



Modélisation mésoscopique des écoulements avec changement de phase à partir de l'équation de Boltzmann-Enskog. Introduction des effets thermiques.

Benjamin Piaud

► To cite this version:

Benjamin Piaud. Modélisation mésoscopique des écoulements avec changement de phase à partir de l'équation de Boltzmann-Enskog. Introduction des effets thermiques.. Sciences de l'ingénieur [physics]. Université Toulouse III, 2007. Français. <tel-00931543>

HAL Id: tel-00931543

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00931543>

Submitted on 15 Jan 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITE TOULOUSE III - PAUL SABATIER - U.F.R. P.C.A.
Ecole doctorale Transfert, Dynamique des Fluides, Energétique, Procédés

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE TOULOUSE III

Spécialité : Energétique et Transfert

présentée et soutenue

par

Benjamin PIAUD

le 4 juillet 2007 à 10h30

**Modélisation mésoscopique des écoulements avec changement de phase à
partir de l'équation de Boltzmann-Enskog. Introduction des effets
thermiques.**

Directeurs de thèse : M. Richard Fournier et M. Michael Clifton

JURY

M. Olivier SIMONIN	IMFT (Toulouse)	Président
M. Victor SOFONEA	Académie Roumaine (Timisoara)	Rapporteur
M. Lounes TADRIST	IUSTI (Marseille)	Rapporteur
M. Luca CIPELLETTI	LCVN (Montpellier)	Examineur
M. Stéphane BLANCO	LAPLACE (Toulouse)	Invité
M. Olivier MASBERNAT	LGC (Toulouse)	Invité

Remerciements

Mes remerciements vont tout d’abord à mes trois co-directeurs de thèse Mr. Stéphane Blanco, Mr. Richard Fournier et Mr. Michael Clifton pour m’avoir permis d’effectuer ma thèse entre le Laboratoire d’Energétique ¹ et le Laboratoire de Génie Chimique. Plus que de diriger ce travail, ils ont su me montrer le métier de chercheur et en particulier le plaisir indispensable du travail d’équipe.

J’adresse des remerciements particuliers à messieurs Victor Sofonea et Lounès Tadrist pour leurs rapports sur ce manuscrit de thèse, ainsi qu’aux autres membres du jury pour leur présence lors de la soutenance : le président du jury, Mr. Olivier Simonin et enfin messieurs Luca Cipelletti et Olivier Masbernat.

Ma gratitude va également vers l’ensemble des personnes qui ont entouré ce travail au Laboratoire d’Energétique : JLJ, Seb, Vincent P., Marc et Pascal. C’était très intéressant, distrayant mais aussi parfois très énervant de passer des heures à digresser sur ce “foutu deuxième principe”. Je remercie également les personnes qui font fonctionner le labo : Jacques et Josiane.

Je profite de ces quelques lignes pour faire un clin d’oeil à toutes les personnes, stagiaires, thésards, post doc et autres : Vj, Val, Sandra, Phil, Nico, Béatrice, Estelle, Bérangère, Vincent S, Mala, Bruno, Guillaume ...

Enfin, je remercie mes parents pour m’avoir fait confiance et de m’avoir toujours laisser libre dans le choix de mes études. Et biensûr, je suis très heureux de finir ma vie d’étudiant par cette thèse au moment où j’ai rencontré Hélène pour commencer le chapitre suivant de la vie.

¹intégré au LAboratoire PLAsma et Conversion d’Energie depuis le 01/01/2007.

Table des matières

Introduction	1
I Modélisation cinétique des fluides	7
I.1 La description mésoscopique	7
I.1.1 Microscopique/mésoscopique/Macroscopique	9
I.1.2 Approche heuristique de l'équation de transport	11
I.2 Démonstration de l'équation de Boltzmann	14
I.2.1 Hypothèses	14
I.2.2 Evolution du nombre de particules à la vitesse \mathbf{v}	14
I.3 Eléments de démonstration de l'équation de Boltzmann à partir de l'équation de Liouville	18
I.3.1 Equation de Liouville	18
I.3.2 Densité de probabilité à n particules	19
I.3.3 Hiérarchie BBGKY	19
I.4 Théorème \mathbb{H} et équilibre	20
I.4.1 Evolution de s au cours du temps	21
I.4.2 Distribution d'équilibre	21
I.5 Modèles du terme collisionnel	22
I.5.1 Modèle BGK	23
I.5.2 Modèle ES-BGK	25

I.6	De l'équation de Boltzmann aux équations macroscopiques	26
I.6.1	Equations de bilan locales	27
I.6.1.1	Equation de bilan locale de la masse	27
I.6.1.2	Equation de bilan locale de la quantité de mouvement	28
I.6.1.3	Equation de bilan locale de l'énergie interne	29
I.6.2	Approximation d'ordre 0	30
I.6.2.1	Tenseur des pressions à l'ordre 0	30
I.6.2.2	Flux de chaleur à l'ordre 0	30
I.6.2.3	Hydrodynamique du fluide parfait	31
I.6.3	Approximation d'ordre 1	31
I.6.3.1	Modèle de $f^{(1)}$	32
I.6.3.2	Tenseur des pressions à l'ordre 1	34
I.6.3.3	Flux de chaleur à l'ordre 1	34
I.6.3.4	Hydrodynamique à l'ordre 1	35
I.6.4	A propos de $f^{(1)}$	35
I.6.4.1	Ecoulement cisailé	36
I.6.4.2	Couche de gaz entre deux parois de températures différentes . . .	38
I.6.5	Coefficients de transport pour le modèle collisionnel ES-BGK	39
II	Boltzmann-sur-réseau (BsR)	43
II.1	Historique de BsR	43
II.1.1	Gaz sur Réseau	44
II.1.2	De Gaz-sur-Réseau à Boltzmann-sur-réseau	46
II.1.2.1	Modèle BGK sur réseau	47
II.2	Dérivation de BsR à partir de l'équation de Boltzmann	48
II.2.1	Discretisation spatio-temporelle	49

II.2.2	Modèle de vitesses discrètes	50
II.2.3	Remarques concernant la mise en œuvre	53
II.2.4	Illustration de la méthode Boltzmann-sur-Réseau	54
II.3	BsR pour les écoulements anisothermes	56
II.3.1	Modèles existants	56
II.3.2	Modèle de vitesses discrètes	58
II.3.3	Modèle approché	61
II.3.4	Discretisation spatio-temporelle	62
II.3.4.1	Intégration temporelle	63
II.3.4.2	Intégration spatiale	63
II.3.5	A propos de $f^{(1)}$ et du modèle de vitesses discrètes	64
II.3.6	Validation du modèle proposé	65
II.3.6.1	Décroissance d'un vortex	66
II.3.6.2	Propagation d'onde acoustique	66
II.3.6.3	Stratification d'une colonne de gaz isotherme	67
II.3.6.4	Ecoulement de Couette	69
II.3.6.5	Conduction pure	70
II.3.6.6	Test avec le modèle de collision ES-BGK	72
II.4	Conclusions du chapitre	72
III	Modélisation cinétique des fluides non-idéaux	75
III.1	Thermodynamique de l'équilibre des systèmes liquide-vapeur	76
III.1.1	Energie d'interface et la loi de Laplace	79
III.1.2	Modèle d'interface diffuse	82
III.1.2.1	Théorie de van der Waals	83
III.1.2.2	Profil d'interface et énergie d'interface	85

III.2	Equation de Boltzmann-Enskog	89
III.2.1	Modélisation du terme collisionnel répulsif : terme d'Enskog	90
III.2.2	Approximation de champ moyen du terme d'interactions attractives	92
III.2.3	Equation cinétique pour les fluides non-idéaux	93
III.3	Passage au macroscopique à partir de l'équation de Boltzmann-Enskog étendue	94
III.3.1	Equation de conservation de la masse	94
III.3.2	Equation de conservation de la quantité de mouvement	94
III.3.2.1	A propos de l'équation de quantité de mouvement :	95
III.3.3	Equation de conservation de l'énergie	96
III.4	Point de vue mésoscopique sur l'équilibre liquide-vapeur et conclusions	98
IV	BsR pour les écoulement diphasiques	101
IV.1	BsR pour écoulements diphasiques isothermes	102
IV.1.1	Modèle de Shan-Chen (SC)	102
IV.1.2	Modèle de He-Shan-Doolen (HSD)	103
IV.1.3	Modèle basé sur l'énergie libre (EL)	103
IV.1.4	Quelques exemples	106
IV.2	Boltzmann sur Réseau pour les dispersions colloïdales avec changement de phase	112
IV.2.1	Modèle pour dispersion colloïdale avec changement de phase	113
IV.2.1.1	Modèle Boltzmann sur réseau pour le fluide global	114
IV.2.1.2	Modèle Boltzmann sur réseau pour les particules colloïdales en suspension	115
IV.2.1.3	Régime diffusif	117
IV.2.2	Validations, implémentation numérique et résultats	117
IV.2.2.1	Validation du régime diffusif	117
IV.2.2.2	Analyse linéaire de stabilité	119

IV.2.2.3	Méthode de pénalisation	121
IV.2.3	Premiers résultats	123
IV.3	Conclusions du chapitre	125
V	BsR diphasique avec transferts d'énergie	127
V.1	Rappel du modèle cinétique	128
V.2	Modèle de vitesses discrètes	129
V.3	Discretisation spatio-temporelle	130
V.3.1	Point de vue mésoscopique sur l'équilibre liquide-vapeur	130
V.3.2	Reformulation des termes d'interaction pour une situation d'équilibre liquide-vapeur	132
V.3.3	Reformulation des termes d'interaction pour une situation hors d'équilibre en $1D$	133
V.3.4	Généralisation	134
V.4	Validations et premiers résultats	137
V.4.1	Profil d'interface	137
V.4.2	Condensation sur parois	138
	Conclusions et perspectives	145
A	Procédure de Chapman-Enskog sur réseau	149
A.1	Effets du schéma numérique	149
A.2	Ordre 0 de la procédure de Chapman-Enskog	150
A.3	Ordre 1 de la procédure de Chapman-Enskog	150
B	Energy-conserving LB thermal model in $2D$	153
B.1	Introduction	153
B.2	Discrete velocity model for thermal applications	154
B.3	Finite-difference implementation and testing	156

B.4	Implementation within the standard Lattice Boltzmann algorithm	158
B.5	Conclusions	160
B.6	Determination of quadrature order	162
B.6.1	Chapman-Enskog procedure	163
B.6.2	Equilibrium expansion	164
B.6.3	Required quadrature orders	164
B.7	Extrapolation in velocity space	165
C	Conditions aux limites thermiques	169
D	Distribution d'équilibre du modèle BsR (EL) $D3Q15$	171
E	Poiseuille avec viscosité non-uniforme	173
F	Procédure de Chapman-Enskog sur réseau	175

Table des figures

I.1	Positionnement entre les différents points de vue, microscopique, mésoscopique et macroscopique.	10
I.2	Représentation schématique de quelques particules d'un fluide à deux instants proches. Les particules de vitesse \mathbf{v} , situées en \mathbf{r} à l'instant t , se retrouvent en $\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t$ à l'instant $t + \delta t$	12
I.4	Ecoulement cisaillé stationnaire entre deux plaques séparées d'une distance h . La plaque du haut a une vitesse U_x et la plaque du bas a une vitesse $-U_x$. A l'état stationnaire la composante de la vitesse du fluide selon x est linéaire en fonction de y entre $-U_x$ et U_x	37
I.5	(a) : Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la partie hors d'équilibre de f dans un écoulement cisaillé stationnaire à l'endroit où $u_x = 0$; (b) : Représentation de $P_{xy}(\mathbf{v})$ qui est la contribution des particules de vecteur \mathbf{v} au flux de quantité de mouvement P_{xy} . Toutes les particules contribuent dans le sens opposé au cisaillement.	38
I.6	Profil de température à l'état stationnaire entre deux parois de températures T_1 et T_2 , séparées d'une distance h . Au stationnaire le profil de température du fluide est linéaire entre T_1 et T_2	39
I.7	Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la partie hors d'équilibre de f dans le cas d'un gradient de température dans l'axe y	40
I.8	(a) : Représentation dans le plan (v_x, v_y) de $J_{Qy}(\mathbf{v})$ qui est la contribution des particules de vecteur \mathbf{v} au flux J_{Qy} ; (b) : Profil de $J_{Qy}(\mathbf{v})$ en fonction de v_y pour $v_x = 0$	41

II.1	Evolution de particules sur un réseau. Les flèches noires représentent les particules au temps t et les flèches blanches au temps $t + 1$. Ceci représente donc les configurations initiales et finales après un cycle de collision et transport.	44
II.2	Exemples de quelques collisions possibles.	45
II.3	Vitesses discrètes du modèle $D2Q9$	53
II.4	(a) Empilement de sphères arrangées dans une configuration cubique face centrée. Le cube représente le domaine de simulation . (b). Illustration d'un écoulement obtenu par simulation BsR dans un plan de l'empilement de sphères.	55
II.5	(a) Coefficient K_{ZH} en fonction de la fraction volumique ϕ . Sont représentés les résultats semi-analytiques de Zick et Homsy ainsi que les résultats de simulations BsR effectuées avec les termes collisionnels BGK et MRT et avec les conditions aux limites SBB ou LIBB. (b). Cette figure représente les erreurs relatives du coefficient K_{ZH} obtenu par les simulations par rapport aux résultats de Zick et Homsy.	56
II.6	Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la contribution au flux de quantité de mouvement $P_{xy}(\mathbf{v})$ de chaque vecteur vitesse. Les cercles blancs correspondent aux vecteurs vitesses discrètes : (a) modèle $D2Q9$ et (b) modèle $D2Q25$	64
II.7	Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la contribution au flux de chaleur $J_y(\mathbf{v})$ de chaque vecteur vitesse. Les cercles blancs correspondent aux vecteurs vitesses discrets : (a) modèle $D2Q9$ et (b) modèle $D2Q25$. Le cercle noir représente le lieu des points où $J_y(\mathbf{v})$ change de signe.	66
II.8	(a) : Champs de vitesse d'un vortex ; (b) : Comparaison entre l'expression analytique de la décroissance de la vorticité au centre du vortex (traits pleins) et les résultats de simulations numériques (cercles).	67
II.9	(a) : Configuration initiale pour créer des ondes acoustiques. Le gaz est isotherme à l'instant initial et la masse volumique a un profil en créneau ; (b) : Comparaison entre la célérité du son théorique $c = \sqrt{\gamma r T}$ (traits pleins) et les simulations numériques (cercles).	68
II.10	Masse volumique ρ en fonction de l'altitude y d'une colonne de gaz isotherme de hauteur H . En traits pleins, l'expression analytique $\rho(y) = \rho_0 \exp\left(\frac{gy}{rT}\right)$, les cercles représentent les résultats de simulations numériques.	69

- II.11 (a) : Configuration de l'écoulement de Couette qui est un écoulement cisailé entre deux plaques séparées par une distance H . La plaque du bas a une vitesse nulle et une température T_0 , la plaque du haut a une vitesse U et une température T_1 ; (b) : Comparaison entre le profil de température théorique adimensionnée au stationnaire $\frac{T(y)-T_0}{T_1-T_0} = \frac{y}{H} + \frac{Pr Ec}{2} \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right)$ (traits pleins) et les simulations numériques (cercles). Les simulations ont été faites pour trois valeurs différentes du nombre d'Eckert Ec 70
- II.12 Ecart relatif entre la conductivité thermique observée numériquement et la conductivité thermique théorique, obtenue par la procédure de Chapman-Enskog, en fonction du rapport de la différence de température entre les plaques sur la température de référence choisie pour fixer le jeu de vitesses discrètes. La température de référence choisie ici est la moyenne des températures des plaques. Les cercles représentent l'écart relatif moyenné sur tout le champ. Les croix représentent l'erreur maximale qui est obtenue lorsque la température est la plus éloignée de la température de référence, c'est-à-dire au niveau des plaques. 71
- II.13 Nombre de Prandtl en fonction de b pour des simulations BsR appuyées sur un modèle collisionnel ES-BGK. En trait plein, expression analytique obtenue par la procédure de Chapman-Enskog, $Pr = \frac{1}{2(1-b)}$. Les cercles représentent le Prandtl obtenu par les "expériences numériques" en remontant à la conductivité et à la viscosité par le calcul des flux. 73
- III.1 Potentiel intermoléculaire de Lennard-Jones. L'expression du potentiel $u(r)$ entre deux particules séparées par une distance r est $u(r) = 4u_0 \left[\left(\frac{r_0}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r}\right)^6 \right]$. Ce potentiel est caractérisé par deux paramètres : u_0 qui est la profondeur du puits de potentiel et r_0 le paramètre de "sphère dure". r_0 correspond à la distance en dessous de laquelle les particules se repoussent. 77
- III.2 Tracé de trois isothermes de l'équation d'état de van der Waals dans le plan (p_b, ρ) (a) et dans le plan (p_b, V) (b). Trois isothermes particulières sont représentées, une pour laquelle $T < T_c$, une pour $T = T_c$ et une pour $T > T_c$ 78
- III.3 A l'équilibre thermodynamique le fluide est à température T_0 et à pression p_0 . Trois états de volumes différents V_v , V_0 et V_l (ou de masses volumiques différentes) respectent ces conditions. Règle des aires de Maxwell : si la pression imposée p_0 est telle que les surfaces hachurées A et B ont la même aire alors le système peut choisir indifféremment le volume V_v ou V_l 80

III.4	Fluide de van der Waals enfermé dans une boîte indéformable V_0 et de température $T_0 < T_c$. La masse de fluide est telle que l'existence du fluide sous forme d'une seule phase homogène est instable. Quelles sont les conditions de coexistence à l'équilibre entre la bulle vapeur de rayon r et le liquide qui l'entoure.	81
III.5	(a) profil d'interface brusque entre les deux phases de masse volumique ρ_v et ρ_l . (b) profil d'interface réaliste entre les deux phases de masse volumique ρ_v et ρ_l . Dans cette description, l'objet interface a une épaisseur non-nulle.	82
III.6	Allure de ψ_r en fonction de ρ pour un fluide de van der Waals. Les deux masses volumiques coexistantes ρ_v et ρ_l sont telles que les tangentes de ψ en ces points sont confondues. Cette construction graphique est équivalente à la règle des aires de Maxwell.	84
III.7	Allure du profil de masse volumique ρ d'un équilibre liquide-vapeur avec gravité. .	86
III.8	Allure de $W(\rho) = \rho\mu_0 - P_0 - \psi_r(\rho)$. Cette fonction est nulle dans chaque phase. $W(\rho)$ est non nulle uniquement à l'interface puisqu'à l'interface, ρ passe par toutes les valeurs entre ρ_v et ρ_l	87
III.9	(a) Rapport de la tension de surface sur $\sqrt{\kappa}$ en fonction de la température réduite pour un fluide de van der Waals. (b) Comparaison entre la tension de surface du diazote et la tension de surface obtenue selon la théorie de van der Waals en ajustant le paramètre κ	88
III.10	Illustration de la prise en compte de la taille des particules pour le terme collisionnel d'Enskog.	91
IV.1	Jeu de vitesses discrètes $D3Q15$ (extrait de [1])	105
IV.2	Les parois étant mouillantes, le liquide au départ commence à s'étaler. La courbure ainsi obtenue engendre une différence de pression entre l'intérieur de la colonne et l'extérieur qui crée un écoulement du centre de la colonne vers les parois. Ceci amplifie le mouvement initial du liquide qui est attiré par les parois mouillantes. .	107
IV.3	La colonne de liquide finit par se rompre. Bien qu'il n'y ait pas de gravité, les erreurs numériques d'arrondi suffisent à créer une dissymétrie. Sous l'effet de la tension de surface, les deux gouttes s'arrondissent et continuent de s'étaler sur les parois.	108

- IV.4 Les deux gouttes, n'ayant pas la même taille et donc des courbures différentes, ont une pression différente. Cette différence de pression conduit à l'évaporation de la plus petite au bénéfice de la plus grande. 109
- IV.5 Le liquide a tendance à se courber de façon à former un angle de contact de 140° avec les parois. Bien qu'il n'y ait pas de gravité ici non plus, une dissymétrie se crée et la goutte se détache de la paroi du haut. 110
- IV.6 Les effets de la tension de surface, arrondissent la goutte qui finit par se détacher de la paroi. L'angle de contact est tel que la configuration qui minimise les énergies de surface est une goutte sphérique loin des parois plutôt qu'une goutte partiellement accrochée à une paroi. 111
- IV.7 (a) : Comparaison entre le coefficient théorique de diffusion $D_{th} = \frac{k_b T}{6\pi\mu a}$ d'une solution diluée de fluide colloïdal idéal avec D_{num0} obtenu numériquement par la première loi de Fick (IV.34) pour une série de simulations de diffusion d'un profil gaussien de ϕ pour différentes valeurs de $\delta t/\tau_u$; (b) : Les cercles représentent le rapport entre le coefficient de diffusion D_{num} obtenu numériquement à partir l'équation de la diffusion (IV.35) et D_{th} . La ligne représente le rapport théorique $D_{num}/D_{th} = 1 - \frac{\delta t}{2\tau_u}$ prédit par la procédure de Chapman-Enskog sur réseau et l'approximation de diffusion. 118
- IV.8 Equation d'état selon Guérin [2] pour un potentiel d'interaction double-Yukawa-sphère-dure. D'après la construction de Maxwell, le système peut montrer deux fractions volumiques coexistantes ϕ_G et ϕ_L . ϕ_0 est la fraction volumique d'équilibre instable. 120
- IV.9 Relation de dispersion $\omega_+(k)$ pour plusieurs valeurs du pas de temps δt . Les résultats sont montrés en fonction du rapport $R = \frac{\delta t H(\phi_0)}{2\phi_0\tau_u(1-\phi_0)}$. Le résultat physique correspond à $\delta t = 0$ (c'est à dire $R = 0$). La discrétisation temporelle change la valeur de $\omega_+(k)$ mais n'affecte pas la valeur de k_m pour laquelle $\omega_+(k)$ est maximale. La valeur k_m est $\sqrt{\frac{-\Pi'_0}{2\rho_0^2\phi_0\kappa}}$ 121
- IV.10 Profil de fraction volumique ϕ . La condition initiale est un champ de fluctuations aléatoires autour du point d'équilibre instable de fraction volumique ϕ_0 . Une longueur d'onde caractéristique autour de 18 nm apparaît après quelques pas de temps ce qui est en accord avec l'analyse linéaire de stabilité. 122

IV.11	Représentation de la fraction volumique ϕ de colloïdes, $5\mu s$ après le début de la séparation de phase. La taille du domaine est $100 \times 40 \times 40$ avec $\delta x = 0.5 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-10} \text{ s}$. Un écoulement global d'environ $10^{-4} m.s^{-1}$ est imposé dans la direction x mais les colloïdes sont bloqués à la membrane. La condition initiale est un champ aléatoire autour de la fraction volumique instable $\phi_0 = 0.145$	124
IV.12	Représentation de la fraction volumique à la surface de la membrane en fonction du temps. Du fait de l'écoulement global, il y a une accumulation de colloïdes à la surface de la membrane. Des oscillations sont observées car il n'y a pas assez de matière pour former une interface stable.	125
V.1	Illustration d'un équilibre liquide-vapeur lorsque $\kappa = 0$ c'est à dire lorsque la masse volumique passe de ρ_v à ρ_l d'un nœud à l'autre	131
V.2	Comparaison des profils d'interface liquide-vapeur obtenus par simulation avec les résultats théoriques (traits pleins). Les simulations ont été effectuées pour un fluide de van der Waals de température critique $T_c = 4/7 \text{ K}$ et de masse volumique critique $\rho_c = 3.5 \text{ kg.m}^{-3}$. Les paramètres de simulation sont $T = 0.98T_c$, $\tau = 0.1 \text{ s}$, $\delta x = 1 \text{ m}$ et $\delta t = 0.01 \text{ s}$. Les trois profils correspondent à trois valeurs de κ : $0.01 \text{ m}^7.kg^{-1}.s^{-2}$ (carrés), $0.05 \text{ m}^7.kg^{-1}.s^{-2}$ (cercles) et $0.1 \text{ m}^7.kg^{-1}.s^{-2}$ (étoiles).	139
V.3	Courbe de saturation du diazote dans le plan $(T - \rho)$. A l'instant initial, le fluide est sous forme vapeur (représenté par la croix). Les cercles représentent les masses volumiques du fluide à l'état final qui est imposé par la température des parois ($T_{p_1} = 122 \text{ K}$ pour la simulation 1 et $T_{p_2} = 120 \text{ K}$ pour la simulation 2).	140
V.4	Champs de masse volumique (colonne de gauche) et de température (à droite). Les conditions de simulation sont : un maillage de 50×50 , $\delta x = 20 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-11} \text{ s}$. Les parois (en haut et en bas) ont une température $T_{p_1} = 122 \text{ K}$. Dans les premiers instants le fluide se condense aux parois puis ces phases liquides forment des gouttes accrochées aux parois.	142
V.5	La goutte du haut disparaît au bénéfice de la goutte inférieure. Compte tenu du pas de temps la durée totale de la simulation est de $12 \mu s$	143

V.6	Champs de masse volumique (colonne de gauche) et de température (à droite). Les conditions de simulation sont : un maillage de 50×50 , $\delta x = 20 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-11} \text{ s}$. Les parois (en haut et en bas) ont une température $T_{p1} = 120 \text{ K}$. La durée totale de la simulation est de $1.5 \mu\text{s}$. Le sous-refroidissement au sein du fluide permet la formation de gouttes ($t = 10000 \delta t$) mais ces gouttes disparaissent au bénéfice des films liquides sur les parois.	144
B.1	Vorticity as a function of the dimensionless time $t^* = \nu t / L^2$ with $\nu = RT\tau$ the kinematic viscosity. The solid line represent the analytical result : $\omega_{max}(t^*) = \frac{\omega_0}{(1+4t^*)^2}$. The crosses represent the LB simulations.	158
B.2	A gravity force is introduced in the model as proposed by [6]. Vertical density profiles are compared with analytical macroscopic solutions at the stationary limit for an isothermal gas layer of thickness H . Simulations are performed for three values of $\alpha = \frac{gH}{RT}$ where g is the acceleration due to gravity.	159
B.3	The speed of sound was estimated for various temperatures and compared with the theoretical value $c = \sqrt{2RT}$. Following the idea proposed by [13], the density distribution was initialized as a step profile with a small difference in density and the speed of sound is directly estimated by simple front tracking.	160
B.4	Heat dissipation is tested in traditional Couette flow with a temperature gradient [5] for a gas layer of thickness H . The wall at location $y = 0$ is fixed and its temperature is T_0 . The wall located at $y = H$ moves with a constant speed and its temperature is T_1 . The simulation points are in complete agreement with the analytical solution for different Eckert numbers ($Ec=[4;20;40]$).	161
B.5	The relative error in thermal conductivity is shown for different values of $\Delta T/T$. From the Chapman-Enskog expansion, the thermal conductivity is $\lambda = \frac{D+2}{2} R^2 T \tau$. The mean (circles) and maximum (crosses) relative errors incurred using the finite-difference scheme tend asymptotically towards 0 for quasi-isothermal situations. The sensitivity to the reference temperature is indicated by the maximum error, as it occurs where the temperature is minimum or maximum, i.e. $T - T_{ref} = \Delta T/2$. However the maximum relative error inherent in a traditional lattice scheme (triangles) shows the presence of a residual error.	162
B.6	Discrete velocities set.	165

- C.1 schéma d'une paroi dont on veut imposer au noeud n_0 une vitesse de glissement u_p et une température de paroi T_p 170
- E.1 Profil de vitesse pour un écoulement de Poiseuille avec une viscosité non-uniforme dans le canal. L'expression de la viscosité est : $\nu(y) = \nu_0 + \alpha y$. La ligne représente le profil analytique et les cercles représentent les simulations BsR. 174

Introduction

La compréhension des mécanismes de transitions de phase revêt une grande importance dans différents domaines des sciences physiques, que ce soit dans le cadre d'études fondamentales ou dans un cadre plus technologique. Nous nous intéressons en particulier ici au changement de phase liquide-vapeur qui met en jeu d'importants échanges d'énergie sous forme de chaleur. Cette propriété peut être employée pour extraire de l'énergie dans des zones à forte densité de puissance dégagée, par exemple par des composants électroniques (microprocesseurs, électroniques embarquées dans les satellites ...). De tels dispositifs sont déjà largement utilisés, d'autres sont en cours de développement (caloducs, micro-caloducs, micro-boucles diphasiques à pompage capillaire ...). Sans entrer dans tous les détails, le principe de fonctionnement de l'ensemble de ces dispositifs de refroidissement à changement de phase peut se décomposer en quatre étapes : extraction de la chaleur par évaporation d'un fluide caloporteur au sein d'un échangeur au contact de l'objet à refroidir (source chaude) - acheminement du fluide sous forme vapeur vers une source froide (air ambiant dans le cas d'applications terrestres ou panneaux rayonnant dans le cas spatial) - condensation du fluide au sein d'un échangeur au contact de la source froide - acheminement du fluide sous forme liquide vers la source chaude. Bien que ce principe de fonctionnement semble simple, la mise au point de ce type de dispositifs nécessite une compréhension fine des écoulements avec changement de phase. Pour illustrer ces besoins, on peut citer l'exemple de la condensation qui se produit dans un tube de diamètre inférieur au millimètre dans le cas des micro-boucles diphasiques. Le fluide sous forme de vapeur pénètre dans le micro-condenseur (au contact de la source froide) où la condensation se produit par la création de minces films liquides le long de la paroi dans lesquels d'importants transferts de chaleur interviennent (de l'ordre de 100 W.cm^{-2}). Cet exemple, bien que simplifié, met en évidence plusieurs couplages entre différentes physiques : écoulements en micro-tube pour lesquels la capillarité joue un rôle, changement de phase liquide-vapeur et transferts thermiques de forte densité de puissance.

Dans cette thèse nous nous intéressons également à l'agrégation de particules colloïdales en suspension. Le comportement des suspensions colloïdales, qui peuvent se définir comme une dispersion dans un solvant de particules ou de macromolécules d'une taille inférieure au micromètre,

est un enjeu de l'industrie pharmaceutique et agroalimentaire. On peut citer l'exemple des procédés d'ultrafiltration membranaire du lait qui est une suspension colloïdale complexe dont le solvant est de l'eau et qui contient principalement des globules gras, du lactose, des bactéries, des protéines solubles et bien d'autres macromolécules. La filtration du lait, qui se fait au travers de membranes dont la taille des pores varie en fonction du composé à séparer, permet d'épurer le lait de son contenu bactérien ou bien d'ajuster le taux de chaque composant afin de fournir industriellement un produit de qualité constante. Ce type de procédé membranaire peut être le siège d'agrégation de particules colloïdales lorsque la concentration de particules croît au niveau de la surface de la membrane. Cette agrégation soudaine, qui peut être considérée comme une transition de phase, forme un gel à la surface de la membrane qui va modifier, en fonction de la structure formée, les conditions d'écoulements et les performances de la filtration. Contrairement aux écoulements liquide-vapeur, les effets énergétiques ne jouent pas de rôle pour ce type de transition de phase. La complexité, dans ce cas, apparaît par le nombre de phénomènes physiques du même niveau d'importance : couplage entre le transport des particules et l'écoulement du solvant, interactions entre particules et interactions particules-membrane.

Ces deux exemples d'écoulements de "fluides complexes" illustrent les enjeux et les besoins méthodologiques associés à la compréhension et à l'analyse de la physique des transitions de phase qui se manifestent également dans d'autres disciplines. C'est le cas notamment en physique des plasmas hors d'équilibre où de nombreuses questions restent ouvertes en ce qui concerne l'émergence de structures spatiales à l'échelle du système à partir d'interactions électrons/ions/neutres dans des conditions incompatibles avec l'utilisation de modèles macroscopiques de type fluidique. Un autre exemple est la biologie dont l'un des sujets d'étude actuel est l'analyse des phénomènes d'auto-organisation, de morphogénèse et plus généralement de comportements collectifs à différentes échelles du vivant (vaisseaux sanguins, bactéries, insectes, bancs de poissons ...). Les applications plasma et biologie ne seront plus mentionnées dans le présent document mais elles ont fait partie de notre environnement de recherche et ont donc influencé indirectement certaines des exigences d'approfondissement théorique qui ont présidé à cette thèse.

Pour l'étude et la compréhension de tels "systèmes complexes", caractérisés par un grand nombre de degrés de liberté, où les transitions de phase résultent d'effets collectifs, la modélisation la plus naturelle est la description macroscopique. Or celle-ci n'est pas toujours adaptée ou suffisante. C'est le cas très clairement pour des situations loin de l'équilibre, par exemple, en mécanique des fluides, pour les écoulements de gaz raréfiés ou des écoulements dans des géométries de faibles dimensions (micro ou nanofluidique). Cependant, même lorsque les problématiques abordées sont des situations proches de l'équilibre, la modélisation macroscopique peut être difficile à mener totalement car énormément de ce qui se passe à l'échelle du système entier nécessite une

compréhension détaillée de ce qui se passe à petite échelle (près des parois, dans les interfaces etc ...). C'est le cas par exemple des transferts thermiques dans les films minces de liquides ou bien les formes des structures résultant de l'agrégation des particules colloïdales sur une membrane. Ainsi, même lorsque la description macroscopique est pertinente dans la quasi-totalité du système, on est communément amené à faire appel à des corrélations pour rendre compte de phénomènes à petite échelle. Aujourd'hui, de plus en plus de travaux sont menés pour aborder spécifiquement cette question (en particulier avec la dynamique moléculaire) afin de comprendre les mécanismes se produisant à petite échelle et d'alimenter ainsi les modèles macroscopiques. D'autres difficultés liées à la modélisation macroscopique concernent la mise en oeuvre en terme de simulations numériques. Ces difficultés se manifestent par exemple pour des écoulements diphasiques où il est nécessaire de suivre les interfaces liquide-vapeur et la dynamique de la ligne triple.

Dans ce contexte où les besoins concernant la compréhension d'écoulements avec transitions de phase sont importants et où la modélisation macroscopique atteint des limites, il est intéressant d'explorer les possibilités d'une description mésoscopique. Pour les situations de hors d'équilibre lointain de nombreux travaux ont été menés et ont permis d'amener à maturité un certain nombre de techniques numériques. Au delà de ces aspects, le point de vue correspondant nous paraît susceptible d'éclairer des questions d'interprétations physiques, en particulier en ce qui concerne l'influence des phénomènes de petite échelle sur l'évolution du système entier.

Trois compétences existantes ont permis d'effectuer ce travail dans le cadre d'une collaboration entre deux laboratoires. D'une part, l'ex-Laboratoire d'Energétique² composé d'une équipe ayant acquis un savoir-faire sur la modélisation mésoscopique pour des situations de hors d'équilibre lointain dans le cadre de problématiques en transfert radiatif et en biologie, et d'une équipe menant des études expérimentales et théoriques sur le changement de phase liquide-vapeur. D'autre part, le Laboratoire de Génie Chimique où M. Clifton a acquis une expérience sur les méthodes Boltzmann-sur-Réseau dans le cadre d'études d'écoulements en géométrie complexe. C'est dans ce contexte que ce travail a pris naissance et s'est naturellement orienté dans un premier temps vers un objectif d'appropriation et de clarification des concepts, avec en particulier le besoin d'identifier à toutes les étapes, la part de l'édifice théorique relevant rigoureusement d'une description mésoscopique et pouvant donc conserver une validité au delà du domaine de validité des modèles macroscopiques. En s'appuyant sur cette compréhension, des développements originaux ont pu être menés allant jusqu'à des propositions effectives pour rendre compte de phénomènes de transition de phase avec prise en compte des effets thermiques.

Ce mémoire s'organise en cinq chapitres. Les chapitres I et III sont des chapitres de mise au

²aujourd'hui appartenant à l'équipe Groupe de Recherche en Energétique, Plasma et Hors d'Equilibre du Laboratoire PLAsma et Conversion d'Energie

point incluant à la fois un rappel des bases théoriques et un point de vue personnel sur les concepts physiques employés dans ce travail. Les trois autres chapitres présentent des travaux de modélisation originaux de cette thèse pour différents types d'écoulements avec ou sans transferts thermiques et avec ou sans changement de phase. Le découpage détaillé est le suivant :

- Le chapitre I rappelle les concepts et les hypothèses associées à la modélisation cinétique des fluides. Le terme *mésoscopique* tel qu'il est utilisé tout au long de ce travail ainsi que tous les concepts liés à ce type de modélisation sont définis et commentés dans ce chapitre. Nous présentons une démonstration de l'équation de Boltzmann à partir d'un bilan dans l'espace des phases. Les étapes de la démonstration à partir de l'équation de Liouville et de la hiérarchie BBGKY sont également présentées. Enfin, le passage de la description mésoscopique à la description macroscopique est exposé en détail. Ce passage est un élément important de tout le travail de modélisation présenté dans les chapitres suivants.
- Dans le deuxième chapitre, après un historique de la méthode Boltzmann-sur-Réseau et une revue non-exhaustive des modèles existants, nous reprenons un travail présenté par He et Luo en 1997 aboutissant à la conclusion que certains schémas Boltzmann-sur-Réseau peuvent être rigoureusement regardés comme des discrétisations particulières de l'équation de Boltzmann. Ce point de vue a joué un rôle essentiel dans notre travail : il nous a conduit à une proposition originale concernant la simulation d'écoulements gazeux anisothermes (section II.3) et il a été la base de la méthodologie présentée en fin de thèse pour la simulation d'écoulements diphasiques anisothermes.
- Le troisième chapitre ouvre la question de la modélisation des phénomènes de transition de phase. Nous rapellons tout d'abord les bases de l'équilibre thermodynamique d'un mélange liquide-vapeur. On introduit également le modèle d'interface liquide-vapeur de van der Waals qui permet de faire une description thermodynamique continue d'une interface. Dans une deuxième partie nous présentons un modèle mésoscopique (équation de Boltzmann-Enskog) pour les fluides non-idéaux ainsi que les équations macroscopiques relatives à ce modèle. Ce modèle mésoscopique, les équations macroscopiques correspondantes, ainsi que le modèle thermodynamique d'interface de van der Waals servent de bases physiques aux travaux présentés dans les deux derniers chapitres.
- Le chapitre IV présente un travail de modélisation pour les écoulements de suspensions colloïdales avec agrégation des particules colloïdales. Le modèle proposé repose sur le fait que le colloïde peut être considéré comme un fluide non-idéal avec une équation d'état reliant la pression osmotique à la fraction volumique de colloïde. Dans cette analogie la phase "liquide" du colloïde correspond aux domaines où les particules sont agrégées. Ainsi, pour ce type d'écoulements où les effets thermiques peuvent être négligés, nous proposons un modèle à deux fluides pour lequel le fluide global est décrit par un modèle Boltzmann-sur-

Réseau pour écoulements isothermes et incompressibles et le fluide colloïde est décrit par un schéma Boltzmann-sur-Réseau pour écoulement isotherme avec changement de phase. Compte tenue de l'absence d'effets thermiques, nous utilisons pour les deux fluides, des modèles issus de la littérature.

- Enfin le dernier chapitre présente un travail plus exploratoire sur la modélisation et la simulation d'écoulements liquide-vapeur avec changement de phase et prise en compte des effets thermiques. Nous proposons un schéma Boltzmann-sur-Réseau qui est obtenu par discrétisation de l'équation de Boltzmann-Enskog (modèle mésoscopique pour fluide non-idéal présenté au chapitre III). Cette proposition découle de l'ensemble des concepts mésoscopiques présentés au chapitre I, de l'analyse physique détaillée des interfaces liquide-vapeur présentée au chapitre III et de la démarche méthodologique employée au chapitre II pour aborder les écoulements anisothermes.

Chapitre I

Modélisation cinétique des fluides, équation de Boltzmann

Ce chapitre introductif a pour objectif de présenter les notions essentielles de modélisation cinétique des fluides que nous utiliserons tout au long de ce manuscrit. En aucun cas il ne prétend à l'exhaustivité des démonstrations mais permet de donner une vision générale de l'approche cinétique pour la description des gaz dilués. Nous essaierons dans un premier temps de présenter l'équation de Boltzmann à partir de points de vue sensiblement différents, de façon à éclairer d'une part le point de vue strictement mésoscopique et d'autre part le passage de la vision microscopique à la vision mésoscopique. Nous discuterons dans une seconde phase les propriétés d'évolution vers l'équilibre relatif à cette description, ce qui nous amènera à présenter différents modèles pour rendre compte des effets collisionnels. La dernière partie qui s'attache à décrire le passage des équations cinétiques aux équations macroscopiques est un point important de l'édifice et sera pour toute la suite un paragraphe de référence. Nous reportons au chapitre III la description cinétique pour les fluides non-idéaux.

