la facette Est (e), le coefficient de convection-diffusion  $a_E$  est approché par :

$$a_E = \begin{cases} -P_{ee}D_e, & \text{si } P_{ee} < -10 \\ ((1 + 0.1P_{ee})^5 - P_{ee})D_e, & \text{si } -10 < P_{ee} < 0 \\ (1 - 0.1P_{ee})^5 D_e, & \text{si } 0 < P_{ee} < 10 \\ 0, & \text{si } P_{ee} > 10 \end{cases} \quad (5.49)$$

L'équation de discrétisation de ce schéma s'écrit aussi :  $a_p\phi_p = a_E\phi_E + a_W\phi_W + a_N\phi_N + a_S\phi_S + b$ , avec :

$$\begin{cases} a_E = D_e \max(0, (1 - 0.1 |P_{ee}|)^5) + \max(-F_e, 0) \\ a_W = D_w \max(0, (1 - 0.1 |P_{ew}|)^5) + \max(F_w, 0) \\ a_N = D_n \max(0, (1 - 0.1 |P_{en}|)^5) + \max(-F_n, 0) \\ a_S = D_s \max(0, (1 - 0.1 |P_{es}|)^5) + \max(F_s, 0) \end{cases} \quad (5.50)$$

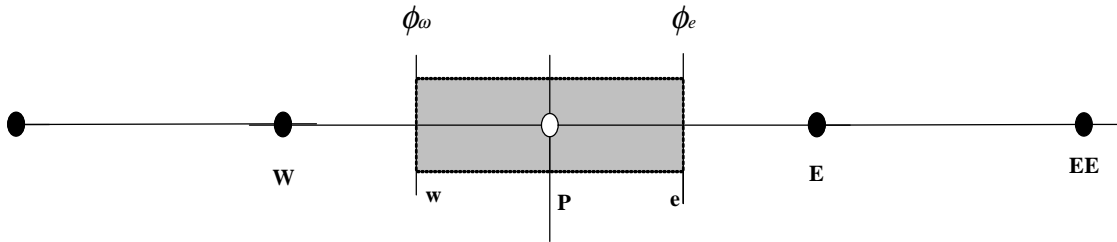


FIG. 5.10 – Position du nœud du côté amont 1D.

- **Schéma de différentiation quadratique «QUICK Schéma»**

En vue d'augmenter la précision du schéma numérique, le schéma Quick basé sur une interpolation quadratique a été proposé [64]. La valeur de  $\phi$  est obtenue en

utilisant une fonction quadratique passant par deux nœuds (en chaque face) et un nœud du côté amont (figure (5.10)). Par exemple sur la face Est :

$$\phi_e = \begin{cases} \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) - CF(\phi_E - 2\phi_P + \phi_W) & \text{si } F_e > 0 \\ \frac{1}{2}(\phi_E + \phi_P) - CF(\phi_P - 2\phi_E + \phi_{EE}) & \text{si } F_e < 0 \end{cases} \quad (5.51)$$

Où CF représente le facteur de correction de la courbure (pour ce schéma CF=1/8). Ce schéma est caractérisé par une erreur de troncature de troisième ordre.

Pour éliminer toute oscillation introduite par la discrétisation d'ordre élevé, la méthode 'ULTIMATE2D' «Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equations» est utilisée. Cette méthode est basée sur un schéma de troisième ordre pour les termes de convection en appliquant un limiteur de flux universel, elle utilise l'approche de diagramme des valeurs normalisées NVD «Normalised Diagram variables» introduite par Gaskell et Lau[41] et développée ensuite par Leonardi [65].

## 5.5 Couplage LBM non uniforme à la méthode Volumes finis

La méthode LBM dans cette partie est conçue pour le calcul des champs de vitesses. Le passage du maillage uniforme à un maillage non uniforme vise à optimiser les calculs en terme de précision alors que l'introduction d'une méthode classique telle que la méthode des volumes finis optimise les calculs en terme de gain en temps de calcul[5, 93]. En effet, la méthode des volumes finis est utilisée pour la discrétisation de l'équation d'énergie, les termes diffusifs sont discrétisés à l'aide d'un schéma centré et un schéma Quick associé à un limiteur de flux de type ULTIMATE est utilisé pour les termes convectifs. Un schéma d'Euler implicite d'ordre 2 est utilisé pour la discrétisation temporelle. L'équation de transport associée à des conditions aux limites adéquates est réduite alors à un système linéaire résolu par l'algorithme classique de Thomas pour les systèmes tridiagonaux (TDMA).



## 5.6 Résultats numériques

### 5.6.1 Problème de changement de phase avec conduction

Dans une première simulation par la méthode hybride couplant la méthode LBM et celle des Volumes Finis, nous nous proposons de simuler le problème de Stefan dont la formulation mathématique est explicitée précédemment et dont la solution analytique existe.

Pour simuler ce problème de Stefan, adoptons la géométrie indiquée sur la figure (5.11). Considérons une cavité rectangulaire semi- infinie de rapport de forme 0.04, remplie d'un matériau caractérisé par un nombre de Stefan  $Ste = 1.2$ , et dont les parois sont adiabatiques sauf la paroi gauche qui est froide. Considérons un maillage réseau 125x5 dont les paramètres utilisés sont explicités sur le tableau (5.2). Le transfert de chaleur est seulement dû à la conduction.

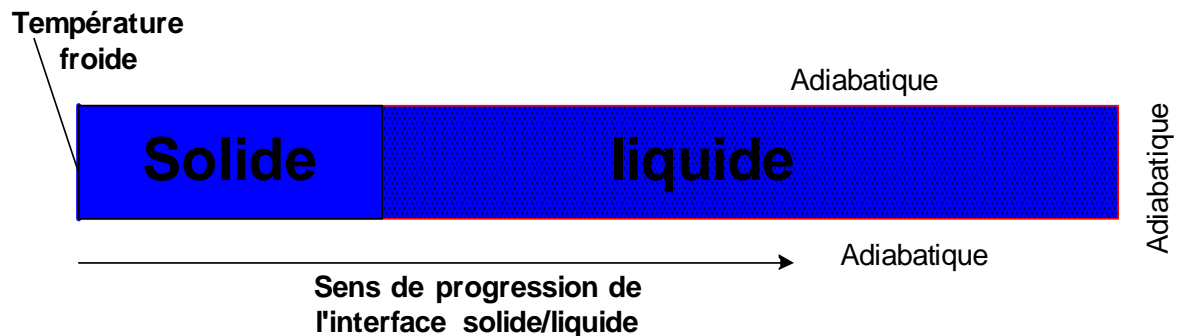


FIG. 5.11 – Géométrie adoptée pour le problème de Stefan

En traçant l'évolution de la position du front de solidification en fonction du temps, comparons les résultats numériques à ceux analytiques. La figure (5.12) montre une bonne concordance des résultats numériques (LBM-FV) avec les estimations analytiques pour une valeur de  $\lambda = 0,445$ . L'erreur introduite par la considération d'une longueur finie de la cavité reste négligeable pour des positions de l'interface ne dépassant pas une limite maximale. Ainsi, cette validation montre la capacité de la méthode à décrire avec précision l'évolution de l'interface solide-liquide en mode conductif.

Nous nous sommes intéressés par la suite aux effets du nombre de Stefan ; c'est à dire aux effets de la variation de la chaleur latente sur l'évolution de la position de l'interface solide-liquide.

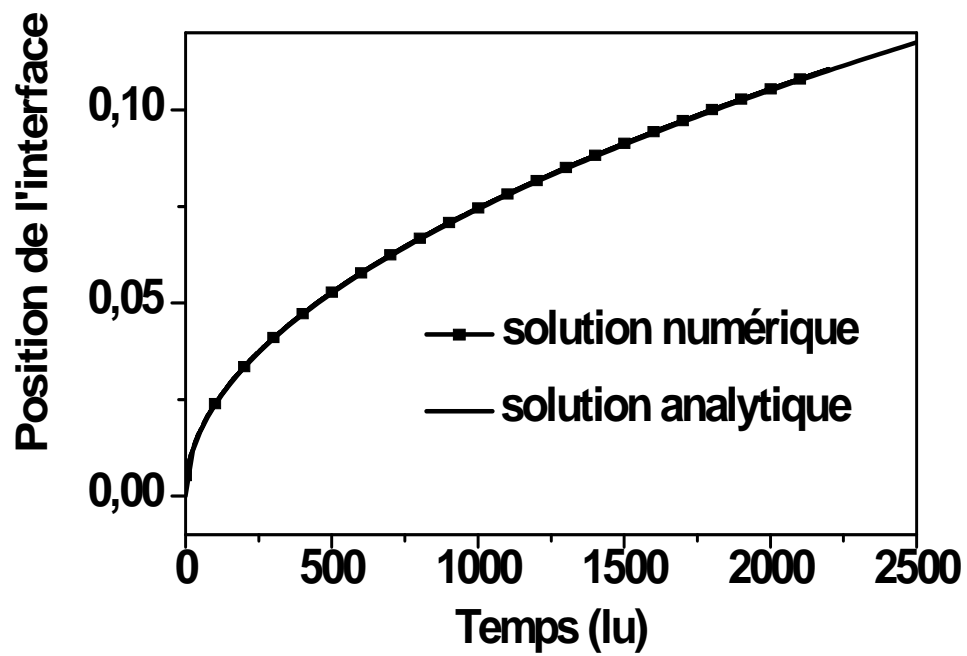


FIG. 5.12 – Comparaison des résultats numériques LBM-VF aux résultats analytiques

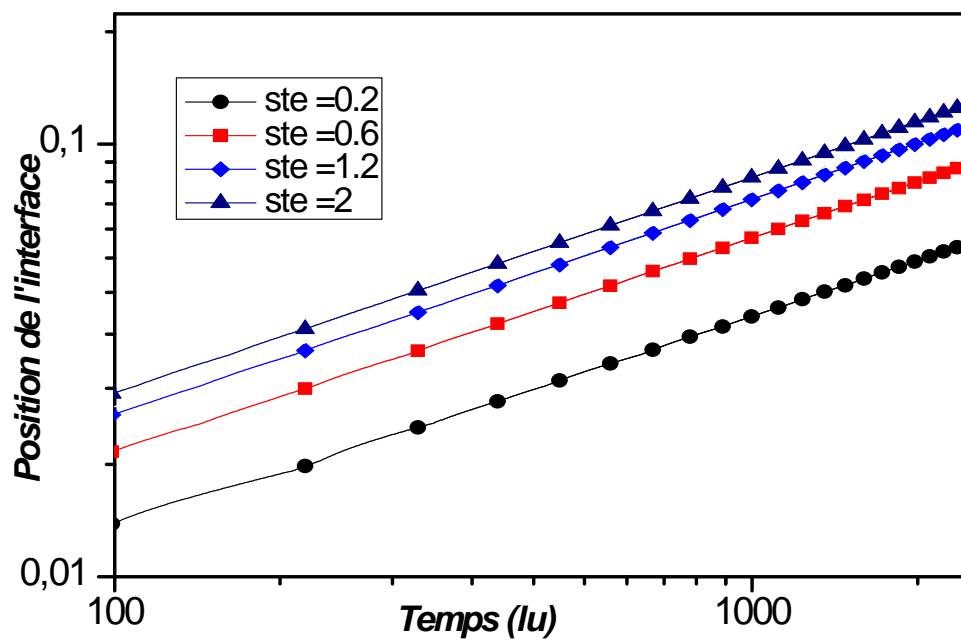


FIG. 5.13 – Evolution de la position du front de solidification en fonction du temps pour différentes valeurs du nombre de Stefan

La figure (5.13) montre que la progression de l'interface solide-liquide est freinée par l'augmentation de la chaleur latente (diminution de la valeur de Stefan).

### 5.6.2 Problème de changement de phase avec convection

Pour simuler le cas de la convection thermique par la méthode hybride LBM-VF, considérons une cavité carrée remplie d'un fluide caractérisé par un nombre de Prandtl ( $Pr = 7.36$ ) et portée à une température chaude adimensionnelle ( $T = 0.33$ ). Nous avons appliqué brutalement une température froide  $T = -0.67$  aux frontières. La température de fusion est prise égale à 0. Le phénomène de changement de phase (solidification) du fluide est étudié pour différents nombres de Rayleigh. Pour ce faire, nous avons considéré la géométrie indiquée sur la figure (5.14) :

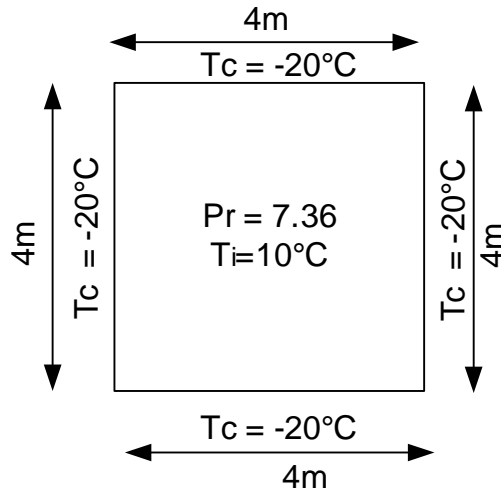


FIG. 5.14 – Géométrie adoptée pour le problème convectif

Le phénomène de changement de phase (solidification) du fluide, dans le cas convectif, a été étudié pour différents nombres de Rayleigh. Pour les nombres de  $Ra \leq 10^6$ , les mouvements convectifs sont très faibles et n'affectent pas la cinétique de changement de phase. Ce qui est bien illustré dans les figures (5.15) et (5.16). Cependant, pour les  $Ra \geq 10^7$ , les mouvements convectifs développés au sein de la

zone fluide améliorent l'échange thermique entre les deux phases et accélèrent par conséquence le processus de solidification.

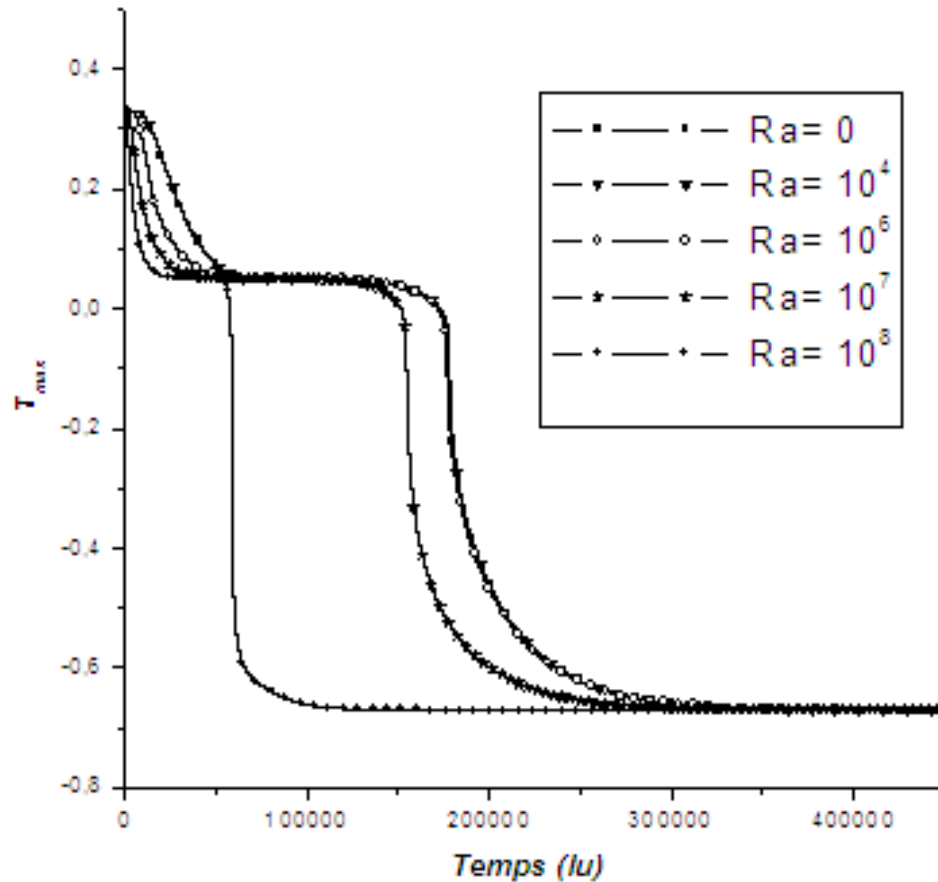


FIG. 5.15 – Evolution globale de la température maximale

Pour  $Ra \geq 10^7$ , les mouvements convectifs développés au sein de la zone fluide améliorent l'échange thermique entre les deux phases et accélèrent par conséquence le processus de solidification. La fraction liquide totale évolue suivant une loi exponentielle figure ((5.16)). La figure (5.17) montre la progression du processus de solidification pour  $Ra = 10^8$  à travers la variation interfaces et champs de vitesses en différents instants de la solidification.