I.1 La description mésoscopique

L'équation de Boltzmann est l'équation d'évolution de la densité monoparticulaire $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Cette équation a été dérivée par Ludwig Boltzmann en 1872 pour décrire un gaz dilué classique de particules identiques de masse m . Il est important de noter que cette équation qui s'attache à décrire des situations de non-équilibre (y compris lointain) a été établie alors que les théories de la physique statistique de l'équilibre ne sont parvenues à maturité que dans la première partie

du 20e siècle. Le vocabulaire “mésoscopique” et “cinétique” sera souvent utilisé et aucune différence fondamentale n’est à considérer dans ce manuscrit. La modélisation mésoscopique est une description statistique adaptée aux systèmes complexes comportant un grand nombre de degrés de liberté comme les fluides, les photons, les plasmas ou bien encore un gaz d’électrons dans les conducteurs. La grandeur descriptive d’un modèle mésoscopique est la fonction de distribution monoparticulaire $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. A une normalisation près, $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ est au temps t la densité de probabilité de particules dans l’espace des phases $\{\Omega_r, \Omega_v\}$. L’espace des phases est un espace à 6 dimensions : 3 pour l’espace géométrique Ω_r et 3 pour l’espace des vitesses Ω_v . Ainsi de façon plus intuitive, la quantité $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v}$ représente, à l’instant t , dans l’élément de volume $d\mathbf{r}$ autour de la position \mathbf{r} , le nombre de particules se déplaçant à la vitesse \mathbf{v} à $d\mathbf{v}$ près. A partir de la définition de $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, il est possible de retrouver les grandeurs descriptives usuelles lorsqu’une description macroscopique est employée : par exemple, la masse volumique $\rho(\mathbf{r}, t)$, la vitesse du fluide $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ ou la température $T(\mathbf{r}, t)$. La masse volumique $\rho(\mathbf{r}, t)$ étant le produit de la masse m d’une particule, par le nombre de particules dans l’élément de volume $d\mathbf{r}$ autour de la position \mathbf{r} , et ceci indépendamment de leurs vitesses, elle se relie à la fonction de distribution monoparticulaire par la relation suivante :

$$\rho(\mathbf{r}, t) = m \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.1})$$

La vitesse du fluide $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ s’interprète comme la vitesse moyenne des particules distribuées selon la fonction $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ et normalisée par $m/\rho(\mathbf{r}, t)$:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{\rho(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.2})$$

De la même façon la température $T(\mathbf{r}, t)$ s’interprète, en utilisant le théorème d’équipartition de l’énergie, comme la moyenne de l’énergie cinétique de translation des particules dans le repère du centre de masse :

$$\frac{3}{2}rT(\mathbf{r}, t) = \frac{m}{\rho(\mathbf{r}, t)} \int d\mathbf{v} \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.3})$$

dans laquelle $r = k_b/m$ est la constante massique des gaz parfaits et k_b est la constante de Boltzmann. Pour simplifier les écritures, dans le reste du manuscrit, la masse m d’une particule est intégrée à la définition de $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ de sorte que $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ remplace $m f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. A partir de maintenant, pour alléger les écritures, nous ne mentionnerons plus systématiquement les dépendances de f . Ainsi les relations précédentes deviennent :

$$\rho = \int d\mathbf{v} f \quad (\text{I.4})$$

$$\rho\mathbf{u} = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f \quad (\text{I.5})$$

$$\frac{3}{2}\rho rT = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f \quad (\text{I.6})$$

I.1.1 Microscopique/mésoscopique/Macroscopique

Dans ce paragraphe on va discuter qualitativement le point de vue attaché aux passages entre les différents niveaux de description.

La description microscopique consiste à conserver, à chaque instant, toute l'information attachée à chaque individu composant le système. Par exemple pour un fluide constitué de N particules classiques identiques et supposées ponctuelles, les descripteurs microscopiques sont les N positions $\mathbf{r}_i(t)$ et les N vitesses $\mathbf{v}_i(t)$ des particules en fonction du temps t . L'évolution de ces descripteurs obéit, selon nos hypothèses, aux lois de la mécanique newtonienne. La modélisation et la simulation de l'évolution des systèmes selon cette description sont souvent référencées sous la dénomination de *dynamique moléculaire*.

Contrairement à la description microscopique, la description macroscopique postule un continuum spatial et temporel et les descripteurs apparaissent naturellement comme des champs de l'espace et du temps. Pour un fluide, les descripteurs usuels sont la masse volumique $\rho(\mathbf{r}, t)$, la vitesse du fluide $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ et la température $T(\mathbf{r}, t)$. La *thermodynamique* et la *mécanique des fluides* sont les bases de la modélisation de l'évolution des systèmes complexes sous l'angle macroscopique. Historiquement la mécanique des fluides et plus généralement les méthodes dites *fluidiques* (pour décrire d'autres systèmes complexes comme les plasmas ou les photons) ont été construite indépendamment de la nature corpusculaire de l'objet d'étude. Les descripteurs macroscopiques sont souvent reliés à des variables accessibles expérimentalement : il est plus facile de mesurer la température d'un fluide que de mesurer les vitesses et positions des particules composant le fluide.

Le point de vue mésoscopique peut être qualifié d'intermédiaire entre les descriptions microscopique et macroscopique en terme de quantité d'informations pour la modélisation des systèmes. Dans la description microscopique, l'information sur le système est maximale puisque toutes les positions et les vitesses des particules sont connues contrairement à la description macroscopique où quelques champs spatio-temporels (ρ, \mathbf{u}, T) sont utilisés. Ces variables macroscopiques pouvant s'interpréter comme des valeurs moyennes des variables microscopiques, la description macroscopique correspond à une information partielle du système. Comme en macroscopique, le descripteur mésoscopique est une grandeur continue et n'est pas directement associé aux "individus" du système. Cependant, les informations en termes de positions et vitesses des particules existent en tant que variables indépendantes au travers d'une densité de probabilité de présence. Le caractère déterministe de la description microscopique est perdu et le point de vue devient statistique. La fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ s'interprète comme une densité de probabilité dans l'espace des phases. L'approche mésoscopique est pleinement intégrée dans le cadre des théories de la *physique statistique du hors d'équilibre*.

Le schéma suivant résume les différents points de vue associés à chacune des descriptions.

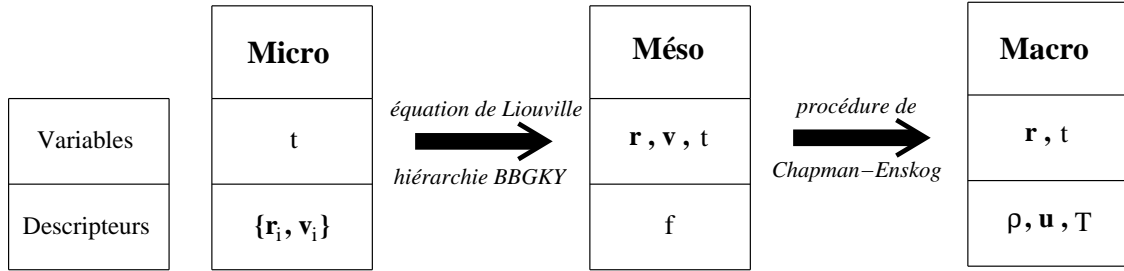


FIG. I.1: Positionnement entre les différents points de vue, microscopique, mésoscopique et macroscopique.

On retrouve sur le schéma I.1 les descripteurs et les variables associés à chaque point de vue. On note à nouveau que les positions \mathbf{r} et vitesses microscopiques \mathbf{v} passent du statut de descripteurs en microscopique au statut de variables indépendantes en mésoscopique. En macroscopique, la vitesse \mathbf{u} qui apparaît n'a plus le même sens que la vitesse microscopique \mathbf{v} puisqu'elle représente la vitesse apparente du fluide, c'est-à-dire la vitesse moyenne des particules au point. Ce tableau indique également qu'il existe un lien formel entre les différents niveaux de descriptions. L'intérêt de ces procédures réside principalement dans la mise en évidence des niveaux d'approximation et d'informations perdues au moment des passages :

- les équations cinétiques peuvent être dérivées de la description microscopique par une modélisation simplifiée des corrélations de paires, pouvant aller jusqu'à les négliger complètement pour l'équation de Boltzmann (chaos moléculaire ou "Stosszahl Ansatz"). Techniquement il s'agit de réécrire l'équation de Liouville correspondant à la reformulation des équations de la mécanique (en terme de fonction de distribution à N corps) sous la forme d'une succession d'équations couplées (hiérarchie BBGKY). L'approximation consiste alors à tronquer la hiérarchie en introduisant une relation de fermeture.
- pour obtenir un jeu d'équations macroscopiques sur les grandeurs conservatives (masse, quantité de mouvement, énergie) à partir d'une prise de moyenne de l'équation cinétique il est nécessaire, pour l'évaluation de certaines moyennes, de faire une hypothèse sur la forme de la fonction de distribution. En général l'hypothèse consiste à développer la fonction de distribution autour de la distribution d'équilibre. Cette procédure est connue en cinétique des gaz sous le nom de "procédure de Chapman-Enskog".

Ces procédures de passage seront rediscutées plus en détail dans la suite du chapitre. Il est important de noter que les concepts et grandeurs manipulés sur chaque niveau de description sont totalement différents et qu'il n'est en général pas nécessaire de construire complètement les descriptions

les plus élémentaires pour aller vers les descriptions les plus macroscopiques. Ainsi, bien qu'il soit possible de classer les trois descriptions par la quantité d'informations sur le système, cela ne signifie pas qu'un point de vue soit plus intéressant qu'un autre. On pourrait croire qu'une modélisation microscopique est plus performante puisque l'information sur le système est maximale. Or ce n'est généralement pas le cas pour au moins deux raisons : la première concerne les possibilités de calcul pour la simulation de systèmes complexes composés d'un nombre de particules de l'ordre du nombre d'Avogadro. La deuxième raison concerne la compréhension et l'analyse des mécanismes physiques et des dynamiques à l'échelle du système. En effet, en imaginant qu'il n'y ait pas de limites techniques sur les possibilités de calcul, il serait difficile d'analyser le nombre fabuleux d'informations à disposition et donc très difficile d'appréhender la physique à l'échelle du système. En ce sens, les approches macroscopiques apportent un point de vue à l'échelle du système en faisant apparaître des concepts comme, par exemple, la pression, la viscosité ou la conductivité thermique. Ces concepts, émergeant de phénomènes collectifs, rendent possible une analyse et une compréhension d'un système complexe dans son ensemble.

La description mésoscopique apparaît de ce point de vue comme ayant aussi un intérêt propre. D'une part, elle bénéficie de la possibilité, comme en microscopique, de construire des modèles en intégrant la physique à l'échelle de la particule. Ceci permet en particulier de considérer les forces intermoléculaires intervenant dans les fluides non-idéaux. D'autre part, la description mésoscopique résultant d'une première prise en compte d'effets collectifs (point de vue statistique) laisse la possibilité d'un premier niveau d'analyse complémentaire du niveau macroscopique. Cette dualité de la description mésoscopique sera présentée tout au long de ce travail de thèse. Une grande partie du travail de modélisation a été réalisé à partir des possibilités de la description mésoscopique sans jamais se priver d'un éclairage macroscopique pour l'analyse et la compréhension des mécanismes et des dynamiques du système.

I.1.2 Approche heuristique de l'équation de transport

Avant de présenter différentes "démonstrations" de l'équation de Boltzmann, il est intéressant de se familiariser avec les différents termes par des images physiques simples. Pour cela on considère un fluide constitué de particules identiques de masse m .

Isolons par la pensée les particules situées dans un élément de volume autour de la position \mathbf{r} et se déplaçant à la vitesse \mathbf{v} à $d\mathbf{v}$ près. Autrement dit, cela correspond au nombre de particules dans l'élément de volume de l'espace des phases autour du point (\mathbf{r}, \mathbf{v}) . Par définition de la fonction de distribution f , ce nombre de particules est égal à $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v}$. Si aucun événement ne change le nombre de particules (réactions chimiques ...) ou ne change la vitesse des particules (champ de

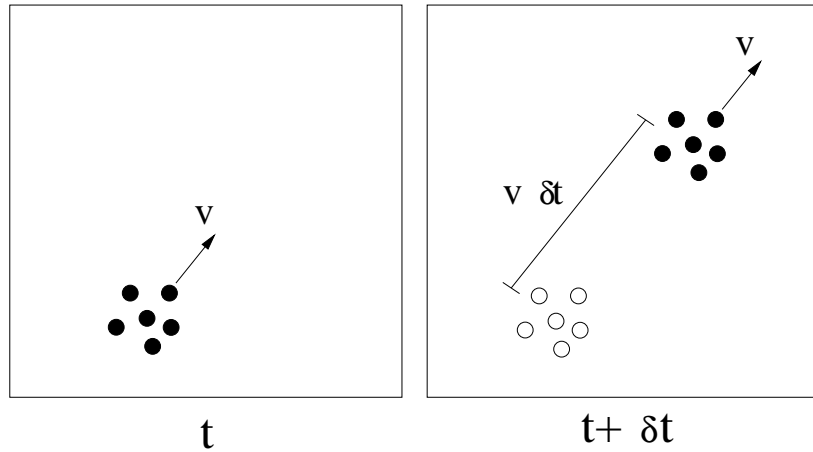


FIG. I.2: Représentation schématique de quelques particules d'un fluide à deux instants proches. Les particules de vitesse \mathbf{v} , situées en \mathbf{r} à l'instant t , se retrouvent en $\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t$ à l'instant $t + \delta t$.

force, collision entre particules ...), toutes les particules de vitesses \mathbf{v} , situées en \mathbf{r} à l'instant t se *transportent*, durant un intervalle de temps δt jusqu'au point $\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t$. Ce transport de particules (cf. Fig. I.2) se traduit par l'égalité suivante :

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v}, t + \delta t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{v} \quad (\text{I.7})$$

On admet sans démonstration (théorème de Liouville) que sous ces conditions le volume de l'espace des phases occupé par les particules $d\mathbf{r} d\mathbf{v}$ est conservé. On peut noter que cette propriété reste valable en présence de champs de forces conservatives. Cependant, nous en restons pour l'instant à l'hypothèse d'une absence de force et il vient alors :

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v}, t + \delta t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.8})$$

En supposant δt petit, on peut faire un développement limité au premier ordre de $f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v}, t + \delta t)$ autour de \mathbf{r} et t , et il vient :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \delta t \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f \right) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.9})$$

soit encore :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f = 0 \quad (\text{I.10})$$

Le terme $\mathbf{v} \cdot \nabla f$ est appelé génériquement terme de transport pur. Ce terme indique la variation de la fonction de distribution du simple fait du déplacement libre des particules. L'équation (I.10) est un modèle d'équation cinétique d'un système de particules où seul le terme de transport fait

évoluer la fonction de distribution. Dans la même logique, il est aisé de montrer qu'en présence d'un champ de force, l'équation résultante s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_v f = 0 \quad (\text{I.11})$$

Dans le cas le plus général, il faut tenir compte d'autres processus physiques faisant varier la fonction de distribution. Durant l'intervalle de temps δt , les particules de vitesses \mathbf{v} que l'on suit peuvent "collisionner" avec d'autres particules de vitesses différentes (ou sur une matière extérieure) et acquérir ainsi une vitesse \mathbf{v}' après la collision. Ce processus se traduit par un terme de perte locale $P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}')$ dans l'égalité (I.11). De façon similaire, des particules ayant une vitesse \mathbf{v}' à l'instant t , peuvent après collision, se retrouver à la vitesse \mathbf{v} à l'instant $t + \delta t$. Ceci correspond à un terme de source locale $S(\mathbf{r}, \mathbf{v}', \mathbf{v})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_v f = -P(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}') + S(\mathbf{r}, \mathbf{v}', \mathbf{v}) \quad (\text{I.12})$$

Ces termes de perte et de source ayant pour origine les collisions interparticulaires sont généralement regroupés dans le terme *collisionnel* noté $\mathcal{C}(f, f)$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_v f = \mathcal{C}(f, f) \quad (\text{I.13})$$

La double dépendance formelle en f du terme collisionnel permet de signifier que ce terme est non-linéaire en f dans le cas des fluides. Cette non-linéarité a pour origine le fait que les particules collisionnent avec d'autres particules de même nature décrites par la même fonction de distribution f . Il existe d'autres situations pour lesquelles le terme collisionnel du modèle cinétique est linéaire. C'est le cas par exemple de l'équation de transfert radiatif pour laquelle les photons ne collisionnent pas avec d'autres photons, mais interagissent uniquement avec des particules du milieu de propagation. On retrouve aussi cette logique de modélisation dans les descriptions cinétiques des plasmas où il est souvent raisonnable de négliger les collisions électron-électron, l'essentiel des événements collisionnels des électrons se produisant avec les atomes neutres du plasma.

Une des principales difficultés de la dérivation d'une équation cinétique est la modélisation du terme collisionnel $\mathcal{C}(f, f)$. Différentes propositions peuvent alors être faites sur la base d'hypothèses plus ou moins avancées de la physique d'interaction entre molécules. Dans la section suivante, on se propose de détailler le terme collisionnel d'interactions entre particules tel qu'il a été introduit originellement par Boltzmann sous l'hypothèse des gaz dilués [3, 4, 5].

I.2 Démonstration de l'équation de Boltzmann

Nous proposons dans ce paragraphe de dériver l'équation de Boltzmann en raisonnant sur la fonction de distribution monoparticulaire f , à partir d'une formalisation statistique des différents processus physiques faisant évoluer f au cours du temps. Pour simplifier la présentation mathématique on ne considérera pas les champs de forces extérieures, sachant qu'il n'y aurait aucune difficulté conceptuelle supplémentaire à leur prise en compte.

I.2.1 Hypothèses

- Les particules du gaz se déplacent en ligne droite à vitesse constante entre deux événements d'interaction. Les particules sont toutes identiques et il n'y a aucune autre matière dans le système, les seules interactions possibles sont les collisions entre particules.
- Le gaz est dilué : les distances intermoléculaires moyennes sont grandes devant la distance d'interaction entre particules. Autrement dit, les interactions sont considérées comme quasi-punctuelles et quasi-instantanées aux échelles considérées et on peut négliger les collisions autres que binaires.
- On peut toujours définir une échelle en dessous de laquelle les lieux des interactions possibles sont distribués spatialement aléatoirement de façon uniforme. L'importance de cette hypothèse sera explicitée plus tard.

I.2.2 Evolution du nombre de particules à la vitesse \mathbf{v}

On considère un élément de volume Ω d'enveloppe Σ . $N_\Omega(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v}$ est le nombre de particules à l'instant t , situées dans l'élément Ω avec la vitesse \mathbf{v} à $d\mathbf{v}$ près dans l'espace des vitesses. On peut écrire simplement :

$$N_\Omega(\mathbf{v}, t)d\mathbf{v} = \int_\Omega f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{r}d\mathbf{v} \quad (\text{I.14})$$

Si l'élément de volume Ω ne se déforme pas, on a :

$$\frac{\partial N_\Omega}{\partial t} = \int_\Omega \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{r} \quad (\text{I.15})$$

L'évolution du nombre de particules N_Ω peut varier de trois façons :

1. A l'intérieur de Ω des particules à la vitesse \mathbf{v} disparaissent suite à un changement de vitesse dû aux collisions avec d'autres particules.

2. A l'intérieur de Ω des particules à la vitesse \mathbf{v} apparaissent suite à un changement de vitesse dû aux collisions avec d'autres particules.
3. Des particules à la vitesse \mathbf{v} entrent ou sortent de Ω à travers la frontière Σ .

L'hypothèse de distribution aléatoire des lieux d'interactions se traduit statistiquement par une loi de décroissance exponentielle pour les disparitions. Le taux d'évolution de N_Ω dû aux disparitions par interactions s'écrit alors :

$$\left(\frac{\partial N_\Omega}{\partial t}\right)_1 = \int_\Omega -\frac{v}{\lambda} f \, d\mathbf{r} \quad (\text{I.16})$$

dans lequel $\lambda = \lambda(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ est le libre parcours moyen des particules de vitesses \mathbf{v} en \mathbf{r} à l'instant t (dans le cas le plus général) et $v = \|\mathbf{v}\|$.

On note $S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d\mathbf{r}$ le taux temporel d'apparition (suite aux interactions) de particules à la vitesse \mathbf{v} en \mathbf{r} à $d\mathbf{r}$ près. Le taux d'évolution de N_Ω par apparition s'écrit :

$$\left(\frac{\partial N_\Omega}{\partial t}\right)_2 = \int_\Omega S \, d\mathbf{r} \quad (\text{I.17})$$

Le dernier terme correspond à l'évolution de N_Ω lié aux entrées-sorties à travers la frontière Σ . Il s'exprime comme l'intégrale de la densité surfacique de flux de particules à la vitesse \mathbf{v} en tout point \mathbf{s} de la frontière Σ . Avec \mathbf{n} le vecteur normal sortant en \mathbf{s} , le taux d'évolution de N_Ω dû aux entrées-sorties s'écrit :

$$\left(\frac{\partial N_\Omega}{\partial t}\right)_3 = \int_\Sigma -f \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, d\mathbf{s} \quad (\text{I.18})$$

Ce qui peut se réécrire, à partir du théorème de Green-Ostrogradsky, sous la forme :

$$\left(\frac{\partial N_\Omega}{\partial t}\right)_3 = \int_\Omega -\nabla_r(f \mathbf{v}) \, d\mathbf{r} \quad (\text{I.19})$$

\mathbf{v} et \mathbf{r} étant des variables indépendantes, on obtient :

$$\left(\frac{\partial N_\Omega}{\partial t}\right)_3 = \int_\Omega -\mathbf{v} \cdot \nabla_r f \, d\mathbf{r} \quad (\text{I.20})$$

En regroupant toutes les contributions, on obtient l'équation d'évolution de N_Ω :

$$\frac{\partial N_\Omega}{\partial t} = \int_\Omega \left[-\frac{v}{\lambda} f + S - \mathbf{v} \cdot \nabla_r f \right] d\mathbf{r} \quad (\text{I.21})$$

Ceci se réécrit :

$$\int_\Omega \frac{\partial f}{\partial t} d\mathbf{r} = \int_\Omega \left[-\frac{v}{\lambda} f + S - \mathbf{v} \cdot \nabla_r f \right] d\mathbf{r} \quad (\text{I.22})$$

Cette relation étant vérifiée quel que soit l'élément de volume Ω , on obtient l'équation locale suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f = -\frac{v}{\lambda} f + S \quad (\text{I.23})$$

Pour retrouver l'équation de Boltzmann à partir de cette forme générale, nous devons d'une part détailler les processus à l'origine de la disparition de f et d'autre part expliciter le terme source S . Compte tenue des hypothèses retenues, les seules interactions possibles sont les collisions avec les autres particules du gaz. Elles ont pour première conséquence de faire "disparaître" des particules de vitesse \mathbf{v} en les faisant apparaître à la vitesse \mathbf{v}' . De la même façon, suite à une collision, une particule à vitesse \mathbf{v}' peut se retrouver à la vitesse \mathbf{v} , ce qui correspond à un terme source vis-à-vis de la population des particules suivies.

On note $W(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ la densité de probabilité pour que la vitesse de la particule après la collision soit \mathbf{v}' sachant que la vitesse avant la collision est \mathbf{v} ; elle vérifie la condition de normalisation suivante :

$$\int W(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}' = 1 \quad (\text{I.24})$$

Le terme source peut alors s'écrire sous la forme :

$$S = \int \frac{v'}{\lambda} W(\mathbf{v}; \mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) d\mathbf{v}' \quad (\text{I.25})$$

De façon plus arbitraire, il est toujours possible de réécrire le terme de disparition sous la forme :

$$-\frac{v}{\lambda} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int -\frac{v}{\lambda} W(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}' \quad (\text{I.26})$$

Ainsi, avec les notations $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ et $f' = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)$, l'équation (I.23) peut se réécrire sous la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f = \int \left[\frac{v'}{\lambda} W(\mathbf{v}; \mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f' - \frac{v}{\lambda} W(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f \right] d\mathbf{v}' \quad (\text{I.27})$$

Pour fermer complètement la description, il reste à expliciter les dépendances du libre parcours moyen $\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ à la fonction de distribution f . On considère une particule en \mathbf{r} se déplaçant à la vitesse \mathbf{v} et on analyse les interactions possibles avec des particules au même point à la vitesse \mathbf{v}'' . Tout se passe alors comme si la molécule considérée était au repos et soumise à un flux de particules incidentes de vitesses $\mathbf{v}'' - \mathbf{v}$ (cf. Fig. I.3). La section efficace $\sigma(\mathbf{v}'', \mathbf{v})$ est la surface que définit autour de la particule au repos (particule cible) l'ensemble des points d'intersection correspondant à des particules incidentes qui entrent en interaction avec la particule cible. Le nombre d'interactions par unité de temps est alors $\|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}\| \sigma(\mathbf{v}'', \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'', t)$. En considérant l'ensemble des vitesses incidentes possibles, on peut ainsi détailler le taux de disparition par interaction (ce qui correspond en fait à l'inverse du libre temps moyen de collision) :

$$\frac{v}{\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)} = \int \|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}\| \sigma(\mathbf{v}'', \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'', t) d\mathbf{v}'' \quad (\text{I.28})$$

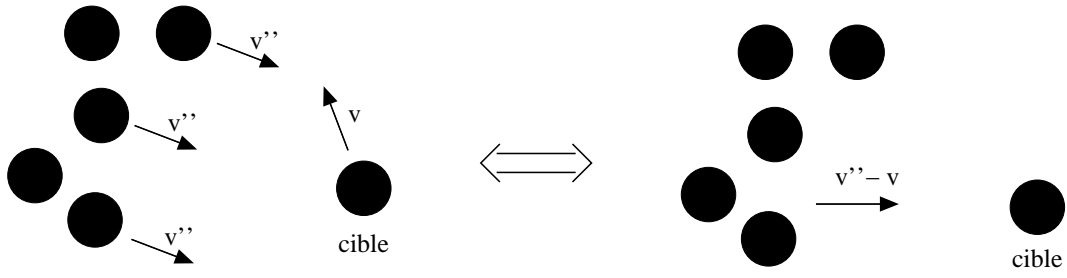


FIG. I.3

On peut alors reprendre l'équation (I.27) en détaillant les interactions (en identifiant la vitesse des particules avec lesquelles les particules suivies interagissent) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r(f) = & \int d\mathbf{v}' \int d\mathbf{v}'' \left[\|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}'\| \sigma(\mathbf{v}'', \mathbf{v}') \widehat{W}(\mathbf{v}; \mathbf{r}, \mathbf{v}', t, \mathbf{v}'') f'' f' \right. \\ & \left. - \|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}\| \sigma(\mathbf{v}'', \mathbf{v}) \widehat{W}(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t, \mathbf{v}'') f'' f \right] \end{aligned} \quad (\text{I.29})$$

avec $f'' \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'', t)$ et $\widehat{W}(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t, \mathbf{v}'')$ est la densité de probabilité qu'une particule à vitesse \mathbf{v} , subissant une interaction en \mathbf{r} à l'instant t , avec une particule à vitesse \mathbf{v}'' , se retrouve à la vitesse \mathbf{v}' après l'interaction. Si on suppose de plus que la section efficace est indépendante des vitesses des particules, alors on aboutit à l'équation de Boltzmann pour la cinétique des gaz dilués :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r(f) = & \sigma \int d\mathbf{v}' \int d\mathbf{v}'' \left[\|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}'\| \widehat{W}(\mathbf{v}; \mathbf{r}, \mathbf{v}', t, \mathbf{v}'') f'' f' \right. \\ & \left. - \|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}\| \widehat{W}(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t, \mathbf{v}'') f'' f \right] \end{aligned} \quad (\text{I.30})$$

Cette dernière équation correspond à l'équation de Boltzmann en l'absence de champs de force extérieure. Dans le cas le plus général, on peut démontrer simplement que les forces extérieures qui s'appliquent sur les particules ajoutent un terme dans l'équation de transport qui devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r(f) + \nabla_v \left(\frac{\mathbf{F}}{m} f \right) = & \sigma \int d\mathbf{v}' \int d\mathbf{v}'' \left[\|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}'\| \widehat{W}(\mathbf{v}; \mathbf{r}, \mathbf{v}', t, \mathbf{v}'') f'' f' \right. \\ & \left. - \|\mathbf{v}'' - \mathbf{v}\| \widehat{W}(\mathbf{v}'; \mathbf{r}, \mathbf{v}, t, \mathbf{v}'') f'' f \right] \end{aligned} \quad (\text{I.31})$$

Notons que la forme du terme de "force" retenue ici n'est pas standard. Nous avons en effet écrit $\nabla_v \left(\frac{\mathbf{F}}{m} f \right)$ plutôt que $\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_v(f)$ comme précédemment (équation (I.13)). Cela correspond à une

généralisation du terme de force au cas où les forces extérieures ne sont pas forcément conservatives.

I.3 Eléments de démonstration de l'équation de Boltzmann à partir de l'équation de Liouville

Sans entrer dans tous les détails de la démonstration (voir [4, 5] pour les détails), il est intéressant de présenter les principales étapes de la dérivation de l'équation de Boltzmann à partir de la description microscopique de systèmes complexes composés de particules identiques obéissant aux lois de la mécanique classique newtonienne. Cette démarche a pour objectif de faire sentir les hypothèses qui conduisent de la description déterministe et réversible à la description statistique et irréversible que constitue l'équation cinétique.

I.3.1 Equation de Liouville

L'équation de Liouville dérive du formalisme hamiltonien de la mécanique classique. On considère un système de N particules identiques de masse m . Ce système peut être entièrement caractérisé par la densité de probabilité de présence $f_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \dots; \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N; t)$ dans l'espace des phases à $6N$ dimensions. \mathbf{r}_i et \mathbf{p}_i représente respectivement la position et la quantité de mouvement de la i^{eme} particule. Cette densité de probabilité se lit comme la probabilité conjointe d'avoir une particule de coordonnées $(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$, une particule de coordonnées $(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$, ... et une particule de coordonnées $(\mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N)$ dans l'espace des phases (à l'intérieur du volume élémentaire correspondant). La conservation du flot hamiltonien se traduit par l'équation d'évolution de Liouville [6] pour la densité de probabilité :

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \{f_N, \mathcal{H}_N\} = 0 \quad (\text{I.32})$$

avec \mathcal{H}_N l'hamiltonien du système à N particules qui s'écrit (en l'absence de force magnétique) comme la somme des énergies cinétiques des particules et des interactions $u(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ que nous supposons ici être à 2 corps.

$$\mathcal{H}_N = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{\langle i,j \rangle} u(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (\text{I.33})$$

Le crochet de Poisson $\{f_N, \mathcal{H}_N\}$ est défini par :

$$\{f_N, \mathcal{H}_N\} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (\text{I.34})$$

I.3.2 Densité de probabilité à n particules

On note f_n la densité de probabilité de trouver conjointement une particule de coordonnées $(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$, une deuxième en $(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$, ... et une n -ième en $(\mathbf{r}_n, \mathbf{p}_n)$ quelles que soient les positions et impulsions de $N - n$ particules restantes :

$$f_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \dots; \mathbf{r}_n, \mathbf{p}_n; t) = \frac{1}{(N-n)!} \int f_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; \dots; \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N; t) d\mathbf{r}_{n+1} \cdot d\mathbf{p}_{n+1} \dots d\mathbf{r}_N \cdot d\mathbf{p}_N \quad (\text{I.35})$$

Le facteur $\frac{1}{(N-n)!}$ est en lien direct avec l'hypothèse d'indiscernabilité des particules. Nous rappelons que nous cherchons à dériver l'équation de Boltzmann qui est une équation d'évolution de la densité monoparticulaire $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}; t) = f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1; t)$.

I.3.3 Hiérarchie BBGKY

A partir de ce qui précède, et en n'explicitant plus les dépendances, on peut écrire la fonction de distribution à $N - 1$ corps :

$$f_{N-1} = \int d\mathbf{r}_N \cdot d\mathbf{p}_N f_N \quad (\text{I.36})$$

en dérivant par rapport au temps on obtient sans difficultés :

$$\frac{\partial f_{N-1}}{\partial t} = - \int d\mathbf{r}_N \cdot d\mathbf{p}_N \{f_N, \mathcal{H}_N\} \quad (\text{I.37})$$

En reportant l'expression du crochet de Poisson dans cette dernière équation et en intégrant on peut réécrire l'équation d'évolution de f_{N-1} sous la forme :

$$\frac{\partial f_{N-1}}{\partial t} + \{f_{N-1}, \mathcal{H}_{N-1}\} = \int d\mathbf{r}_N d\mathbf{p}_N \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\partial u_{iN}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (\text{I.38})$$

On peut répéter l'ensemble de la démarche pour trouver les équations d'évolution de f_i à partir de leur définition en fonction de f_{i+1} . On obtient ainsi une reformulation du problème sous la forme d'un système de N équations couplées [7] :

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \{f_N, \mathcal{H}_N\} = 0 \quad (\text{I.39})$$

\vdots

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \{f_n, \mathcal{H}_n\} = \int d\mathbf{r}_{n+1} d\mathbf{p}_{n+1} \sum_{i=1}^n \frac{\partial u_{i,n+1}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial f_{n+1}}{\partial \mathbf{p}_i} \quad (\text{I.40})$$

\vdots

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \{f_1, \mathcal{H}_1\} = \int d\mathbf{p}_2 d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} u_{12} \quad (\text{I.41})$$

Dans les cas non relativistes, en remplaçant \mathbf{p} par $m\mathbf{v}$, l'équation d'évolution de $f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t)$ peut s'écrire en fonction de la fonction de distribution à 2 corps f_2 :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f_1 = \int \int d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (\text{I.42})$$

L'équation (I.42) est similaire à l'équation de Boltzmann. Le terme de transport apparaît dans le membre de gauche et le membre de droite s'identifie au terme collisionnel. Un des intérêts de cette formulation réside dans la mise en évidence du lien formel entre le potentiel d'interaction intermoléculaire et le terme collisionnel. Cependant, en l'état l'équation (I.42) n'est pas suffisante puisqu'elle fait intervenir f_2 . Pour fermer le problème à partir d'une seule équation sur f_1 , il est donc nécessaire de fixer un jeu d'hypothèses concernant à la fois la forme de f_2 et du potentiel intermoléculaire. En fonction des besoins et des problèmes traités, on pourra ainsi affiner les approximations (cf. chapitre III). Pour retrouver l'équation de Boltzmann traditionnelle il est nécessaire de faire les hypothèses suivantes :

- Le chaos moléculaire qui consiste à négliger les corrélations et qui se traduit formellement par l'approximation suivante : $f_2 \approx f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) f_1(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t)$
- Les particules sont considérées comme ponctuelles et les interactions sont locales et instantanées. Cela peut se faire en particulier en modélisant le potentiel d'interaction par des interactions de types sphères dures ou fortement répulsives entre des particules sphériques ponctuelles.

I.4 Théorème \mathbb{H} et équilibre

On peut noter que la description de Liouville (y compris la hiérarchie BBGKY) est parfaitement réversible puisqu'appuyée sur une description purement mécanique. L'équation de Boltzmann quant à elle n'est pas invariante par renversement du temps. Il est clair que l'apparition de l'irréversibilité est entièrement liée aux hypothèses qui ont permis d'établir l'équation de Boltzmann. Ceci a été longuement discuté dans la littérature [8] et s'interprète statistiquement en introduisant la grandeur entropie qui permet une mesure de l'irréversibilité et de la perte d'information. L'objet de ce paragraphe n'est pas de discuter à proprement parler de l'entropie mais de faire ressortir certaines propriétés de l'équation de Boltzmann, en particulier la mise évidence de la solution d'équilibre. Pour cela on introduit la quantité \mathbb{H} (définie en général comme l'opposée de l'entropie statistique à une constante près) définie par :

$$\mathbb{H} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \log f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.43})$$

ainsi que la densité correspondante :

$$s = -h = - \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \log f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (\text{I.44})$$

I.4.1 Evolution de s au cours du temps

En multipliant l'équation de Boltzmann par $\log f$ et en intégrant selon v , on obtient (on supprime volontairement les dépendances de f) :

$$\int d\mathbf{v} \log f \frac{\partial f}{\partial t} + \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \nabla f) \log f = \int d\mathbf{v} \log f \mathcal{C}(f, f) \quad (\text{I.45})$$

En introduisant la grandeur flux local d'entropie :

$$\mathbf{j}_s = - \int d\mathbf{v} f \log f \mathbf{v}$$

on peut écrire sans difficulté une équation locale d'évolution de la densité d'entropie :

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_s = - \int d\mathbf{v} \log f \mathcal{C}(f, f) \quad (\text{I.46})$$

On peut montrer assez simplement que le terme de droite de l'équation précédente est toujours positif ou nul. Ceci constitue la version locale du théorème III. En terme interprétatif on retrouve les résultats de la thermodynamique axiomatique qui postule que l'évolution de l'entropie est liée à un terme d'échange ($\nabla \cdot \mathbf{j}_s$) et un terme de production positif ou nul ($\sigma_s = - \int d\mathbf{v} \log f \mathcal{C}(f, f)$). Autrement dit, le théorème III est une formulation du second principe de la thermodynamique, qui dit en particulier que l'entropie d'un système isolé ne peut qu'augmenter.

I.4.2 Distribution d'équilibre

En s'appuyant sur ce qui précède, il est aisé de voir que l'équilibre qui correspond à une situation stationnaire pour laquelle il n'y a pas de flux aux frontières se traduit mathématiquement par l'annulation du terme de production. Sans rentrer dans les détails mathématiques, on trouve que cette contrainte est obtenue lorsque la grandeur $\log f$ est conservée localement au moment d'une collision. Or, lors d'une collision élastique entre deux particules, 5 quantités sont conservées entre l'état initial et l'état final : la masse, les 3 composantes de l'impulsion et l'énergie cinétique. De ce fait $\log f$ doit être une combinaison linéaire de ces invariants collisionnels :

$$\log f = A + \mathbf{B} \cdot \mathbf{v} + C \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \quad (\text{I.47})$$

avec A , \mathbf{B} et C des constantes. Nous pouvons donc écrire f sous la forme suivante :

$$f = A1 \exp \left(\mathbf{B}\mathbf{v} - C\frac{1}{2}\mathbf{v}^2 \right) = A2 \exp \left[-\frac{C}{2} \left(\mathbf{v} - \frac{\mathbf{B}}{C} \right)^2 \right] \quad (\text{I.48})$$

Pour déterminer ces constantes, nous utilisons les relations déjà explicitées pour les grandeurs macroscopiques :

$$\rho = \int f \, d\mathbf{v} \quad (\text{I.49})$$

$$\rho\mathbf{u} = \int \mathbf{v}f \, d\mathbf{v} \quad (\text{I.50})$$

$$\frac{3}{2}\rho rT = \int \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f \, d\mathbf{v} \quad (\text{I.51})$$

Ces définitions permettent de déterminer les constantes :

$$A2 = \frac{\rho}{(2\pi rT)^{3/2}} \quad (\text{I.52})$$

$$B = \frac{\mathbf{u}}{rT} \quad (\text{I.53})$$

$$C = \frac{1}{rT} \quad (\text{I.54})$$

Finalement à l'équilibre la fonction de distribution s'écrit sous la forme :

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi rT)^{3/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} \right) \quad (\text{I.55})$$

Ceci est la distribution de Maxwell-Boltzmann qui décrit l'équilibre d'un gaz parfait. La distribution de Maxwell est donc la solution d'équilibre de l'équation de Boltzmann. Il est normal de trouver cette solution d'équilibre car les hypothèses du gaz parfait sont compatibles avec les hypothèses que nous avons utilisées pour dériver l'équation de Boltzmann. Les particules sont considérées comme ponctuelles et il n'y a pas d'interactions à distance entre celles-ci. Dans le modèle de Boltzmann, les collisions ont pour effet de redistribuer les particules. Et en l'absence de contraintes extérieures, cette redistribution fait tendre la fonction de distribution vers la distribution d'équilibre de Maxwell-Boltzmann.

I.5 Modèles du terme collisionnel

L'équation de Boltzmann obtenue précédemment est une équation intégral-différentielle non linéaire qui permet de modéliser des situations de non-équilibre y compris lointain. En contrepartie les analyses et résolutions (numériques pour l'essentiel) de l'équation sont délicates à mener en

l'état. La principale difficulté provient du terme collisionnel qui, incluant l'interaction à deux corps avec une partie strictement collisionnelle, rend possibles des sauts discontinus dans le sous-espace des vitesses. Il est toujours possible, mais souvent très coûteux, d'utiliser des techniques du type DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) [9] pour approcher numériquement ses solutions. Différentes propositions ont été proposées dans la littérature pour simplifier le terme collisionnel en accord avec les caractéristiques particulières du problème traité. Nous présentons dans ce qui suit le modèle du temps de relaxation (modèle BGK) et le modèle ES-BGK qui en est une extension possible.