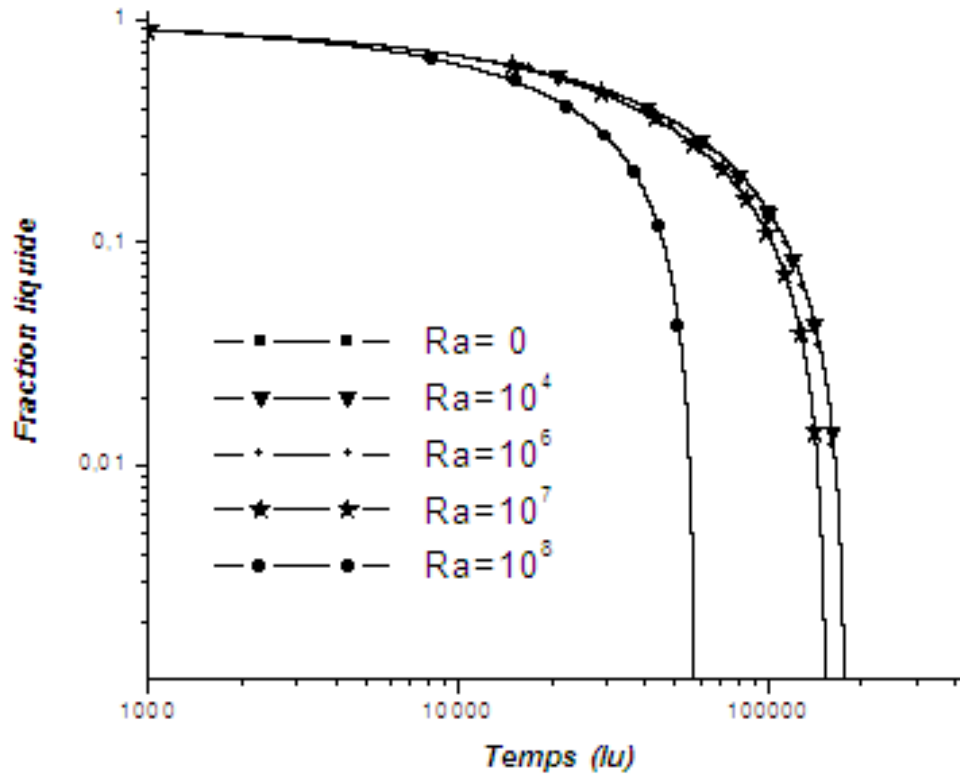


FIG. 5.16 – Evolution temporelle de la fraction liquide totale

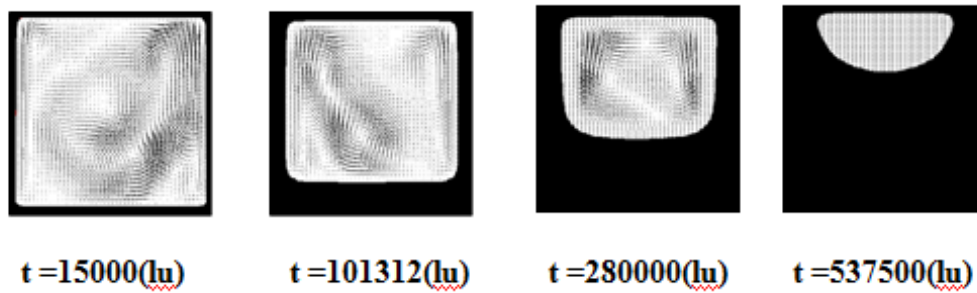


FIG. 5.17 – Interfaces et champs de vitesses en différents instants de la solidification pour  $Ra = 10^8$ .

Pour mettre l'accent sur l'effet du nombre de Stefan sur l'apparition des cellules convectives, et ainsi sur l'évolution temporelle de la fraction liquide, nous avons simulé le phénomène de changement de phase pour  $Ra = 10^8$ , pour différentes valeurs du nombre de Stefan (figure (5.18)).

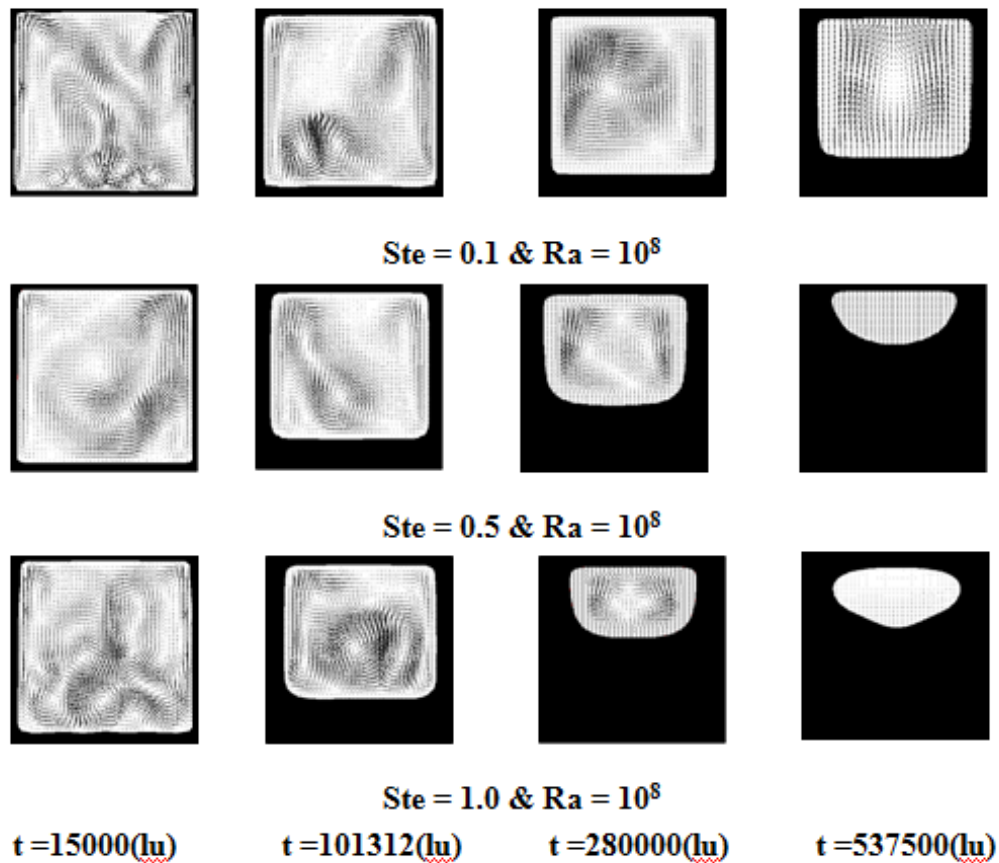


FIG. 5.18 – Interfaces et champs de vitesses en différents instants de la solidification pour différents nombres de Stefan

Aussi, en traçant l'évolution de la fraction liquide en fonction du temps pour différentes valeurs du nombre de Stefan, remarquons que plus ce dernier augmente plus l'évolution de la fraction liquide devient rapide comme illustré sur la figure (5.19).

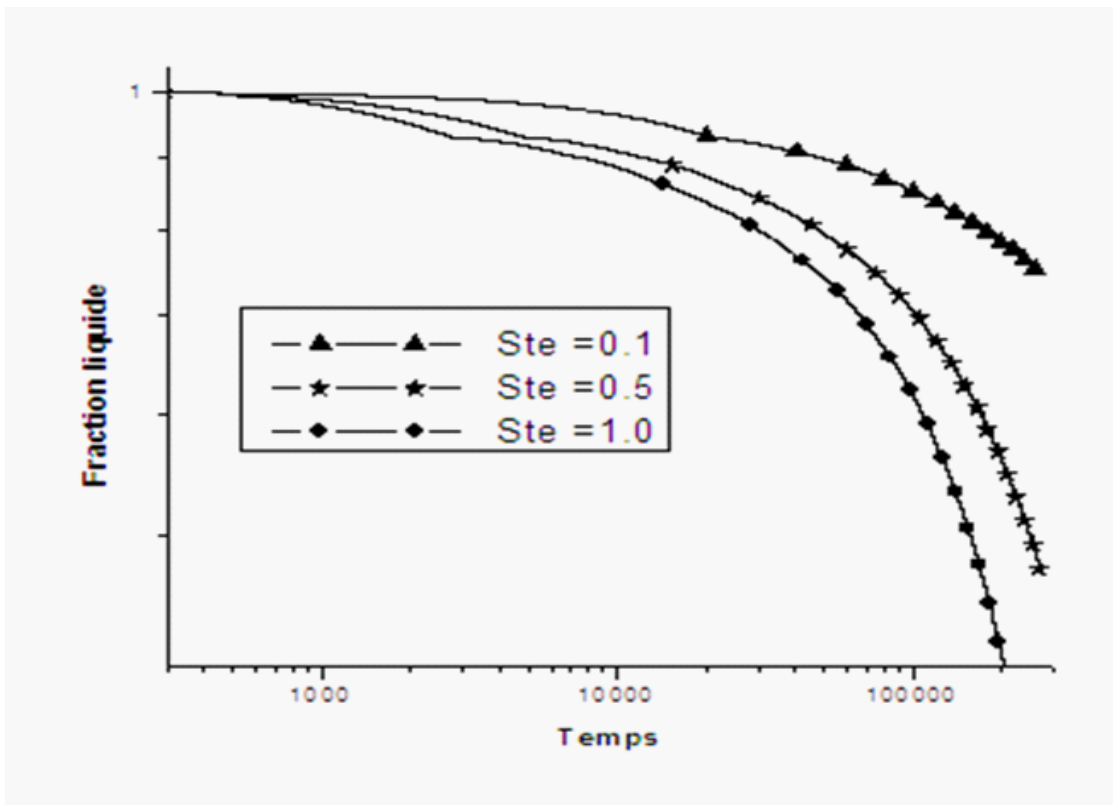


FIG. 5.19 – Evolution temporelle de la fraction liquide pour différents nombres de Stefan.