I.5.1 Modèle BGK

L'approximation BGK a été introduite par Bhatnagar, Gross et Krook en 1954 [10]. Le terme collisionnel proposé n'a pas été originellement dérivé mathématiquement à partir du terme collisionnel de Boltzmann mais à partir d'arguments plus physiques. L'idée principale est que le terme collisionnel de Boltzmann est un rappel vers la distribution d'équilibre local de Maxwell. Si l'on est dans une situation de lointain non-équilibre alors le terme de rappel est très fort sur des temps caractéristiques de l'ordre du libre temps moyen de collision. Dès que la distribution s'est isotropisée et régularisée autour de la la distribution d'équilibre local le terme collisionnel devient beaucoup plus faible (on rappelle qu'il s'annule si on est strictement à l'équilibre) et on rentre dans le régime dit hydrodynamique pour lequel les temps caractéristiques d'évolution sont beaucoup plus longs.

Pour comprendre la forme proposée pour ce terme collisionnel, repartons de l'équation cinétique (I.23), pour laquelle le terme source S n'est pas explicité et la non-linéarité du terme collisionnel n'est pas encore apparente :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla(f) = -\frac{v}{\lambda} f + S \quad (\text{I.56})$$

La première approximation consiste à simplifier singulièrement le terme de disparition.

$$-\frac{v}{\lambda} f \simeq -\frac{f}{\tau} \quad (\text{I.57})$$

Cette approximation consiste à ne considérer qu'un seul et même temps moyen de collision τ pour toutes les particules quelles que soient leurs vitesses. La valeur la plus pertinente pour τ est en général le temps moyen entre deux collisions successives, ce qui est une caractéristique du gaz dans les conditions d'étude. La difficulté est maintenant de proposer une approximation pour le terme source. Nous avons indiqué précédemment que l'effet des collisions est de redistribuer les

particules selon la distribution d'équilibre local de Maxwell f^{eq} . Ainsi Bhatnagar, Gross et Krook, ont proposé d'approximer le terme source par un terme proportionnel à la distribution d'équilibre f^{eq} :

$$S \simeq \frac{f^{eq}}{\tau_s} \quad (\text{I.58})$$

Par homogénéité de l'équation, un temps caractéristique τ_s apparaît. Or le terme collisionnel a certaines contraintes à respecter. En effet, lors des collisions la masse, la quantité de mouvement et l'énergie cinétique sont conservées. Ceci, ce traduit par :

$$\int \mathcal{C}_{BGK} d\mathbf{v} = 0 \quad (\text{I.59})$$

$$\int \mathbf{v} \mathcal{C}_{BGK} d\mathbf{v} = 0 \quad (\text{I.60})$$

$$\int \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \mathcal{C}_{BGK} d\mathbf{v} = 0 \quad (\text{I.61})$$

avec $\mathcal{C}_{BGK} = -\frac{f}{\tau} + \frac{f^{eq}}{\tau_s}$, le terme collisionnel BGK. Par définition de f et f^{eq} , nous avons les relations suivantes :

$$\rho = \int f d\mathbf{v} = \int f^{eq} d\mathbf{v} \quad (\text{I.62})$$

$$\rho \mathbf{u} = \int \mathbf{v} f d\mathbf{v} = \int \mathbf{v} f^{eq} d\mathbf{v} \quad (\text{I.63})$$

$$\frac{3}{2} \rho r T = \int \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f d\mathbf{v} = \int \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f^{eq} d\mathbf{v} \quad (\text{I.64})$$

Nous en déduisons que le temps caractéristique du terme source est le même que celui du terme de disparition $\tau_s = \tau$. Ainsi, nous obtenons le terme collisionnel de BGK et l'équation de Boltzmann sous l'approximation BGK ou l'équation Boltzmann-BGK :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla(f) = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (\text{I.65})$$

Contrairement aux apparences, l'équation de Boltzmann-BGK n'est pas linéarisée ; seul le terme de disparition est linéaire. En revanche, le terme source fait intervenir la distribution d'équilibre f^{eq} qui dépend des champs macroscopiques ρ , \mathbf{u} et T . Or ces champs macroscopiques sont des intégrales de f . Donc l'équation de Boltzmann-BGK est aussi une équation intégral-différentielle dont une partie du terme collisionnel est non linéaire. Mais cette "quasi-linéarisation" autorise l'utilisation de techniques numériques plus classiques que la DSMC, et permet aussi de déduire quelques résultats analytiques dans certains cas. Il est à noter aussi, que sous l'approximation BGK, le gaz n'est caractérisé que par un seul paramètre, le temps de relaxation τ . Ceci est une très grande simplification car si on devait résoudre l'équation de Boltzmann, on aurait besoin de

plus de données sur les particules du gaz, telles que la taille des particules et les caractéristiques du potentiel intermoléculaire à courte portée nécessaires à caractériser la section efficace des collisions.

I.5.2 Modèle ES-BGK

Parmi les inconvénients du modèle BGK, le fluide est caractérisé par un seul paramètre, le temps de relaxation τ . Il est important de noter que ceci n'est pas intrinsèquement lié au modèle BGK, et apparaît de la même façon dans le terme collisionnel de Boltzmann si on considère par exemple une modélisation de type sphère dure pour l'interaction interparticulaire. Ceci a pour conséquence, qu'au niveau macroscopique, le nombre de Prandtl est toujours fixé quelle que soit la valeur de τ . En effet, nous allons démontrer dans la section suivante que la viscosité ν du fluide et la diffusivité thermique α sont proportionnelles à τ . C'est pourquoi le nombre de Prandtl qui est le rapport entre ces deux coefficients de transport ($Pr = \frac{\nu}{\alpha}$) est indépendant de τ . Le calcul du nombre de Prandtl à partir du terme collisionnel BGK donne une valeur de 1 alors qu'à partir du terme collisionnel complet de l'équation de Boltzmann on obtient une valeur $Pr = 2/3$. Ce qui est en très bon accord avec les données expérimentales de la plupart des gaz. L'air par exemple a un nombre de Prandtl de 0.7. De plus, comme nous l'avons dit précédemment, l'équation de Boltzmann est pertinente pour la description des liquides à la limite macroscopique. Mais les valeurs du nombre de Prandtl pour les liquides sont bien différentes de $2/3$. Par exemple, le nombre de Prandtl de l'eau à pression atmosphérique à $20^\circ C$ a pour valeur 7. Afin d'obtenir des valeurs souhaitées du nombre de Prandtl, nous allons utiliser une autre approximation pour le terme collisionnel, le modèle ES-BGK¹ [11, 12, 13]. Cette approximation a été introduite spécifiquement pour pallier les défauts de BGK par rapport au nombre de Prandtl. Sous l'approximation ES-BGK, le fluide sera décrit par deux paramètres, le temps de relaxation τ et un autre paramètre noté b . Le terme collisionnel ES-BGK présente le même terme de disparition que BGK, $-\frac{f}{\tau}$. La différence se situe au niveau du terme source.

Le terme collisionnel ES-BGK apparaît comme une généralisation de BGK. En effet le terme source de ES-BGK est une gaussienne anisotrope alors qu'avec BGK le terme source est la fonction d'équilibre de Maxwell-Boltzmann². De ce point de vue l'approximation BGK est un cas particulier de l'approximation ES-BGK. L'expression de la gaussienne anisotrope est :

$$f_G = \frac{\rho}{(2\pi \det[\Theta])^{3/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \Theta_{\alpha\beta}^{-1} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\alpha - u_\alpha) \right] \quad (I.66)$$

¹pour Ellipsoidal Statistical BGK

²qui est une gaussienne isotrope

avec $\underline{\Theta}$ le tenseur de composante $\Theta_{\alpha\beta} = (1 - b)rT\delta_{\alpha\beta} + \frac{b}{\rho}P_{\alpha\beta}$. b est le deuxième paramètre qui caractérise le fluide en plus du temps de relaxation τ . Contrairement au temps de relaxation, il est difficile de donner une signification physique à b . On peut remarquer que lorsque $b = 0$ on retrouve que $f_G = f^{eq}$. Ainsi sous cette approximation, nous obtenons l'équation de Boltzmann-ES-BGK, de forme similaire à l'équation de Boltzmann-BGK :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla(f) = -\frac{f - f_G}{\tau} \quad (\text{I.67})$$

Nous montrerons quelques résultats de simulations incluant cette description dans le chapitre suivant.

I.6 De l'équation de Boltzmann aux équations macroscopiques

Ce paragraphe s'appuie pour partie sur les notes de cours de DEA de Pottier [14], en reprenant en particulier la plupart des notations. Nous allons présenter la procédure permettant de retrouver les équations macroscopiques ou hydrodynamiques qui décrivent le fluide en fonction des variables macroscopiques : la masse volumique $\rho(\mathbf{r}, t)$, la vitesse locale moyenne $u(\mathbf{r}, t)$ et la température $T(\mathbf{r}, t)$. Ce développement porte le nom de procédure de Chapman-Enskog, du nom des auteurs qui l'ont proposé en 1916 et 1917. Tandis que l'équation de Boltzmann décrit l'évolution de la fonction de distribution f à des échelles de temps de l'ordre du temps entre deux collisions, les équations macroscopiques décrivent un gaz à des échelles de temps et de longueur bien supérieures. En effet, nous avons vu précédemment que les collisions ont pour effet de redistribuer les particules dans l'espace des vitesses selon la distribution d'équilibre de Maxwell. Cette relaxation vers l'équilibre local a lieu en un temps de relaxation que nous appellerons τ . Une fois que la relaxation vers l'équilibre local a eu lieu, et en l'absence de contraintes extérieures, le gaz relaxe vers l'équilibre global du système avec des temps bien supérieurs à τ . Cette relaxation vers l'équilibre global ne nécessite pas une description cinétique de type Boltzmann. Les équations macroscopiques permettent de décrire correctement la relaxation vers l'équilibre global. Il existe des situations où une description cinétique est indispensable. Par exemple, les écoulements dans les microsystèmes fluidiques dont les tailles sont inférieures au libre parcours moyen des particules et les écoulements autour d'objets entrant dans l'atmosphère (missiles ou vaisseaux spatiaux). Pour ces exemples, nous sommes dans une situation hors d'équilibre. En effet, les collisions sont peu fréquentes. Pour les microsystèmes fluidiques les collisions particule-particule sont plus rares que les collisions particule-paroi car les dimensions caractéristiques des canaux dans lesquels s'écoule le fluide sont inférieures au libre parcours moyen des particules. Pour les objets entrant dans l'atmosphère, la pression, et donc la masse volumique, est très faible, donc le libre parcours moyen des particules est de l'ordre de

longueur des objets. Ces deux exemples ont en commun le fait que les collisions particule-particule étant peu fréquentes aux échelles de temps d'observation, le régime hydrodynamique n'est pas établi car la relaxation vers l'équilibre local n'a pas lieu.

I.6.1 Equations de bilan locales

La première étape de la procédure de Chapman-Enskog consiste à intégrer sur l'espace des vitesses le produit de l'équation de Boltzmann par les invariants collisionnels. Nous partons de l'équation de Boltzmann avec un terme de force extérieure \mathbf{F} :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \mathcal{C}(f, f) \quad (\text{I.68})$$

En multipliant cette équation par un des invariants collisionnels $\chi \in \{1, \mathbf{v}, \frac{1}{2}\mathbf{v}^2\}$ ³ et en intégrant sur les vitesses nous obtenons :

$$\int d\mathbf{v} \chi \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f \right) = 0 \quad (\text{I.69})$$

Comme χ se conserve lors des collisions nous avons $\int d\mathbf{v} \chi \mathcal{C}(f, f) = 0$. L'équation (I.69) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{v} \chi f - \int d\mathbf{v} \frac{\partial \chi}{\partial t} f + \nabla \cdot \int d\mathbf{v} \chi \mathbf{v} f - \int d\mathbf{v} f \mathbf{v} \cdot \nabla \chi \\ + \int d\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{v}} \left(\chi \frac{\mathbf{F}}{m} f \right) - \int d\mathbf{v} f \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla \chi = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.70})$$

Comme la fonction de distribution f s'annule lorsque $v \rightarrow \pm\infty$, le cinquième terme de la relation précédente est nul. Ainsi en adoptant comme convention d'écriture $\int d\mathbf{v} \mathcal{O} f = \langle \mathcal{O} \rangle$, nous pouvons écrire le bilan général suivant pour un invariant collisionnel :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \chi \rangle - \left\langle \frac{\partial \chi}{\partial t} \right\rangle + \nabla \cdot \langle \chi \mathbf{v} \rangle - \langle \mathbf{v} \cdot \nabla \chi \rangle - \left\langle \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \chi \right\rangle = 0 \quad (\text{I.71})$$

I.6.1.1 Equation de bilan locale de la masse

Pour dériver une équation de bilan locale de la masse, nous allons appliquer l'équation de bilan générale (I.71) pour $\chi = 1$ ⁴. Par définition de f , seuls deux termes de (I.71) sont non nuls :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 1 \rangle = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (\text{I.72})$$

$$\nabla \cdot \langle \mathbf{v} \rangle = \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \quad (\text{I.73})$$

³normalement les invariants collisionnels sont $\{m, m\mathbf{v}, \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2\}$ mais ici dans la définition de f nous avons inclus la masse des particules m

⁴la masse étant intégrée à f , l'invariant collisionnel $\chi = 1$ correspond à la masse

En additionnant ces deux termes, nous retrouvons l'équation bien connue de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{I.74})$$

I.6.1.2 Equation de bilan locale de la quantité de mouvement

Les composantes de la quantité de mouvement sont aussi des invariants collisionnels. Si on applique la relation (I.71) pour chaque composante de la quantité de mouvement $\chi = v_\alpha$, trois termes sont non nuls :

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle v_\alpha \rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\rho v_\alpha) \quad (\text{I.75})$$

$$\nabla \cdot \langle v_\alpha \mathbf{v} \rangle = \partial_\beta \langle v_\alpha v_\beta \rangle \quad (\text{I.76})$$

$$\left\langle \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} v_\alpha \right\rangle = \rho \frac{F_\alpha}{m} \quad (\text{I.77})$$

L'expression $\langle v_\alpha v_\beta \rangle$ peut être développée de la façon suivante :

$$\langle v_\alpha v_\beta \rangle = \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle + \langle v_\alpha u_\beta \rangle + \langle v_\beta u_\alpha \rangle - \rho u_\alpha u_\beta \quad (\text{I.78})$$

$$= \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle + \rho u_\alpha u_\beta \quad (\text{I.79})$$

En appelant \underline{P} le tenseur des pressions de composante $P_{\alpha\beta} = \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle$, on obtient l'équation de bilan locale de quantité de mouvement suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho v_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta + P_{\alpha\beta}) = \rho \frac{F_\alpha}{m} \quad (\text{I.80})$$

En présence d'un champ de force (gravité par exemple), la quantité de mouvement n'est pas une quantité conservée ; le terme source a pour expression $\rho \frac{F_\alpha}{m}$. Le flux de quantité de mouvement est composé de deux termes, un terme convectif $\rho u_\alpha u_\beta$ et un terme non explicité pour le moment $P_{\alpha\beta}$. En développant l'expression (I.80) et en utilisant l'équation de continuité (I.74), nous pouvons réécrire cette équation sous la forme :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) u_\alpha = \frac{F_\alpha}{m} - \frac{1}{\rho} \partial_\beta P_{\alpha\beta} \quad (\text{I.81})$$

Notons bien que dans cette équation $P_{\alpha\beta}$ reste défini comme $P_{\alpha\beta} = \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle$ et n'a donc pas été exprimé en fonction des grandeurs macroscopiques ρ , \mathbf{u} et T .

I.6.1.3 Equation de bilan locale de l'énergie interne

Enfin, nous allons appliquer l'équation de bilan général (I.71) au dernier invariant collisionnel, l'énergie ⁵, $\chi = \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2$. Les termes non nuls de l'équation (I.71) sont :

$$\frac{\partial}{\partial t} \left\langle \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle = \frac{\partial e_{int}}{\partial t} \quad (\text{I.82})$$

$$\nabla \cdot \left\langle \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \mathbf{v} \right\rangle = \nabla \cdot (e_{int} \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_Q \quad (\text{I.83})$$

$$\left\langle \mathbf{v} \cdot \nabla \left(\frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right) \right\rangle = \frac{1}{2} \langle v_\beta \partial_\beta (v_\alpha - u_\alpha)^2 \rangle \quad (\text{I.84})$$

Nous avons défini ici la densité d'énergie interne comme $e_{int} = \left\langle \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle$ et le flux de chaleur comme $\mathbf{J}_Q = \left\langle \frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle$. Compte tenu de sa définition, l'énergie interne est la moyenne de l'énergie cinétique dans le centre de masse des particules distribuées selon f . Le deuxième terme s'interprète comme le divergent du flux d'énergie. Ce flux d'énergie peut s'écrire comme la somme de deux contributions, le flux convectif $e_{int} \mathbf{u}$ et le flux de chaleur \mathbf{J}_Q . Pour l'instant, on ne peut pas dire à quoi correspond ce flux de chaleur si ce n'est que c'est la partie du flux d'énergie qui n'est pas convectif. On verra plus tard que ce flux correspondra donc au flux conductif. Le troisième terme peut s'écrire ainsi :

$$\frac{1}{2} \langle v_\beta \partial_\beta (v_\alpha - u_\alpha)^2 \rangle = \langle v_\beta (u_\alpha - v_\alpha) \rangle \partial_\beta u_\alpha \quad (\text{I.85})$$

$$= - \langle (v_\beta - u_\beta)(v_\alpha - u_\alpha) \rangle \partial_\beta u_\alpha \quad (\text{I.86})$$

$$= -P_{\alpha\beta} \partial_\beta u_\alpha \quad (\text{I.87})$$

En additionnant ces trois termes nous obtenons l'équation de bilan locale de l'énergie interne :

$$\frac{\partial e_{int}}{\partial t} + \partial_\beta (e_{int} u_\beta) + \partial_\beta (J_{Q,\beta}) = -P_{\alpha\beta} \partial_\beta u_\alpha \quad (\text{I.88})$$

En intégrant l'équation de Boltzmann sur l'espace des vitesses, nous venons d'écrire trois équations de bilan locales pour les trois premiers moments de la fonction de distribution, la masse volumique ρ , la vitesse macroscopique \mathbf{u} et la densité d'énergie interne e_{int} . Mais ces équations ne sont pas encore utilisables car elles ne constituent pas un système fermé. En effet nous n'avons pas encore d'expression macroscopique pour le tenseur des pressions \underline{P} et le flux de chaleur \mathbf{J}_Q . Nous avons seulement des expressions en intégrales de f pour ces deux grandeurs. Pour fermer ce jeu d'équations il est alors nécessaire de proposer une approximation de f pour évaluer le tenseur des pressions et le flux de chaleur.

⁵En fait le dernier invariant est $\chi = \frac{1}{2}\mathbf{v}^2$ mais $\frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2$ étant une combinaison linéaire de tout les invariants collisionnels est aussi un invariant collisionnel

I.6.2 Approximation d'ordre 0

Nous rappelons que nous voulons dériver les équations macroscopiques dans des conditions où le gaz est proche de l'équilibre local. Ainsi naturellement la première approximation pour f est de prendre la fonction d'équilibre de Maxwell f^{eq} :

$$f = f^{eq} \quad (\text{I.89})$$

Cette hypothèse constitue l'ordre zéro de la procédure de Chapman-Enskog. Ainsi nous allons pouvoir évaluer, à l'ordre zéro, le tenseur des pressions $\underline{P}^{(0)}$ et le flux de chaleur $\mathbf{J}_Q^{(0)}$.

I.6.2.1 Tenseur des pressions à l'ordre 0

Par définition nous avons :

$$P_{\alpha\beta}^{(0)} = \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle_{eq} \quad (\text{I.90})$$

$$= \int \mathbf{d}\mathbf{v} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) f^{eq} \quad (\text{I.91})$$

$$= \rho \frac{k}{m} T \delta_{\alpha\beta} = \rho r T \delta_{\alpha\beta} = p \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{I.92})$$

Ainsi à l'ordre 0, nous trouvons que le tenseur des pressions est un scalaire qui est simplement la pression du gaz parfait de constante massique $r = \frac{k}{m}$.

I.6.2.2 Flux de chaleur à l'ordre 0

Par définition nous avons :

$$\mathbf{J}_Q^{(0)} = \left\langle \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle_{eq} \quad (\text{I.93})$$

$$= \int \mathbf{d}\mathbf{v} \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f^{eq} \quad (\text{I.94})$$

$$= 0 \quad (\text{I.95})$$

A l'ordre 0 le flux de chaleur est nul. A l'équilibre local, la seule contribution au flux d'énergie est le flux convectif.

I.6.2.3 Hydrodynamique du fluide parfait

Avec les expressions que nous venons d'obtenir pour le tenseur des pressions et le flux de chaleur à l'ordre 0, nous pouvons écrire les trois équations de l'hydrodynamique du fluide parfait :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{I.96})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) u_\alpha = \frac{F_\alpha}{m} - \frac{1}{\rho} \partial_\alpha p \quad (\text{I.97})$$

$$\frac{\partial e_{int}}{\partial t} + \partial_\beta (e_{int} u_\beta) = -p \partial_\beta u_\beta \quad (\text{I.98})$$

Plutôt que de garder la troisième équation décrivant l'évolution de la densité d'énergie interne, nous pouvons utiliser le théorème d'équipartition de l'énergie afin d'avoir une équation portant sur la température. Ainsi d'après le théorème d'équipartition de l'énergie nous avons $e_{int} = \rho \frac{3}{2} r T$ (en supposant les trois degrés de liberté de translation). Ainsi nous avons le système d'équations suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{I.99})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) u_\alpha = \frac{F_\alpha}{m} - \frac{1}{\rho} \partial_\alpha p \quad (\text{I.100})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) T = -\frac{p}{\rho c_v} \partial_\beta u_\beta \quad (\text{I.101})$$

avec $c_v = 3/2r$. Ces équations constituent les équations de l'hydrodynamique du fluide parfait, appelées ainsi, car dans ces équations il n'y a pas de termes dissipatifs tels que la viscosité ou la conductivité thermique. Les phénomènes de dissipation ne peuvent pas apparaître ici car pour dériver ces équations nous avons supposé que nous sommes à l'équilibre local.

I.6.3 Approximation d'ordre 1

Dans la partie précédente, nous avons vu qu'en supposant l'équilibre local comme solution de l'équation de Boltzmann, les termes dissipatifs n'apparaissent pas. Une meilleure solution consiste à prendre la fonction de distribution f perturbée autour de l'équilibre local :

$$f \approx f^{eq} + f^{(1)} \quad (\text{I.102})$$

avec $f^{(1)}$ faible devant f^{eq} . Cette hypothèse sera d'autant plus pertinente que le nombre de Knudsen sera petit devant 1. Comme pour l'ordre 0, pour fermer le système d'équations macroscopiques, il

faut calculer le tenseur des pressions et le flux de chaleur avec la nouvelle expression de f .

$$P_{\alpha\beta} = \int \mathbf{d}\mathbf{v} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) (f^{eq} + f^{(1)}) \quad (\text{I.103})$$

$$= P_{\alpha\beta}^{(0)} + \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle_{(1)} \quad (\text{I.104})$$

$$\mathbf{J}_Q = \int \mathbf{d}\mathbf{v} \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 (f^{eq} + f^{(1)}) \quad (\text{I.105})$$

$$= \left\langle \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle_{(1)} \quad (\text{I.106})$$

avec comme convention d'écriture $\int d\mathbf{v} \mathcal{O} f^{(1)} = \langle \mathcal{O} \rangle_{(1)}$. Mais pour l'instant nous n'avons pas encore d'expression pour $f^{(1)}$.

I.6.3.1 Modèle de $f^{(1)}$

Pour simplifier la présentation et accéder à une meilleure compréhension, nous allons utiliser l'équation de Boltzmann-BGK pour dériver le modèle de $f^{(1)}$. Dans leurs travaux originaux, Chapman et Enskog ont fait leur développement directement à partir de l'équation de Boltzmann⁶. En remplaçant f par son expression dans l'équation de Boltzmann-BGK, nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial t} (f^{eq} + f^{(1)}) + \mathbf{v} \cdot \nabla (f^{eq} + f^{(1)}) + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} (f^{eq} + f^{(1)}) = -\frac{f^{(1)}}{\tau} \quad (\text{I.107})$$

A cette étape l'approximation de Chapman-Enskog consiste à ne considérer que les dérivées de $f^{(eq)}$ dans le membre de gauche. Ceci permet d'obtenir une expression pour $f^{(1)}$ en fonction des dérivées de $f^{(eq)}$.

$$f^{(1)} \approx -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} \right) f^{eq} \quad (\text{I.108})$$

Compte tenue de l'expression de f^{eq} , ses dérivées peuvent être exprimées en fonction des dérivées des variables macroscopiques ρ , u et T .

$$\frac{\partial f^{(eq)}}{\partial \rho} = \frac{f^{(eq)}}{\rho} \quad (\text{I.109})$$

$$\frac{\partial f^{(eq)}}{\partial u_\alpha} = \frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} f^{(eq)} \quad (\text{I.110})$$

$$\frac{\partial f^{(eq)}}{\partial T} = \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{3}{2} \right] f^{(eq)} \quad (\text{I.111})$$

⁶d'autant plus que l'approximation BGK n'existait pas encore

de plus on a :

$$\frac{\partial f^{(eq)}}{\partial v_\alpha} = -\frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} f^{(eq)} \quad (\text{I.112})$$

Ainsi $f^{(1)}$ peut s'écrire :

$$\begin{aligned} f^{(1)} = -\tau \left\{ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \right. \\ + \frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} \mathbf{v} \cdot \nabla u_\alpha \\ + \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{3}{2} \right] \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{3}{2} \right] \mathbf{v} \cdot \nabla T \\ \left. - \frac{F_\alpha}{m} \frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} \right\} f^{(eq)} \end{aligned} \quad (\text{I.113})$$

En définissant l'opérateur suivant $D(X) = (\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla)X$, l'expression de $f^{(1)}$ est :

$$\begin{aligned} f^{(1)} = -\tau \left\{ \frac{1}{\rho} D(\rho) + \frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} D(u_\alpha) \right. \\ \left. + \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{3}{2} \right] D(T) - \frac{F_\alpha}{m} \frac{(v_\alpha - u_\alpha)}{rT} \right\} f^{(eq)} \end{aligned} \quad (\text{I.114})$$

A cette étape du développement, il faut utiliser, les équations (I.99), (I.100) et (I.101) obtenues à l'ordre 0 pour évaluer les termes $D(\rho)$, $D(u_\alpha)$ et $D(T)$. Cette étape permet d'éliminer les dérivées temporelles dans l'expression de $f^{(1)}$.

$$D(\rho) = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} + (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla \rho \quad (\text{I.115})$$

$$D(u_\alpha) = \frac{1}{\rho} \partial_\alpha p + \frac{F_\alpha}{m} + (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla u_\alpha \quad (\text{I.116})$$

$$D(T) = -\frac{2}{3} T \nabla \cdot \mathbf{u} + (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \quad (\text{I.117})$$

En reportant ces expressions et en utilisant le fait que $p = \rho rT$, nous trouvons :

$$\begin{aligned} f^{(1)} = -\tau \left\{ \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{5}{2} \right] (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \right. \\ \left. + \frac{1}{rT} (v_\alpha - u_\alpha) (v_\beta - u_\beta) \partial_\beta u_\alpha - \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} f^{(eq)} \end{aligned} \quad (\text{I.118})$$

Ainsi, nous trouvons que $f^{(1)}$ qui est la partie hors d'équilibre de f peut s'approximer par le produit de la fonction d'équilibre $f^{(eq)}$ par un terme comportant le gradient de la température T et les dérivées spatiales de la vitesse macroscopique \mathbf{u} . Il est intéressant de constater que le gradient de la masse volumique ρ et le terme de force \mathbf{F} n'apparaissent pas dans l'expression de la partie hors d'équilibre de f à l'ordre 1.

I.6.3.2 Tenseur des pressions à l'ordre 1

Maintenant que nous avons une expression pour $f^{(1)}$, nous pouvons évaluer le tenseur des pressions à l'ordre 1 selon la définition donnée précédemment.

$$\begin{aligned}
 P_{\alpha\beta} &= P_{\alpha\beta}^{(0)} + \langle (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \rangle_{(1)} \\
 &= p\delta_{\alpha\beta} \\
 &\quad - \tau \int \mathbf{d}\mathbf{v} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \left\{ \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{5}{2} \right] (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \right\} f^{(eq)} \\
 &\quad - \tau \int \mathbf{d}\mathbf{v} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \left\{ \frac{1}{rT} (v_k - u_k)(v_l - u_l) \partial_l u_k \right\} f^{(eq)} \\
 &\quad + \tau \int \mathbf{d}\mathbf{v} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \left\{ \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} f^{(eq)}
 \end{aligned} \tag{I.119}$$

La première intégrale ne contribue pas au tenseur des pressions car elle ne comporte que des moments impairs de f^{eq} . La seconde intégrale donne $-\eta(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \delta_{\alpha\beta} \nabla \cdot \mathbf{u})$ et la troisième $\frac{5}{3}\delta_{\alpha\beta} \nabla \cdot \mathbf{u}$. Nous avons défini $\eta = \rho r T \tau$. Au final, nous trouvons pour le tenseur des pressions :

$$P_{\alpha\beta} = p\delta_{\alpha\beta} - \eta(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta} \nabla \cdot \mathbf{u}) \tag{I.120}$$

En fait ce tenseur des pressions peut se décomposer en deux contributions bien connues, la pression p qui est un scalaire et le tenseur des contraintes d'un écoulement compressible $\eta(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\beta} \nabla \cdot \mathbf{u})$, ce qui signifie que η s'apparente à la viscosité dynamique.

I.6.3.3 Flux de chaleur à l'ordre 1

Nous pouvons également calculer le flux de chaleur à l'ordre 1.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{J}_Q &= \left\langle \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right\rangle_{(1)} \\
 &= -\tau \int \mathbf{d}\mathbf{v} \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \left\{ \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{5}{2} \right] (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \right\} f^{(eq)} \\
 &\quad - \tau \int \mathbf{d}\mathbf{v} \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \left\{ \frac{1}{rT} (v_k - u_k)(v_l - u_l) \partial_l u_k \right\} f^{(eq)} \\
 &\quad + \tau \int \mathbf{d}\mathbf{v} \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \left\{ \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} f^{(eq)}
 \end{aligned} \tag{I.121}$$

Pour les mêmes raisons que précédemment, seule la première intégrale contribue au flux de chaleur et nous trouvons :

$$\mathbf{J}_Q = -\lambda \nabla T \quad (\text{I.122})$$

avec $\lambda = \frac{5}{2} \rho r^2 T \tau$. En fait, nous retrouvons la loi de Fourier qui dit que le flux de chaleur est proportionnel au gradient de température et de sens opposé. Le coefficient λ s'apparente donc à la conductivité thermique du fluide.

I.6.3.4 Hydrodynamique à l'ordre 1

Maintenant que nous avons évalué le tenseur des pressions \underline{P} et le flux de chaleur \mathbf{J}_Q à l'ordre 1, nous pouvons les insérer dans les équations de bilan locales (I.81) et (I.88).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{I.123})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) u_\alpha = \frac{F_\alpha}{m} - \frac{1}{\rho} \partial_\alpha p + \nu \nabla^2 u_\alpha + \frac{\nu}{3} \partial_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{I.124})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) T &= -\frac{p}{\rho c_v} \partial_\beta u_\beta + \frac{1}{\rho c_v} \partial_\beta (\lambda \partial_\beta T) \\ &+ \frac{\nu}{c_v} (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \nabla \cdot \mathbf{u}) \partial_\beta u_\alpha \end{aligned} \quad (\text{I.125})$$

avec $\nu = \frac{\eta}{\rho}$ la viscosité cinématique et $c_v = \frac{3}{2} r$ la chaleur spécifique massique à volume constant. L'équation de continuité reste bien sûr inchangée puisqu'aucune approximation n'est nécessaire pour son obtention. L'équation de bilan de la quantité de mouvement au premier ordre n'est autre que l'équation de Navier-Stokes contenant les termes de dissipation. Et la troisième équation est l'équation de la chaleur avec deux termes de dissipation, la conduction thermique et la dissipation visqueuse. Ce système d'équations est parfois appelé équations de Navier-Stokes-Fourier par référence à l'équation de Navier-Stokes et à la loi de Fourier contenue dans l'équation de la chaleur.

I.6.4 A propos de $f^{(1)}$...

Comme nous venons de le voir, la procédure de Chapman-Enskog donne une approximation de la partie hors d'équilibre de la fonction de distribution f . Le premier commentaire qui peut être fait sur $f^{(1)}$ est de constater que les situations hors d'équilibre n'existent qu'en présence de gradient de vitesse et/ou de gradient de température. Le corollaire de cette remarque est qu'il peut exister une situation d'équilibre thermodynamique en présence d'un gradient de masse volumique

et d'un champ de force. C'est par exemple le cas du modèle d'atmosphère isotherme. S'il n'y a pas d'échange d'énergie avec l'extérieur, le système thermodynamique "atmosphère" évolue vers une situation d'équilibre thermodynamique pour laquelle tous les flux dissipatifs sont nuls : isothermie de l'atmosphère et stratification à cause du champ de pesanteur. La stratification et donc la présence d'un gradient de masse volumique n'empêche pas l'existence d'une situation d'équilibre. Afin d'appréhender cette partie hors d'équilibre de f , nous allons examiner deux situations simples stationnaires hors d'équilibre : un écoulement cisailé et une couche de gaz entre deux parois de températures différentes.

I.6.4.1 Ecoulement cisailé

Considérons une situation bi-dimensionnelle d'un écoulement stationnaire dans la direction x cisailée selon y comme le montre la figure I.4. Ceci est une situation hors d'équilibre car du point de vue macroscopique il existe un flux dissipatif constant de quantité de mouvement, perpendiculaire à l'écoulement, $P_{xy} = -\rho\nu \frac{\partial u_x}{\partial y}$. D'un point de vue mésoscopique, sous l'hypothèse BGK et selon le développement de Chapman-Enskog à l'ordre 1, l'expression de l'écart à l'équilibre de la fonction de distribution $f(\mathbf{v})$ se réduit à :

$$f^{(1)}(\mathbf{v}) = -\tau \frac{1}{rT} (v_x - u_x) v_y f^{eq}(\mathbf{v}) \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (\text{I.126})$$

Pour simplifier les raisonnements, nous allons considérer $f^{(1)}$ lorsque $u_x = 0$. La figure I.5 représente cet écart à l'équilibre $f^{(1)}$ dans le plan (v_x, v_y) . La forme de $f^{(1)}$ doit respecter les invariants collisionnels. $f^{(1)}$ correspond à une redistribution de particules qui ne contribue ni à la masse volumique, ni à la quantité de mouvement et ni l'énergie cinétique. Comme le montre la figure I.5.a, les propriétés de symétrie de $f^{(1)}$ sont en accord avec ces contraintes d'invariance. Il y a autant de lobes positifs que négatifs, donc pas de contribution à la masse. Si on regarde de part et d'autre de l'axe x , il y a un lobe positif et un lobe négatif de part et d'autre de l'axe, donc pas de contribution à la composante y de la quantité de mouvement. La même chose pour l'axe y et la composante x de la quantité de mouvement. Et pour finir $f^{(1)}$ ne contribue pas à l'énergie cinétique car compte tenue de sa forme, $f^{(1)}$ est une redistribution angulaire ; la distribution en module de vitesse n'est pas modifiée. Donc comme l'énergie cinétique ne dépend que de la distribution des modules alors celle-ci n'est pas modifiée par $f^{(1)}$.

En revanche cette redistribution des vitesses crée un flux de quantité de mouvement dans la direction y . En effet par définition la composante y du flux de quantité de mouvement selon x

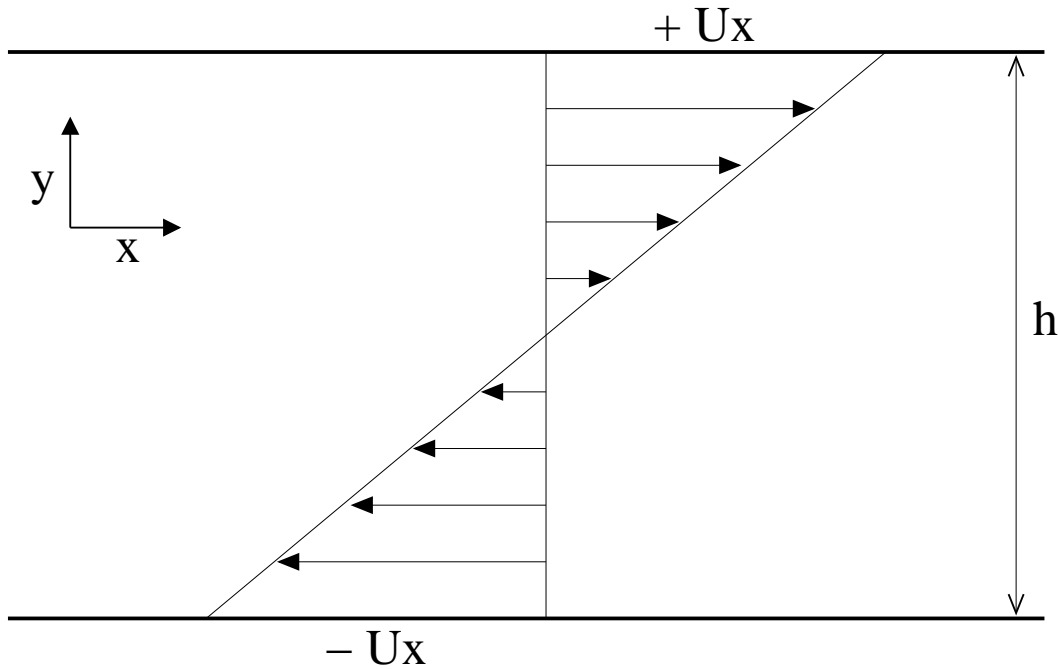


FIG. I.4: Ecoulement cisailé stationnaire entre deux plaques séparées d'une distance h . La plaque du haut a une vitesse U_x et la plaque du bas a une vitesse $-U_x$. A l'état stationnaire la composante de la vitesse du fluide selon x est linéaire en fonction de y entre $-U_x$ et U_x .

correspond au “transport” de v_x par v_y , ce qui se traduit par :

$$P_{xy} = \int d\mathbf{v} v_x v_y f = \int d\mathbf{v} v_x v_y f^{(1)} \quad (\text{I.127})$$

car f^{eq} étant isotrope pour un module de vitesse donné, ne contribue pas à cette intégrale. On peut définir $P_{xy}(\mathbf{v})$ la contribution à P_{xy} , des particules de vecteur \mathbf{v} , telle que $P_{xy} = \int d\mathbf{v} P_{xy}(\mathbf{v})$. Donc par identification :

$$P_{xy}(\mathbf{v}) = v_x v_y f^{(1)} = -\tau \frac{1}{rT} v_x^2 v_y^2 f^{eq}(\mathbf{v}) \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (\text{I.128})$$

La figure I.5.b représente dans le plan (v_x, v_y) , cette contribution $P_{xy}(\mathbf{v})$ au flux de quantité de mouvement. Comme on peut le constater sur la figure ou par l'expression de $P_{xy}(\mathbf{v})$, tous les vecteurs vitesses contribuent au flux dans le sens opposé au cisaillement $\frac{\partial u_x}{\partial y}$. Le produit $v_x^2 v_y^2 e^{-v^2/(2rT)}$ donne la mesure de la contribution. Si on effectue le changement de variables $(v_x, v_y) \rightarrow (v, \varphi)$ tel que $v_x = v \cos(\varphi)$ et $v_y = v \sin(\varphi)$, alors le produit $v_x^2 v_y^2 e^{-v^2/(2rT)}$ devient $v^4 \cos^2(\varphi) \sin^2(\varphi) e^{-v^2/(2rT)}$. Ceci permet de dire que les vitesses qui contribuent le plus sont situées autour des points de modules $v = 2\sqrt{rT}$ et d'angle $\varphi = \pi/4, 3\pi/4, 5\pi/4, 7\pi/4$.