## 5.7 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons développé une méthode hybride couplant la méthode de Boltzmann sur réseau non uniforme (TLLBM) à la méthode de volumes finis. La méthode LBM est implémentée pour le calcul du champ de vitesses alors que la méthode des volumes finis a été conçue pour le calcul de la température. En effet, nous avons introduit la méthode non uniforme de Boltzmann sur réseau (TLLBM) pour avoir la possibilité de raffiner le maillage dans les zones nécessitant un traitement particulier. Ainsi, nous avons validé notre code en comparant nos résultats avec des résultats de référence relatifs à une cavité carrée différentiellement chauffée sans changement de phase puis dans une cavité allongée pour la fusion du Gallium.

# Conclusion générale et perspectives

Dans cette thèse nous avons étudié la méthode de résolution Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann) aussi bien dans son contexte analytique que numérique. Dans une première partie, après une brève introduction afin de situer cette méthode relativement aux autres méthodes CFD, nous avons présenté en détail les fondements de base de la méthode LBM, à savoir sa relation directe avec la théorie cinétique des gaz et la mécanique des fluides ainsi que sa dérivation des méthodes d'automates cellulaires, notamment les modèles HPP et FHP.

Dans une seconde partie, nous nous sommes intéressés à l'application de la méthode LBM aux problèmes de diffusion à une dimension et deux dimensions d'espace. Les différentes étapes à suivre pour simuler un problème physique ont été explicitées.

Le développement d'un nouveau modèle LBM pour l'étude des phénomènes avec transmission à l'interface a fait l'objet d'une troisième partie. Ce modèle (modèle IP) fondé sur le calcul des images des particules à l'interface de passage d'un milieu à un autre, a été appliqué pour traiter la résistance thermique de contact (RTC) et pour résoudre un problème de changement de phase ; le problème de Stefan. En effet, pour la RTC, ce nouveau modèle a été validé dans le cas bidimensionnel en comparaison avec un autre modèle, dit modèle PBB(Partial Bounce Back) et un modèle analytique dans le cas transitoire. Il a été démontré que ce modèle reste valable aussi dans le cas du régime établi. Ainsi, ce modèle (IP) nous a permis de traiter le déplacement et la déformation de l'interface de séparation entre les deux phases solide-liquide. Dans le cas du problème de Stefan 1D, les résultats obtenus sont validés par comparaison avec la solution analytique. Nous nous proposons dans

le futur, une généralisation de ce nouveau modèle pour l'étude des problèmes de transmission à l'interface aussi bien en dynamique qu'en thermique ainsi que le couplage avec le changement de phase et la résistance thermique de contact. Aussi, ce modèle peut être amélioré pour le traitement des conditions aux limites d'une surface courbe.

Dans une quatrième partie, nous avons développé une méthode hybride couplant la méthode de Boltzmann sur réseau non uniforme à la méthode des volumes finis pour traiter des problèmes de changement de phase. La méthode LBM a été conçue pour le calcul des champs de vitesses. Le passage d'un maillage uniforme à un maillage non uniforme vise à optimiser les calculs en terme de précision alors que l'introduction d'une méthode classique telle que la méthode des volumes finis, utilisée pour la discrétisation de l'équation d'énergie, vise à optimiser les calculs en terme du gain de temps de calcul. Comme première simulation de cette méthode hybride nous avons opté pour la cas bidimensionnel du problème de Stefan, ce qui nous a permis de valider nos calculs. Par la suite nous nous sommes intéressés à l'étude d'un problème diphasique solide-liquide que nous avons validé en comparaison avec des références relatives à une cavité carrée différentiellement chauffée sans changement de phase puis dans une cavité allongée pour la fusion du Gallium. Ainsi, l'extension de cette méthode hybride pour étudier la cinétique de changement de phase solide-liquide dans des configurations de croissance cristalline complexes, serait efficace.

# Annexe : Algorithme de Chapman Enskog

De grands efforts, en théorie cinétique, ont été consacrés à la résolution de l'équation de transport, ainsi l'équation de Boltzmann.

Des noms exceptionnels sont associés à cet effort : Boltzmann, Maxwell, Hilbert, Chapman, Enskog et Grad, etc. Une méthode de perturbation pour résoudre l'équation de Boltzmann est la procédure suivie par Chapman- Enskog. Cette méthode fournit des solutions normales de l'équation de Boltzmann.

## Développement de Chapman–Enskog et solution normale

La procédure de Chapman- Enskog est une méthode pour résoudre l'équation de Boltzmann par développement asymptotique et pour passer des équations régissant l'état mésoscopique aux équations macroscopiques du système. Pour ce développement, il est nécessaire d'introduire formellement un petit paramètre de développement pour lequel celui-ci soit valide, supposant ainsi un faible écart à l'équilibre local.

Le paramètre utilisé dans cette procédure est le nombre de Knudsen  $K_n$  .

$$K_n = \frac{\ell}{L} \tag{6.1}$$

Où  $\ell$  est le libre parcours moyen (représente la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux chocs intermoléculaire) et  $L$  est l'échelle de longueur macroscopique typique du système.

$K_n$  doit être petit pour que la description hydrodynamique soit valide.

A côté de  $\ell$  et  $L$ , d'autres paramètres du système sont importants tels que le temps à l'échelle macroscopique,  $\tau_0$ , et le temps à l'échelle microscopique  $\tau$  qui est l'intervalle de temps entre deux collisions successives.

Si on se restreint au régime où :

$$O(\xi) = O\left(\frac{\ell}{\tau}\right) = O\left(\frac{L}{\tau_0}\right) = O(\nu) \quad (6.2)$$

Cette écriture montre bien que l'importance de la vitesse microscopique,  $\xi$ , est de même ordre que celle de la vitesse macroscopique,  $\nu$  et notons que  $\ell$  est proportionnel à  $(\frac{\rho v_0^2}{m_0})^{-1}$ , une analyse dimensionnelle montre que le terme à gauche de l'équation de Boltzmann est de l'ordre de  $(\tau_0)^{-1}$  et  $\frac{\nu}{L}$ , alors que le terme de collision est de l'ordre  $(\frac{\rho}{m_0})\nu r_0^2 = \frac{\nu}{\ell}$ . En comparant les deux parties de l'équation de Boltzmann, il est possible d'introduire un petit paramètre  $\epsilon$  tel que :

$$\frac{Df}{Dt} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{1}{\epsilon} C(f) \quad (6.3)$$

Le paramètre  $\epsilon = K_n$  est introduit pour obtenir des équations successives du même ordre.

Pour résoudre l'équation ci-dessus, supposons que la dépendance entière du temps de  $f(r, \Gamma, t)$  est seulement contenue dans les variables thermodynamiques  $\rho$ ,  $v$  et  $T$ . Ainsi, la fonction  $f(r, \Gamma, t)$ , au lieu d'être fonction de temps  $t$ , elle est traitée comme fonction de  $\rho$ ,  $v$  et  $T$ . Cette hypothèse de Chapman-Enskog mène formellement au remplacement :

$$f(r, \xi, t) \rightarrow f(r, \xi, \rho, v, T) \quad (6.4)$$

Dans cette procédure de Chapman-Enskog, une solution de la forme suivante est cherchée :

$$\begin{aligned} f(r, t) &= f^{(0)}(r, t) + \epsilon^1 f^{(1)}(r, t) + \epsilon^2 f^{(2)}(r, t) + \epsilon^3 f^{(3)}(r, t) + \dots \\ &= f^{(eq)}(r, t) + f^{(neq)}(r, t) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon^n f^{(n)}(r, t) \end{aligned} \quad (6.5)$$

En remplaçant  $f(r, t)$  par son développement dans l'équation de Boltzmann (2.17) nous trouvons :

$$\int d\xi f^{(0)} \begin{bmatrix} 1 \\ \xi \\ (\xi - v)^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho v \\ 3\rho RT \end{bmatrix} \quad (6.6)$$

et :

$$\int d\xi f^{(n)} \begin{bmatrix} 1 \\ \xi \\ (\xi - v)^2 \end{bmatrix} = 0, n \geq 1 \quad (6.7)$$

Notons que  $f$ , comme fonction de  $r$ ,  $\xi$  et  $t$  n'est pas développée en séries de fonctions de  $\epsilon$ .

En fait  $f^{(n)}$  dépend de  $\epsilon$  d'une manière complexe seulement à travers les variables thermodynamiques  $\rho$ ,  $v$  et  $T$ .

Puisque :  $f(r, \xi, t) \rightarrow f(r, \xi, \rho, v, T)$

Soit :  $\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$ , bien que les moments de  $f$ , i.e. :  $\rho$ ,  $v$  et  $\epsilon$  ne sont pas des développements de  $\epsilon$ , leurs dérivations le sont.

Par substitution du développement de  $f$ , les équations des moments de  $f$  deviennent :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (6.8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -v \cdot \nabla v_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \sigma_{ij}^{(n)} \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -v \cdot \nabla T + \frac{2}{3R\rho} \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \left( \sigma_{ij}^{(n)} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \nabla \cdot Q^{(n)} \right) \quad (6.10)$$

$$\text{où : } \begin{bmatrix} \sigma_{ij}^{(n)} \\ Q^{(n)} \end{bmatrix} = \int d\xi f^{(n)} \begin{bmatrix} -\xi_0 i \xi_0 j \\ \xi_0 \xi_0^2 \end{bmatrix}$$

Pour la commande appropriée des limites des termes de l'ordre  $O(\epsilon^n)$ , l'opérateur  $\frac{\partial_n}{\partial t}$  est introduit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial_0 \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho v) \\ \frac{\partial_n \rho}{\partial t} = 0, n \geq 1 \end{array} \right. \quad (6.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial_0 v_i}{\partial t} = -v \cdot \nabla v_i + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial_n v_i}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}^{(n)}}{\partial x_j}, n \geq 1 \end{array} \right. \quad (6.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial_0 T}{\partial t} = -v \cdot \nabla T + \frac{2}{3R\rho} \left( \sigma_{ij}^{(0)} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \nabla \cdot Q^{(0)} \right) \\ \frac{\partial_n T}{\partial t} = \frac{2}{3R\rho} \left( \sigma_{ij}^{(n)} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \nabla \cdot Q^{(n)} \right), n \geq 1 \end{array} \right. \quad (6.13)$$

En utilisant les notations ci-dessus, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} &= \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \sum_{m=0}^n \left( \frac{\partial_m \rho}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial_m v}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial_m T}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T} \right) f^{(n-m)} \\ &\equiv \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \frac{\partial_n f}{\partial t}\end{aligned}\quad (6.14)$$

Donc le terme à gauche de l'équation de Boltzmann devient :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f}{\partial r} = \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \left( \frac{\partial_n f}{\partial t} + \xi \frac{\partial f^{(n)}}{\partial r} \right) \equiv \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^n \frac{D_n f}{Dt} \quad (6.15)$$

alors que le terme à droite est :

$$\frac{1}{\epsilon} C(f) = \frac{1}{\epsilon} C(f^{(0)}) + \sum_{n=0}^{+\infty} \epsilon^{n-1} \sum_{m=0}^n C(f^{(m)}, f^{(n-m)}) \quad (6.16)$$

Où  $C(f)$  et  $C(f^{(0)})$  sont définies par l'équation (2.19), et  $C(f^{(m)}, f^{(n)})$  par :

$$\begin{aligned}C(f^{(m)}, f^{(n)}) &= \frac{1}{m_0} \int dS d\xi_1 \|\xi_1 - \xi\| [f^{(m)}(r, \xi', t) f^{(n)}(r, \xi_1', t) \\ &\quad + f^{(n)}(r, \xi', t) f^{(m)}(r, \xi_1', t) - f^{(m)}(r, \xi, t) f^{(n)}(r, \xi_1, t) \\ &\quad - f^{(n)}(r, \xi, t) f^{(m)}(r, \xi_1, t)]\end{aligned}\quad (6.17)$$

L'ensemble d'équations de  $f^{(n)}$  peut donc être obtenu en faisant l'égalité des termes du même ordre que le paramètre  $\epsilon$ . Nous allons dériver deux solutions une dite du premier ordre et l'autre du second ordre en utilisant l'algorithme de Chapman-Enskog.

## Solution du premier ordre

En considérant les termes d'ordre  $O(\epsilon^{-1})$ , nous obtenons l'équation du 1er ordre du développement de Chapman-Enskog :

$$C(f^{(0)}) = 0 \quad (6.18)$$

Suite aux conditions données par l'équation (6.6) et (6.7), l'équation du premier ordre mène immédiatement au fait que  $f^{(0)}$  est la fonction de distribution locale de Maxwell- Boltzmann.

Cette solution du premier ordre est en effet une conséquence directe du théorème  $H$  de Boltzmann. Ainsi l'approximation du premier ordre mène aux équations gouvernant le mouvement d'un fluide non visqueux, i.e, équations d'Euler.

## Solution du second ordre

L'équation du second ordre est obtenue en faisant l'égalité des termes de l'ordre  $O(\epsilon^0)$ , cette équation est fonction de  $f^{(1)}$  :

$$\begin{aligned} \frac{D_0 f}{Dt} &= C(f^{(0)}, f^{(1)}) + C(f^{(1)}, f^{(0)}) \\ &= 2C(f^{(0)}, f^{(1)}) = 2f_L L_\phi(\phi^{(1)}) \end{aligned} \quad (6.19)$$

où,  $\phi^{(1)} = \frac{f^{(1)}}{f_L}$  et l'opérateur linéaire est donné par :

$$L_\phi(\phi^{(1)}) = \frac{1}{m_0} \int dS d\xi_1 \|\xi_1 - \xi\| f_L(\xi_1) (\phi^{(1)'} + \phi_1^{(1)'} - \phi^{(1)} - \phi_1^{(1)}) \quad (6.20)$$

La solution de l'équation (6.19) n'est pas aussi triviale que celle de l'équation du 1er ordre, c'est un processus plutôt délicat, pour ce fait nous allons nous contenter de quelques résultats.

Puisque  $f^{(0)} = f_L$ , est connue, le terme  $\frac{D_0 f}{Dt}$  dépend seulement de  $f^{(0)}$ . On peut donc écrire explicitement  $\frac{D_0 f}{Dt}$  en fonction de  $\rho$ ,  $v$  et  $T$  et leurs dérivées :

$$\begin{aligned} \frac{D_0 f}{Dt} &\equiv \left( \frac{\partial \rho}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial v}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial v} + \frac{\partial T}{\partial t} \frac{\partial}{\partial T} + v \cdot \frac{\partial}{\partial r} \right) f_L \\ &= \frac{f_L}{2RT} \left( (\xi_0^2 (D+2) RT) \xi_0 \cdot \nabla \ln T + S_{ijkl} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \xi_{0k} \xi_{0l} \right) \\ &= f_L \left( \left( \frac{\xi_0}{2RT} - \frac{5}{2} \right) \xi_0 \cdot \nabla \ln T + \frac{1}{RT} (\xi_{0i} \xi_{0j} - \frac{1}{3} \xi_0^2 \delta_{ij}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \end{aligned} \quad (6.21)$$

L'équation non homogène (6.19), a une solution dans l'espace tridimensionnel :

$$f^{(1)} = -\frac{f^{(0)}}{\rho RT} \left( A(\xi_0, T) \xi_0 \cdot \nabla \ln T + B(\xi_0, T) (\xi_{0i} \xi_{0j} - \frac{1}{3} \xi_0^2 \delta_{ij}) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) \quad (6.22)$$



où  $A(\xi_0, T)$  et  $B(\xi_0, T)$  sont les solutions respectives de :

$$\begin{aligned} -L_\phi(A\xi_0) &= \left(\frac{\xi_0}{2RT} - \frac{5}{2}\right)\xi_0 \\ -L_\phi(B \cdot (\xi_{0i}\xi_{0j} - \frac{1}{3}\xi_0^2\delta_{ij})) &= \xi_{0i}\xi_{0j} - \frac{1}{3}\xi_0^2\delta_{ij} \end{aligned} \quad (6.23)$$

Résoudre ces équations est une tâche difficile aussi pour les potentiels intermolécules simples que pour les potentiels dans des sphères rigides.