⁷ $e^{-v^2/(2rT)}$ provient de f^{eq}

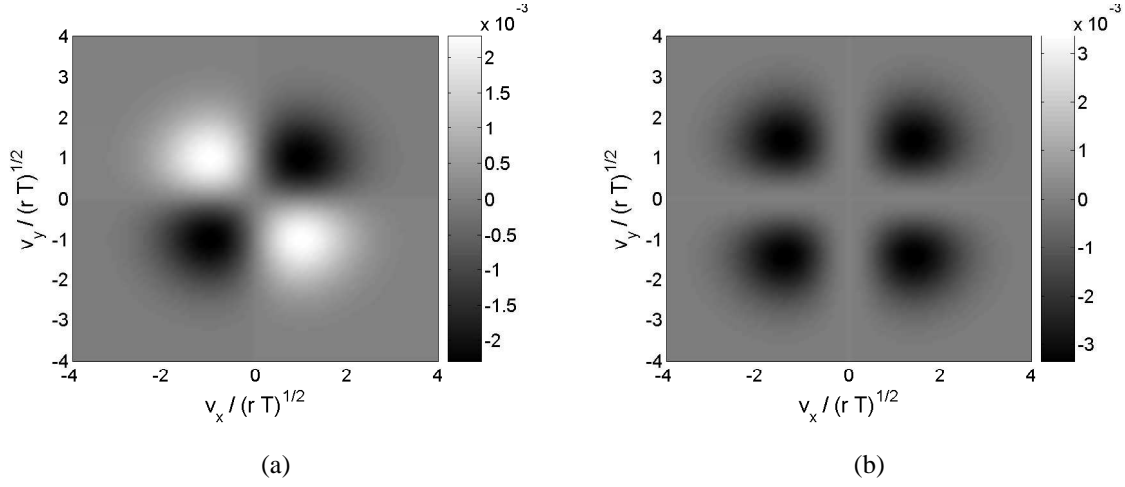


FIG. I.5: (a) : Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la partie hors d'équilibre de f dans un écoulement cisaillé stationnaire à l'endroit où $u_x = 0$; (b) : Représentation de $P_{xy}(\mathbf{v})$ qui est la contribution des particules de vecteur \mathbf{v} au flux de quantité de mouvement P_{xy} . Toutes les particules contribuent dans le sens opposé au cisaillement.

I.6.4.2 Couche de gaz entre deux parois de températures différentes

De la même façon que précédemment, il est possible de regarder l'allure de $f^{(1)}$ dans une autre situation classique stationnaire hors d'équilibre : une couche de gaz entre deux parois de températures différentes. La figure I.6 illustre la situation que nous allons regarder. D'un point de vue macroscopique, à l'état stationnaire, il existe un flux de chaleur dissipatif constant dont seule la composante selon y est non nul : $J_{Qy} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial y} = -\lambda(T_2 - T_1)/h$. D'un point de vue mésoscopique, sous l'hypothèse BGK et selon le développement de Chapman-Enskog à l'ordre 1, l'expression de la partie hors d'équilibre de la fonction de distribution est :

$$f^{(1)}(\mathbf{v}) = -\frac{\tau}{T} \left[\frac{v^2}{2rT} - \frac{5}{2} \right] v_y \frac{\partial T}{\partial y} f^{(eq)} \quad (\text{I.129})$$

La figure I.7 est une représentation de $f^{(1)}$ dans le plan (v_x, v_y) . Comme pour la situation cisaillée les propriétés de symétrie de $f^{(1)}$ sont telles que $f^{(1)}$ ne contribue pas aux invariants collisionnels. Par définition la composante selon y du flux de chaleur est le "transport" de l'énergie cinétique v^2 par v_y :

$$J_{Qy} = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} v^2 v_y f = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} v^2 v_y f^{(1)} \quad (\text{I.130})$$

Pour des raisons d'isotropie, f^{eq} ne contribue pas à cette intégrale. Il est intéressant de définir $J_{Qy}(\mathbf{v})$ la contribution à J_{Qy} des particules de vecteur vitesse \mathbf{v} , telle que $J_{Qy} = \int d\mathbf{v} J_{Qy}(\mathbf{v})$.

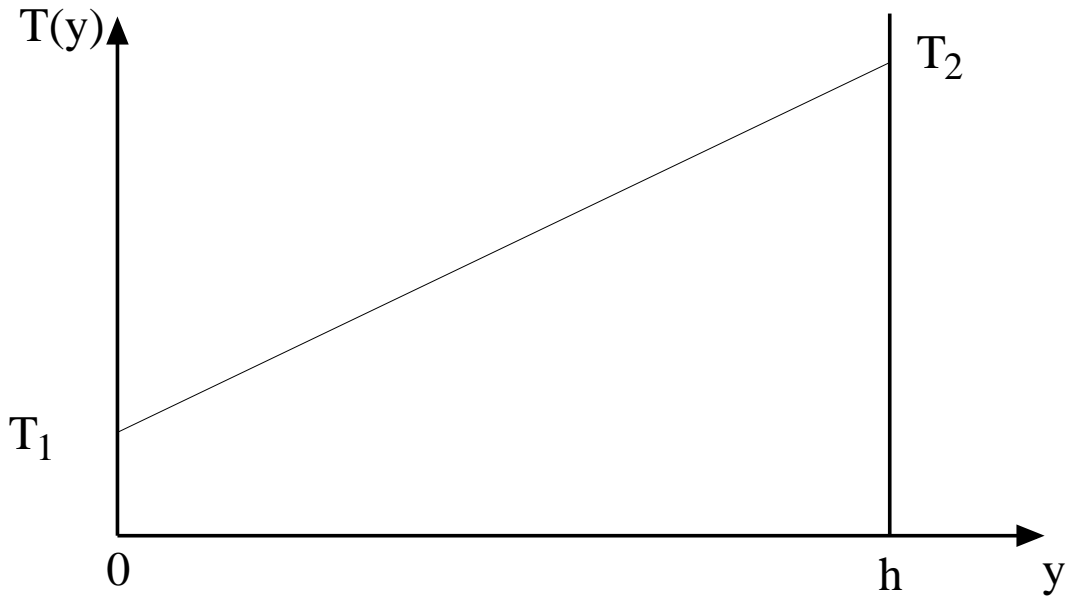


FIG. I.6: Profil de température à l'état stationnaire entre deux parois de températures T_1 et T_2 , séparées d'une distance h . Au stationnaire le profil de température du fluide est linéaire entre T_1 et T_2 .

Donc par identification :

$$J_{Qy}(\mathbf{v}) = -\frac{\tau}{T} \frac{1}{2} v^2 \left[\frac{v^2}{2rT} - \frac{5}{2} \right] v_y^2 \frac{\partial T}{\partial y} f^{(eq)} \quad (\text{I.131})$$

La figure II.7 illustre cette contribution de chaque vecteur vitesse. Contrairement à la situation cisailée où toutes les vitesses contribuaient au flux P_{xy} dans le sens opposé au cisaillement $\frac{\partial u_x}{\partial y}$, ici il existe des vecteurs vitesses dont la contribution va dans le même sens que le gradient de température $\frac{\partial T}{\partial y}$. Mais bien entendu, la somme de toutes les contributions crée un flux de chaleur dans le sens opposé au gradient de température.

I.6.5 Coefficients de transport pour le modèle collisionnel ES-BGK

Comme pour l'équation de Boltzmann-BGK, nous pouvons retrouver les équations macroscopiques à partir de l'équation de Boltzmann-ES-BGK par la procédure de Chapman-Enskog (voir [12] pour les détails). L'ordre 0 de la procédure est identique à BGK. La différence intervient à

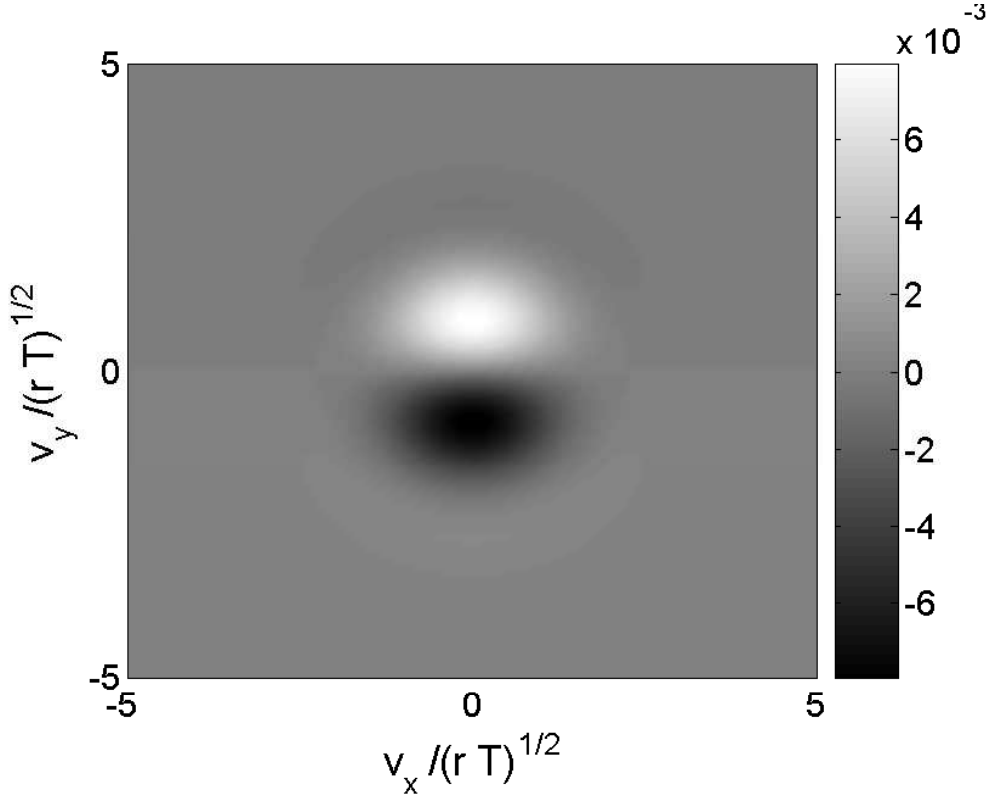


FIG. I.7: Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la partie hors d'équilibre de f dans le cas d'un gradient de température dans l'axe y .

l'ordre 1 par un terme supplémentaire proportionnel à b dans la partie hors d'équilibre $f^{(1)}$:

$$\begin{aligned}
 f^{(1)} = -\tau \left\{ \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{5}{2} \right] (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \right. \\
 + \frac{1}{rT} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \partial_\beta u_\alpha - \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \Big\} f^{(eq)} \quad (\text{I.132}) \\
 + \frac{b}{2\rho(rT)^2} (P_{\alpha\beta} - p\delta_{\alpha\beta})(v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) f^{(eq)}
 \end{aligned}$$

Ainsi la seule différence avec les équations macroscopiques dérivées pour Boltzmann-BGK, vient de la contribution du terme supplémentaire de $f^{(1)}$ au tenseur des pressions et au flux de chaleur. Compte tenue de la forme de ce terme supplémentaire, il ne contribue qu'au tenseur des pressions, et nous trouvons que la viscosité cinématique est alors :

$$\nu = \frac{1}{1-b} rT\tau \quad (\text{I.133})$$

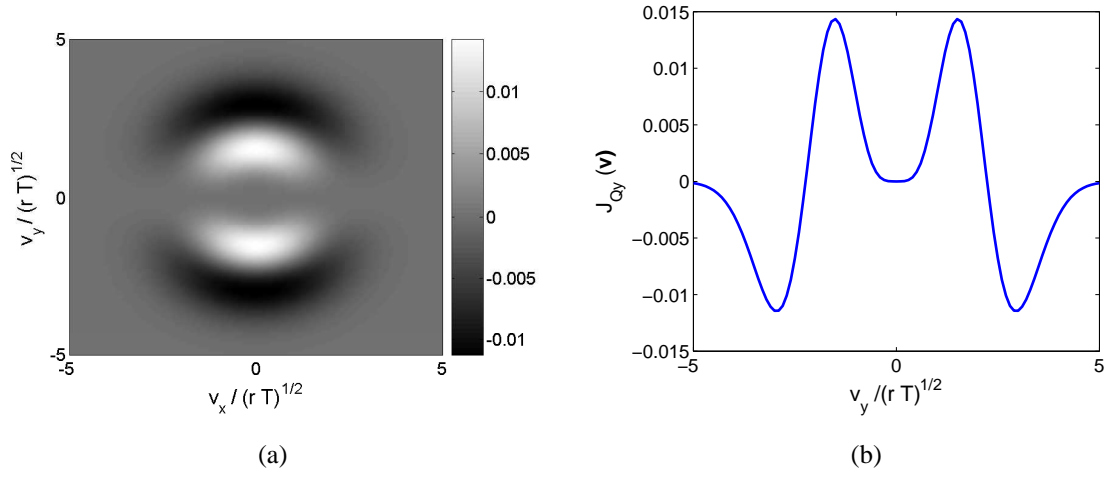


FIG. I.8: (a) : Représentation dans le plan (v_x, v_y) de $J_{Qy}(\mathbf{v})$ qui est la contribution des particules de vecteur \mathbf{v} au flux J_{Qy} ; (b) : Profil de $J_{Qy}(\mathbf{v})$ en fonction de v_y pour $v_x = 0$.

Pour $b = 0$ nous retrouvons, bien entendu, les résultats de Boltzmann-BGK. Ainsi pour l'approximation ES-BGK, le nombre de Prandtl vaut :

$$Pr = \frac{1}{1 - b} \quad (\text{I.134})$$

Le paramètre b de ES-BGK nous permet donc de choisir le nombre de Prandtl du fluide considéré.

Chapitre II

Boltzmann-sur-réseau (BsR)

Dans ce chapitre, nous commençons par une revue bibliographique des modèles BsR existants pour les écoulements isothermes (paragraphe II.1). Cette revue est très rapide et peut être complétée par la lecture des différents ouvrages de synthèse disponibles [15]. Le centre de ce chapitre est plutôt de montrer que certains schémas BsR parmi les plus couramment utilisés peuvent être vus, à strictement parler, comme des schémas de discrétisation de l'équation de Boltzmann. C'est l'objectif du paragraphe II.2 où l'on montre comment le schéma de discrétisation est choisi de façon à assurer un niveau de précision compatible avec les approximations que nous avons utilisées au chapitre I pour établir les équations de Navier-Stokes. L'intérêt principal de ce point de vue est qu'il permet de concevoir de nouveaux schémas BsR en réponse à des exigences de précision accrues ou bien à une physique mésoscopique différente. Un premier exemple est donné au paragraphe II.3 où l'on augmente le niveau de précision de façon à assurer une bonne représentation des effets thermiques. On aboutit ainsi à une proposition originale de schéma BsR pour les écoulements anisothermes. Un second exemple sera donné au chapitre V où l'on proposera un schéma BsR pour les écoulements anisothermes avec transition de phase liquide-vapeur par discrétisation de l'équation cinétique de Boltzmann-Enskog (présentée au chapitre III).

II.1 Historique de BsR

Historiquement la méthode BsR dérive des automates cellulaires et plus précisément des méthodes Gaz-sur-Réseau (GsR). Ces méthodes GsR étaient alors strictement utilisées comme une alternative à la résolution de Navier-Stokes et il n'était aucunement question de leur associer une interprétation réaliste en termes mésoscopiques.

II.1.1 Gaz sur Réseau

Les méthodes GsR sont basées sur l'image de particules pouvant se déplacer, sur un réseau, par saut d'un noeud à un autre. L'espace étant discrétisé par un ensemble de noeuds, les particules ne peuvent se déplacer qu'avec un nombre restreint de vitesses discrètes. Lorsque plusieurs particules arrivent à un même noeud, il y a collision. Ces collisions doivent respecter des invariants collisionnels qui sont bien sûr le nombre de particules (ou la masse), la quantité de mouvement et éventuellement l'énergie pour les fluides anisothermes. Pour illustrer ce type de méthodes, regardons le "Lattice Gas Automaton" proposé par Frisch, Hasslacher et Pomeau [16] et par Wolfram [17]. Dans ce modèle, des particules se déplacent sur un réseau triangulaire à deux dimensions (voir Fig. II.1).

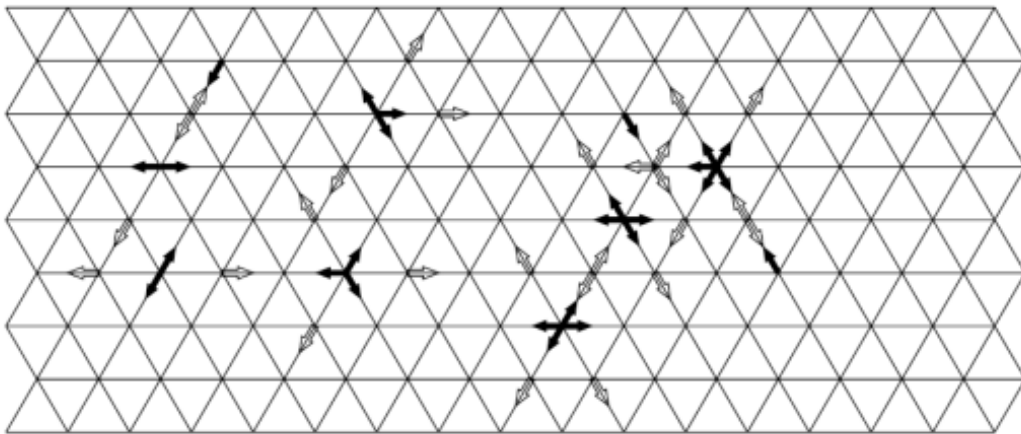


FIG. II.1: Evolution de particules sur un réseau. Les flèches noires représentent les particules au temps t et les flèches blanches au temps $t + 1$. Ceci représente donc les configurations initiales et finales après un cycle de collision et transport.

Chaque site du réseau peut contenir de 0 à 6 particules ayant un vecteur vitesse pointant vers un site plus proche voisin. L'évolution de l'automate consiste en deux étapes : la collision et le transport. La figure II.2 montre quelques exemples de collisions possibles. Lorsque 2 ou plusieurs particules arrivent au même noeud, elles collisionnent. C'est-à-dire que l'état de sortie est tel qu'il respecte les invariants collisionnels : la masse et la quantité de mouvement. Comme ce modèle ne comporte qu'un seul module de vitesse, la conservation de l'énergie est équivalente à la conservation de la masse. Ensuite l'étape de transport est très simple, chaque particule se déplace vers un site voisin en fonction de son vecteur vitesse. Si on appelle $n_i(\mathbf{r}, t)$ le nombre de particules au noeud de coordonnées \mathbf{r} au temps t se déplaçant à la vitesse \mathbf{v}_i alors l'équation d'évolution de l'automate s'écrit simplement :

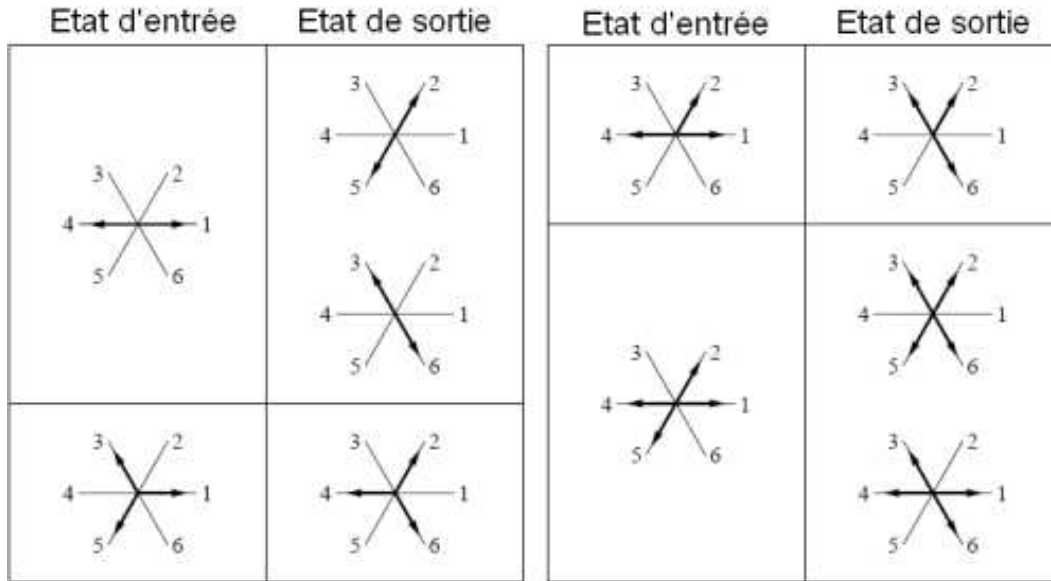


FIG. II.2: Exemples de quelques collisions possibles.

$$n_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{r}, t) + C_i(\{n_j\}) \quad (\text{II.1})$$

où $C_i(\{n_j\})$ représente le changement du nombre de particules $n_i(\mathbf{r}, t)$ par collision avec l'ensemble des particules $\{n_j\}$ au noeud \mathbf{r} . $n_i(\mathbf{r}, t)$ ne peut prendre que les valeurs 0 ou 1. Connaissant $n_i(\mathbf{r}, t)$, les variables hydrodynamiques locales telles que la masse volumique $\rho(\mathbf{r}, t)$ et la quantité de mouvement $\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ peuvent être évaluées par sommation du nombre de particules $n_i(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = m \sum_i n_i(\mathbf{r}, t) \quad (\text{II.2})$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = m \sum_i \mathbf{v}_i n_i(\mathbf{r}, t) \quad (\text{II.3})$$

où m est la masse d'une particule. Bien que ces types de modèle soient construits de façon heuristique, l'équation d'évolution (II.1) ressemble beaucoup à ce que pourrait être la discrétisation d'une équation cinétique de type Boltzmann puisque ce modèle décrit l'évolution d'un nombre de particules n_i se déplaçant à la vitesse v_i , et que l'équation contient un terme de transport et un terme collisionnel devant respecter des invariants. Par une procédure de prise de moyenne similaire à la procédure de Chapman-Enskog pour l'équation de Boltzmann, on peut démontrer que les variables hydrodynamiques locales obéissent aux équations suivantes (voir [16, 17] pour les

détails) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.4})$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (g(\rho) \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nu \nabla^2 (\rho \mathbf{u}) + \eta \nabla \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \quad (\text{II.5})$$

avec $p = \rho c_s^2 (1 - \frac{g(\rho)}{\delta x^2} \mathbf{u}^2)$. Nous reconnaissons l'équation de continuité et une équation très proche de l'équation de Navier-Stokes. Les automates cellulaires peuvent donc être utilisés comme une alternative à la résolution de Navier-Stokes. Comme par essence, ces méthodes sont discrètes, l'implémentation informatique est facile contrairement à la discrétisation de l'équation de Navier-Stokes. De plus, ce type de méthode se prête facilement à la parallélisation. Il est aussi possible de rendre compte d'écoulements plus complexes comme les milieux poreux par exemple ou des fluides binaires simplement en ajoutant une seconde équation d'évolution pour une autre espèce de particules. Cependant, bien que les automates cellulaires offrent de nombreux avantages par rapport à la résolution de Navier-Stokes, il y a aussi des inconvénients. De par la nature booléenne du nombre de particules n_i , les simulations sont intrinsèquement bruitées, ce qui oblige à un lissage des mesures par moyenne temporelle ou spatiale. Ensuite du fait du nombre fini de vitesses \mathbf{v}_i , les automates souffrent d'un manque d'invariance galiléenne. Ceci se traduit par le fait que $g(\rho) \neq 1$ dans l'équation de Navier-Stokes obtenue. Enfin, l'équation d'état n'est pas physique car elle dépend de \mathbf{u}^2 .

II.1.2 De Gaz-sur-Réseau à Boltzmann-sur-réseau

Pour pallier les défauts des automates cellulaires, les méthodes GsR ont évolué vers les méthodes BsR au travers d'une moyenne d'ensemble de l'équation d'évolution (II.1). McNamara et Zanetti [18] ont proposé de remplacer le nombre de particules n_i , de nature booléenne, par une variable réelle $f_i = \langle n_i \rangle$. Cette nouvelle variable f_i s'apparente de plus en plus à la fonction de distribution monoparticulaire de l'équation de Boltzmann (I.30). L'équation d'évolution de ce nouveau modèle s'écrit :

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{r}, t) + \mathcal{C}_i(\{f_j\}) \quad (\text{II.6})$$

De même, que f_i est introduit comme une moyenne d'ensemble de n_i , l'opérateur de collision est une moyenne de l'ancien opérateur de collision, soit $\mathcal{C}_i(\{f_j\}) = \langle \mathcal{C}_i(\{n_j\}) \rangle$. Bien que palliant certains inconvénients des premiers automates cellulaires, en particulier le bruit statistique, le coût de calcul de l'opérateur de collision est très important pour des applications pratiques. Par exemple pour un modèle 2D à 6 vitesses discrètes, l'opérateur de collision est une matrice de taille $2^6 \times 2^6$.

Pour réduire ce coût de calcul, Higuera et Jiménez [19] ont proposé de linéariser l'opérateur de collision autour de $f_i^{(0)}$ qui s'apparente à la distribution d'équilibre de f_i .

$$\mathcal{C}_i(\{f_j\}) \approx \frac{\partial \mathcal{C}_i(\{f_j\})}{\partial f_i} \Big|_{f_i^{(0)}} [f_i - f_i^{(0)}] \quad (\text{II.7})$$

Cette linéarisation de l'opérateur de collision permet de réduire la taille de la matrice à 6×6 .

II.1.2.1 Modèle BGK sur réseau

La similarité entre ce que pourrait être une discrétisation de l'équation de Boltzmann et les premières méthodes appelées Boltzmann-sur-réseau, a tout naturellement conduit à utiliser l'approximation BGK [10] (voir I.5.1) pour le terme collisionnel. Qian *et coll.* [20] et Chen *et coll.* [21] ont proposé d'introduire un temps de relaxation $\bar{\tau}$ et de poser un terme collisionnel de la forme :

$$\mathcal{C}_i(\{f_j\}) = -\frac{1}{\bar{\tau}} [f_i - f_i^{(eq)}] \quad (\text{II.8})$$

la fonction de distribution d'équilibre $f_i^{(eq)}$ ayant la forme suivante :

$$f_i^{(eq)} = \rho [1 + A(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u}_i) + B(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u}_i)^2 + C\mathbf{u}_i^2] \quad (\text{II.9})$$

où A , B et C sont déterminés en accord avec les lois de conservation. On remarque que la température n'apparaît pas dans cette fonction d'équilibre alors que la "vraie" fonction d'équilibre de Maxwell-Boltzmann dépend de la température. Ceci provient du fait que l'essentiel des premiers modèles BsR, tout comme les modèles GsR, était pensé pour l'étude d'écoulements de fluides isothermes.

A la limite macroscopique, et la limite où $\delta x \rightarrow 0$ et $\delta t \rightarrow 0$, une procédure similaire à Chapman-Enskog permet de retrouver les équations macroscopiques suivantes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{II.10})$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \nabla \cdot (\mathbf{u}) = -\nabla p + \rho \nu \nabla^2(\mathbf{u}) \quad (\text{II.11})$$

avec

$$p = c_s^2 \rho \quad (\text{II.12})$$

$$\nu = c_s^2 \left(\bar{\tau} - \frac{1}{2} \right) \delta t \quad (\text{II.13})$$

L'équation d'état est "plus physique" que dans le cas de GsR car elle ne dépend pas de \mathbf{u}^2 mais seulement de ρ , ce qui semble pertinent sous l'hypothèse d'un fluide isotherme. Dans les expressions de la pression et de la viscosité, c_s une constante qui dépend de la topologie du réseau et du jeu de vitesses discrètes. c_s est souvent interprétée comme la vitesse du son du fluide, et pourtant celle-ci dépend directement des caractéristiques du réseau. Nous reviendrons sur cette ambiguïté au paragraphe II.2.3.

Ce type de modèle, avec un terme collisionnel de type BGK, constitue le point de départ des méthodes BsR utilisées dans les années 90 et encore aujourd'hui. Ces modèles sont souvent présentés avec la dénomination D_dQ_n où d est la dimension du problème et n le nombre de vitesses discrètes. Les modèles les plus couramment utilisés sont $D2Q9$ en deux dimensions et $D3Q15$ et $D3Q19$ en trois dimensions. Pour exemple voici les détails du modèle $D2Q9$ de Qian *et coll.* [20] :

- L'équation d'évolution est :

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_i - f_i^{(eq)}] \quad (\text{II.14})$$

- La distribution d'équilibre a pour expression :

$$f_i^{eq} = t_i \rho \left[1 + \frac{\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}^2}{2c_s^2} \right] \text{ où } c_s = c/\sqrt{3} \text{ avec } c = \delta x/\delta t.$$

- Les vitesses discrètes \mathbf{v}_i et les poids t_i sont :

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} (0, 0) \\ (\pm c, 0) \\ (0, \pm c) \\ (\pm c, \pm c) \end{cases} \quad t_i = \begin{cases} 4/9 & i = 0 \\ 1/9 & i = 1 - 4 \\ 1/36 & i = 5 - 8 \end{cases} \quad (\text{II.15})$$

- Les champs macroscopiques ρ et \mathbf{u} s'obtiennent par sommation de f_i :

$$\rho = \sum_i f_i \quad (\text{II.16})$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{v}_i f_i \quad (\text{II.17})$$

II.2 Dérivation de Boltzmann-sur-réseau à partir de l'équation de Boltzmann

Comme on vient de le voir précédemment, la méthode BsR a été historiquement dérivée, à partir de modèles heuristiques d'automates cellulaires GsR, en s'inspirant de l'équation de Boltzmann et en particulier l'équation de Boltzmann-BGK. Et pourtant, il semble y avoir une parenté

plus forte que la seule inspiration. L'équation de Boltzmann est l'équation d'évolution de la fonction de distribution monoparticulaire $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ et BsR est un algorithme pour calculer l'évolution de ce qu'on a appelé la fonction de distribution $f_i(\mathbf{r}, t)$ de la vitesse discrète \mathbf{v}_i . Tout comme l'équation de Boltzmann, les schémas BsR présentent un terme de collision devant respecter des invariants collisionnels et un terme de transport. Comme pour l'équation de Boltzmann, il existe une procédure similaire à Chapman-Enskog permettant de retrouver les équations macroscopiques. Compte tenue de cette similarité apparente entre BsR et l'équation de Boltzmann, il était intéressant de tenter d'établir un lien formel entre les deux. Cette démonstration a été faite en 1997 par He and Luo [22, 23] pour certains schémas BsR. Ces auteurs ont montré que BsR peut être vu comme une discrétisation particulière dans l'espace des phases de l'équation de Boltzmann. Précédemment les valeurs calculées de la fonction de distribution discrète n'étaient pas supposées avoir un sens physique direct, à l'échelle mésoscopique, comme mesure de la distribution des vitesses. Il apparaît au contraire avec le travail de He et Luo, pour un ensemble de schémas parmi les plus employés dans la littérature BsR, que $f_i(\mathbf{r}, t)$ est directement exploitable. La démonstration correspondante donne une base théorique solide à BsR et en particulier ouvre la possibilité de résoudre l'équation de Boltzmann elle-même, à un ordre de précision donné, alors que précédemment ce type de méthodes était seulement utilisé comme une alternative à la résolution Navier-Stokes.

II.2.1 Discrétisation spatio-temporelle

Le point de départ de cette démonstration est l'équation de Boltzmann-BGK sans terme de force extérieure :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (\text{II.18})$$

avec $f^{eq} = \frac{\rho}{2\pi r T} \exp\left[-\frac{(\mathbf{v}-\mathbf{u})^2}{2rT}\right]$, la fonction de distribution d'équilibre en deux dimensions et τ le temps de relaxation. Formellement, la solution de cette équation peut s'écrire sous forme intégrale :

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v}, t + \delta t) = e^{-\delta t/\tau} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) + \frac{1}{\tau} e^{-\delta t/\tau} \int_0^{\delta t} e^{t'/\tau} f^{eq}(\mathbf{r} + \mathbf{v}t', \mathbf{v}, t + t') dt' \quad (\text{II.19})$$

Le premier terme de cette solution décrit tout simplement l'atténuation exponentielle du nombre de particules, de vitesse \mathbf{v} , qui étaient en \mathbf{r} au temps t et qui arrivent au temps $t + \delta t$ en $\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t$. Ce sont les particules qui ont échappé aux collisions et qui ont par conséquent leur vitesse \mathbf{v} de départ. Le second terme est le terme source : durant le trajet entre \mathbf{r} et $\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t$, des particules de vitesse $\mathbf{v}' \neq \mathbf{v}$ acquièrent une vitesse \mathbf{v} suite à une collision.

En faisant un développement de Taylor au premier ordre de l'exponentielle $e^{-\delta t/\tau} \approx 1 - \delta t/\tau$ et en faisant l'hypothèse que f^{eq} ne varie pas trop entre t et $t + \delta t$ de façon à pouvoir approximer

l'intégrale par $\int_0^{\delta t} e^{t'/\tau} f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) dt'$, nous obtenons :

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}\delta t, \mathbf{v}, t + \delta t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - \frac{\delta t}{\tau} [f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] \quad (\text{II.20})$$

Nous retrouvons ainsi, l'équation d'évolution du modèle BsR, avec le terme collisionnel BGK, en identifiant $\bar{\tau} = \frac{\tau}{\delta t}$. Pour autant, l'espace des vitesses n'est pas encore discrétisé.

II.2.2 Modèle de vitesses discrètes

Le fait de discrétiser l'espace des vitesses va nous permettre de résoudre l'équation de Boltzmann, non-pas de façon exacte, mais à un ordre près. La difficulté est de savoir quantifier l'erreur, et de déterminer à quel ordre il est pertinent de s'arrêter en fonction des besoins affichés. Au chapitre I, la procédure de Chapman-Enskog nous a montré que le développement à l'ordre 1 de l'équation de Boltzmann est équivalent à la résolution du système d'équations macroscopiques Navier-Stokes-Fourier. Etant donné que les premières versions de BsR étaient utilisées comme une alternative à la résolution de Navier-Stokes pour un fluide isotherme, on peut décider de déterminer un jeu de vitesses discrètes tel que la résolution de l'équation de Boltzmann discrétisée corresponde à un niveau de précision comparable à celui de l'approximation { Navier-Stokes fluide isotherme }. Nous partons donc sur la base d'un fluide isotherme en rappelant que sous cette hypothèse, l'approximation conduisant à Navier-Stokes est $f = f^{eq} + f^{(1)}$ avec (sous l'approximation BGK) :

$$f^{(1)} = -\tau \left\{ \frac{1}{rT} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \partial_\beta u_\alpha - \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} f^{(eq)} \quad (\text{II.21})$$

soit

$$f^{(1)} = P_2(\mathbf{v}) f^{(eq)} \quad (\text{II.22})$$

avec

$$P_2(\mathbf{v}) = -\tau \left\{ \frac{1}{rT} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \partial_\beta u_\alpha - \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} \quad (\text{II.23})$$

Le point important à retenir est que $f^{(1)}$ s'écrit comme le produit de f^{eq} par un polynôme d'ordre 2 en \mathbf{v} , $P_2(\mathbf{v})$. Pour cette expression de f , le jeu de vitesses discrètes \mathbf{v}_i et les poids de quadrature ω_i utilisés doivent donc assurer les deux premiers moments de f , la masse volumique ρ et la vitesse macroscopique \mathbf{u} . Doivent aussi être exacts, les flux de ces moments. Donc le tenseur des pressions

\underline{P} doit être exact. Autrement dit, nous devons trouver une quadrature telle que :

$$\rho = \int f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \sum_i \omega_i (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = \rho \quad (\text{II.24})$$

$$\rho \mathbf{u} = \int \mathbf{v} f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \sum_i \omega_i \mathbf{v}_i (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = \rho \mathbf{u} \quad (\text{II.25})$$

$$P_{\alpha\beta} = \int v_\alpha v_\beta f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \sum_i \omega_i v_{i\alpha} v_{i\beta} (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = P_{\alpha\beta} \quad (\text{II.26})$$

$P_{\alpha\beta}$ fait apparaître le terme $v_\alpha v_\beta$ qui est un carré de vitesse et $f^{(1)}$ est le produit de f^{eq} par un polynôme d'ordre 2 en \mathbf{v} . Trouver une quadrature capable d'évaluer de façon exacte ρ , $\rho \mathbf{u}$ et $P_{\alpha\beta}$ revient donc à trouver une quadrature permettant d'évaluer de façon exacte les moments d'ordre 4 de f^{eq} . Une telle quadrature assurerait une résolution de l'équation de Boltzmann-BGK à un ordre équivalent à la résolution de l'équation de Navier-Stokes pour un fluide isotherme. Cependant, le modèle de vitesses discrètes qui serait ainsi obtenu, ferait apparaître des vitesses discrètes dépendantes du champ de vitesse macroscopique \mathbf{u} car f^{eq} dépend de \mathbf{u} . Pour simplifier l'algorithme, on cherche à obtenir un jeu de vitesses discrètes unique dans l'espace et le temps. Pour cela on effectue un développement supplémentaire.

Pour un écoulement à faible nombre de Mach, soit $u \ll \sqrt{rT}$, la fonction de distribution d'équilibre f^{eq} peut en effet se développer ainsi :

$$f^{eq} \approx \frac{\rho}{2\pi rT} \exp\left[-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT}\right] \left\{ 1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{rT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(rT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2rT} \right\} \quad (\text{II.27})$$

$$f^{eq} \approx P_2(\mathbf{v}) \exp\left[-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT}\right] \quad (\text{II.28})$$

% Ce développement permet d'écrire la distribution d'équilibre f^{eq} comme le produit d'un polynôme d'ordre 2 en \mathbf{v} par une gaussienne centrée en 0. Si on récapitule, compte tenue de l'expression de $f^{(1)}$ et du développement à faible nombre de Mach, $f^{(1)}$ peut s'écrire comme le produit d'une gaussienne centrée en 0 par un polynôme d'ordre 4 en \mathbf{v} .

$$f^{(1)} = P_4(\mathbf{v}) \exp\left[-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT}\right] \quad (\text{II.29})$$

Au final calculer de façon exacte ρ , $\rho \mathbf{u}$ et $P_{\alpha\beta}$ pour $f = f^{eq} + f^{(1)}$, revient à calculer de façon exacte les moments d'ordre 6 d'une gaussienne centrée en 0. Toutefois, l'ordre peut être abaissé de 6 à 5 car, compte tenue de l'hypothèse d'un écoulement à faible nombre de Mach, nous avons $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$, ce qui a pour conséquence que $f^{(1)}$ s'écrit non plus en fonction d'un polynôme d'ordre 2 en \mathbf{v} mais simplement d'un polynôme d'ordre 1. Nous devons donc trouver une quadrature pour

évaluer ce type d'intégrale :

$$I_n = \sum_i \omega_i P_n(\mathbf{v}_i) \exp \left[-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT} \right] = \int P_n(\mathbf{v}) \exp \left[-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT} \right] d\mathbf{v} \quad (\text{II.30})$$

avec $n \leq 5$. Pour ceci nous disposons des quadratures de Gauss-Hermite [24]. Dans cette famille de quadratures, pour calculer les moments de façon exacte jusqu'à l'ordre n , il faut une quadrature d'ordre k telle que $n = 2k - 1$. C'est-à-dire que nous avons ici besoin d'une quadrature d'ordre $k = 3$. Ceci signifie qu'il suffit d'avoir en coordonnées cartésiennes, 3 valeurs discrètes pour chaque coordonnée de vitesse, c'est-à-dire 9 vitesses discrètes en dimension 2. Pour l'intégrale suivante :

$$\int P_n(x) e^{-x^2} dx = \sum_i W_i P_n(x_i) \quad (\text{II.31})$$

d'après la théorie de Gauss-Hermite, les 3 abscisses discrètes x_i sont les 3 racines du polynôme d'Hermite $H_3(x)$ et les poids correspondants ont pour expressions :

$$W_i = \frac{2^{3+1} 3! \sqrt{\pi}}{[H'_3(x_i)]} \quad (\text{II.32})$$

En identifiant, pour notre application, nous trouvons que les 3 valeurs discrètes de chaque coordonnée de vitesse sont $-c, 0$ et c , avec $c = \sqrt{3rT}$. Ainsi, en dimension 2 $\mathbf{v}_i = v_{ix}\mathbf{e}_x + v_{iy}\mathbf{e}_y$ et les composantes v_{ix} et v_{iy} appartiennent à l'ensemble $\{-c, 0, c\}$. Les poids de quadrature sont alors simplement $\omega_i = W_{ix} e^{\frac{v_{ix}^2}{2rT}} W_{iy} e^{\frac{v_{iy}^2}{2rT}}$. Ainsi les 9 vecteurs vitesses discrètes (Fig. II.3) et leurs poids correspondants sont :

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} (0, 0) \\ (\pm c, 0) \\ (\pm c, \pm c) \end{cases} \quad \omega_i = \begin{cases} W_0^2 & i = 0 \\ W_0 W_1 e^{\frac{c^2}{2rT}} & i = 1 - 4 \\ W_1^2 e^{\frac{2c^2}{2rT}} & i = 5 - 8 \end{cases} \quad (\text{II.33})$$

Cette procédure de discrétisation de l'équation de Boltzmann-BGK aboutit exactement au modèle Boltzmann-sur-réseau $D2Q9$ dérivé de façon plus heuristique auparavant (paragraphe II.1.2.1) à condition d'identifier la pseudo-fonction de distribution f_i du modèle heuristique au produit de la fonction de distribution par le poids de quadrature $\omega_i f_i$ et en remarquant que $t_i = \frac{W_{ix} W_{iy}}{2\pi c_s^2}$ avec $c_s = \sqrt{rT}$.