Une fois  $f^{(1)}$  est obtenue,  $\sigma_{ij}^{(1)}$  ainsi que  $Q^{(1)}$  peuvent être calculés facilement et donc il serait facile de calculer les coefficients de transport correspondants; la viscosité cinématique  $\nu$  et la conductivité thermique  $k$  :

$$\nu = \frac{m_0}{15\rho RT} \int d\xi \xi_0^4 A f_L \quad (6.24)$$

$$k = \frac{m_0}{6RT} \int d\xi \xi_0^4 B f_L \quad (6.25)$$

Par conséquent, l'équation incompressible de Navier Stokes a été dérivée ainsi que les coefficients de transport correspondants, à partir du développement de Chapman-Enskog.

# Nomenclature

## Nomenclature Latine

p	pression ( $Pa$ )
H	enthalpie
T	température ( $K$ )
$T_c$	température froide ( $K$ )
$T_h$	température chaude
t	temps ( $s$ )
u	vitesse macroscopique, ab ( $ms^{-1}$ )
v	vitesse macroscopique ( $ms^{-1}$ )
$c_s$	célérité du son du réseau
$c_p$	chaleur spécifique à pression constante ( $J.kg^{-1}.K^{-1}$ )
$c_v$	chaleur spécifique à volume constant ( $J.kg^{-1}.K^{-1}$ )
e	valeur de vitesse nodale (unité)
f	fonction de distribution
$f_s$	fraction solide
$f_l$	fraction liquide
$f^{eq}$	fonction de distribution à l'équilibre
g	constante de pesanteur ( $m.s^{-2}$ )

L	Longueur ( $m$ )
$L_f$	chaleur latente massique ( $J.K^{-1}$ )
H	hauteur ( $m$ )
k	conductivité thermique ( $W.m^{-1}.K^{-1}$ )
q	flux thermique ( $W$ )
R	constante du gaz parfait ( $J.mole^{-1}.K^{-1}$ )
E	énergie ( $J$ )
m	moment (modèle MRT de LBM)
$T_f$	température de fusion

## Nomenclature grecque

$\alpha$	diffusivité thermique ( $m^2.s^{-1}$ )
$\beta$	coefficient de dilatation thermique
$\varepsilon$	énergie interne, précision de calcul
$\lambda$	constante, solution de Neumann
$\mu$	viscosité dynamique ( $kg.m^{-1}.s^{-1}$ )
$\tau$	temps de relaxation adimensionnel
$\xi$	viscosité microscopique (unité)
$\nu$	viscosité cinématique ( $m^2.s^{-1}$ )
$\rho$	masse volumique ( $kg.m^{-3}$ )
$\Omega$	opérateur de collision
$\delta$	symbole de kronecker

## Nombres adimensionnels

Ma	nombre de Mach	$Ma = \frac{c}{C_s}$
Pr	nombre de Prandtl	$Pr = \frac{\nu}{\alpha}$
Ra	nombre de Rayleigh	$Ra = \frac{g\beta}{\nu\alpha}\Delta TL^3$
Re	nombre de Reynolds	$Re = \frac{uL}{\nu}$
Ste	nombre de Stefan	$Ste = \frac{c_p\Delta T}{L_f}$

## Indice

s	solide
l	liquide
i	direction selon x
j	direction selon y
k	direction selon z
eq	équilibre
in	entrée
out	sortie
init	initiale

## Abréviations

BGK	Bhatnagar, Gross et Krook (modèle)
HPP	Hardy, Pazziz, Pomeau (modèle)
FHP	Frisch- Hasslacher- Pomeau (modèle)
DF	Différences finies (méthode)
EF	Eléments finis (méthode)
LB	Lattice Boltzmann
VF	Volumes finis (méthode)
BR	Boltzmann sur réseau
DnQm	Type de modèle LB, (n : dimension, m : nombre de vitesses discrètes)
EDP	Equations aux Dérivées Partielles
RTC	Résistance Thermique de Contact

## Termes en anglais

BC	Boundary Conditions
LBM	Lattice Boltzmann Method

LGA Lattice Gas automata  
MRT Multiple Time Relaxation  
CFD Computational Fluid Dynamics(méthode)

# Bibliographie

- [1] M. Abdellaoui, approche des systèmes distribués par automates cellulaires. Application en mécanique des milieux déformables. Thèse soutenue à l'université de Perpignan (2003).
- [2] S. Addakiri, E. Semma, A. Mohamad M. Elganaoui, R. Bennacer, Numerical Lattice Boltzmann method for convection coupled to melting/solidification problems, Proceedings of the International Conference on Computational Heat and Mass Transfer(ICCHMT07), A.V. Kuzmin Eds., 479-482, 2007.
- [3] S. Addakiri, E. Semma, M. Elganaoui, B. Pateyron, Etude numérique de la fusion d'un bloc solide soumis à un écoulement horizontal : utilisation de la méthode de lattice Boltzmann, Actes du Congrès Annuel de la Société Française de Thermique, Le Masson, P. Salagnac Eds., tome 1, 345-350, 2009.
- [4] S. Addakiri, E. Semma, M. Elganaoui, B. Pateyron, Numerical study of melting/ solidification by a hybrid method coupling a lattice boltzmann and a finite volumes approaches, Defect and Diffusion Forum Vols. 283-286 (2009) pp 477-482.
- [5] S. Addakiri, E. Semma, B. Pateyron2 , M. El Ganaoui, K. Choukairy, B. Nassereddine, Etude numérique du changement de phase par un couplage hybride Boltzmann/Volume finis(LBM/VF), Phys. Chem. News, 55 (2010) 48-52.
- [6] H. H. T. Ashemi and C. M. Sliepcevich, A numerical method for solving twodimensional problems of heat conduction with phase change, Chem. Eng. Prog. Symp.Series, 63 (1961), 34-41 .
- [7] V.Alexiades and Alan D. Solomone, Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes, Taylor & Francis, 1993.
- [8] S. Ansumali, I. Karlin, Entropy function approach to the lattice Boltzmann method, J. Stat. Phys. 107 (2002) 291-308.
- [9] S. Ansumali, I. Karlin, Single relaxation time model for entropic lattice Boltzmann methods, Phys. Rev. E 65 (2002) 056312.

- [10] B. André De Vriendt, *La transmission de la chaleur*, Gaëtan morin éditeur, 1990.
- [11] B. R. Baliga and S. V. Patankar. A control-volume finite element method for two dimensional fluid flow and heat transfer. *Numerical Heat Transfer*, 6 :245–261, 1983.
- [12] J. P. Bardou, Introduction a l'étude des resistances thermiques de contact, *Rev C.& I. Therm*, 125(1972), 429-447.
- [13] J. Bao , P. Yuan, L. Schaefer, A mass conserving boundary condition for the lattice Boltzmann equation method, *Journal of Computational Physics* 227 (2008) 8472–8487.
- [14] G. C. J. Bart and C. J. Hoogendoorn, A model for the extracted heat and phase front position in solidification with boudary condition of the third kind, *Int. J. Heat Mass Transfer* , 35 (1992), 375-382.
- [15] M. A. Behr, L.P. Franca and T.E. Tezduyar, Stabilized finite element methods for the velocity-pressure-stress formulation of incompressible flows, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.* 104, 31-48, 1993
- [16] H. Belghazi, M. El Ganaoui, J-C Labbe, analytical solution of unsteady heat diffusion within a porous copper layer deposited on alumina substrate and subjected to a moving laser beam, *Defect and Diffusion Forum*, Vols. 273-276 (2008) pp 52-57.
- [17] G. E. Bell and A. S. Wood, On the performance of the enthalpy method in the region of a singularity, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 19 (1983), 1583-1592.
- [18] R. Bennacer, D. E. Ameziani, Y. Guo, Mohammed El Ganaoui and M. Bouzidi, Competition between lid-driven and natural convection in square cavities investigated with a lattice boltzmann method, *Comput Thermal Scien.* Vol.2, 3(2010), 269-282.
- [19] R. Benzi, S. Succi, and M. Vergassola. *The lattice Boltzmann equation : Theory and applications*. Physics Reports, Decembre 1992.
- [20] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, M. Krook, A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged in neutral one-component systems, *Phys. Rev.* 94 (1954) 511-525.
- [21] B. Binet, and M. Lacroix, : Numerical study of natural convection dominated melting inside uniformly and discretely heated rectangular cavities, *Num. Heat Transfer A*, 33 (1998), 207-227.
- [22] L. Boltzmann, *Leçons sur la théorie des gaz*, Gauthier-Villars (1902-1905)
- [23] M. Bouzidi, M. Firdaouss, P. Lallemand, Momentum transfer of a lattice-Boltzmann fluid with boundaries, *Phys. Fluids*. 13 (2002), 3452-3459.