L'intérêt de cette démonstration n'est pas seulement de montrer que certains modèles BsR correspondent à une discrétisation particulière de l'équation de Boltzmann. Il est intéressant de voir que la construction du jeu de vitesses discrètes s'est faite en s'appuyant sur la procédure de Chapman-Enskog à l'ordre 1. Ici l'ordre 1 a été choisi, car le

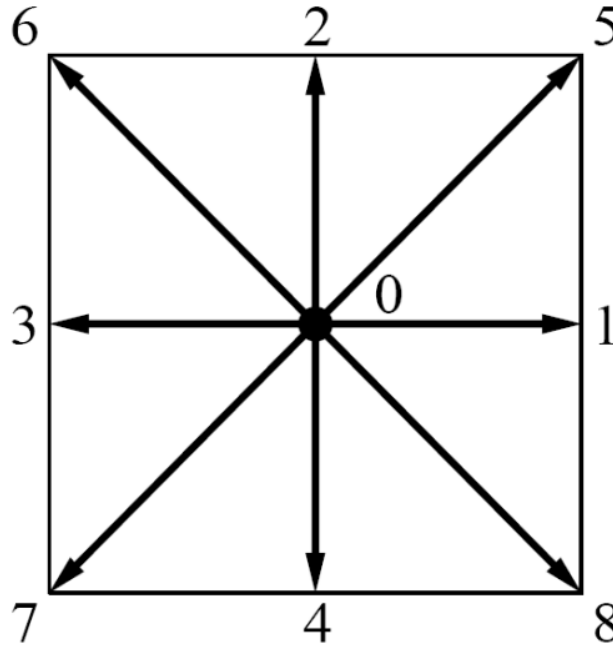


FIG. II.3: Vitesses discrètes du modèle $D2Q9$.

but était d'atteindre le même niveau de précision que celui des équations macroscopiques (Navier-Stokes). Mais dans les cas où il est nécessaire d'aller plus loin dans le développement de Chapman-Enskog, il est possible d'appliquer la même procédure pour déterminer l'ordre de quadrature et le nombre de vitesses discrètes nécessaires. Par exemple, dans des situations hors d'équilibre où Navier-Stokes n'est plus valide mais où l'équation de Burnett est pertinente. L'équation de Burnett correspond à l'ordre 2 du développement de Chapman-Enskog [12]. Alors il est possible de dériver un modèle BsR qui sera au moins aussi précis que l'équation de Burnett. De façon plus générale, les méthodes BsR obtenues par discrétisation de l'équation de Boltzmann peuvent donc être incluses dans la littérature des "modèles à vitesses discrètes" pour la résolution numérique des équations cinétiques [25, 26, 27].

II.2.3 Remarques concernant la mise en œuvre

Une des spécificités de BsR est le lien entre le pas d'espace δx et le pas de temps δt , soit $\delta x = c\delta t$. Ceci permet le "saut" des particules de noeud en noeud. D'après le développement de Chapman-Enskog pour l'équation de Boltzmann-BGK, la viscosité du fluide est liée au temps de relaxation par la relation $\nu = rT\tau$. Et pour le schéma BsR, le développement de Chapman-Enskog

sur réseau (voir Appendice F) aboutit à la relation $\nu = rT(\tau - 1/2\delta t)$, alors que nous venons de démontrer que certains schémas BsR correspondent à une forme discrétisée de l'équation Boltzmann-BGK. En fait, le facteur correctif $-1/2\delta t$ vient de la discrétisation spatio-temporelle. On peut donc parler de viscosité numérique. Cette viscosité numérique a pour conséquence que pour des simulations réalistes, le vrai temps de relaxation du fluide n'est jamais utilisé directement. Il est ajusté, en tenant compte du terme $-1/2\delta t$, afin que la viscosité résultante corresponde à la viscosité du fluide simulé. Le temps de relaxation ajusté est donc $\tilde{\tau} = \tau + 1/2\delta t$ soit également $\tilde{\tau} = \frac{\nu}{rT} + 1/2\delta t$. Un point important également est que pour des raisons de stabilité numérique, le pas de temps doit être tel que $\delta t < 2\tau$. Le plus courant est de prendre $\delta t = \tilde{\tau}$ soit $\delta t = \tau + 1/2\delta t$ ce qui conduit à $\delta t = 2\tau$ ou encore en terme de viscosité $\delta t = \frac{2\nu}{rT}$. Prenons l'exemple de l'air à 293 K de constante massique $r = R/M \approx 287 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ et de viscosité $\nu \approx 10^{-6} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$. Cela conduit à un pas de temps $\delta t = 2.38 \cdot 10^{-11} \text{ s}$, $c = 502.3 \text{ m.s}^{-1}$ et donc un pas d'espace $\delta x = c\delta t = 1.2 \cdot 10^{-8} \text{ m}$. Ces valeurs de pas de temps et d'espace sont nécessaires si l'on veut résoudre l'équation de Boltzmann-BGK sous-jacente au modèle BsR. Cependant, elles sont souvent inappropriées lorsque l'objectif n'est pas la résolution du modèle mésoscopique mais la détermination des champs macroscopiques ρ et \mathbf{u} . Il est possible de mener de telles simulations avec des pas d'espace et de temps plus appropriés. En effet, il faut se rappeler que le modèle BsR précédemment dérivé correspond à une résolution de l'équation Boltzmann-BGK compatible à l'échelle macroscopique avec la résolution de l'équation de Navier-Stokes pour un écoulement isotherme. Or pour un tel écoulement la seule caractéristique du fluide est la viscosité. Dans ces conditions, l'écoulement ne dépend pas de la température ni de la constante massique du fluide. On peut donc jouer librement sur ces grandeurs de façon à modifier les contraintes de discrétisations spatiale et temporelle. Dans le cas $\delta t = \tilde{\tau}$ les contraintes se résument à $\delta x = c\delta t = \sqrt{3rT}\delta t$ et $\delta t = 2\tau = \frac{2\nu}{rT}$ soit encore $\delta t = \frac{1}{6} \frac{\delta x^2}{\nu}$ et $T = \frac{1}{3} \frac{\delta x^2}{r\delta t^2}$. Concrètement, on choisi donc un pas d'espace, par exemple $\delta x = 10^{-3} \text{ m}$ et on détermine la valeur de température et le pas de temps assurant la bonne valeur de viscosité, ce qui nous donne ici $T = 4.18 \cdot 10^{-8} \text{ K}$ et $\delta t = 0.1667 \text{ s}$. On voit donc que lorsque l'objectif est d'utiliser BsR comme une alternative à la résolution de Navier-Stokes, il est possible d'augmenter les pas de temps et d'espace par la résolution du modèle mésoscopique d'un autre fluide (temps de relaxation τ et température différents), ce fluide se traduisant par le même écoulement à l'échelle macroscopique (champs de masse volumique ρ de vitesse \mathbf{u}).

II.2.4 Illustration de la méthode Boltzmann-sur-Réseau

Afin d'illustrer les possibilités de la méthode BsR pour les écoulements isothermes, nous présentons des résultats de simulations numériques effectuées par M. Clifton dans le cadre d'un projet

de recherche sur l'évaluation de la résistance hydraulique de milieux poreux par la méthode BsR [28]. Ces simulations ont permis d'évaluer numériquement la résistance hydraulique d'un empilement régulier de sphères de rayon a (cf. Fig. II.4).

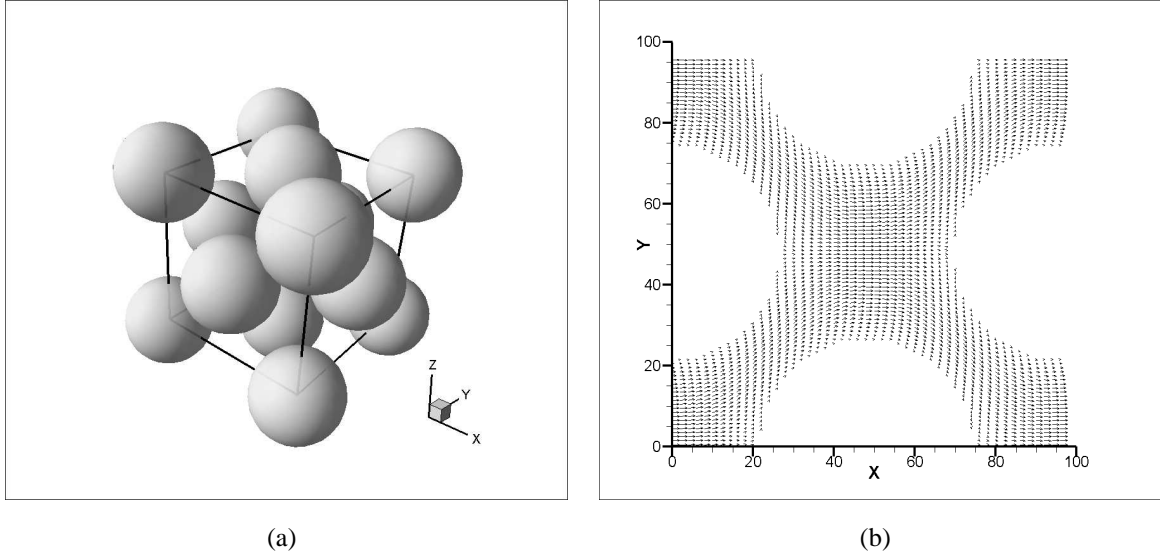


FIG. II.4: (a) Empilement de sphères arrangées dans une configuration cubique face centrée. Le cube représente le domaine de simulation. (b). Illustration d'un écoulement obtenu par simulation BsR dans un plan de l'empilement de sphères.

Les figures II.5.a et II.5.b présentent des résultats de simulations sous la forme d'un coefficient K_{ZH} , introduit par Zick et Homsy [29], et qui représente le rapport entre la force de traînée subie par une sphère au sein de l'empilement et la force exercée sur une sphère isolée. Un premier jeu de simulations a été effectué avec un modèle BsR traditionnel $D3Q19$, un terme collisionnel BGK et des conditions aux limites de type rebond simple (SBB). D'autres simulations ont été effectuées avec un terme collisionnel à multiple temps de relaxation (MRT [30]), des conditions aux limites SBB et avec des conditions aux limites plus évoluées décrites par Bouzidi *et coll.* [31] (LIBB). Les conditions de simulations sont : un maillage de 128^3 , un pas d'espace $\delta x = 1$, un pas de temps $\delta t = 1$ et un temps de collision $\bar{\tau} = 1$. Ces résultats ont été obtenus en mesurant la vitesse de l'écoulement lorsqu'une différence de pression Δp est appliquée entre les deux faces de l'empilement séparées par une distance L . Ceci a permis de remonter au coefficient K_{ZH} par la loi de Darcy qui peut s'exprimer sous la forme :

$$\mathbf{u} = -\frac{2}{9} \frac{a^2}{\phi K_{ZH}} \frac{\Delta p}{\mu L} \quad (\text{II.34})$$

où μ est la viscosité dynamique du fluide et ϕ est la fraction volumique de solide.

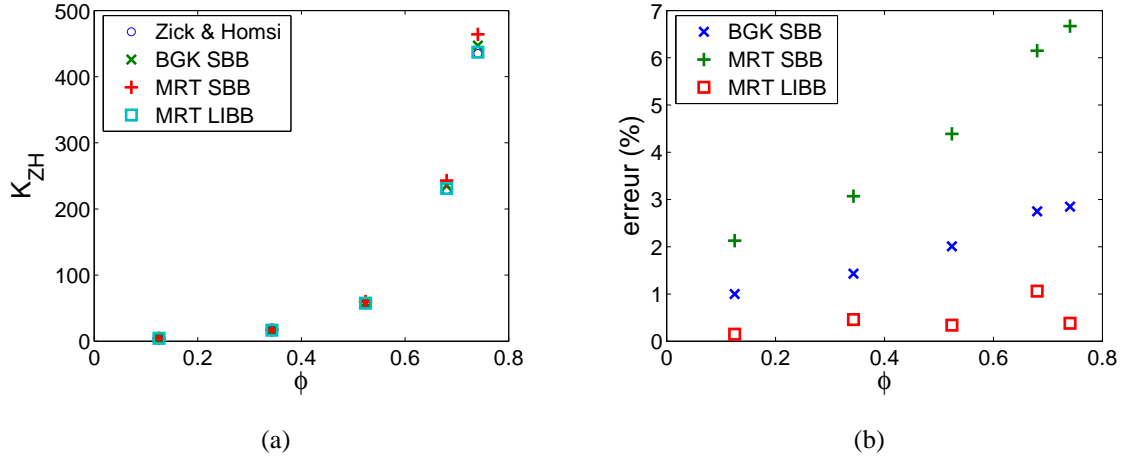


FIG. II.5: (a) Coefficient K_{ZH} en fonction de la fraction volumique ϕ . Sont représentés les résultats semi-analytiques de Zick et Homsi ainsi que les résultats de simulations BsR effectuées avec les termes collisionnels BGK et MRT et avec les conditions aux limites SBB ou LIBB. (b). Cette figure représente les erreurs relatives du coefficient K_{ZH} obtenu par les simulations par rapport aux résultats de Zick et Homsi.

Ce type de configuration est typique de ce que nous cherchons à obtenir à terme en ce qui concerne la complexité géométrique, mais cette fois-ci en présence de transitions de phase et d'effets thermiques.

II.3 BsR pour les écoulements anisothermes

Jusqu'à présent, nous avons présenté la méthode BsR comme une méthode numérique pour résoudre les écoulements de fluides considérés comme isothermes. Nous allons maintenant faire une brève présentation des modèles BsR de la littérature permettant de résoudre les écoulements de fluides anisothermes. Puis nous présenterons le modèle proposé dans ce travail de thèse qui s'appuie sur une extension de la démonstration de He et Luo à la section II.2, et qui est donc un modèle BsR résultant d'une stricte discrétisation de l'équation de Boltzmann.

II.3.1 Modèles existants

Plusieurs tentatives de modèles BsR thermiques ont été faites depuis les débuts de cette technique. Ces différentes propositions peuvent être classifiées en trois catégories :

- 1 modèle BsR (pour la résolution des champs de ρ et \mathbf{u}) \oplus 1 modèle macroscopique (pour la résolution du champ de T)
- 2 modèles BsR (1 modèle BsR pour la résolution des champs de ρ et \mathbf{u} \oplus 1 modèle BsR pour la résolution du champ de T)
- 1 modèle BsR (pour la résolution simultanée des champs de ρ , \mathbf{u} et T)

Les modèles de la première catégorie sont dits hybrides [32] car ils font appel à un schéma BsR traditionnel pour la résolution du champ de masse volumique (ou de pression) et du champ de vitesse macroscopique auquel on ajoute une équation macroscopique de conservation de l'énergie résolue par des méthodes numériques classiques de type différences finies.

Les modèles de la seconde catégorie utilisent également un modèle BsR traditionnel pour la résolution du champ de masse volumique et du champ de vitesse macroscopique auquel on ajoute un autre modèle de type BsR. Ce second modèle est construit de telle sorte qu'à la limite macroscopique, le premier moment de la nouvelle fonction de distribution soit la température et l'équation macroscopique correspondante soit l'équation de conservation de l'énergie. Dans cette catégorie, on peut citer l'approche scalaire-passif proposée par Shan [33], pour laquelle la seconde fonction de distribution est telle que son premier moment est un scalaire qui satisfait à une équation macroscopique de type convection-diffusion. Dans le modèle de Shan ce scalaire est la température mais il est à noter qu'originellement les approches scalaire-passif ont été développées pour les écoulements à plusieurs phases pour lesquels le scalaire était la densité d'une seconde espèce. Parmi les modèles à deux fonctions de distribution, citons également la proposition de He *et coll.* [34]. Cette approche donne une base physique à la seconde fonction de distribution. He *et coll.* définissent la seconde fonction de distribution g comme la fonction de distribution d'énergie interne $g = \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2} f$. Par définition, la température correspond au premier moment de cette nouvelle fonction de distribution g . Ce modèle n'est pas une simple reformulation de l'équation de Boltzmann-BGK par un système équivalent de deux équations couplées car les auteurs attribuent un temps de collision différents aux deux équations. Le temps de collision de l'équation d'évolution de g permet d'ajuster la conductivité thermique du fluide indépendamment du temps de collision de la première équation d'évolution qui est lié à la viscosité. Dans le cas où les temps de collision ont la même valeur, ce modèle fait partie de la troisième catégorie parce que l'énergie interne correspond bien au second moment de la fonction de distribution f (ce qui n'est plus le cas

lorsque les temps de collision sont différents).

La troisième catégorie fait référence aux modèles conservant l'énergie. On entend par là des modèles à une seule fonction de distribution pour lesquels la température et le flux de chaleur sont respectivement les moments d'ordre 2 et 3 de la fonction de distribution. En général, ce type de modèle requiert un nombre de vitesses discrètes plus important [35, 36, 37]. Pour des raisons pas encore bien comprises, ce type de modèles présente des instabilités numériques [35, 36].

Dans ce travail de thèse, nous proposons un modèle conservant l'énergie à une seule fonction de distribution. La construction du modèle de vitesses discrètes peut être vue comme une extension possible du travail de He et Luo sur la démonstration du lien formel entre l'équation de Boltzmann et la méthode BsR. A notre connaissance, cette démarche n'a jamais été explorée auparavant. Le modèle résultant ne présente pas de problèmes particuliers d'instabilités numériques. La description qui suit est reprise de l'article [38] "Energy-conserving lattice Boltzmann thermal model in two dimensions" (*J. Stat. Phys.* **121**, 119 (2005)) qui est joint en annexe B. Comme pour He et Luo [22, 23], le point de départ est l'équation de Boltzmann-BGK :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla(f) = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (\text{II.35})$$

II.3.2 Modèle de vitesses discrètes

Nous rappelons que la démonstration de He et Luo est basée sur la discrétisation de l'espace des vitesses par la quadrature de Gauss-Hermite. L'utilisation de cette quadrature est adaptée car différents développements et approximations (Chapman-Enskog à l'ordre 1, approximation faible nombre de Mach) permettent d'écrire, à un ordre de précision donné, la fonction de distribution f comme le produit d'une gaussienne par un polynôme de \mathbf{v} . Dans le cas isotherme, l'ordre de la quadrature requis était tel que la masse volumique ρ , la vitesse macroscopique \mathbf{u} et le tenseur des pressions \underline{P} soient évalués de façon exacte pour $f = f^{eq} + f^{(1)}$. Reprenons ces étapes dans le cas non-isotherme.

Dans le cas non-isotherme, la quadrature doit être capable d'évaluer les moments de f jusqu'à

l'ordre 3 qui correspond au flux de chaleur :

$$\begin{aligned}
 \rho &= \int f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \sum_i \omega_i (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = \rho \\
 \rho \mathbf{u} &= \int \mathbf{v} f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \sum_i \omega_i \mathbf{v}_i (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = \rho \mathbf{u} \\
 P_{\alpha\beta} &= \int v_\alpha v_\beta f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \sum_i \omega_i v_{i\alpha} v_{i\beta} (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = P_{\alpha\beta} \\
 \frac{D}{2} \rho r T &= \frac{1}{2} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_i \omega_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2 (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = \frac{D}{2} \rho r T \\
 \mathbf{J}_Q &= \frac{1}{2} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u})^3 f \, d\mathbf{v} \Rightarrow \frac{1}{2} \sum_i \omega_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^3 (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) = \mathbf{J}_Q
 \end{aligned}$$

avec $f = f^{eq} + f^{(1)}$ tel que :

$$f^{(1)} = -\tau \left\{ \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{3}{2} \right] (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \right. \quad (\text{II.36})$$

$$\left. + \frac{1}{rT} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \partial_\beta u_\alpha - \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} f^{(eq)} \quad (\text{II.37})$$

soit $f^{(1)} = P_3(\mathbf{v}) f^{(eq)}$ avec :

$$P_3(\mathbf{v}) = -\tau \left\{ \frac{1}{T} \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT} - \frac{3}{2} \right] (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T \right. \quad (\text{II.38})$$

$$\left. + \frac{1}{rT} (v_\alpha - u_\alpha)(v_\beta - u_\beta) \partial_\beta u_\alpha - \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{rT} \nabla \cdot \mathbf{u} \right\} \quad (\text{II.39})$$

P_3 est un polynôme d'ordre 3 en \mathbf{v} et $f^{(1)}$ s'écrit comme le produit de la fonction d'équilibre f^{eq} par un polynôme d'ordre 3 en \mathbf{v} . Comme précédemment il est possible d'arrêter le développement à cette étape et d'utiliser une quadrature de Gauss-Hermite assurant une évaluation exacte des moments de f^{eq} jusqu'à l'ordre 6. Comme pour le cas isotherme, les vitesses discrètes résultantes seraient alors dépendantes du champ de vitesse macroscopique \mathbf{u} , mais elles seraient également dépendantes du champ de température T car f^{eq} dépend à la fois de \mathbf{u} et de T . Ainsi, pour rendre unique le jeu de vitesses discrètes dans l'espace et dans le temps, il faut développer la fonction d'équilibre pour un faible nombre de Mach (comme au paragraphe II.2.2) et faire également un développement autour d'une température de référence que nous noterons T_0 , la notation θ étant utilisée pour représenter le champ $\theta = T - T_0$ des écarts à la référence.

$$\begin{aligned}
f^{eq} &= \frac{\rho}{(2\pi rT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2rT}\right) \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi rT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{rT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(rT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2rT}\right] \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi rT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2r(T_0 + \theta)}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{rT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(rT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2rT}\right] \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi rT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT_0}\right) \exp\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2rT_0} \frac{\theta}{T_0}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{rT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(rT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2rT}\right] \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi rT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT_0}\right) \cdot \left(1 + \frac{\mathbf{v}^2}{2rT_0} \frac{\theta}{T_0}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{rT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(rT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2rT}\right] \\
&\approx \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2rT_0}\right) \cdot P_4(\mathbf{v})
\end{aligned} \tag{II.40}$$

Ce développement permet d'écrire, dans le cas non-isotherme, la fonction d'équilibre comme le produit d'une gaussienne centrée en 0 par un polynôme d'ordre 4 en \mathbf{v} . En reportant ce développement dans l'expression de $f^{(1)}$ on obtient le produit d'une gaussienne centrée en 0 par un polynôme en \mathbf{v} d'ordre 7. Donc au final, pour évaluer les moments de f jusqu'à l'ordre 3, an accord avec l'ordre 1 du développement de Chapman-Enskog la quadrature de Gauss-Hermite doit évaluer de façon exacte les moments d'ordre 10 d'une gaussienne centrée en 0. Cette exigence requiert une quadrature d'ordre 6, c'est à dire 6 abscisses discrètes par dimension, à comparer aux 3 abscisses discrètes par dimension en isotherme. Ces 6 abscisses sont les 6 racines du polynôme de Hermite $H_6(v/\sqrt{2rT_0})$. Les 6 valeurs discrètes de chaque coordonnée de vitesse sont $-c_3, -c_2, -c_1, c_1, c_2$ et c_3 avec $c_1 = 0.61670659\sqrt{rT_0}$, $c_2 = 1.88917588\sqrt{rT_0}$ et $c_3 = 3.32425743\sqrt{rT_0}$. Ainsi, en dimension 2, les 36 vecteurs vitesses discrètes et leur poids correspondant sont les suivant :

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} (\pm c_1, \pm c_1) \\ (\pm c_1, \pm c_2)(\pm c_2, \pm c_1) \\ (\pm c_1, \pm c_3)(\pm c_1, \pm c_3) \\ (\pm c_2, \pm c_2) \\ (\pm c_2, \pm c_3)(\pm c_3, \pm c_2) \\ (\pm c_3, \pm c_3) \end{cases} \quad \omega_i = \begin{cases} W_1^2 \\ W_1 W_2 \\ W_1 W_3 \\ W_2^2 \\ W_2 W_3 \\ W_3^2 \end{cases} \tag{II.41}$$

avec $W_1 = 1.23320599$, $W_2 = 1.31647854$ et $W_3 = 1.59977183$.

II.3.3 Modèle approché

En étendant la démarche de He et Luo, nous venons de montrer qu'il faut 36 vitesses discrètes en 2 dimensions et 216 en 3 dimensions. Il faut noter qu'une quadrature de Gauss-Hermite d'ordre 6 assure l'évaluation exacte des moments d'ordre 11 d'une gaussienne, ce qui est 1 ordre supplémentaire par rapport à l'ordre requis. Pour autant une quadrature d'ordre 5 ne suffit pas car elle n'assure pas l'exactitude des moments de la gaussienne que jusqu'à l'ordre 9. Bien qu'une quadrature d'ordre 5 ne soit pas rigoureusement adéquate pour les applications anisothermes, nous proposons de l'utiliser afin de réduire le nombre de vitesses discrètes. Leur nombre est ainsi réduit à 25 en 2 dimensions et 125 en 3 dimensions. Cette perte de précision (le calcul du 10^{ème} moment sera moins précis mais pas totalement erroné) s'accompagne bien sûr d'un gain non-négligeable en terme de taille mémoire. Ayant fait ce choix, nous avons observé qu'il était possible d'améliorer cette quadrature réduite en recalculant les poids de la quadrature en chaque noeud et à chaque pas de temps en fonction de la température locale. Concrètement une température de référence T_0 est choisie afin de déterminer un jeu de 5 valeurs discrètes $\{v_i(T_0)\}$ pour chaque coordonnée de vitesse. Ces 5 valeurs sont fixes et uniques pour tout l'espace et toute la durée de la simulation : $\{-c_2, -c_1, 0, c_1, c_2\}$ avec $c_1 = \sqrt{(5 - \sqrt{10})rT_0}$ et $c_2 = \sqrt{(5 + \sqrt{10})rT_0}$. Les poids de quadrature ne sont par contre pas fixes mais sont recalculés en fonction de la température locale T à chaque pas de temps. Pour chaque coordonnée de vitesses les poids $W_i(T)$ sont déterminés de façon à assurer le calcul des moments suivant :

$$\int e^{-\frac{v^2}{2rT}} dv = \sum W_i(T) \quad (\text{II.42})$$

$$\int v^2 e^{-\frac{v^2}{2rT}} dv = \sum W_i(T) v_i^2(T_0) \quad (\text{II.43})$$

$$\int v^4 e^{-\frac{v^2}{2rT}} dv = \sum W_i(T) v_i^4(T_0) \quad (\text{II.44})$$

La solution de ce système conduit aux expressions des poids en fonction de la température locale du noeud considéré :

$$W_0(T) = K_0 - \frac{(c_1^2 + c_2^2) K_2 - K_4}{c_1^2 c_2^2} \quad (\text{II.45})$$

$$W_1(T) = \frac{c_2^2 K_2 - K_4}{2c_1^2 (c_2^2 - c_1^2)} \quad (\text{II.46})$$

$$W_2(T) = \frac{K_4 - c_1^2 K_2}{2c_2^2 (c_2^2 - c_1^2)} \quad (\text{II.47})$$

avec $K_0 = \sqrt{2\pi rT}$, $K_2 = rT K_0$ et $K_4 = 3 (rT)^2 K_0$. Comme au paragraphe II.2.2, on applique ce schéma aux deux composantes v_{ix} et v_{iy} et les poids de quadrature sont tout simplement $\omega_i(T) =$

$W_{ix}(T)e^{\frac{v_{ix}^2}{2rT}}W_{iy}(T)e^{\frac{v_{iy}^2}{2rT}}$. En résumé les 25 vecteurs vitesses discrètes et leurs poids correspondant sont les suivant :

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} (0, 0) \\ (\pm c_1, 0)(0, \pm c_1) \\ (\pm c_1, \pm c_1) \\ (\pm c_2, 0)(0, \pm c_2) \\ (\pm c_2, \pm c_2) \\ (\pm c_1, \pm c_2) \\ (\pm c_2, \pm c_1) \end{cases} \quad \omega_i(T) = \begin{cases} W_0(T)^2 \\ W_0(T) W_1(T) e^{\frac{c_1^2}{2rT}} \\ W_1(T)^2 e^{\frac{2c_1^2}{2rT}} \\ W_0(T) W_2(T) e^{\frac{c_2^2}{2rT}} \\ W_2(T)^2 e^{\frac{2c_1^2}{2rT}} \\ W_1(T) W_2(T) e^{\frac{c_1^2}{2rT}} e^{\frac{c_2^2}{2rT}} \\ W_1(T) W_2(T) e^{\frac{c_1^2}{2rT}} e^{\frac{c_2^2}{2rT}} \end{cases} \quad (\text{II.48})$$

Le niveau de précision assuré par cette quadrature réduite pour la simulation d'écoulements anisothermes ne peut être évalué que par des tests numériques puisque la procédure de discrétisation employée (ordre 1 de Chapman-Enskog, faible nombre de Mach $u \ll \sqrt{rT}$ et faible différence de température $T = T_0 + \theta$) n'est pas menée rigoureusement jusqu'à son terme. De tels tests numériques seront détaillés au paragraphe II.3.6 après une discussion concernant la discrétisation spatio-temporelle (paragraphe II.3.4) et une analyse qualitative de la pertinence de la répartition de notre jeu de vitesses discrètes dans l'espace des vitesses (paragraphe II.3.5).

II.3.4 Discrétisation spatio-temporelle

En ce qui concerne la discrétisation spatio-temporelle de ce type de modèle, dit "multispeed", il n'est pas possible d'appliquer les stratégies classiquement employées pour les schémas BsR isothermes pour lesquels le pas d'espace et le pas de temps sont liés par le module de vitesse par la relation $\delta x = c\delta t$. En effet, pour les modèles "multispeed" tel que celui que nous proposons, il y a plusieurs modules de vitesses non-nuls et leur rapport est non-entier. Par exemple pour la quadrature d'ordre 5 que nous utilisons, si nous avons $c_2 = 2 c_1$, il serait possible de faire sauter les particules de noeud en noeud, mais ce n'est pas le cas. Donc pour la discrétisation spatio-temporelle de l'équation de Boltzmann, nous allons utiliser des schémas aux différences finies [39, 37]. Nous rappelons que notre point de départ est l'équation de Boltzmann-BGK :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} \quad (\text{II.49})$$

II.3.4.1 Intégration temporelle

Pour l'intégration temporelle, il est possible d'utiliser un schéma Euler au premier ordre :

$$f_i(\mathbf{r}, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \delta t \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{\delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{II.50})$$

avec δt le pas de temps et $f_i(\mathbf{r}, t) \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t)$. Pour des raisons de stabilité, il faut bien sûr avoir $\delta t < \tau$. Pour augmenter la précision du schéma numérique, on peut faire appel à des schémas au second ordre, à point milieu ou encore de Runge-Kutta.

Point milieu :

$$f_i(\mathbf{r}, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t - \delta t) - 2\delta t \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_i(\mathbf{r}, t) - 2\frac{\delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{II.51})$$

Runge-Kutta :

$$f_i(\mathbf{r}, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \delta t \mathbf{v}_i \cdot \nabla f_i(\mathbf{r}, t + \delta t/2) - \frac{\delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t + \delta t/2) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t + \delta t/2)] \quad (\text{II.52})$$

II.3.4.2 Intégration spatiale

Pour évaluer le terme de transport $\mathbf{v}_i \cdot \nabla f_i$, il existe également plusieurs possibilités au premier ordre ou au second ordre. Comme l'équation de Boltzmann est une équation hyperbolique, nous favoriserons plutôt les schémas dits "amont" pour prendre en compte le fait que l'information vient d'une direction connue. Cela signifie que la discrétisation du terme ∇f_i dépendra de la vitesse \mathbf{v}_i considérée. Si on passe en coordonnées cartésiennes telles que $f_i(\mathbf{r}, t) = f_i(x, y, t)$ et $\mathbf{v}_i = v_{ix}\mathbf{e}_x + v_{iy}\mathbf{e}_y$ alors le schéma au premier ordre amont s'écrit :

$$\frac{\partial f_i(x, y, t)}{\partial x} = \begin{cases} \frac{f_i(x, y, t) - f_i(x - \delta x, y, t)}{\delta x} & \text{si } v_{ix} \geq 0 \\ \frac{f_i(x, y, t) - f_i(x + \delta x, y, t)}{-\delta x} & \text{si } v_{ix} < 0 \end{cases} \quad (\text{II.53})$$

$$\frac{\partial f_i(x, y, t)}{\partial y} = \begin{cases} \frac{f_i(x, y, t) - f_i(x, y - \delta y, t)}{\delta y} & \text{si } v_{iy} \geq 0 \\ \frac{f_i(x, y, t) - f_i(x, y + \delta y, t)}{-\delta y} & \text{si } v_{iy} < 0 \end{cases} \quad (\text{II.54})$$

et pour un schéma amont au second ordre :

$$\frac{\partial f_i(x, y, t)}{\partial x} = \begin{cases} \frac{3f_i(x, y, t) - 4f_i(x - \delta x, y, t) + f_i(x - 2\delta x, y, t)}{2\delta x} & \text{si } v_{ix} \geq 0 \\ \frac{3f_i(x, y, t) - 4f_i(x + \delta x, y, t) + f_i(x + 2\delta x, y, t)}{-2\delta x} & \text{si } v_{ix} < 0 \end{cases} \quad (\text{II.55})$$

$$\frac{\partial f_i(x, y, t)}{\partial y} = \begin{cases} \frac{3f_i(x, y, t) - 4f_i(x, y - \delta x, t) + f_i(x, y - 2\delta x, t)}{2\delta x} & \text{si } v_{iy} \geq 0 \\ \frac{3f_i(x, y, t) - 4f_i(x, y + \delta x, t) + f_i(x, y + \delta x, t)}{-2\delta x} & \text{si } v_{iy} < 0 \end{cases} \quad (\text{II.56})$$

II.3.5 A propos de $f^{(1)}$ et du modèle de vitesses discrètes

Comme nous venons de le voir, certains modèles Boltzmann-sur-réseau peuvent être vus comme une discrétisation dans l'espace des phases de l'équation de Boltzmann. Dans cette vision, le modèle de vitesses discrètes est ajusté en fonction d'un besoin de précision donné dans la résolution de l'équation de Boltzmann. Dans ce travail, nous avons choisi une précision qui correspond à l'ordre 1 du développement de Chapman-Enskog car celui-ci correspond au niveau d'approximation que représentent les équations macroscopiques. Il est donc intéressant d'examiner en détail la façon dont notre modèle de vitesses discrètes assure la représentation de $f^{(1)}$, la partie hors d'équilibre de la fonction de distribution f . Pour cela, nous allons visualiser les vitesses discrètes sur les représentations faites au chapitre précédent (paragraphe I.6.4), des contributions de chaque vecteur vitesse au flux de quantité de mouvement et au flux de chaleur dans des configurations simples pour lesquelles il existe une solution analytique de $f^{(1)}$.

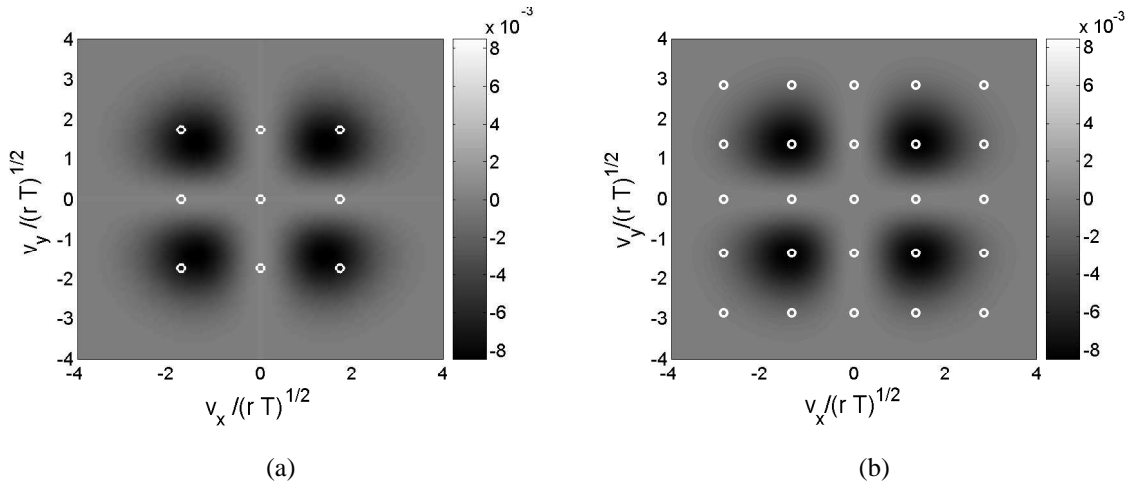


FIG. II.6: Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la contribution au flux de quantité de mouvement $P_{xy}(\mathbf{v})$ de chaque vecteur vitesse. Les cercles blancs correspondent aux vecteurs vitesses discrètes : (a) modèle $D2Q9$ et (b) modèle $D2Q25$.

La figure II.6 montre la pertinence du choix des vecteurs vitesses par rapport à la contribution au flux de quantité de mouvement $P_{xy}(\mathbf{v})$ de chaque vecteur vitesse, en présence d'un cisaillement.

On remarque que tous les vecteurs vitesses contribuent au flux de quantité de mouvement dans le sens opposé au cisaillement et qu'il existe quatre zones particulières où cette contribution est importante. Les deux modèles discrets considérés ici, $D2Q9$ et $D2Q25$, semblent pertinents car ils contiennent des vitesses discrètes dans les zones où $P_{xy}(\mathbf{v})$ est important. De la même façon, la figure II.7 montre la pertinence du choix des vecteurs vitesses par rapport à la contribution au flux de chaleur $J_y(\mathbf{v})$ de chaque vecteur vitesse. Contrairement au flux de quantité de mouvement, toutes les vitesses ne contribuent pas au flux de chaleur dans le sens opposé au gradient de température. Il existe une zone telle que $v < 2\sqrt{rT}$, pour laquelle les vecteurs vitesses contribuent au flux de chaleur dans le même sens que le gradient de température. Outre l'argument mathématique de l'utilisation de la quadrature de Gauss-Hermite qui dit qu'évaluer le flux de chaleur nécessite de monter plus haut dans l'ordre de quadrature, la représentation graphique de $J_y(\mathbf{v})$ indique quels sont les vecteurs vitesses qui comptent le plus pour le flux de chaleur macroscopique J_y . On constate que le modèle discret $D2Q9$ n'est pas particulièrement adapté pour évaluer les flux de chaleur : les zones de plus forte contribution ne sont pas couvertes et la majorité des vitesses discrètes se situent dans la zone où la contribution au flux $J_y(\mathbf{v})$ est du même signe que le gradient de température. Le modèle $D2Q25$ semble beaucoup mieux adapté de ces deux points de vue. A partir de ces observations, il serait peut-être intéressant d'explorer la possibilité de construire des modèles discrets, sans utiliser la quadrature de Gauss-Hermite, qui est cartésienne mais en essayant de construire une discrétisation en module et angulaire. Pour la discrétisation en module, on pourrait retenir deux modules qui seraient celui où la contribution au flux de quantité de mouvement $P_{xy}(\mathbf{v})$ est la plus importante, d'une part, et celui où la contribution au flux de chaleur $J_y(\mathbf{v})$ est la plus importante, d'autre part.

II.3.6 Validation du modèle proposé

Pour valider et tester le modèle BsR thermique proposé, nous avons effectué des simulations numériques d'exemples académiques pour lesquels il existe une solution analytique. Concernant les conditions aux limites, nous nous sommes inspirés du travail de Watari *et coll.* [40]. Les détails de l'implémentation de ces conditions aux limites sont reportés en annexe C. Les tests présentés ici ont été effectués pour le modèle approché à 5 vitesses discrètes par dimension. Un modèle à 6 vitesses sera utilisé au chapitre V pour la discrétisation de l'équation de Boltzmann-Enskog dans un contexte de simulation des transitions de phase liquide-vapeur.

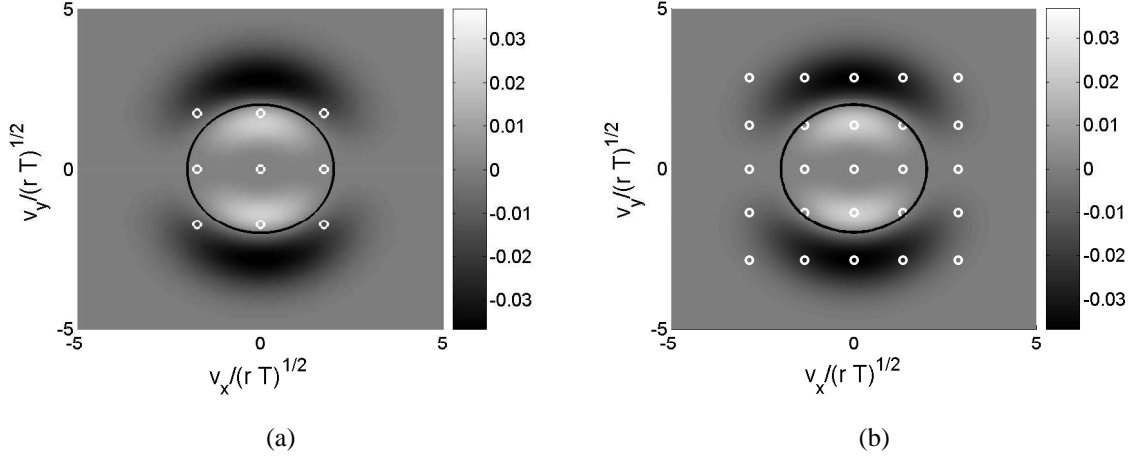


FIG. II.7: Représentation dans le plan (v_x, v_y) de la contribution au flux de chaleur $J_y(\mathbf{v})$ de chaque vecteur vitesse. Les cercles blancs correspondent aux vecteurs vitesses discrets : (a) modèle $D2Q9$ et (b) modèle $D2Q25$. Le cercle noir représente le lieu des points où $J_y(\mathbf{v})$ change de signe.

II.3.6.1 Décroissance d'un vortex

Le premier test concerne la décroissance d'un vortex. Cela permet de vérifier que le modèle rend compte précisément des effets visqueux. La condition initiale du champ de vitesses du vortex est la suivante :

$$u_x = (y_0 - y)\omega_0 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{L^2}\right) \quad (\text{II.57})$$

$$u_y = (x - x_0)\omega_0 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{L^2}\right) \quad (\text{II.58})$$

avec $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0)$ le centre du vortex, L sa longueur caractéristique et ω_0 la vorticité initiale au centre du vortex. A cause des effets visqueux, la vorticité diminue. L'expression de la vorticité au centre du vortex en fonction du temps est :

$$\omega_{max}(t^*) = \frac{\omega_0}{(1 + 4t^*)^2} \quad (\text{II.59})$$

avec $t^* = \nu t / L^2$, le temps adimensionnel. La figure II.8 représente les résultats de simulations numériques indiquant une parfaite représentation des effets visqueux.

II.3.6.2 Propagation d'onde acoustique

Le test précédent ne permettait pas d'apprécier l'aptitude du modèle proposé à rendre compte des effets thermiques. Il indiquait simplement que notre schéma est capable de rendre compte des

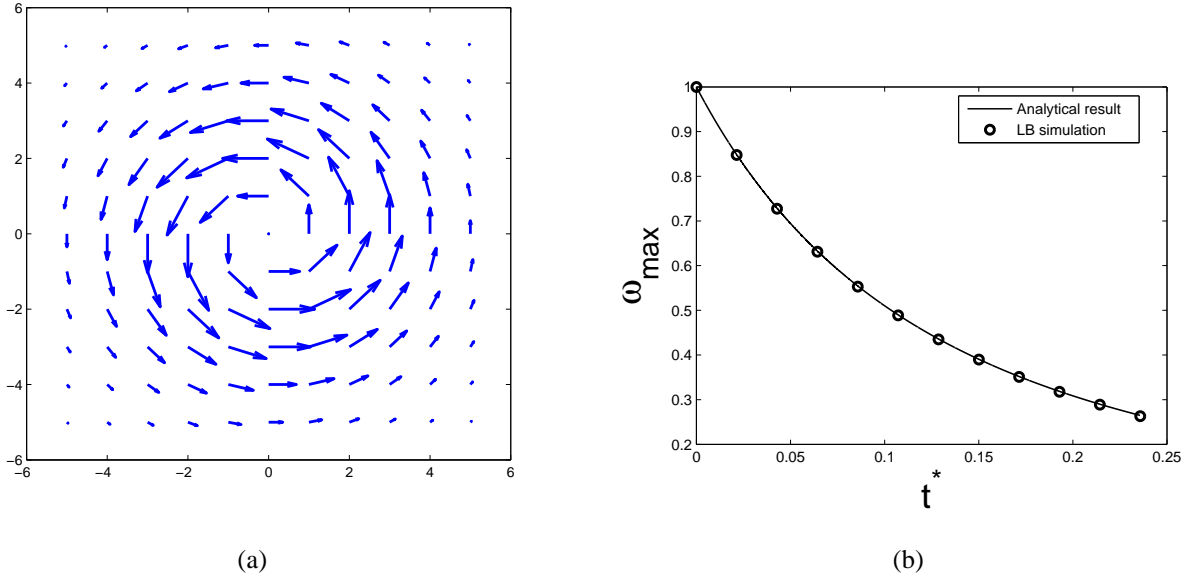


FIG. II.8: (a) : Champs de vitesse d'un vortex ; (b) : Comparaison entre l'expression analytique de la décroissance de la vorticité au centre du vortex (traits pleins) et les résultats de simulations numériques (cercles).

effets visqueux comme tous les modèles BsR utilisés comme une alternative à la résolution de l'équation de Navier-Stokes. Ce second test montre un effet thermique que les schémas BsR isothermes ne peuvent pas représenter. Ce test concerne la propagation d'une onde acoustique proposé par Watari et Tsutahara [37]. En effet avec un modèle de fluide isotherme la vitesse théorique du son serait $c_{isoT} = \sqrt{rT}$ et non pas $\sqrt{\gamma rT}$. Le facteur γ vient du fait que la propagation d'une onde acoustique n'est pas isotherme mais adiabatique. Afin de vérifier cet effet thermique sur la propagation d'une onde acoustique, nous prenons comme condition initiale un volume de gaz à température T et avec un profil de masse volumique en créneau (voir figure II.9.(a)). Cet état étant mécaniquement instable, des ondes acoustiques se propagent dans le milieu. Par suivi des fronts d'ondes qui se forment, il est alors possible de remonter à la célérité du son dans le gaz. La figure II.9.(b) compare les résultats de simulations pour différentes températures avec la célérité du son annoncée théoriquement.

II.3.6.3 Stratification d'une colonne de gaz isotherme

Le test suivant permet de vérifier que la prise en compte d'un champ de force extérieure est correcte dans le modèle. En effet, en présence d'un champ de force extérieure \mathbf{F} , le terme supplé-

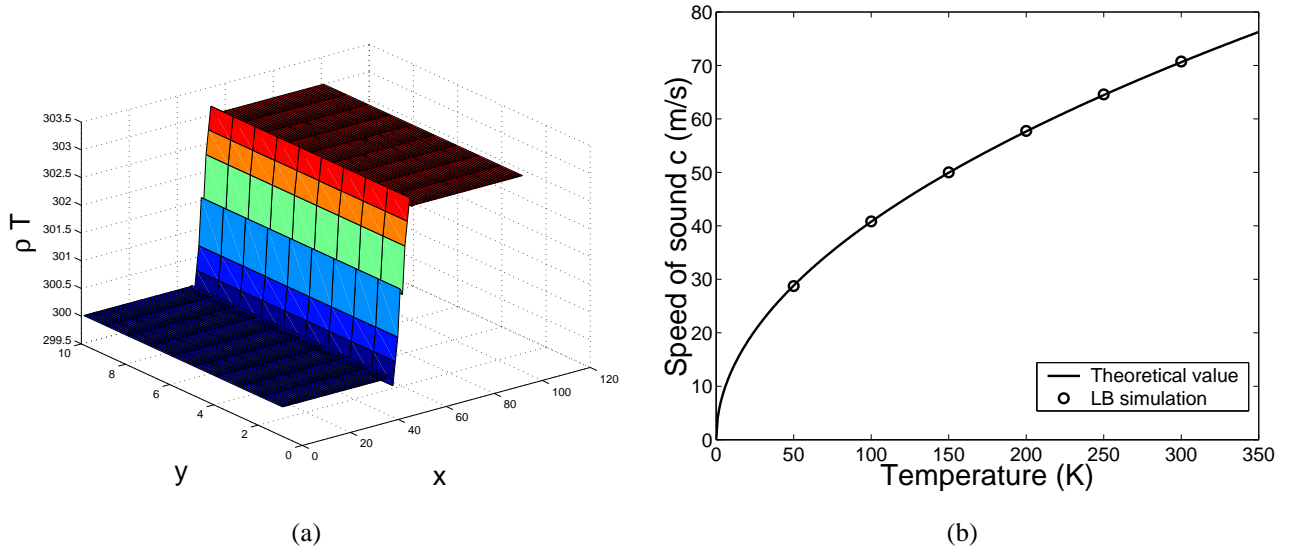


FIG. II.9: (a) : Configuration initiale pour créer des ondes acoustiques. Le gaz est isotherme à l'instant initial et la masse volumique a un profil en créneau ; (b) : Comparaison entre la célérité du son théorique $c = \sqrt{\gamma r T}$ (traits pleins) et les simulations numériques (cercles).

mentaire $\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f$ est introduit dans l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \mathcal{C}(f, f) \quad (\text{II.60})$$

Pour évaluer ce terme, la dérivée de f par rapport à \mathbf{v} est approximée par la dérivée de f^{eq} par rapport à \mathbf{v} [41] :

$$\frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f \approx \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} = -\frac{\mathbf{F}}{m} \frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{rT} f^{eq} \quad (\text{II.61})$$

Cette approximation est justifiée par le développement de Chapman-Enskog qui montre que le terme de force \mathbf{F} n'apparaît pas dans l'expression de $f^{(1)}$. L'ordre 0 de Chapman-Enskog est donc équivalent à l'ordre 1 en ce qui concerne les forces extérieures. La figure II.10 illustre la stratification d'une colonne d'air isotherme dans un champ de pesanteur \mathbf{g} . A l'équilibre, l'expression analytique de la masse volumique $\rho(y)$ en fonction de la hauteur y est $\rho(y) = \rho_0 \exp\left(\frac{gy}{rT}\right)$, avec $\rho_0 = \rho(y = 0)$. Les résultats de simulations sont présentés pour différentes valeurs de $\alpha = \frac{gH}{rT}$ avec H la hauteur de la colonne.

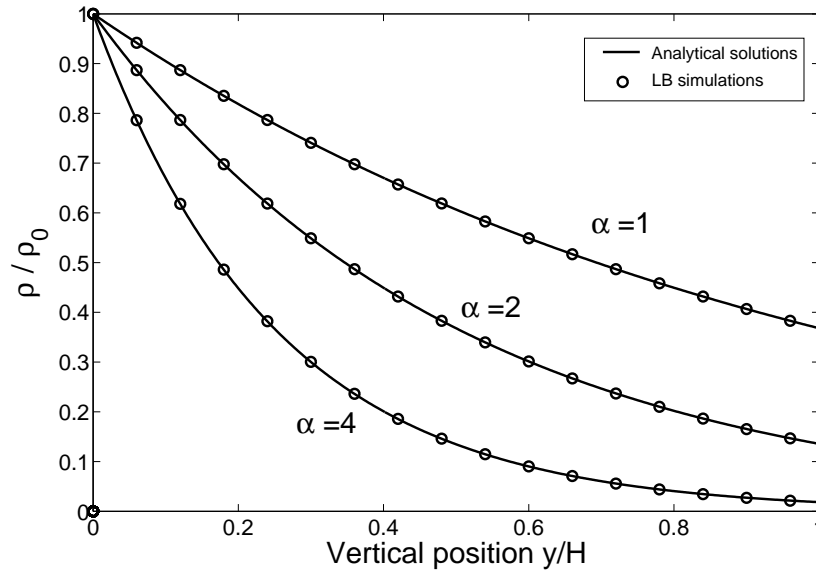


FIG. II.10: Masse volumique ρ en fonction de l'altitude y d'une colonne de gaz isotherme de hauteur H . En traits pleins, l'expression analytique $\rho(y) = \rho_0 \exp\left(\frac{gy}{rT}\right)$, les cercles représentent les résultats de simulations numériques.

II.3.6.4 Écoulement de Couette

L'écoulement de Couette (voir fig. II.11.(a) pour la description) permet de tester plusieurs effets thermiques. L'écoulement étant cisailé, cela produit une source de chaleur dans l'écoulement par dissipation visqueuse. De plus, cet écoulement correspond à une situation hors d'équilibre thermique, le profil de température au stationnaire résulte de la conduction de la chaleur au sein du fluide. Le profil de température analytique au stationnaire entre les deux plaques obtenu à partir des équations macroscopiques est :

$$\frac{T(y) - T_0}{T_1 - T_0} = \frac{y}{H} + \frac{Pr Ec}{2} \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right) \quad (\text{II.62})$$

avec $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$ le nombre de Prandtl et $Ec = \frac{U^2}{c_v(T_1 - T_0)}$ le nombre d'Eckert. La figure II.11.(b) montre la comparaison entre les résultats de simulations numériques et le profil analytique de température au stationnaire.

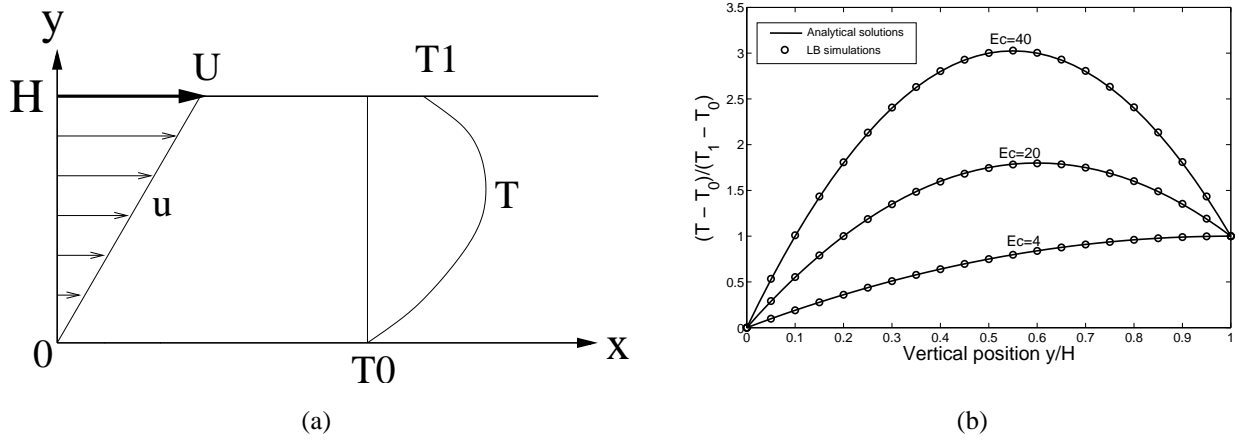


FIG. II.11: (a) : Configuration de l'écoulement de Couette qui est un écoulement cisailé entre deux plaques séparées par une distance H . La plaque du bas a une vitesse nulle et une température T_0 , la plaque du haut a une vitesse U et une température T_1 ; (b) : Comparaison entre le profil de température théorique adimensionnée au stationnaire $\frac{T(y)-T_0}{T_1-T_0} = \frac{y}{H} + \frac{Pr Ec}{2} \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right)$ (traits pleins) et les simulations numériques (cercles). Les simulations ont été faites pour trois valeurs différentes du nombre d'Eckert Ec .

II.3.6.5 Conduction pure

Ce dernier test permet de quantifier le niveau de précision autorisé par le modèle BsR proposé en ce qui concerne les effets purement thermiques. Comme il a été vu précédemment, la détermination du modèle de vitesses discrètes est basée sur la quadrature de Gauss-Hermite. Cette procédure conduit à un jeu de vitesses discrètes dont les modules dépendent de la température. Ce qui signifie que le jeu de vitesses discrètes dépend du point de l'espace. Mais pour des raisons numériques, le choix a été fait de fixer un jeu de vitesses discrètes, correspondant à une température de référence T_0 , pour tout le champ et qui est conservé pour toute la durée de la simulation. L'ordre de la quadrature étant déterminé pour assurer l'évaluation des moments de la fonction de distribution f , sous l'hypothèse du développement de Chapman-Enskog, jusqu'au flux de la chaleur, le fait de fixer un jeu de vitesses discrètes peut engendrer des erreurs sur l'évaluation du flux de chaleur si la température est différente de la température de référence T_0 . De plus, nous nous sommes arrêtés à une quadrature d'ordre 5 là où une quadrature d'ordre 6 aurait été nécessaire à rigoureusement parler. Cette perte d'un ordre de quadrature a été compensée par un ajustement local des poids, mais le niveau d'incertitude associé n'a pas pu être quantifié théoriquement. Pour quantifier le niveau d'incertitude résultant de ce choix numérique, nous comparons le flux de chaleur conductif entre deux plaques de températures différentes au flux conductif théorique. Par définition, le flux

conductif correspond au moment d'ordre 3 de f , $\mathbf{J}_Q = \frac{1}{2} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u})^3 f d\mathbf{v}$. A partir des simulations numériques, ce flux est évalué par $\mathbf{J}_Q^{num} = \frac{1}{2} \sum_i \omega_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^3 f_i$. D'un point de vue macroscopique, le flux conductif est lié au gradient de température $\mathbf{J}_Q = -\lambda \nabla T$ avec la conductivité thermique théorique donnée par la procédure de Chapman-Enskog $\lambda^{th} = 2\rho r^2 T \tau$. La figure II.12 illustre l'écart relatif entre la conductivité thermique théorique λ^{th} et la conductivité thermique observée numériquement, évaluée par $\lambda^{num} = -\frac{\mathbf{J}_Q^{num}}{\nabla T}$.

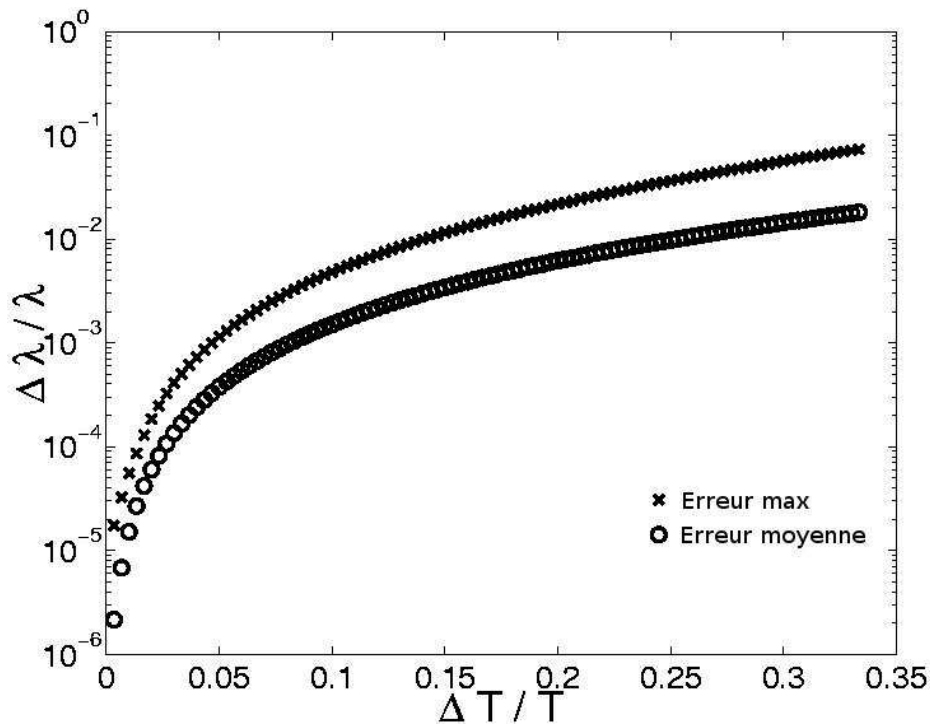


FIG. II.12: Ecart relatif entre la conductivité thermique observée numériquement et la conductivité thermique théorique, obtenue par la procédure de Chapman-Enskog, en fonction du rapport de la différence de température entre les plaques sur la température de référence choisie pour fixer le jeu de vitesses discrètes. La température de référence choisie ici est la moyenne des températures des plaques. Les cercles représentent l'écart relatif moyenné sur tout le champ. Les croix représentent l'erreur maximale qui est obtenue lorsque la température est la plus éloignée de la température de référence, c'est-à-dire au niveau des plaques.

La figure II.12 montre que l'erreur sur l'évaluation du flux conductif tend vers zéro lorsque le gaz est à la température de référence. Lorsque le gaz n'est pas à la température de référence, une erreur est commise sur l'évaluation du flux conductif, mais elle reste relativement faible même pour de forts écarts de température. Par exemple lorsque la température du gaz diffère de 5% par

rapport à la température de référence, l'erreur sur le flux est de 0.5% environ et lorsque la température diffère de 15% l'erreur sur le flux est alors de 5% environ.

II.3.6.6 Test avec le modèle de collision ES-BGK

Pour pallier l'inconvénient du nombre de Prandtl non-ajustable associé au modèle BGK, nous avons mené des simulations numériques en utilisant le modèle collisionnel ES-BGK (paragraphe I.5.2). Compte tenue de la forme de la partie hors d'équilibre $f^{(1)}$ (voir I.132), le modèle de vitesses discrètes est directement adapté car $f^{(1)}$ s'écrit toujours sous la forme d'un produit de f^{eq} par un polynôme de \mathbf{v} d'ordre 3. L'utilisation de ES-BGK par rapport à BGK n'augmente pas l'ordre de ce polynôme et donc n'augmente pas l'ordre de la quadrature.

Des simulations ont été faites en faisant varier le paramètre b de -1 à 0.9 , ce qui, compte tenue des expressions des coefficients de transport, correspond à une variation du nombre de Prandtl de 0.25 à 5 . Le tenseur des contraintes visqueuses et le flux de chaleur peuvent être évalués par le calcul des moments de f . Ces "expériences numériques" permettent d'évaluer la viscosité cinématique et la conductivité thermique par comparaison avec les expressions macroscopiques de $\Pi_{ij} = -2\rho\nu\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ et $\mathbf{J}_q = -\lambda\nabla T$. Ces résultats sont en très bon accord avec les valeurs théoriques données par la procédure de Chapman-Enskog (voir Fig II.13).

II.4 Conclusions du chapitre

Avant le travail de He et Luo en 1997 [22], Boltzmann-sur-réseau était essentiellement une méthode numérique vue comme une alternative aux schémas usuels de résolution de l'équation de Navier-Stokes pour les fluides isothermes. He et Luo ont démontré que certains schémas Boltzmann-sur-réseau correspondaient à une discrétisation, à un ordre donné, dans l'espace des phases, de l'équation cinétique Boltzmann-BGK. Ainsi, plus qu'une alternative numérique à la résolution de l'équation de Navier-Stokes, Boltzmann-sur-réseau est une méthode numérique de résolution de l'équation de Boltzmann-BGK à un ordre donné. Cette nouvelle vision de Boltzmann-sur-réseau redonne un intérêt supplémentaire à la méthode notamment dans les domaines de la microfluidique et des gaz raréfiés pour lesquels les équations macroscopiques usuelles perdent leurs validités.

Reprenant la procédure de He et Luo, basé sur la quadrature de Gauss-Hermite pour discrétiser l'espace des vitesses, dans ce travail de thèse, nous avons proposé un modèle Boltzmann-sur-réseau pour les fluides anisothermes. Le modèle correspond à une résolution de l'équation de Boltzmann-BGK à un ordre donné qui correspond à l'ordre 1 du développement de Chapman-Enskog, c'est à

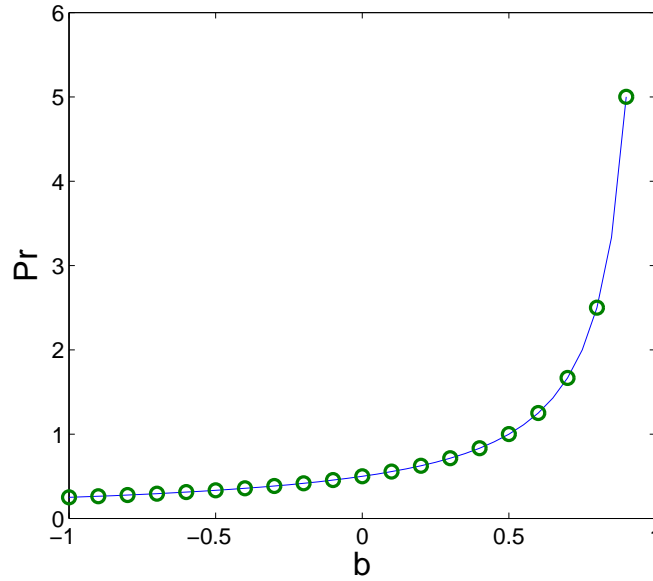


FIG. II.13: Nombre de Prandtl en fonction de b pour des simulations BsR appuyées sur un modèle collisionnel ES-BGK. En trait plein, expression analytique obtenue par la procédure de Chapman-Enskog, $Pr = \frac{1}{2(1-b)}$. Les cercles représentent le Prandtl obtenu par les “expériences numériques” en remontant à la conductivité et à la viscosité par le calcul des flux.

dire au domaine de validité des équations macroscopiques usuelles. Mais l’ordre de résolution peut être amélioré en augmentant l’ordre de la quadrature de Gauss-Hermite si les applications visées le nécessitent. Concernant les intégrations spatiales et temporelles, nous avons utilisé des schémas numériques simples respectivement d’ordre 2 et d’ordre 1. Il est envisageable d’améliorer les vitesses de calcul en utilisant des schémas numériques plus évolués mais ce n’était pas le propos de ce travail de thèse.

Enfin, le modèle proposé a été testé et validé sur des exemples académiques pour lesquels il existe une solution analytique : décroissance de vortex, propagation d’onde acoustique, stratification d’une colonne isotherme, écoulement de Couette et conduction pure, pour quantifier les erreurs obtenues sur le flux de chaleur. Ce dernier test montre la pertinence de la démarche puisque le flux de chaleur est le moment d’ordre le plus élevé de la fonction de distribution f . Le savoir-faire qui vient d’être détaillé ici concernant les écoulements monophasiques anisothermes sera directement exploité au chapitre V pour l’étude d’écoulements diphasiques anisothermes.

Chapitre III

Modélisation cinétique des fluides non-idéaux, équation de Boltzmann-Enskog

Le premier chapitre a permis de présenter dans les détails l'établissement de l'équation de Boltzmann. Nous nous sommes ensuite appuyé sur l'équation de Boltzmann, au chapitre II, pour établir un schéma Boltzmann-sur-Réseau, d'abord en écoulement isotherme, puis en écoulement anisotherme. Nous cherchons maintenant à étendre cette méthodologie aux écoulements en présence de transition de phase liquide-vapeur. Pour cela, nous commençons par une présentation détaillée de la cinétique et la thermodynamique des fluides non-idéaux. Parmi les hypothèses nécessaires à la dérivation de l'équation de Boltzmann, il y a l'hypothèse de gaz dilué et l'hypothèse que les interactions entre particules (supposées ponctuelles) sont décrites par des collisions supposées ponctuelles et instantanées et respectant les invariants collisionnels (masse, quantité de mouvement et énergie). Ces hypothèses correspondent aux hypothèses du gaz parfait. Dans ce cadre, seule l'énergie cinétique des particules contribue à l'énergie totale du système (l'énergie d'interaction est nulle).

Pour les gaz moins dilués, la distance moyenne entre particules diminue, de sorte que l'hypothèse des collisions locales instantanées est moins pertinente. En effet, les interactions entre particules sont de types répulsifs à courte portée, et attractives à longue portée en tendant asymptotiquement vers zéro quand la distance entre particules augmente. Ainsi, le gaz dilué correspond à une situation où la distance moyenne entre particules est telle que l'attraction est négligeable. En revanche lorsque la densité du gaz est telle que la portée des interactions devient de l'ordre de la distance moyenne entre particules, alors ces interactions ne peuvent plus être négligées. Comme nous allons le voir, ces interactions peuvent conduire à des situations de transitions de phase. En préalable à la présentation de l'équation de Boltzmann-Enskog qui est l'équation de Boltz-

mann modifiée pour prendre en compte une interaction plus fine entre particules, nous allons faire quelques rappels sur la thermodynamique de l'équilibre des systèmes liquide-vapeur et en particulier la modélisation thermodynamique de l'interface.

III.1 Thermodynamique de l'équilibre des systèmes liquide-vapeur

Pour une bonne partie de ce qui suit nous allons utiliser comme modèle, le fluide de van der Waals de façon à mettre évidence assez simplement la plupart des effets que nous souhaitons étudier. Ceci peut bien sûr s'étendre sans problème à des équations d'état plus réalistes. L'équation d'état, qui relie la pression p_b à la température T et à la masse volumique du fluide, est :

$$p_b(\rho, T) = \frac{\rho r T}{(1 - b\rho)} - a\rho^2 \quad (\text{III.1})$$

avec $r = R/M$ la constante massique des gaz parfaits et a et b des paramètres caractérisant le fluide. Cette équation s'écrit aussi classiquement en fonction du volume du système :

$$p_b(V, T) = \frac{nRT}{(V - nb')} - a' \frac{n^2}{V^2} \quad (\text{III.2})$$

avec n le nombre moles, $b' = bM$ et $a' = aM^2$. Pour dériver cette équation d'état, on considère en général un potentiel intermoléculaire $u(\mathbf{r})$ de type Lennard-Jones (voir figure III.1). Ce potentiel présente une forte répulsion lorsque la distance entre les deux particules est inférieure à r_0 . Par ailleurs, le potentiel présente une partie attractive qui tend asymptotiquement vers zéro lorsque la distance entre les particules croît. Les hypothèses utilisées par la physique statistique pour dériver l'équation d'état de van der Waals à partir de ce potentiel sont les suivantes :

- Les particules sont considérées comme des sphères dures de rayon r_0 .
- La partie attractive est traitée en champ moyen.

L'hypothèse sphère dure a pour conséquence qu'il existe un volume minimal V_0 occupé par le fluide. Ce volume est approximativement donné en multipliant le volume d'une particule par le nombre de particules : $V_0 = N4/3\pi r_0^3$. Ce qui se traduit par une masse volumique maximale $\rho_0 = N m/V_0 = m/(4/3\pi r_0^3)$ avec m , la masse d'une particule. C'est ce que représente le paramètre b dans l'équation de van der Waals, $b = 1/\rho_0$. Concernant la partie attractive, si on considère une particule située en \mathbf{r}_1 qui subit la somme de toutes interactions des particules situées dans l'espace, le potentiel effectif s'écrit :

$$U_{eff}(\mathbf{r}_1) = \int \rho(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (\text{III.3})$$

L'hypothèse champ moyen consiste à approximer $\rho(\mathbf{r})$ par $\rho(\mathbf{r}_1)$. Cette hypothèse repose sur le fait que l'attraction tend très vite vers zéro et de cette façon seules les particules situées à quelques rayons de sphère dure contribuent au potentiel effectif. Ainsi le potentiel effectif s'approxime par :

$$U_{eff}(\mathbf{r}_1) \approx -2a\rho(\mathbf{r}_1) \quad (\text{III.4})$$

avec $a = -\frac{1}{2} \int u(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \mathbf{dr}$. C'est ce que représente le paramètre a dans l'équation de van der Waals.

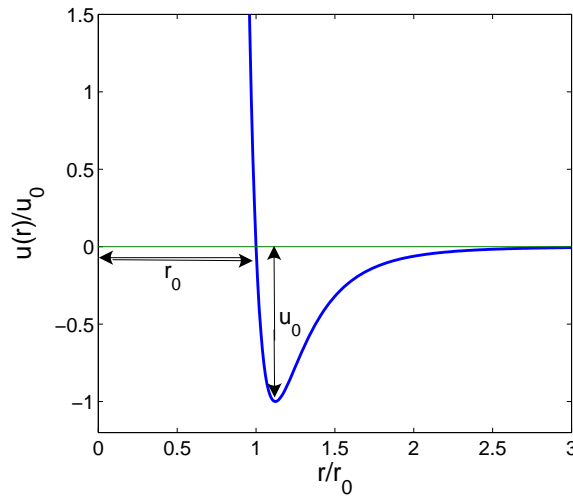


FIG. III.1: Potentiel intermoléculaire de Lennard-Jones. L'expression du potentiel $u(r)$ entre deux particules séparées par une distance r est $u(r) = 4u_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$. Ce potentiel est caractérisé par deux paramètres : u_0 qui est la profondeur du puits de potentiel et r_0 le paramètre de "sphère dure". r_0 correspond à la distance en dessous de laquelle les particules se repoussent.

La figure III.2 est un tracé des isothermes de van der Waals, c'est-à-dire l'évolution de la pression p_b en fonction de la masse volumique ρ pour différentes températures. Un fluide pouvant être décrit par une équation de van der Waals, présente un état macroscopique particulier appelé point critique, de coordonnées $(T_c = \frac{8a}{27rb}, \rho_c = 1/(3b), p_c = a/(27b^2))$. On peut noter que si la température est inférieure à la température critique ($T < T_c$), il existe trois états de masse volumique différente qui ont la même pression et même température. Autrement dit, lorsqu'on impose au système une température extérieure $T_0 < T_c$ et une pression extérieure p_0 , celui-ci peut 'a priori' exister à l'équilibre thermodynamique, sous trois états de masse volumique différente. La question qui se pose alors est : quel est l'état d'équilibre ? le système évolue-t-il vers une masse volumique en particulier ou existe-t-il la possibilité de coexistence de phases de masses volumiques différentes ?

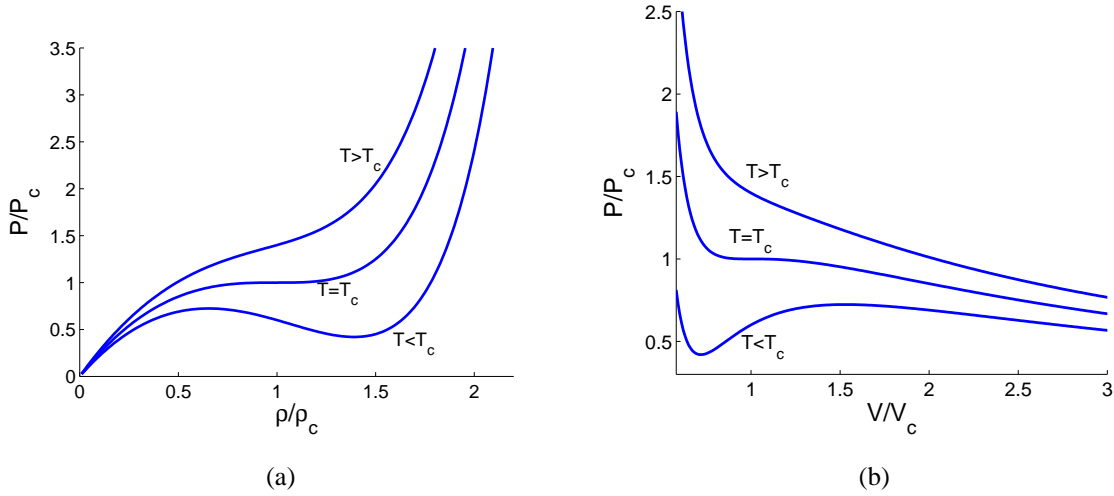


FIG. III.2: Tracé de trois isothermes de l'équation d'état de van der Waals dans le plan (p_b, ρ) (a) et dans le plan (p_b, V) (b). Trois isothermes particulières sont représentées, une pour laquelle $T < T_c$, une pour $T = T_c$ et une pour $T > T_c$.

Pour répondre à cette question, on considère une masse m de fluide obéissant à l'équation d'état de van der Waals emprisonnée dans un cylindre fermé sur le haut par un piston mobile sans frottement. Le cylindre qui est perméable aux transferts de chaleur est placé dans une atmosphère de température $T_0 < T_c$ et de pression p_0 (voir figure III.3). Trois états différents du système correspondant à trois volumes différents respectent les contraintes imposées par l'extérieur T_0 et p_0 . Sans rentrer dans une démonstration complète, il apparaît clairement par des arguments physiques que l'état de volume V_0 (tel qu'indiqué sur la figure III.3) est instable à cause du signe de la pente $\frac{\partial p_b}{\partial V}$ qui est positif. En effet si on déstabilise légèrement le système lorsque son volume est V_0 en appuyant légèrement sur le piston, le volume va diminuer et la pression du système va diminuer aussi. Ce qui a pour conséquence que le piston va continuer à descendre, car la pression du système est inférieure à la pression extérieure p_0 . Pour la suite nous raisonnons donc comme si cet état n'existait pas. Pour aller un peu plus loin dans l'analyse on peut écrire le premier et le deuxième principe de la thermodynamique dans le cas où le système initialement mis dans un état d'équilibre quelconque est mis au contact d'un milieu extérieur à T_0 et p_0 :

$$\Delta U = W + Q = -p_0 \Delta V + Q \quad (\text{III.5})$$

$$\Delta S = \frac{Q}{T_0} + S^p \quad (\text{III.6})$$

avec $S^p \geq 0$. Ce qui signifie que $T_0 \Delta S - Q = T_0 S^p \geq 0$ et conduit à :

$$\Delta U + p_0 \Delta V - T_0 \Delta S \leq 0 \quad (\text{III.7})$$

Cela signifie que la fonction $G^* = U + p_0V - T_0S$ ne peut que décroître au cours d'une transformation pour laquelle la température et la pression extérieure sont imposées. L'équilibre stable du système est par définition l'état dont la valeur de G^* est la plus petite, ce qui n'exclue pas que le système se "coince" dans un puits de potentiel différent (métastabilité). On exclut dans cette analyse les états métastables pour se concentrer uniquement sur les états stables. Comme nous l'avons montré, le système va dans ce cas chercher à minimiser la fonction enthalpie libre. Or formellement G peut s'écrire à partir de grandeurs massiques sous la forme :

$$G = m_l g_l + m_v g_v \quad (\text{III.8})$$

avec $m_l + m_v = m$ (dans lequel l et v désigne respectivement liquide et vapeur). On note que le système trouvera son minimum en basculant complètement du côté du potentiel massique le plus faible. En revanche, si les potentiels massiques sont égaux (ce qui n'existe que pour une seule pression si la température est fixée) tous les couples (m_l, m_v) assurent la même valeur du potentiel G et il existe une infinité d'états qui assurent la contrainte. On est en présence de deux phases et le fluide est dans les conditions dites de saturation. Si on s'intéresse dans ce cas-là aux deux états limites, à savoir l'état liquide saturant et l'état vapeur saturante alors on peut écrire simplement : $\Delta G_{l,v} = \Delta G_{l,v}^* = 0$, ce qui se traduit par :

$$\Delta G_{l,v} = \Delta G_{l,v}^* = \int dG = \int V dp_b = p_0(V_v - V_l) - \int_{V_l}^{V_v} p_b dV = 0 \quad (\text{III.9})$$

Cette expression est vérifiée si la pression extérieure p_0 est telle que $p_0(V_v - V_l) = \int_{V_l}^{V_v} p_b dV$. Cette condition qui correspond à la règle des aires des Maxwell (Figure III.3), détermine la pression de saturation du fluide qui ne dépend que de la température T_0 .

III.1.1 Energie d'interface et la loi de Laplace

On ne cherche pas dans ce paragraphe à redémontrer rigoureusement l'ensemble des relations thermodynamiques qui concernent le problème de coexistence de phases mais plus de faire sentir que l'origine est toujours strictement la conséquence des principes fondamentaux. Nous nous intéressons en particulier ici à l'apparition de la loi de Laplace. Pour cela on ne redémontre pas qu'en l'absence de champ de force la coexistence de phases se fait en présence d'interfaces sphériques. On étudie donc la possibilité d'existence d'une bulle de vapeur entourée de liquide dans un volume V fixé (figure III.4).