- [24] Y. Cao and A. Faghari, A numerical analysis of phase change problems including natural convection, *ASME J. Heat Transfer*, 112 (1990), 812-816.
- [25] C. Cercignani, *Theory and Application of the Boltzmann Equation* (Elsevier, New York, 1975).
- [26] H. Chen, S. Chen, W.H. Matthaeus, Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method, *Phys. Rev. A*, 45 (1992) R5339.
- [27] S. Chen and G. D. Doolen, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30 (1998), 329–364.
- [28] M. Clément, *Etude mathématique de quelques équations cinétiques collisionnelles*, Thèse, 25 Octobre 2005.
- [29] G. Comini, S. Del Giudice, R. W. Lewis and O. C. Zienkiewicz, Finite element solution of non-linear heat conduction problems with special reference to phase change, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 8 (1974), 613-624.
- [30] J. Crank, *The mathematics of diffusion*, Clarendon Press, Oxford, 1975.
- [31] J. Crank, *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [32] J. Crank, *The mathematics of diffusion*, second edition, Clarendon press Oxford, 1993, pp. 38-41.
- [33] H. S. Carslaw and J. C. Jeager, *Conduction of heat in solids*, second edition, Clarendon press Oxford, 1993, pp. 87-89.
- [34] F. M. Chiesa and I. L. Guthrie, Natural convection heat transfer rate during the solidification and melting of metals and alloy systems, *ASME J. Heat Transfer*, 99 (1977), 520-526 .
- [35] J. A Dantzig, Modeling liquid-solid phase changes with melt convection, *Int. J. Num. Eng.*, 28 (1987), 1768-1785.
- [36] R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin, Finite Volume Methods, in Ph. Ciarlet and J.L. Lions (eds.), *Handbook of Numerical Analysis*, North-Holland, 2000.
- [37] N. R. Eyres, D. R. Hartee, J. Ingham, R. Jakson, R. J. Sarjant and J. B. Wagstaff, The calculation of variable heat flow in solid, *Phil. Trans. R. Soc.*, 240 A (1946), 1-57.
- [38] O. Filippova and D. Hanel, Grid refinement for lattice-BGK models, *J. Computat. Phys.*, 147 (1998), 219-228.
- [39] U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau, Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equations, *Phys. Rev. Lett.*, 56 (1986), 1505-1508.



- [40] M. El-Ganaoui and R. Djebali, Aptitude of a lattice Boltzmann method for evaluating transitional thresholds for low Prandtl number flows in enclosures, *Comptes Rendus Mécanique*, 338 (2010), 85-96.
- [41] P. H. Gaskell and A. K. C. Lau, Curvature compensated convective transport : SMART, a new boundedness preserving transport algorithm., *Int. J. Num. Methods in Fluids*, 8 (1988), 617-641 .
- [42] I. Ginzbourg and P.M. Alder, Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model, *J. Phys. II*, 4 (1994), 191–214.
- [43] V. Girault and P.-A.Raviart, *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations, Theory and Algorithms*, Springer-Verlag, Berlin, 1986.
- [44] K. Han, Y.T. Feng and D.R.J. Owen, Modelling of thermal contact resistance within the framework of the thermal lattice Boltzmann method, *Int. J. of Thermal Sciences*, 47 (2008), 1276-1283
- [45] J. Hardy, Y. Pomeau and O. de Pazzis, Time evolution of two dimensional model system, I. Invariant states and time correlation function, *J. Math. Phys.* 14 (1973), 1746-1759.
- [46] X. He and G. Doolen, Lattice Boltzmann method on curvilinear coordinates system : Flow around a circular cylinder , *J. Computat. Phys.*, 134 (1997), 306-315.
- [47] X. He, Q. Zou, L.-S. Luo, and M. Dembo, Analytic solutions and analysis on non-slip boundary condition for the lattice Boltzmann BGK model , *J. Stat. Phys.*, 87 (1997), 115-136.
- [48] F. J. Higuera, J. Jiménez, Boltzmann approach to lattice gas simulations, *Europhys. Lett.* 9 (1989), 663-668.
- [49] F. J. Higuera, Lattice gas method based on the Chapman-Enskog expansion, *Physics of fluids A*, June 1990.
- [50] C. J. Ho and C. H. Chu, Periodic melting within square enclosure with an oscillatory surface temperature, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 36 (1993), 725-733.
- [51] D. d’Humières, Generalized lattice Boltzmann equations. In : B.D. Shizgal and D.P. Weaver, Editors, *Rarefied Gas Dynamics Theory and Simulations*, Progress in Astronautics and Aeronautics vol. 159, AIAA, Washington DC, 1992.
- [52] D. d’Humières, I. Ginzburg, M.Krafczyk, P. Lallemand and Li-ShiLuo, Multiple-Relaxation-Time Lattice Boltzmann Models in Three Dimensions, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360 (2002), 437-451.

- [53] C. Johnson (1987), Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method, Cambridge University Press, Cambridge.
- [54] L. P. Kadanoff, G. McNamara and G. Zanetti, A Poiseuille Viscometer for Lattice Gas Automata, Complex Systems, 1 (1987), 791-803.
- [55] J. Kaenton , M. El Ganaoui , Timchenko V., G. de Vahl Davis , E. Leonardi and S. S. Leong, Effects of anisotropy and solid/liquid thermal conductivity ratio during inverted Bridgman growth, Proceedings of 12th International Heat Transfer Conference, Grenoble, France, 18-23 August (2002).
- [56] I. Karlin, A. Ferrante, H. Ottinger, Perfect entropy functions of the lattice Boltzmann method, Eur. Phys. Lett., 47 (1999), 182-188.
- [57] S. P. Kerkar, V. Prasad and R. Cox, Experimental and Numerical study of solidification and melting of pure materials, J. Thermophysics Heat Transfer, 5 (1991), 40-45.
- [58] J. M. V. A. Koelman, A simple lattice Boltzmann scheme for Navier-Stokes fluid flow, Europhys. Lett., 15 (1991), 603-607.
- [59] M. Lacroix , Effect of Buoyancy and surface tension forces on the melting of a metal, Num. Heat Transfer, 19 (1991), 101-115.
- [60] M. Lacroix, Etude Numérique de la fusion d'un métal pur dans une enceinte avec une paroi chauffée glissante, Int. J. Heat and Mass Transfer, 34 (1991), 1663-1677.
- [61] P. Lallemand and L. S. Luo, Theory of the lattice Boltzmann method : dispersion, isotropy, Galilean invariance and stability, Phys. Rev. E, 61 (2000), 6546.
- [62] P. Lallemand and L.S. Luo, Lattice Boltzmann method for moving boundaries, J. Comput. Phys., 184 (2003), 406-421.
- [63] G. Lamé and B.P.E Clapeyron, Mémoire sur la solidification par refroidissement d'un globe solide. Ann. Chem. Phys. 47 (1831), 250-265.
- [64] B. P. Leonardi, Locally modified Quick Scheme for highly convective 2D and 3D Flows, C. Taylor and K. Morgan (eds.), Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flows, Pineridge press, Swansea, U.K., 5 (1987), 35-47.
- [65] B. P. Leonardi, The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection, Computer Methods in Applied Mechanics and engineering, 88 (1991), 17-74.
- [66] B. P Leonardi and S. Mokhtari, Beyond first-order unpadding : the Ultra-Sharp alternative for non oscillatory steady state simulation of convection, Int. J. Num. Methods Eng., 30 (1990), 729-766.