Partant d'un état d'équilibre quelconque, on met le système en contact avec un thermostat à la température T_0 . Le premier principe s'écrit $\Delta U = Q$ et le deuxième principe $Q = T_0 \Delta S - S^p$

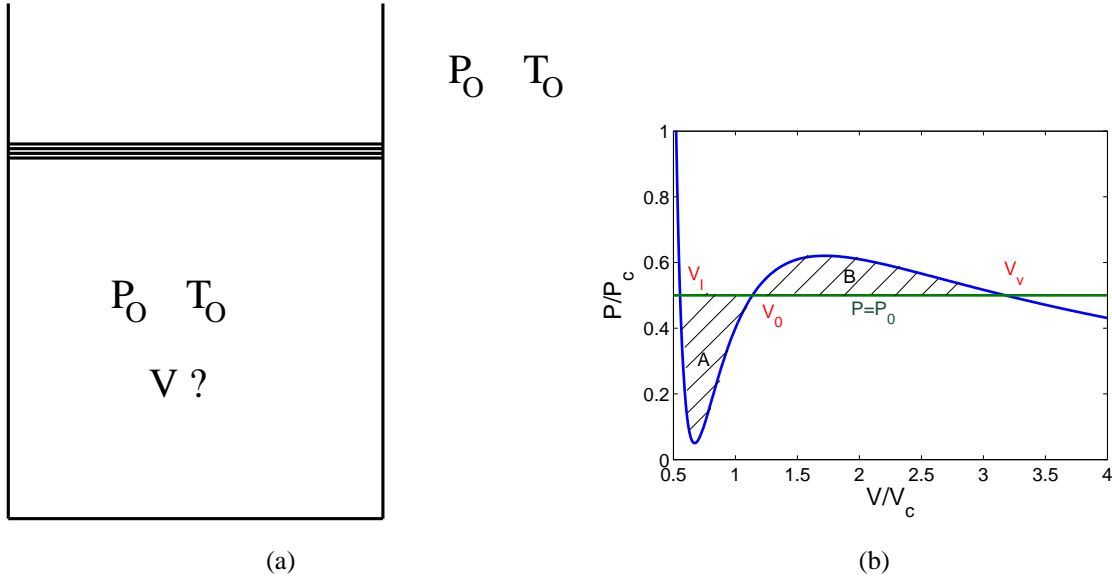


FIG. III.3: A l'équilibre thermodynamique le fluide est à température T_0 et à pression p_0 . Trois états de volumes différents V_v , V_0 et V_l (ou de masses volumiques différentes) respectent ces conditions. Règle des aires de Maxwell : si la pression imposée p_0 est telle que les surfaces hachurées A et B ont la même aire alors le système peut choisir indifféremment le volume V_v ou V_l .

avec $S^p > 0$ ce qui conduit à $\Delta U - T_0 \Delta S \leq 0$. Autrement dit la fonction $F^* = U - T_0 S$ ne peut que décroître. Trouver le minimum de F^* est équivalent à trouver le minimum d'énergie libre $F = U - TS$ avec des contraintes : $T = T_0$, $m_v + m_l = m$ et $V_v + V_l = V_0$, avec m_v , V_v , m_l et V_l étant les masses et volumes respectifs des phases vapeur et liquide. Afin de minimiser F avec ces contraintes, nous allons utiliser la méthode des multiplicateurs de Lagrange. Soit une nouvelle fonction $L = F - \lambda_1(T - T_0) - \lambda_2(m_v + m_l - m) - \lambda_3(V_v + V_l - V_0)$. Avec λ_i les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes. Ainsi le minimum de L correspondra au minimum de F sous contraintes. Exprimons la différentielle de F :

$$dF = dU - TdS - SdT \quad (\text{III.10})$$

Pour exprimer la différentielle de l'énergie interne, nous posons que l'énergie interne est la somme des énergies internes de chaque phase $U_v + U_l$, additionnée d'une énergie d'interaction proportionnelle à la surface entre les phases σA , avec A la surface et σ la tension de surface qui est caractéristique du fluide. Ainsi nous obtenons :

$$dF = dU_v + dU_l + \sigma dA - TdS - SdT \quad (\text{III.11})$$

$$dF = \delta Q_v - p_v dV_v + \mu_v dm_v + \delta Q_l - p_l dV_l + \mu_l dm_l \quad (\text{III.12})$$

$$+ \sigma dA - TdS - SdT \quad (\text{III.13})$$

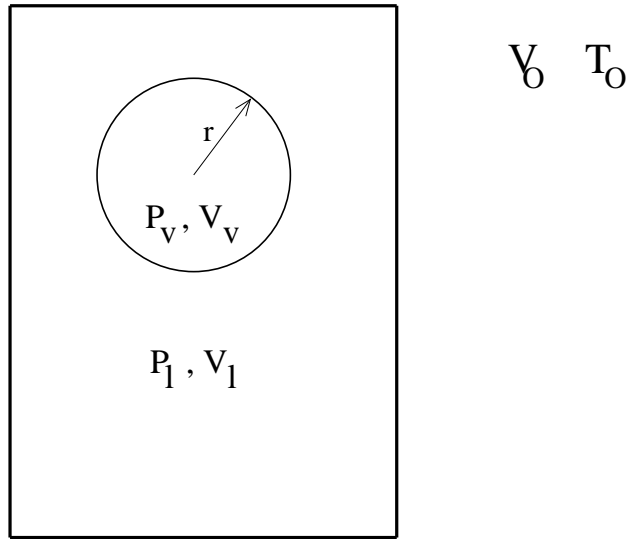


FIG. III.4: Fluide de van der Waals enfermé dans une boîte indéformable V_0 et de température $T_0 < T_c$. La masse de fluide est telle que l'existence du fluide sous forme d'une seule phase homogène est instable. Quelles sont les conditions de coexistence à l'équilibre entre la bulle vapeur de rayon r et le liquide qui l'entoure.

Comme chaque phase est un système ouvert, il faut tenir compte des potentiels chimiques de chaque phase μ_v et μ_l . Ensuite nous utilisons le fait que $\delta Q_v + \delta Q_l = \delta Q = TdS$, et que les variations du volume de la bulle et de la surface sont fonction du rayon r : $dV_v = 4\pi r^2 dr$ et $dA = 8\pi r dr$. Ce qui donne :

$$dF = (8\pi r \sigma - p_v 4\pi r^2) dr - p_l dV_l + \mu_v dm_v + \mu_l dm_l - S dT \quad (\text{III.14})$$

Le minimum de la fonction $L(r, V_l, m_v, m_l, T, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ et donc le minimum de $F(r, V_l, m_v, m_l, T)$ sous contraintes sont donnés par la résolution du système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial r} = -p_v 4\pi r^2 + \sigma 8\pi r - \lambda_3 4\pi r^2 = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial V_l} = -p_l - \lambda_3 = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial m_v} = \mu_v - \lambda_2 = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial m_l} = \mu_l - \lambda_2 = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial T} = -S - \lambda_1 = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.15})$$

Les solutions de ce système imposent :

$$(p_v - p_l) = \frac{2\sigma}{r} \quad (\text{III.16})$$

$$\mu_v = \mu_l \quad (\text{III.17})$$

Cela signifie que dans l'expérience décrite où on impose à une masse m de fluide, un volume V_0 et une température T_0 telle que la phase homogène de masse volumique $\rho_0 = m/V_0$ est instable, il existe une solution diphasique unique où les masses volumiques ρ_v et ρ_l de chaque phase sont telles que les conditions (III.16) et (III.17) sont satisfaites. On peut remarquer que dans le cas où l'interface est plane ($r = \infty$), l'énergie d'interface n'a pas de rôle, on retrouve $p_v = p_l = p_0$ qui est la pression de saturation déterminée par la règle des aires de Maxwell. Le potentiel chimique s'identifie à l'enthalpie libre massique généralisant ainsi le résultat du paragraphe précédent.

III.1.2 Modèle d'interface diffuse

Dans la section précédente, la prise en compte de l'interface liquide-vapeur apparaît par l'ajout d'une énergie de surface proportionnelle à l'aire de l'interface. Ce modèle rend bien compte d'un saut de pression lorsque l'interface est courbée mais par contre il suppose une interface d'épaisseur nulle (voir figure III.5 (a)). Ce modèle peut s'avérer non-pertinent pour un fluide non-idéal et il peut être nécessaire de décrire la variation de masse volumique continûment entre les deux phases (voir figure III.5(b)). L'épaisseur de l'interface peut même tendre vers l'infini lorsque la température du fluide s'approche de la température critique.

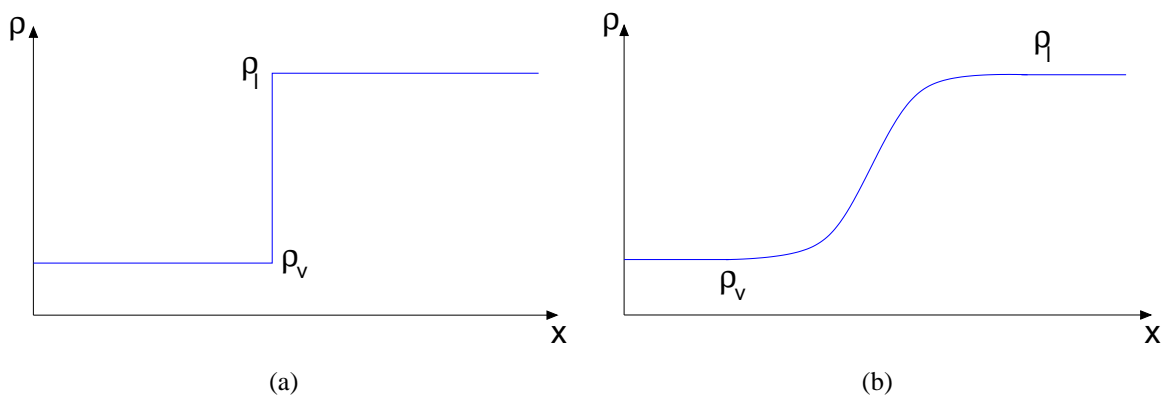


FIG. III.5: (a) profil d'interface brusque entre les deux phases de masse volumique ρ_v et ρ_l . (b) profil d'interface réaliste entre les deux phases de masse volumique ρ_v et ρ_l . Dans cette description, l'objet interface a une épaisseur non-nulle.

III.1.2.1 Théorie de van der Waals

Avant de présenter la théorie de l'interface de van der Waals, nous devons introduire d'abord la densité d'énergie libre ψ définie telle que l'énergie libre F d'un système est l'intégrale de ψ sur tout le volume :

$$F = \int \psi \, \mathbf{dr} \quad (\text{III.18})$$

Il est important de noter que ψ est une fonction qui se définit en chaque point du système mais qui dépend a priori de la configuration de tout le système. Dit autrement les effets d'interaction à distance se traduisent sur l'énergie par un terme potentiel qui est directement lié à la façon dont toutes les particules sont placées dans l'espace. Evidemment à l'échelle macroscopique cette dépendance sera souvent ramenée à des termes qui rendent compte de la distribution spatiale à proximité du point considéré. Toute la subtilité de ce qui suit est ramenée dans la traduction de cette dépendance à la distribution spatiale. Pour un système homogène de volume V_0 , si on néglige les effets de bord on peut écrire : $\psi = F/V_0$.

Modèle à l'ordre 0 de ψ On suppose ici que ψ n'est fonction que des variables locales au point considéré : $\psi = \psi_r$. Dans le cadre de ce modèle on peut écrire : $F = \int \psi_r \, \mathbf{dr}$. Si on suppose que le fluide obéit à l'équation d'état de van der Waals et que la température est uniforme et vaut T_0 , il est aisé de montrer que :

$$\psi_r = \psi_r(\rho) = \rho r T_0 \log \left(\frac{\rho}{1 - b\rho} \right) - a\rho^2 \quad (\text{III.19})$$

Reprenons l'exemple d'un fluide de van der Waals enfermé dans un récipient de volume V_0 avec une température imposée $T_0 < T_c$. La masse m de fluide est telle que l'état homogène de masse volumique $\rho_0 = m/V_0$ est instable. L'état d'équilibre est une somme de domaines de deux masses volumiques différentes ρ_v et ρ_l . Pour trouver le bon couple de masses volumiques il faut minimiser l'énergie libre sous contrainte de conserver la masse totale m , c'est à dire minimiser l'intégrale $F = \int \psi_r(\rho(\mathbf{r})) \, \mathbf{dr}$ avec la contrainte $\int (\rho(\mathbf{r}) - \rho_0) \, \mathbf{dr} = 0$. Pour ceci, on utilise comme précédemment la méthode des multiplicateurs de Lagrange. Ainsi la minimisation de F sous contraintes sera assurée par la minimisation de l'intégrale $L = \int [\psi_r(\rho(\mathbf{r})) - \lambda(\rho(\mathbf{r}) - \rho_0)] \, \mathbf{dr}$. Le minimum de cette intégrale est tel que $\frac{\partial \psi_r}{\partial \rho} - \lambda = 0$. Ce qui signifie que le couple (ρ_v, ρ_l) qui assure le minimum de F sous contraintes est tel que :

$$p_b(\rho_v) = p_b(\rho_l) \quad (\text{III.20})$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right|_{\rho_v} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right|_{\rho_l} \quad (\text{III.21})$$

où p_b est la pression donnée par l'équation d'état. Nous retrouvons donc le résultat précédent qui correspond au cas où l'énergie de surface est nulle, en identifiant le potentiel chimique μ à $\frac{\partial \psi}{\partial \rho}$. La figure III.6 illustre une méthode graphique équivalente à la règle des aires de Maxwell pour déterminer, à partir de la représentation de $\psi(\rho)$, les deux masses volumiques ρ_v et ρ_l pouvant exister sous les mêmes conditions de température et de pression. En remarquant que la pression peut s'écrire $p_b(\rho) = \rho \frac{\partial \psi(\rho)}{\partial \rho} - \psi(\rho)$. On note que pour un fluide de masse volumique ρ , elle se lit comme l'opposé de l'ordonnée à l'origine de la tangente à ψ en ρ . Ainsi, s'il existe deux masses volumiques telles que les tangentes de ψ en ces points sont confondues, alors ces deux masses volumiques ont la même pression et le même potentiel chimique.

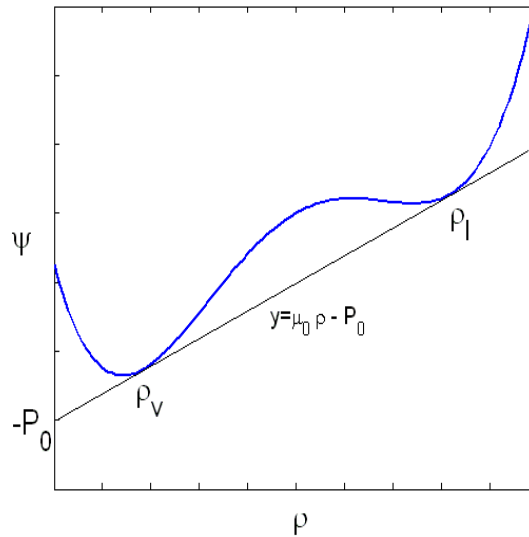


FIG. III.6: Allure de ψ_r en fonction de ρ pour un fluide de van der Waals. Les deux masses volumiques coexistantes ρ_v et ρ_l sont telles que les tangentes de ψ en ces points sont confondues. Cette construction graphique est équivalente à la règle des aires de Maxwell.

Modèle à l'ordre 1 de ψ A partir du modèle de ψ décrit dans le paragraphe précédent, il est clair qu'aucun effet de distance lié aux variations spatiale de ρ n'a été pris en compte. Ceci avait pour conséquence de ne faire apparaître aucun terme spécifique en terme énergétique lié à l'interface. On retrouvait donc les résultats connus en l'absence de tension de surface. Le modèle que nous présentons maintenant et qui a été introduit par van der Waals, traduit les effets à distance par l'introduction d'un terme faisant intervenir le gradient de ρ . Nous ne discutons pas des arguments

qui mènent à la forme présentée et nous posons directement :

$$\psi = \psi_r + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \quad (\text{III.22})$$

Ainsi il vient :

$$F = \int \left(\psi_r + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \right) \mathbf{dr} \quad (\text{III.23})$$

Le terme supplémentaire empêche les variations brusques de masse volumique sur une zone étroite. En effet, une interface dont la taille tend vers zéro correspond à un gradient de masse volumique qui tend vers l'infini et ne permettra pas de minimiser l'énergie libre F . La minimisation de l'énergie libre ne peut se faire que par une variation continue de la masse volumique entre les phases. κ est un paramètre caractérisant le fluide, dont on verra plus tard qu'il se relie au potentiel d'interaction entre les particules. Cette théorie a été reprise en 1957 par Cahn et Hilliard [42] pour décrire des systèmes nonuniformes tels que les mélanges binaires. Leur développement consiste à dire que pour un système avec des interactions internes, la densité d'énergie libre ψ est une fonction du champ de concentration c ¹. Dire que ψ au point \mathbf{r} dépend du champ entier de concentration est équivalent à dire que ψ au point \mathbf{r} dépend de toutes les dérivées de la concentration c en \mathbf{r} : $\psi(\mathbf{r}, [c(\mathbf{r})]) = \psi(\mathbf{r}, c, \nabla c, \nabla^2 c, \dots)$. Donc l'idée de Cahn et Hilliard est de développer ψ autour de ψ_r qui est la densité d'énergie libre lorsque la concentration du système est uniforme. Pour des raisons de symétrie le premier terme non-nul du développement est proportionnel à $|\nabla c|^2$.

$$\psi \approx \psi_r + \frac{\kappa}{2} |\nabla c|^2 \quad (\text{III.24})$$

Ceci est bien équivalent à la théorie de van der Waals. Pour cette raison, nous emploierons dans tout le reste du manuscrit alternativement les expressions de "théorie de van der Waals" ou "théorie de Cahn-Hilliard" pour faire référence à ce modèle de densité d'énergie libre.

III.1.2.2 Profil d'interface et énergie d'interface

Le développement de ψ introduit par van der Waals mène à une variation continue de masse volumique entre le liquide et la vapeur. La question qui se pose est donc de trouver le profil de masse volumique entre deux phases. Imaginons un équilibre liquide-vapeur d'un fluide enfermé dans un récipient de volume V_0 et à température T_0 en présence de gravité. La gravité implique que la vapeur soit placée au-dessus du liquide, ce qui a pour conséquence que la masse volumique ne dépend que de l'altitude z (voir figure III.7). Soit la fonction $\Psi(\rho) = \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 - W(\rho)$ avec $W(\rho)$

¹Cahn et Hilliard s'intéressaient à la concentration c d'une espèce dans une autre espèce. c et ρ ont un rôle équivalent pour ψ .

l'écart de la densité d'énergie libre ψ_r à la double tangente définie par $y = \rho\mu_0 - P_0$ (voir figure III.8).

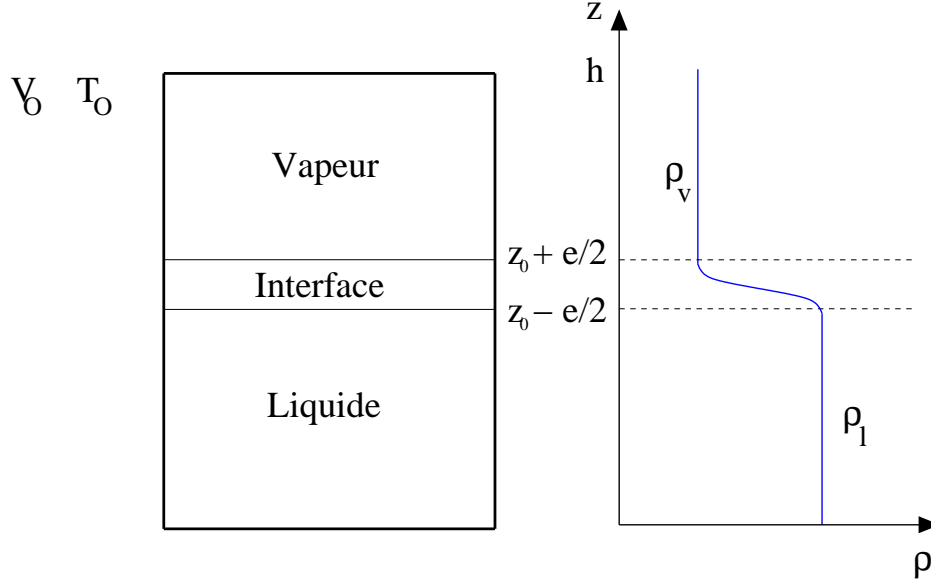


FIG. III.7: Allure du profil de masse volumique ρ d'un équilibre liquide-vapeur avec gravité.

La fonction Ψ représente la densité d'énergie libre en "excès". En effet, dans chaque phase, il n'y a pas d'excès d'énergie libre car dans chaque phase $W(\rho_v) = W(\rho_l) = 0$ et $|\nabla\rho|^2 = 0$. La seule zone où il y a un excès d'énergie libre est au niveau de l'interface. Nous rappelons que l'équilibre est tel que l'énergie libre F soit minimum sous contraintes. Ceci a pour conséquence que le profil de ρ à l'interface est tel que l'excès d'énergie libre soit minimum. Par définition l'excès d'énergie libre est l'intégrale sur tout l'espace de la densité d'énergie libre en excès : $\int \Psi(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = A \int \Psi(\mathbf{r}) \, dz$ avec A la section du récipient. Sans entrer dans les détails du calcul variationnel qui permet de minimiser cette intégrale, on peut simplement dire que le problème est équivalent à trouver le profil qui est solution de l'équation différentielle d'Euler-Lagrange : $\kappa \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} = -\frac{\partial W}{\partial \rho}$. Avec les conditions aux limites adéquates, on trouve donc le profil de ρ qui minimise l'énergie libre. Techniquement il est plus simple d'intégrer z en fonction de ρ que ρ en fonction de z :

$$z(\rho) = z_0 \pm \left(\frac{\kappa}{2}\right)^{1/2} \int_{\rho_v}^{\rho_l} [-W(\rho)]^{-1/2} d\rho \quad (\text{III.25})$$

avec z_0 la position de l'interface où $\rho(z_0) = (\rho_v + \rho_l)/2$. Le signe \pm signifie qu'il y a une branche ascendante telle que la masse volumique tend vers ρ_v et une branche descendante telle que la masse volumique tende vers ρ_l . Par définition l'énergie libre de l'interface F_I correspond à la différence entre l'énergie libre de tout le système F moins l'énergie libre de chaque phase F_v et F_l .

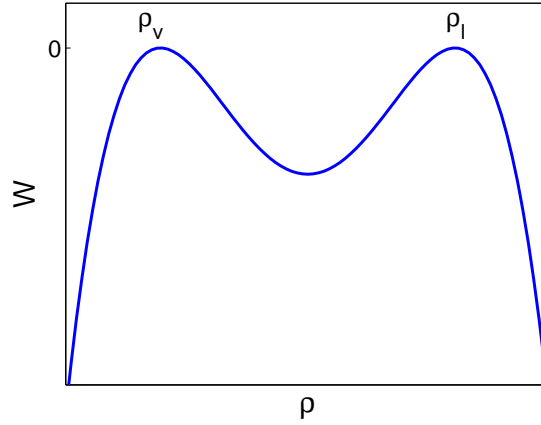


FIG. III.8: Allure de $W(\rho) = \rho\mu_0 - P_0 - \psi_r(\rho)$. Cette fonction est nulle dans chaque phase. $W(\rho)$ est non nulle uniquement à l'interface puisqu'à l'interface, ρ passe par toutes les valeurs entre ρ_v et ρ_l .

$$F_I = F - F_v - F_l \quad (\text{III.26})$$

$$F_I = A \int \psi dz - A \int_{z_0+e/2}^h \psi_v dz - A \int_0^{z_0-e/2} \psi_l dz \quad (\text{III.27})$$

$$F_I = A \int_{z_0-e/2}^{z_0+e/2} (\psi - \psi_{l,v}) dz \quad (\text{III.28})$$

avec $\psi_{l,v} = \psi_l$ si $z < z_0$ et $\psi_{l,v} = \psi_v$ si $z > z_0$. Cette intégrale est uniquement non-nulle au niveau de l'interface. Bien que $\psi - \psi_{l,v}$ soit différent de la densité d'énergie libre en excès Ψ , ces deux fonctions ont la même intégrale : $F_I = A \int \Psi dz$. Par définition la tension de surface σ définie précédemment est la contribution de l'interface à l'énergie libre du système par unité de surface, donc :

$$\sigma = \frac{F_I}{A} = \int \Psi dz \quad (\text{III.29})$$

Ainsi à l'équilibre, pour le profil d'interface solution, la tension de surface σ peut s'écrire sous

trois formes équivalentes :

$$\sigma = \int \kappa |\nabla \rho|^2 dz \quad (\text{III.30})$$

$$= -2 \int W[\rho(z)] dz \quad (\text{III.31})$$

$$= \int_{\rho_v}^{\rho_l} \sqrt{-2\kappa W(\rho)} d\rho \quad (\text{III.32})$$

Les deux premières expressions nécessitent la connaissance du profil solution à l'équilibre alors que la dernière expression permet d'évaluer la tension de surface par l'intégration de $W(\rho)$ qui ne dépend que de l'équation d'état et du paramètre κ qui est généralement choisi indépendamment de ρ . Cette dernière expression permet donc de dire que la tension de surface a un rapport d'échelle en $\sqrt{\kappa}$. Les figures III.9 représentent la tension de surface en fonction de la température. La figure III.9.(a) représente le rapport théorique de la tension de surface σ sur la valeur de $\sqrt{\kappa}$ en fonction de la température réduite du fluide, évalué par l'expression (III.32). La figure III.9.(b) permet de comparer la tension de surface issue de corrélations pour le diazote avec la tension de surface obtenue à partir de l'expression (III.32) en ajustant le coefficient κ et utilisant l'équation d'état de van der Waals.

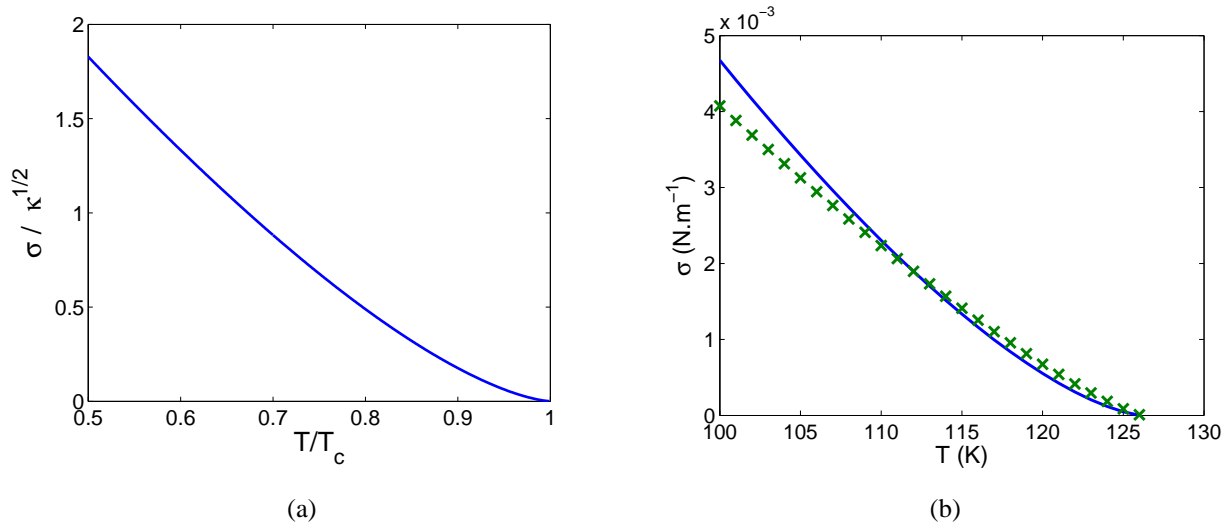


FIG. III.9: (a) Rapport de la tension de surface sur $\sqrt{\kappa}$ en fonction de la température réduite pour un fluide de van der Waals. (b) Comparaison entre la tension de surface du diazote et la tension de surface obtenue selon la théorie de van der Waals en ajustant le paramètre κ .

Ainsi dans la théorie de van der Waals de l'interface, l'énergie d'interface apparaît naturellement en même temps que la variation continue de masse volumique d'une phase à l'autre. Si

on reprend le cheminement : les interactions attractives entre particules induisent une variation continue de la masse volumique entre les deux phases. L'énergie d'interface apparaît de fait par la présence dans l'interface d'un profil continu de masses volumiques entre ρ_v et ρ_l ; ce profil d'interface crée un "excès" d'énergie libre par rapport aux phases homogènes. Cet excès d'énergie libre par unité de surface correspond donc par définition à la tension de surface σ . Et le profil solution d'interface correspond au profil qui minimise cet excès d'énergie libre. On remarque aussi qu'au niveau de l'interface, la pression passe par un ensemble de valeurs différentes de la pression d'équilibre de chaque phase $p_b(\rho_v) = p_b(\rho_l)$. L'équilibre mécanique est assuré à la traversée de l'interface sans l'égalité des pressions. L'équation d'état de van der Waals comme toutes les équations d'état a été dérivée pour des systèmes thermodynamiques infinis et uniformes. Pour des systèmes non-uniformes, comme un équilibre liquide-vapeur avec interface, le concept de pression peut être redéfini. Dans le cadre de la théorie de l'interface de van der Waals, on peut définir un tenseur des pressions [43] :

$$P_{\alpha\beta} = P(\mathbf{r})\delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \quad (\text{III.33})$$

$$P(\mathbf{r}) = p_b - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \quad (\text{III.34})$$

avec p_b correspondant à l'équation d'état du fluide. Pour les systèmes qui présentent un équilibre non-uniforme, la condition d'équilibre n'est pas $\nabla p_b = 0$ mais se généralise par $\partial_\beta P_{\alpha\beta} = 0$. Pour l'exemple de la figure III.7 la composante normale de ce tenseur des pressions est $P_{zz} = p_b - \kappa \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} + \kappa \left(\frac{\partial \rho}{\partial z} \right)^2$. L'équilibre mécanique est assuré à la traversée de l'interface car le profil de masse volumique solution est tel que P_{zz} ait pour valeur $p_b(\rho_v) = p_b(\rho_l)$ dans tout le fluide.

III.2 Equation de Boltzmann-Enskog

Dans cette partie, nous allons présenter l'équation de Boltzmann-Enskog qui peut être vue comme l'extension ou la modification de l'équation de Boltzmann pour les fluides non-idéaux. En effet, comme il a été dit précédemment, les hypothèses de l'équation de Boltzmann correspondent au modèle du gaz parfait : gaz suffisamment dilué pour considérer les particules ponctuelles et les collisions comme des chocs ponctuels instantanés. Dans son travail original [44], Enskog a proposé une modification du terme collisionnel de l'équation de Boltzmann en tenant compte de la taille des particules. Autrement dit, si on considère que le potentiel de Lennard-Jones (figure III.1) est un bon modèle pour décrire les interactions entre particules d'un gaz non-idéal, l'équation de Boltzmann-Enskog originale traite uniquement la partie répulsive de ce potentiel. L'équation de Boltzmann-Enskog étendue qui va être présentée ici, en suivant la démarche de He et Doolen [45],

contient un terme collisionnel supplémentaire pour tenir compte de la partie attractive du potentiel intermoléculaire.

Formellement, d'après la hiérarchie BBGKY, l'équation d'évolution de la fonction de distribution $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t)$ (comme nous l'avons vu au chapitre I) est :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}_1} f = \int \int \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} V(r_{12}) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 \quad (\text{III.35})$$

avec $f^{(2)} = f^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2, t)$ la fonction de distribution à deux corps, \mathbf{F} un champ de force extérieure et $V(r_{12})$ le potentiel entre deux particules séparées d'une distance $r_{12} = \|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\|$. Afin de modéliser ce terme collisionnel, nous séparons l'intégrale sur l'espace en deux régions :

$$\begin{aligned} \int \int \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} V(r_{12}) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 &= \int_{\mathcal{D}_1} \int \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} V(r_{12}) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 \\ &+ \int_{\mathcal{D}_2} \int \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} V(r_{12}) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 \end{aligned}$$

Le domaine \mathcal{D}_1 correspond à $r_{12} < d_0$ avec d_0 la distance à partir de laquelle la force intermoléculaire change de signe c'est-à-dire au minimum du potentiel $V(r_{12})$. Le domaine \mathcal{D}_2 correspond donc à la partie attractive du potentiel.

III.2.1 Modélisation du terme collisionnel répulsif : terme d'Enskog

Regardons tout d'abord, le modèle du terme collisionnel selon Enskog lorsque la taille des particules est prise en compte. L'intégrale I_1 sur le domaine \mathcal{D}_1 est modélisée par des collisions de sphères dures de diamètre d_0 :

$$\begin{aligned} I_1 = & \int d\mu_2 \left[\chi(\mathbf{r}_1 + \frac{1}{2}d_0 \mathbf{k}) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}'_1) f(\mathbf{r}_1 + d_0 \mathbf{k}, \mathbf{v}'_2) \right. \\ & \left. - \chi(\mathbf{r}_1 - \frac{1}{2}d_0 \mathbf{k}) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1) f(\mathbf{r}_1 - d_0 \mathbf{k}, \mathbf{v}_2) \right] \quad (\text{III.36}) \end{aligned}$$

avec μ_2 l'espace collisionnel de la seconde particule de vitesse \mathbf{v}_2 . χ est la fonction de corrélation à deux corps telle que $f^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2) = \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1) f(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2)$. \mathbf{k} est le vecteur unitaire dirigé du centre de la seconde particule vers la première comme le montre la figure III.10. Le terme collisionnel de Boltzmann se traduit par la ponctualité des particules et des collisions ($d_0 = 0$) et par l'hypothèse du chaos moléculaire ($\chi = 1$).

Dans un deuxième temps, la modélisation d'Enskog consiste à développer $f(\mathbf{r}_1 + d_0 \mathbf{k}, \mathbf{v}'_2)$, $f(\mathbf{r}_1 - d_0 \mathbf{k}, \mathbf{v}_2)$ et χ autour de la position \mathbf{r}_1 . En utilisant l'écriture condensée $f_1 = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)$,

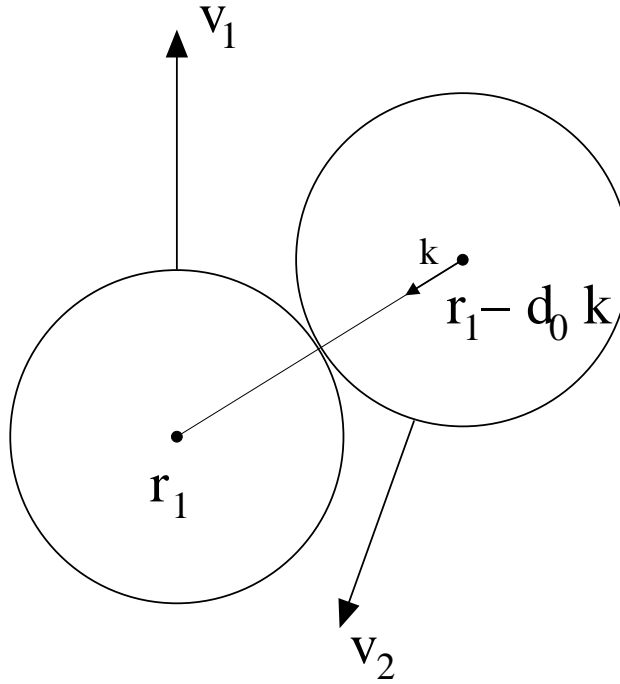


FIG. III.10: Illustration de la prise en compte de la taille des particules pour le terme collisionnel d'Enskog.

$f'_1 = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}'_1)$, $f_2 = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_2)$ et $f'_2 = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}'_2)$, et sans entrer dans les calculs, on obtient :

$$I_1 = \chi \int d\mu_2 [f'_1 f'_2 - f_1 f_2] \quad (\text{III.37})$$

$$+ \chi \int d\mu_2 d_0 \mathbf{k} \cdot [f'_1 \nabla f'_2 + f_1 \nabla f_2] \quad (\text{III.38})$$

$$+ \frac{1}{2} \int d\mu_2 d_0 \mathbf{k} \cdot \nabla \chi [f'_1 f'_2 + f_1 f_2] \quad (\text{III.39})$$

Ce développement permet de faire apparaître, en première position, le terme collisionnel de l'équation de Boltzmann au facteur multiplicatif χ près. Ce premier terme peut donc être modélisé par l'approximation BGK, ES-BGK ou toute autre approximation du terme collisionnel de Boltzmann. Concernant les deux autres termes, Enskog proposa de les évaluer en approximant f_1 , f'_1 , f_2 et f'_2 par f_1^{eq} , $f_1'^{eq}$, f_2^{eq} et $f_2'^{eq}$. Au final, le terme collisionnel d'Enskog s'écrit :

$$I_1 = \chi \Omega_0 \quad (\text{III.40})$$

$$- b \rho \chi f_1^{eq}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u}) \cdot \left[\nabla \ln(\rho^2 \chi T) + \frac{3}{5}(C^2 - \frac{5}{2}) \nabla \ln T \right] \quad (\text{III.41})$$

$$- b \rho \chi f_1^{eq} \frac{2}{5} \left[2\mathbf{C}\mathbf{C} : \nabla \mathbf{u} + (C^2 - \frac{5}{2}) \nabla \cdot \mathbf{u} \right] \quad (\text{III.42})$$

avec Ω_0 le terme collisionnel ordinaire de Boltzmann, ρ , \mathbf{u} et T les champs macroscopiques au point considéré et $\mathbf{C} = \frac{(\mathbf{v}_1 - \mathbf{u})}{\sqrt{2rT}}$ dont la norme est C . La taille des particules apparaît via b qui s'apparente à un volume massique : $b = \frac{2}{3m} \pi d_0^3$. Ainsi le terme collisionnel d'Enskog peut être vu comme une extension du terme collisionnel de Boltzmann puisque dans la limite où les particules sont ponctuelles ($b = 0$) et l'hypothèse de chaos moléculaire ($\chi=1$), on retrouve $I_1 = \Omega_0$. Ce terme d'Enskog fait apparaître les dérivées spatiales des champs macroscopiques et nécessite un modèle pour la fonction de corrélation χ . Différents modèles de χ sont proposés en physique statistique de l'équilibre [46]. Dans ce travail, nous nous limiterons à l'un des modèles les plus simples qui correspond au même niveau d'approximation que celui qui permet d'obtenir l'équation d'état de van der Waals : $\chi = \frac{1}{1 - b\rho}$.

III.2.2 Approximation de champ moyen du terme d'interactions attractives

En complément du travail d'Enskog, il est possible de modéliser le terme collisionnel dans le domaine \mathcal{D}_2 , c'est-à-dire le domaine où les interactions entre particules sont attractives. Dans ce domaine nous allons faire l'hypothèse du chaos moléculaire, $f^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2) = f(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1)f(\mathbf{r}_2, \mathbf{v}_2) = f_1 f_2$, ce qui permet d'écrire :

$$I_2 = \int_{\mathcal{D}_2} \int \frac{\partial f^{(2)}}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} V(r_{12}) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 \quad (\text{III.43})$$

$$= \int_{\mathcal{D}_2} \int f_2 \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{v}_1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} V(r_{12}) d\mathbf{v}_2 d\mathbf{r}_2 \quad (\text{III.44})$$

$$= \nabla_{\mathbf{r}_1} \left[\int_{\mathcal{D}_2} \rho(\mathbf{r}_2) V(r_{12}) d\mathbf{r}_2 \right] \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{v}_1} \quad (\text{III.45})$$

$$= \nabla_{\mathbf{r}_1} V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}_1} f_1 \quad (\text{III.46})$$

Le terme $V_m = \int_{\mathcal{D}_2} \rho(\mathbf{r}_2) V(r_{12}) d\mathbf{r}_2$ représente la somme de toutes les interactions attractives de toutes les particules agissantes sur la particule située en \mathbf{r}_1 . C'est pourquoi V_m est appelé potentiel moyen subi par la particule située en \mathbf{r}_1 . Le gradient de ce potentiel ∇V_m est donc l'opposé de la

résultante des forces des particules de tout le champ agissant sur la particule en \mathbf{r}_1 . Ce potentiel moyen peut être approximé en faisant un développement au second ordre de $\rho(\mathbf{r}_1)$ autour de \mathbf{r}_1 :

$$\rho(\mathbf{r}_2) \approx \rho(\mathbf{r}_1) + \mathbf{r}_{21} \cdot \nabla \rho + \frac{1}{2} \mathbf{r}_{21} \mathbf{r}_{21} : \nabla \nabla \rho \quad (\text{III.47})$$

Ce développement permet d'écrire :

$$V_m = -2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho \quad (\text{III.48})$$

avec a et κ des constantes du potentiel intermoléculaires :

$$a = -\frac{1}{2} \int_{r>d_0} V(r) d\mathbf{r} \quad (\text{III.49})$$

$$\kappa = -\frac{1}{6} \int_{r>d_0} r^2 V(r) d\mathbf{r} \quad (\text{III.50})$$

Il apparaîtra après la procédure de Chapman-Enskog que ces deux paramètres correspondent bien aux paramètres a et κ introduits dans la théorie de van der Waals (équation d'état et interface diffuse). Ainsi le potentiel "ressenti" par la particule située en \mathbf{r}_1 peut être approximé par la connaissance en \mathbf{r}_1 de la masse volumique ρ et de son laplacien. Pour des raisons de symétrie l'intégrale contenant le gradient de masse volumique est nulle. Ce développement se justifie par le fait que le potentiel intermoléculaire tend vers zéro très vite à une distance de l'ordre de quelques diamètres de particule. Seul l'environnement proche de la particule considérée joue un rôle important.