- [67] R. J. LeVeque, Finite Difference Methods for Differential Equations, Class notes for AMath 585-6, University of Washington, version of January (2006).
- [68] L. S. Luo, Lattice-Gaz Automata and Lattice Boltzmann Equations for two-dimensional Hydrodynamics, Thesis, April, 1993.
- [69] L. S. Luo, Analytic solutions of linearized lattice Boltzmann equation for simple flows, *J. Stat. Phys.*, 88 (1997), 913-926.
- [70] P. A. Martin. Physique statistique des processus irréversibles, Lecture Notes of the DEA de Physique Theorique, notes by F.Coppex, ENS Lyon, Fall 2001–Spring 2004.
- [71] G. R. McNamara and G. Zanetti, Use of the Boltzmann equation to simulate lattice automata, *Phys. Rev. Lett.*, 61 (1988), 2332-2335.
- [72] R. Mei, L. S. Luo, and W. Shyy, An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method, *J. Computat. Phys.*, 155 (1999), 307-330.
- [73] A. Mezrhab , M. Bouzidi, P. Lallemand, Hybrid lattice-Boltzmann finite-difference simulation of convective flows, *Computers and Fluids*, 33 (2004), 623-641.
- [74] M.D. Mikhailov and M.N. Ozisik, unified analysis and solutions of heat and mass diffusion, second ed., A Wiley-Interscience publication, 1984, 378-398.
- [75] M.K. Moallemi, R. Viskanta, Analysis of close-contact melting heat transfer, *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 29 (1986), 855-867.
- [76] A.A.Mohamad, Applied Lattice Boltzmann Method for Transport Phenomena, Momentum, Heat and Mass Transfer, Calgary-Canada, 2007.
- [77] A. A. Mohamad, M. El-Ganaoui and R. Bennacer, Lattice Boltzmann Simulation of natural convection in an open ended cavity, *Int. J. Thermal Sci.*, 48 (2009), 1870-1875.
- [78] F. de Monte, Transient heat conduction in one-dimensional composite slab. A natural analytic approach, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 43 (2000), 3607-3619.
- [79] F. de Monte, Transverse eigenproblem of steady-state heat conduction for multi-dimensional two-layered slabs with automatic computation of eigenvalues, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 47 (2004), 191-201.
- [80] F. de Monte, Unsteady heat conduction in two-dimensional two slab-shaped regions. Exact closed-form solution and results, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 46 (2003), 1455-1469.
- [81] J. V. Neumann, The general and logical theory of automata, Collected works, Vol V, page 288, Pergamon Press, 1963.

- [82] J. V. Neumann, Theory of self-reproducing automata, A. W. Burks (Ed.), Univ. of Illinois Press, Illinois, 1966.
- [83] M. N. Ozisik, Boundary Value Problem of heat conduction, Dover publications, New York, 1989.
- [84] D. Pal and Y. Joshi, Application of phase change materials for passive thermal control of plastic quad flat packages : a computational study, Num. Heat Transfer , 30 A(1996), 19-34.
- [85] S. V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, McGraw-Hill, New York, 1980.
- [86] S. V. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow, Hemisphere, New York, 1981.
- [87] S. V. Patankar and D. B. Spalding, A calculation procedure for heat : mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, Int. J. Heat Mass Transfer, 15 (1972), 1787-1805.
- [88] D. Poirier and M. Salcudean, On numerical methods used in mathematical modeling of phase change in liquid metals, ASME J. Heat Transfer, 110 (1988), 562-570.
- [89] Y. H. Qian, D. d'Humières and P. Lallemand, Lattice BGK models Navier-Stokes equation, Europhys. Lett., 17 (1992), 479-484.
- [90] M. E. A. Rose, Method for caluculating solution of parabolic equations with a free boundary, Math. Comput., 14 (1960), 249-256.
- [91] H. Salt, Transient conduction in a two-dimensional composite slab-1. , Int. J. Heat Mass Transfer, 26 (1983), 1611-1616.
- [92] E. A.Semma , M. El Ganaoui , A. Cheddadi and P. Bontoux, Etude numérique des instabilités de la phase fluide et de l'interface de solidification en croissance dirigée horizontale, Instability of melt flow and solidification front during horizontal growth, Comptes Rendus Mécanique, 331 (2003), 631-639.
- [93] E. Semma, S. Addakiri, M. El Ganaoui, R. Bennacer, A non-uniform lattice Boltzmann coupled to the finite volumes method for solving phase change problems, Finite volumes for complex applications V, 641-648, ISTE, London, 2008.
- [94] E. Semma, M. El Ganaoui, R. Bennacer, A. A. Mohamad Investigation of flows in solidification by using the lattice Boltzmann method, Int. J. Th. Sci., 47 (2008), 201-208.
- [95] I. Sezai and A. A. Mohamad, , Double Diffusive Convection in a Cubic Enclosure with Opposing Temperature and Concentration Gradients", Physics of Fluids, 12 (2000), pp. 2210-2223.

- [96] N. Shamsundar and E. M. Sparrow, Storage of thermal energy by solid-liquid phase change temperature drop and heat flux, *J. Heat Trans.* (1974) 541.
- [97] C. Shu, Y. T. Chew and X. D. Niu, Least square-based LBM : a meshless approach for simulation of flows with complex geometry, *Phys. Rev. E.*, 64 (2001), pp.1-4.
- [98] C. Shu, X. D. Niu and Y. T. Chew, Taylor series expansion- and least square-based Lattice Boltzmann method : two-dimensional formulation and its applications, *Phys. Rev. E.*, 65 (2002), 1-13.
- [99] C. Shu, X. D. Niu, Y. Peng, and Y. T. Chew, Taylor series expansion- and least square-based Lattice Boltzmann method : an efficient approach for simulation of incompressible viscous flows, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, 5 (2005), Nos. 1/2, 27-36.
- [100] D. B. Spalding, A novel finite-difference formulation for different expressions involving both first and second derivatives, *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 4 (1972), 551-559.
- [101] J. Stefan et al. *Mat. Natur.* 98 473 – 84, 965-83, 1889.
- [102] J. Stefan, Uber die theorie der eisbildung, insbesondere unber die eisbildung im polarmeer *Ann. Chem. Phys.*, 42 (1891), 269-286, .
- [103] S. Succi, *The lattice Boltzmann equation for Fluid dynamics and Beyond*, 2001.
- [104] M. C. Sukop et D. T. Thorne, *Lattice Boltzmann Modeling : An Introduction for Geoscientists and Engineers*, Springer Publications, 2006.
- [105] J. Szekzly and P.S. Chhabra, The effects of natural convection on the shape and movement of the melt-solid Interface in the controlled solidification, *Met. Trans., B.*, 1 (1970), 1195-1203.
- [106] M.M. Tekitek, Identification des modèles et des paramètres pour la méthode de Boltzmann sur réseau. Thèse soutenue à l'université de Paris sud, 2007.
- [107] M. J. Turner, R.W. Clough, H.C. Martin and L.C. Topp, Stiffness and Deflection Analysis of Complex Structures, *Journal of the Aeronautical Sciences*, 23 (1956), 807-823.
- [108] R. Viswanath and Y. Jaluria, A comparison of different solutions methodologies for melting and solidification problems in enclosures, *Num. Heat Transfer*, 24 B(1993), 77-105.
- [109] V. R. Voller and M. Cross, Accurate solution of moving boundary problems using the enthalpy method, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 24 (1980), 545-556.

- [110] V. R. Voller, N. C. Markatos and M. Cross, Solidification in convection and solidification and diffusion, In Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat/Mass Transfer Processes (Edited by Markatos N.C., Tatchell D.G., Cross M. And Rhodes N.),pp. 425-432, Springer, Berlin, 1986.
- [111] V. R. Voller and C. Prakash, A fixed grid numerical modelling methodology for convection-diffusion mushy region phase-change problems, *Int. J. Heat. Mass. Transfer*, 30 (1987), 1709-1719.
- [112] V. R. Voller, C. R. Swaminathan and B. G. Thomas, Fixed grid techniques for phase change problems : a review, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 30 (1990), 875-898.
- [113] B. W. Webb, et R. Viskanta, Analysis of heat transfer during melting of a pure metal from an isothermal vertical wall, *Numerical Heat Transfer*, 9(1986), 539-558.
- [114] S. Wolfram, Cellular automaton fluids. 1 : basic theory, *J. Stat. Phys.*, 45 (1986), 471-526.
- [115] D. P. Ziegler, Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations, *J. Stat. Phys.*, 71 (1993), 1171-1177.
- [116] Q. ZOU and X.HE, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Phys. Fluids*, 9 (1997), 1591-1598.









## **Résumé**

Dans ce travail de thèse, le transfert de chaleur et de masse est modélisé numériquement par la méthode de Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann). Dans un premier temps, les fondements de base de cette méthode numérique sont présentés. Une attention particulière est donnée à l'application de cette méthode aux problèmes de diffusion multidimensionnels. Dans un second temps, l'extension de la méthode de Boltzmann sur réseau est traitée: d'une part pour résoudre les phénomènes de transmission à l'interface, d'autre part pour résoudre un problème diphasique solide-liquide par l'élaboration d'un couplage entre la méthode LBM non uniforme et la méthode des volumes finis.

Mots clés : Méthode de résolution Boltzmann sur réseau, gaz sur réseau, diffusion, interface solide-liquide,

## **Abstract**

In this thesis, we formulate and implement the numerical modeling of the heat and the mass transfer by the Lattice Boltzmann method (LBM). In a first part we present the basic foundations of this numerical method. Particular attention is given to the application of this method to multidimensional diffusion problems. In a second part we treat an extension of the Lattice Boltzmann method: firstly to solve the transmission phenomena at the interface, secondly to solve a two-phase solid-liquid through the development of a coupling between the non-uniform LBM method and finite volume method.

Key words: Lattice Boltzmann method, lattice gas, diffusion, solid-liquid interphase