III.2.3 Equation cinétique pour les fluides non-idéaux

Le modèle cinétique que nous allons considérer pour décrire un fluide non-idéal est donc au final :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} - \nabla_{\mathbf{r}} V_m \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = I_1 \quad (\text{III.51})$$

avec I_1 le terme collisionnel d'Enskog décrit précédemment. Le terme collisionnel d'attraction $\nabla_{\mathbf{r}} V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f$ a le même statut qu'une force extérieure ; le traitement champ moyen de la partie attractive du potentiel d'interaction permet de voir la somme de toutes les attractions agissant sur une particule en \mathbf{r} comme une force extérieure. Par rapport à l'équation de Boltzmann des gaz dilués, ce modèle cinétique nécessite un modèle d'interaction interparticulaire qui apparaît par l'intermédiaire de la taille des particules dans le terme collisionnel d'Enskog I_1 et par l'intermédiaire (dans le terme d'attraction $\nabla_{\mathbf{r}} V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f$) de deux constantes a et κ qui sont respectivement les moments d'ordre zéro et d'ordre deux du potentiel interparticulaire. Il est nécessaire également d'avoir un

modèle pour la fonction de corrélation χ . Nous pouvons remarquer aussi que le terme d'Enskog I_1 qui représente la partie répulsive du potentiel d'interaction dépend explicitement des gradients des champs macroscopiques ρ , u et T alors que le terme qui représente la partie attractive du potentiel dépend explicitement du gradient de la masse volumique et du gradient de son laplacien : $\nabla_{\mathbf{r}} V_m = -2a\nabla\rho - \kappa\nabla\nabla^2\rho$.

III.3 Passage au macroscopique à partir de l'équation de Boltzmann-Enskog étendue

Comme pour l'équation de Boltzmann, il est possible de faire le développement de Chapman-Enskog (chapitre I) pour trouver les trois équations macroscopiques de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie lorsque la fonction de distribution f est proche de la distribution d'équilibre f^{eq} .

III.3.1 Equation de conservation de la masse

L'équation de conservation de la masse n'est bien entendu pas modifiée puisque le nouveau terme collisionnel ne crée ni ne détruit de masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{III.52})$$

III.3.2 Equation de conservation de la quantité de mouvement

Des termes supplémentaires apparaissent dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement à cause des interactions entre particules.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta\right) u_\alpha = \frac{F_\alpha}{m} - \partial_\alpha V_m - \frac{1}{\rho} \partial_\alpha p_{GP} - \frac{1}{\rho} \partial_\alpha (\rho^2 b r T \chi) + \frac{1}{\rho} \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} \quad (\text{III.53})$$

Cette équation contient comme précédemment (I.124) le tenseur des contraintes visqueuses noté $\partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}$ ici. Cette équation contient également le gradient de la pression des gaz parfaits $\partial_\alpha p_{GP}$ avec $p_{GP} = \rho r T$ qui représente la variation de quantité de mouvement par transport des particules. Par rapport à l'équation de conservation dérivée précédemment (I.124), celle-ci contient donc deux termes supplémentaires : $\partial_\alpha V_m$ et $\partial_\alpha (\rho^2 b r T \chi)$. Le terme $\partial_\alpha V_m$ a pour origine la partie attractive du

potentiel interparticulaire, il représente un échange de quantité de mouvement à distance entre les particules. Le terme $\partial_\alpha (\rho^2 b r T \chi)$ représente un échange de quantité de mouvement entre particules causé par la partie répulsive du potentiel interparticulaire. Nous pouvons réécrire cette équation sous la forme suivante :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta\right) u_\alpha = \frac{F_\alpha}{m} - \frac{1}{\rho} \partial_\beta P_{\alpha\beta} + \frac{1}{\rho} \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} \quad (\text{III.54})$$

en définissant le tenseur des pressions $P_{\alpha\beta} = P\delta_{\alpha\beta} + \kappa \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta}$ et $P = \rho r T (1 + b \rho \chi) - a \rho^2 - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2$. On retrouve ainsi le tenseur des pressions (III.33) dérivé précédemment dans la cadre de la théorie de van der Waals de l'interface liquide-vapeur à l'équilibre en identifiant l'équation d'état du fluide à l'équilibre par $p_b = \rho r T (1 + b \rho \chi) - a \rho^2$. En prenant comme modèle pour la fonction de corrélation $\chi = \frac{1}{1-b\rho}$, on trouve que le fluide obéit à l'équation d'état de van der Waals : $p_b = \frac{\rho r T}{1-b\rho} - a \rho^2$. Si on utilise l'approximation BGK pour le terme collisionnel Ω_0 , le coefficient de viscosité dynamique s'identifie à $\mu = \rho r T \tau (\frac{1}{\chi} + \frac{2}{5} b \rho)$.

III.3.2.1 A propos de l'équation de quantité de mouvement :

Le modèle collisionnel d'Enskog et le traitement champ moyen de la partie attractive permet d'obtenir une équation de conservation de la quantité de mouvement pour un fluide obéissant à l'équation de van der Waals c'est-à-dire un fluide qui peut coexister sous deux phases : vapeur et liquide. Autrement dit, l'équation obtenue est 'a priori' valable et pertinente dans tout le fluide quelle que soit sa forme liquide ou vapeur. De plus cette équation contient le tenseur des pressions de la théorie de l'interface de van der Waals, ce qui signifie que cette équation est capable de décrire l'interface liquide-vapeur. On remarque qu'à l'équilibre et en l'absence de champ de force extérieure, on obtient $\partial_\beta P_{\alpha\beta} = 0$. On retrouve ainsi la condition d'équilibre du fluide de la théorie de l'interface de van der Waals. Cette propriété permet de qualifier l'équation de Boltzmann-Enskog avec champ moyen de "thermodynamiquement cohérente" [45]. D'un point de vue macroscopique l'équation de conservation de la quantité de mouvement est un bilan des forces sur la particule fluide. Dans l'équation (III.54), il y a trois types de forces : le champ de force extérieure F_α , le gradient du tenseur des pressions $\partial_\beta P_{\alpha\beta}$ et le gradient du tenseur des contraintes visqueuses $\partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}$. La séparation entre le tenseur des pressions et le tenseur des contraintes visqueuses permet de faire la distinction entre la partie à l'équilibre et la partie hors d'équilibre du tenseur des contraintes. D'autres choix de distinction entre les forces agissant sur la particule fluide sont pertinents, comme par exemple :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta\right) u_\alpha = \frac{F_\alpha^{tot}}{m} - \frac{1}{\rho} \partial_\alpha p_{GP} + \frac{1}{\rho} \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} \quad (\text{III.55})$$

avec $F_\alpha^{tot} = F_\alpha - m\partial_\alpha V_m - m\frac{1}{\rho}\partial_\alpha(\rho^2 b r T \chi)$. Cette “force totale” est la somme de la force extérieure et des forces internes aux systèmes ayant pour origine le potentiel d’interactions interparticulaires. Dans cette écriture, ni le tenseur des pressions, ni l’équation d’état n’apparaissent. La seule pression qui apparaît est la pression cinétique $p_{GP} = \rho r T$. Cette écriture est basée sur la distinction entre les forces réelles F_α^{tot} et une force “apparente” $\partial_\alpha p_{GP}$. En effet, la pression cinétique a pour origine le transport pur de particules au niveau du modèle cinétique. Lorsqu’on examine la procédure de Chapman-Enskog, on voit que la moyenne selon la distribution d’équilibre du transport de quantité de mouvement $\int d\mathbf{v} v_\alpha \mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = \partial_\beta \langle v_\alpha v_\beta \rangle_{eq}$ se décompose en deux termes au niveau macroscopique : le transport macroscopique $u_\beta \partial_\beta u_\alpha$ et le gradient de pression cinétique $\partial_\alpha p_{GP}$ qui apparaît donc comme une force “apparente” agissant sur la particule fluide contrairement à F_α^{tot} qui représente l’ensemble des forces réelles qu’elles soient externes ou internes au fluide. L’écriture (III.54) englobe dans le tenseur des pressions $P_{\alpha\beta}$ toutes les forces internes au fluide qu’elles soient réelles ou apparentes.

III.3.3 Equation de conservation de l’énergie

Dans le modèle cinétique de Boltzmann, il n’y avait pas de potentiel d’interaction entre les particules si bien que l’énergie était simplement la moyenne des énergies cinétiques des particules. Maintenant l’énergie totale du fluide a deux contributions : l’énergie cinétique e_k qui représente l’énergie cinétique des particules et qui sert de définition à la température par $e_k = 3/2 \rho r T$, et l’énergie potentielle d’interaction e_V qui est la somme de toutes les interactions subies par une particule, c’est à dire $e_V = 1/2 \rho \int \rho(\mathbf{r}_2) V(r_{12}) d\mathbf{r}_2 = 1/2 \rho V_m$ ². L’équation de transport macroscopique de l’énergie cinétique est très semblable à l’équation de conservation de l’énergie dérivée précédemment (I.125) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_k}{\partial t} + \partial_\beta (u_\beta e_k) &= -p_{GP}(1 + b\rho\chi)\partial_\beta u_\beta + \partial_\beta(\lambda\partial_\beta T) + \Pi_{\alpha\beta}\partial_\beta u_\alpha \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta\partial_\beta\right)T &= -\frac{p_{GP}(1 + b\rho\chi)}{\rho c_v}\partial_\beta u_\beta + \frac{1}{\rho c_v}\partial_\beta(\lambda\partial_\beta T) + \frac{1}{\rho c_v}\Pi_{\alpha\beta}\partial_\beta u_\alpha \end{aligned} \quad (\text{III.56})$$

La différence vient du travail des forces de pression. Ce qui ressemble au travail de la pression ne correspond ni au tenseur des pressions $P_{\alpha\beta}$ ni à la pression de l’équation d’état du fluide p_b . La pression qui travaille correspond à la pression cinétique p_{GP} par un facteur correctif $(1 + b\rho\chi)$ qui rend compte de la taille des particules. Si on utilise l’approximation *BGK* pour le terme collisionnel Ω_0 , le coefficient de conductivité thermique s’identifie à $\lambda = \frac{5}{2}\rho r^2 T \tau (\frac{1}{\chi} + \frac{3}{5}b\rho)$.

²Le facteur 1/2 sert à ne pas compter deux fois la même interaction pour une même paire de particules.

Remarque La procédure de Chapman-Enskog nous a conduit, comme en monophasique, à un système fermé de trois équations macroscopiques sur ρ , \mathbf{u} et T . Lorsque les champs de ces trois grandeurs sont connus, il est facile de remonter aux champs de densité d'énergie cinétique $e_k = 3/2\rho rT$ et de densité d'énergie potentielle $e_v = 1/2\rho \int \rho(\mathbf{r}_2)V(r_{12}) d\mathbf{r}_2 = 1/2\rho V_m$. La densité d'énergie interne est alors simplement $e = e_k + e_v$. Il est néanmoins intéressant de prendre le temps de dériver les équations d'évolution de ces trois densités. Il s'agit là d'un raisonnement purement macroscopique qui est extérieure à la procédure de Chapman-Enskog. En adoptant comme notation réduite, $\rho(\mathbf{r}_i) = \rho_i$ et $\mathbf{u}(\mathbf{r}_i) = \mathbf{u}_i$, et en utilisant le théorème de Gauss et le fait que $\partial_{\beta 2}V(\mathbf{r}_{12}) = -\partial_{\beta 1}V(\mathbf{r}_{12})$ nous obtenons :

$$\frac{\partial e_v}{\partial t} + \partial_{\beta 1}(u_{\beta 1}e_v) = \frac{\rho_1}{2} \left\{ \frac{\partial V_m}{\partial t} + (u_{\beta 1}\partial_{\beta 1})V_m \right\} \quad (\text{III.57})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\rho_1}{2} \left\{ - \int_{\mathcal{D}_2} \partial_{\beta 2} [\rho_2 u_{\beta 2}] V(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_{12} + u_{\beta 1} \partial_{\beta 1} \int_{\mathcal{D}_2} \rho_2 V(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_{12} \right\} \\ &= \frac{\rho_1}{2} \left\{ \int_{\mathcal{D}_2} \rho_2 u_{\beta 2} \partial_{\beta 2} V(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_{12} + u_{\beta 1} \int_{\mathcal{D}_2} \rho_2 \partial_{\beta 1} V(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_{12} \right\} \\ &= \frac{\rho_1}{2} \int_{\mathcal{D}_2} \rho_2 [u_{\beta 2} - u_{\beta 1}] \partial_{\beta 2} V(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_{12} \end{aligned} \quad (\text{III.58})$$

En supposant que la vitesse macroscopique varie lentement, on peut faire développement limité de $\mathbf{u}(\mathbf{r}_2)$ autour de \mathbf{r}_1 , c'est-à-dire $u_{\beta 2} = u_{\beta 1} + r_\gamma \partial_\gamma u_\beta$. Ceci nous permet d'écrire :

$$\frac{\partial e_v}{\partial t} + \partial_{\beta 1}(u_{\beta 1}e_v) = \frac{\rho_1}{2} \partial_\gamma u_{\beta 1} \int_{\mathcal{D}_2} \rho_2 r_\gamma \partial_{\beta 2} V(\mathbf{r}_{12}) d\mathbf{r}_{12} \quad (\text{III.59})$$

Pour évaluer cette intégrale, nous pouvons utiliser les mêmes hypothèses que pour le champ moyen et nous servir des expressions (III.47) et (III.48), ce qui nous permet d'écrire l'équation de transport de la densité d'énergie potentielle e_v :

$$\frac{\partial e_v}{\partial t} + \partial_\beta(u_\beta e_v) = \partial_\gamma u_\beta \left[(a\rho^2 + \frac{\kappa}{2}\rho\partial_{\alpha\alpha}\rho)\delta_{\beta\gamma} + \kappa\rho\partial_\beta\partial_\gamma\rho \right] \quad (\text{III.60})$$

En combinant cette équation à l'équation de transport de la densité d'énergie cinétique (III.56), nous obtenons l'équation de transport de la densité d'énergie totale $e = e_k + e_v$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial t} + \partial_\beta(u_\beta e) &= -P_{\alpha\beta}\partial_\beta u_\alpha + \partial_\beta(\lambda\partial_\beta T) + \Pi_{\alpha\beta}\partial_\beta u_\alpha \\ &+ \kappa\partial_\beta u_\alpha \left[\partial_\beta(\rho\partial_\alpha\rho) - \frac{1}{2}\partial_\gamma(\rho\partial_\gamma\rho)\delta_{\alpha\beta} \right] \end{aligned} \quad (\text{III.61})$$

Cette équation fait apparaître le travail du tenseur des pressions $-P_{\alpha\beta}\partial_\beta u_\alpha$ qui a pour origines les transports de e_k et de e_v alors que les termes de conduction $\partial_\beta(\lambda\partial_\beta T)$ et de dissipation visqueuse ont une origine purement cinétique. Et le dernier terme vient du transport de l'énergie potentielle.

III.4 Point de vue mésoscopique sur l'équilibre liquide-vapeur et conclusions

Comme nous venons de le voir le modèle cinétique de Boltzmann-Enskog avec traitement champ moyen de la partie attractive des interactions interparticulaires fait apparaître dans les équations macroscopiques l'équation d'état de van der Waals p_b et le tenseur des pressions $P_{\alpha\beta}$ de la théorie de l'interface de van der Waals. Il est d'abord intéressant et rassurant de constater que les équations macroscopiques dérivées sont compatibles avec la thermodynamique de l'équilibre d'une interface liquide-vapeur. En effet, en regardant les trois équations macroscopiques (III.52), (III.54) et (III.56), on en déduit que l'équilibre thermodynamique est atteint lorsque le fluide est isotherme $\partial_\beta T = 0$, en absence de cisaillement $\partial_\beta u_\alpha = 0$ et lorsque le gradient du tenseur des pressions nul $\partial_\beta P_{\alpha\beta} = 0$. Cela signifie que ce modèle cinétique pour fluides non-idéaux permet d'observer la dynamique de changement de phase et la formation d'interfaces d'un fluide de van der Waals puisque ce modèle est compatible avec l'équilibre d'un fluide de van der Waals et la théorie thermodynamique de van der Waals pour les interfaces liquide-vapeur. Il est intéressant maintenant d'examiner du point de vue mésoscopique de l'équilibre liquide-vapeur et l'existence d'une interface. Pour un état d'équilibre homogène d'un fluide idéal (décrit par l'équation de Boltzmann) ou non-idéal (décrit par l'équation de Boltzmann-Enskog), l'équilibre se traduit par le fait que chaque terme de l'équation cinétique est nul. Dans ce cas le terme collisionnel est nul car par définition il est nul à l'équilibre, le terme temporel est nul car l'équilibre est bien sûr un état stationnaire et le terme de transport est nul car on regarde un état d'équilibre homogène dans l'espace. En revanche, pour un état d'équilibre liquide-vapeur avec interfaces, le terme de transport $\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f$ n'est pas nul au niveau de l'interface. Au niveau de l'interface il y a une compensation entre le terme de transport, une partie du terme collisionnel d'Enskog I_1 et le terme $-\nabla_{\mathbf{r}} V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f$ qui contient la partie attractive des interactions et qui est aussi non-nul au niveau de l'interface.

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f^{eq} - \nabla_{\mathbf{r}} V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} = -b\rho\chi f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla \ln(\rho^2 \chi T) \quad (\text{III.62})$$

Compte tenue de l'expression de la distribution d'équilibre f^{eq} , chacun de ces termes peut s'écrire en fonction des dérivées spatiales de la masse volumique.

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f^{eq} = \frac{f^{eq}}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho \quad (\text{III.63})$$

$$\nabla_{\mathbf{r}} V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} = \frac{2a}{rT} f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho + \frac{\kappa}{rT} f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \rho \quad (\text{III.64})$$

$$b\rho\chi f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla \ln(\rho^2 \chi T) = b\rho\chi f^{eq} \left(\frac{2}{\rho} + \frac{1}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right) \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho \quad (\text{III.65})$$

Ainsi, à partir d'une description mésoscopique, la condition d'équilibre d'une interface liquide-vapeur permet d'écrire une équation différentielle pour le profil de la masse volumique lorsque le système passe d'une phase à l'autre :

$$\frac{\nabla_{\mathbf{r}}\rho}{\rho} - \left[\frac{2a}{rT} \nabla_{\mathbf{r}}\rho + \frac{\kappa}{rT} \nabla_{\mathbf{r}}\nabla_{\mathbf{r}}^2\rho \right] = -b\rho\chi \left(\frac{2}{\rho} + \frac{1}{\chi} \frac{\partial\chi}{\partial\rho} \right) \nabla_{\mathbf{r}}\rho \quad (\text{III.66})$$

Il est intéressant de remarquer que la compensation au niveau de l'interface ne se fait pas entre des populations de particules de vitesses différentes. Cette compensation s'effectue pour chaque population de vitesse \mathbf{v} entre les différents termes de l'équation de transport. C'est pourquoi, partant de l'équation de transport, nous trouvons une équation différentielle sur ρ indépendante de la vitesse \mathbf{v} . Cette propriété sera utilisée dans le chapitre V pour mettre en oeuvre une résolution numérique appropriée. On note également que la résolution de cette équation, avec comme conditions au limite les masses volumiques ρ_v et ρ_l qui coexistent, donne comme profil d'interface le même que celui obtenu au paragraphe III.1.2.2 par minimisation de l'énergie libre.

En résumé, dans ce chapitre, après avoir fait des rappels sur l'équilibre thermodynamique des systèmes liquide-vapeur et présenter le modèle d'interface diffuse de van der Waals, a été présenté, l'équation cinétique de Boltzmann-Enskog avec traitement champ moyen de la partie attractive du potentiel intermoléculaire. Cette équation cinétique à la forme suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} - \nabla_{\mathbf{r}} V_m \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = I_1 \quad (\text{III.67})$$

avec I_1 le terme collisionnel d'Enskog qui peut être vu comme une extension du terme collisionnel de Boltzmann lorsque la taille des particules est considérée. Ce terme devient le terme collisionnel de Boltzmann lorsque la taille des particules est négligée. $V_m = -2a\rho - \kappa\nabla^2\rho$ est le potentiel champ moyen. Ce terme rend compte de la partie attractive du potentiel interparticulaire. a et κ sont des paramètres qui dépendent du potentiel choisi. Par contre, la forme du potentiel moyen ne dépend pas du potentiel choisi mais dépend de la procédure champ moyen elle même. Cette équation qui est un modèle cinétique pour décrire les fluides non-idéaux est compatible, à l'équilibre, avec la théorie de van der Waals des interfaces liquide-vapeur dans laquelle apparaît le tenseur des pressions $P_{\alpha\beta}$ qui est une généralisation du concept de pression pour les systèmes pour lesquels il existe un équilibre non-homogène. Ce tenseur des pressions tient compte des dérivées de la masse volumique ρ et est tel que son gradient est nul pour une interface diffuse à l'équilibre contrairement au gradient de la pression p_b (équation d'état) qui ne tient pas compte des variations spatiales de ρ mais seulement de la valeur au point. Nous avons aussi vu que le traitement champ moyen du potentiel d'interaction contribue à l'équation d'état p_b par l'intermédiaire du paramètre a et est aussi à l'origine de la tension de surface par l'intermédiaire du paramètre κ . C'est pourquoi la pression p_b ³ peut être vue comme une approximation à l'ordre zéro (du développement champ

³ôté de la partie gaz parfait qui a une origine purement cinétique

moyen) de la somme de toutes les interactions et les effets de tension de surface peuvent être interprétés comme le second ordre des interactions interparticulaires.

Chapitre IV

Boltzmann-sur-Réseau pour les écoulements diphasiques : application à l'agrégation de particules colloïdales

Dans le chapitre précédent, nous avons rappelé les bases de la thermodynamique de l'équilibre des systèmes liquide-vapeur (section III.1) ainsi que le modèle d'interface diffuse de van der Waals (paragraphe III.1.2). Ce modèle a mis en évidence un tenseur des pressions (III.33) qui généralise le concept de pression au sein de tout le fluide (phases vapeur, phase liquide, interface). Nous avons également présenté un modèle cinétique pour les fluides non-idéaux : l'équation de Boltzmann-Enskog étendue (III.2) qui peut être vue comme une extension de l'équation de Boltzmann en incluant les interactions interparticulaires. La procédure de Chapman-Enskog appliquée à ce modèle cinétique a abouti à un jeu d'équations macroscopiques (paragraphe III.3) similaires aux équations de Navier-Stokes-Fourier pour lesquelles le rôle de la pression est attribué au tenseur des pressions dérivé de la théorie de van der Waals. Ainsi, nous disposons de deux modèles pour les écoulements liquide-vapeur :

- un modèle macroscopique dont l'équilibre *liquide - interface - vapeur* est compatible avec la théorie de l'interface diffuse de van der Waals
- un modèle mésoscopique compatible avec le modèle macroscopique ci-dessus des les situations proches de l'équilibre.

Ces deux types de descriptions d'écoulements diphasiques laissent la possibilité de concevoir des modèles BsR de deux façons :

- la première est de dériver un modèle BsR heuristique de façon à retrouver après la procédure de Chapman-Enskog sur réseau un modèle macroscopique d'écoulements diphasiques. Cette

démarche est équivalente à celle des premiers modèles BsR pour les écoulements monophasiques. Elle sera retenue dans ce chapitre pour étudier l'agrégation de particules colloïdales au voisinage d'une membrane d'ultrafiltration.

- la seconde façon consiste à discrétiser le modèle mésoscopique. Cette discrétisation peut se mener en suivant la démarche de He et Luo [22, 23] qui a permis de dériver un modèle BsR pour les écoulements monophasiques isothermes et dont nous avons proposé une extension au chapitre II pour concevoir un modèle BsR pour les écoulements monophasiques anisothermes. Cette dernière démarche sera explorée au dernier chapitre afin de proposer un modèle BsR pour écoulements diphasiques anisothermes.

IV.1 BsR pour écoulements diphasiques isothermes

Avant d'aborder les fluides colloïdaux, nous présentons une brève revue des modèles BsR diphasiques en détaillant plus particulièrement celui que nous allons mettre en oeuvre. Les modèles présentés ici, concernent uniquement les écoulements isothermes. Ceux-ci peuvent être classés en trois grandes familles présentées successivement ci-dessous, pour une revue plus détaillée, se référer à [47, 48].

IV.1.1 Modèle de Shan-Chen (SC)

L'un des premiers schémas BsR développés pour les écoulements diphasiques est le modèle SC [49, 50, 51]. Ce modèle repose sur l'ajout d'une force dans un modèle BsR classique, afin de reproduire le comportement d'un fluide non-idéal. Cette force n'est pas explicitement prise en compte dans l'équation d'évolution de la fonction de distribution discrète f_i . Elle est simplement introduite, après chaque pas de temps, par une modification du champ de vitesses macroscopiques \mathbf{u} :

$$\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) + \Gamma(\mathbf{x}, t) \quad (\text{IV.1})$$

avec $\Gamma(\mathbf{x}, t) = -\frac{\tau}{\rho}\psi(\mathbf{x})\sum_i \mathcal{G} \psi(\mathbf{x} + \mathbf{v}_i)\mathbf{v}_i$. La grandeur ψ est la fonction “potentiel” et \mathcal{G} représente l'intensité de l'interaction interparticulaire. Cette interaction est équivalente à un potentiel d'interaction $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ entre des particules situées sur des noeuds premiers voisins de la forme :

$$V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathcal{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')\psi(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}') \quad (\text{IV.2})$$

En choisissant une fonction potentielle de la forme $\psi = \psi_0 \exp(-\frac{\rho_0}{\rho})$, il est possible d'obtenir un équilibre liquide-vapeur dont les masses volumiques coexistantes peuvent être déduites d'une construction du type égalité des aires de Maxwell.

IV.1.2 Modèle de He-Shan-Doolen (HSD)

Le modèle HSD [41] est beaucoup plus inspiré de l'équation de Boltzmann-Enskog pour les gaz non-idéaux (voir paragraphe III.2.3). Le point de départ de ce modèle est l'équation de Boltzmann-BGK :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{f - f^{eq}}{\tau} + \frac{\mathbf{F} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u})}{rT} f^{eq} \quad (\text{IV.3})$$

où \mathbf{F} est un terme de force qui rend compte des effets d'interactions internes au fluide :

$$\mathbf{F} = -\nabla V_m - b\rho(rT)^2\chi\nabla \ln(\rho^2\chi) \quad (\text{IV.4})$$

Le premier terme de cette force représente l'effet de la partie attractive des interactions. V_m peut être obtenu par l'approximation de champ moyen comme au chapitre précédent (paragraphe III.2.2) : $V_m = -2a\rho - \kappa\nabla^2\rho$ (voir paragraphe III.2.2). Le second terme correspond au terme collisionnel d'Enskog lorsque l'écoulement est isotherme et lorsque les effets des dérivées de la vitesse sont négligés. Cette proposition correspond, à l'échelle macroscopique, à un fluide dont l'équation d'état est $p = \rho rT(1 + b\rho\chi) - a\rho^2$, ce qui correspond à un fluide de van der Waals avec comme modèle pour la fonction de corrélation $\chi = \frac{1}{1 - b\rho}$. Un terme supplémentaire de "force diphasique" peut alors être implémenté simplement dans un schéma BsR pour écoulements isothermes. Ceci a été mis en oeuvre, entre autres, par Sofonea *et coll.* [52] avec un modèle de vitesses discrètes $D2Q9$ et un schéma d'intégration spatio-temporelle aux différences finies.

IV.1.3 Modèle basé sur l'énergie libre (EL)

Le modèle que nous avons choisi pour l'application présentée dans la suite du chapitre est le modèle basé sur l'énergie libre (EL). Celui-ci a été développé par Swift *et coll.* [53, 54] en réaction au manque de cohérence thermodynamique du modèle SC. Il a été pensé comme une alternative à la résolution des équations macroscopiques pour les écoulements diphasiques isothermes, c'est-à-dire que ce modèle est compatible avec la thermodynamique d'une interface liquide-vapeur diffuse

suivant la théorie de Cahn-Hilliard. Le point de départ de ce modèle est l'équation d'évolution de la fonction de distribution discrète f_i sur réseau avec un terme collisionnel de type BGK :

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)) \quad (\text{IV.5})$$

La différence par rapport à un modèle monophasique vient de la fonction de distribution d'équilibre f_i^{eq} qui n'est plus un développement polynomial de la fonction de distribution d'équilibre de Maxwell-Boltzmann. La fonction de distribution f_i^{eq} de ce modèle est un polynôme de \mathbf{v}_i formulé de sorte qu'après la procédure de Chapman-Enskog sur réseau, on retrouve les équations macroscopiques d'un fluide non-idéal (équations (III.52), (III.54) et (III.61)) avec comme tenseur des pressions :

$$P_{\alpha\beta} = \left[p_b - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa \partial_\alpha \rho \partial_\beta \rho \quad (\text{IV.6})$$

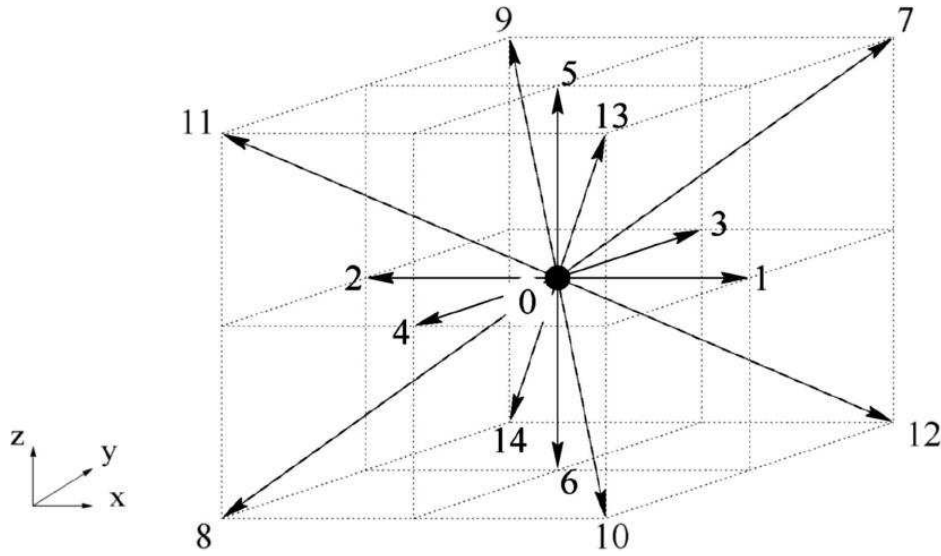
ce qui assure une compatibilité avec la thermodynamique de Cahn-Hilliard. Cela a pour conséquence que la fonction de distribution d'équilibre f_i^{eq} dépend de la position et du temps par l'intermédiaire des champs macroscopiques ρ et \mathbf{u} (comme pour un modèle classique) mais dépend également des dérivées de la masse volumique $\partial_\alpha \rho$ et $\nabla^2 \rho$. Pour ce type de modèle, les interactions interparticulaires sont donc "cachées" dans la fonction de distribution d'équilibre.

Le modèle (EL) a été développé pour différentes topologies de réseaux en 2 et 3 dimensions. Le modèle choisi ici est employé avec une topologie $D3Q15$ [55, 1]. Le jeu de vitesses discrètes \mathbf{v}_i est composé des vecteurs : $(0, 0, 0)$, $(\pm c, \pm c, \pm c)$, $(\pm c, 0, 0)$, $(0, \pm c, 0)$, $(0, 0, \pm c)$ avec $c = \delta x / \delta t$ (voir Fig. IV.1). La distribution d'équilibre f_i^{eq} est un développement en série sur la vitesse locale :

$$f_i^{eq} = A_i + B_i v_{i\alpha} u_\alpha + C_i u_\alpha u_\alpha + D_i v_{i\alpha} v_{i\beta} u_\alpha u_\beta + G_{i\alpha\beta} v_{i\alpha} v_{i\beta} \quad \text{pour } i \neq 0 \quad (\text{IV.7})$$

$$f_0^{eq} = \rho - \sum_{i=1}^{14} f_i^{eq} \quad (\text{IV.8})$$

Les coefficients A_i , B_i , C_i , D_i et $G_{i\alpha\beta}$ (donnés en annexe D) sont déterminés de façon à satisfaire

FIG. IV.1: Jeu de vitesses discrètes $D3Q15$ (extrait de [1])

les contraintes suivantes :

$$\sum_{i=1}^{14} f_i^{eq} = \rho \quad (\text{IV.9})$$

$$\sum_{i=1}^{14} f_i^{eq} v_{i\alpha} = \rho u_\alpha \quad (\text{IV.10})$$

$$\sum_{i=1}^{14} f_i^{eq} v_{i\alpha} v_{i\beta} = P_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta + \nu (u_\alpha \partial_\beta \rho + u_\beta \partial_\alpha \rho + u_\gamma \partial_\gamma \rho \delta_{\alpha\beta}) \quad (\text{IV.11})$$

$$\sum_{i=1}^{14} f_i^{eq} v_{i\alpha} v_{i\beta} v_{i\gamma} = \frac{c^2 \rho}{3} (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) \quad (\text{IV.12})$$

Les deux premières contraintes expriment les lois de conservations de la masse et de la quantité de mouvement. Les deux autres contraintes assurent que le modèle est compatible après la procédure de Chapman-Enskog sur réseau avec les équations macroscopiques d'un écoulement diphasique isotherme :

$$\partial_t \rho + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = 0 \quad (\text{IV.13})$$

$$\begin{aligned} \partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) &= -\frac{1}{\rho} \partial_\beta P_{\alpha\beta} \\ &+ \nu \partial_\beta [\rho (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta + \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma)] \end{aligned} \quad (\text{IV.14})$$

avec comme viscosité cinématique $\nu = \frac{\delta x^2}{\delta t} (\bar{\tau} - 1/2)$

IV.1.4 Quelques exemples ...

Pour montrer l'intérêt de ce type de méthode, nous présentons rapidement une série de simulations effectuées pour un fluide de van der Waals, avec le modèle EL. La température critique et la masse volumique critique du fluide de van der Waals utilisé ici sont respectivement $T_c = 4/7 K$ et $\rho_c = 3.5 kg.m^{-3}$. La constante massique du fluide est $r = 1 J.K^{-1}.kg^{-1}$ et le temps de collision τ a pour valeur $\bar{\tau} = 1$. Les simulations ont été faites pour une température très proche du point critique à $T = 0.98 T_c$. L'ensemble de ces conditions correspond à un fluide modèle communément employé dans la littérature [53, 54] mais qui ne prétend pas à la représentation d'une quelconque configuration réaliste. Les paramètres de simulation sont $\delta x = 1 m$ et $\delta t = 1 s$. Les figures IV.2, IV.3 et IV.4 montrent l'évolution d'une colonne de liquide, en équilibre avec sa vapeur, située entre deux parois mouillantes et en absence de gravité. La mouillabilité est ajustée grâce à l'introduction d'un modèle d'énergie libre à la paroi [56, 1, 57, 58]. Les conditions aux limites selon les axes x et y sont périodiques. Les figures de gauche montrent la position de l'interface liquide-vapeur. Les figures de droite représentent le champ de masse volumique ρ et le champ de vitesse \mathbf{u} dans un plan de symétrie selon z de la colonne de liquide initiale. Les figures IV.5 et IV.6 illustrent la même simulation dans le cas de parois non-mouillantes (angle de contact $\theta = 140^\circ$).

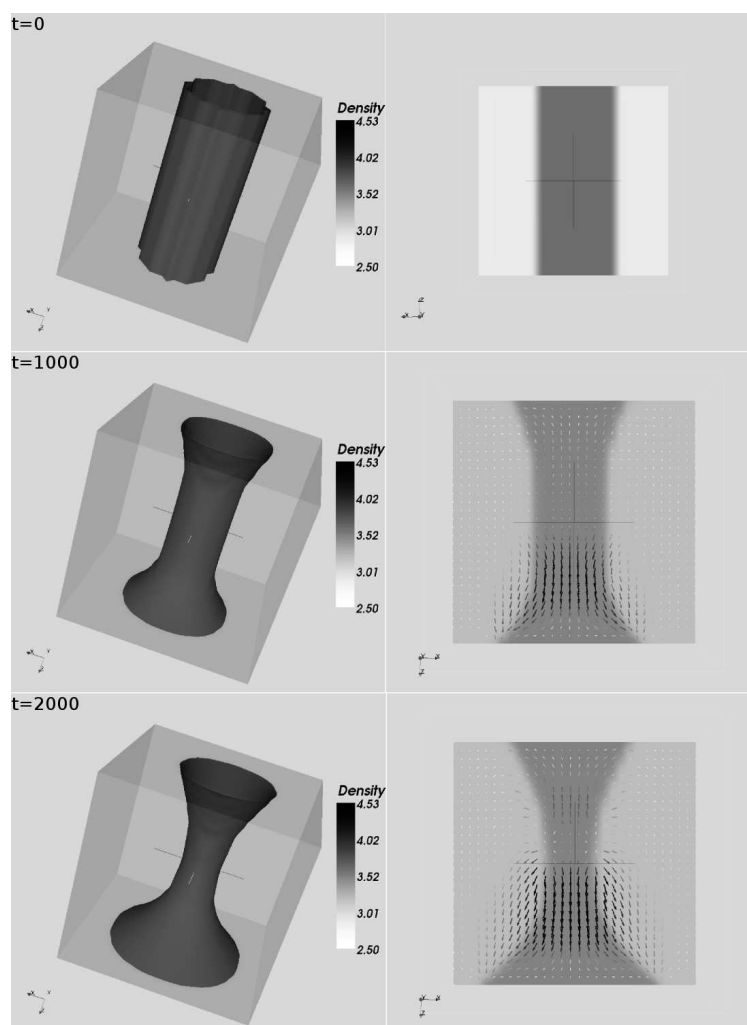


FIG. IV.2: Les parois étant mouillantes, le liquide au départ commence à s'étaler. La courbure ainsi obtenue engendre une différence de pression entre l'intérieur de la colonne et l'extérieur qui crée un écoulement du centre de la colonne vers les parois. Ceci amplifie le mouvement initial du liquide qui est attiré par les parois mouillantes.

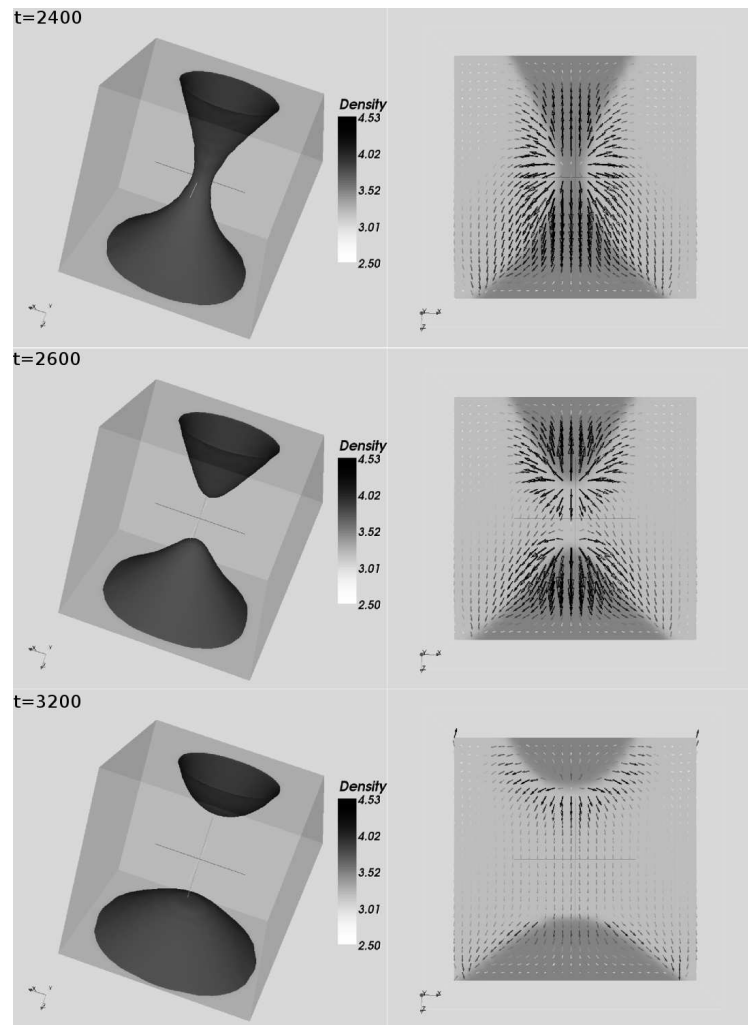


FIG. IV.3: La colonne de liquide finit par se rompre. Bien qu'il n'y ait pas de gravité, les erreurs numériques d'arrondi suffisent à créer une dissymétrie. Sous l'effet de la tension de surface, les deux gouttes s'arrondissent et continuent de s'étaler sur les parois.

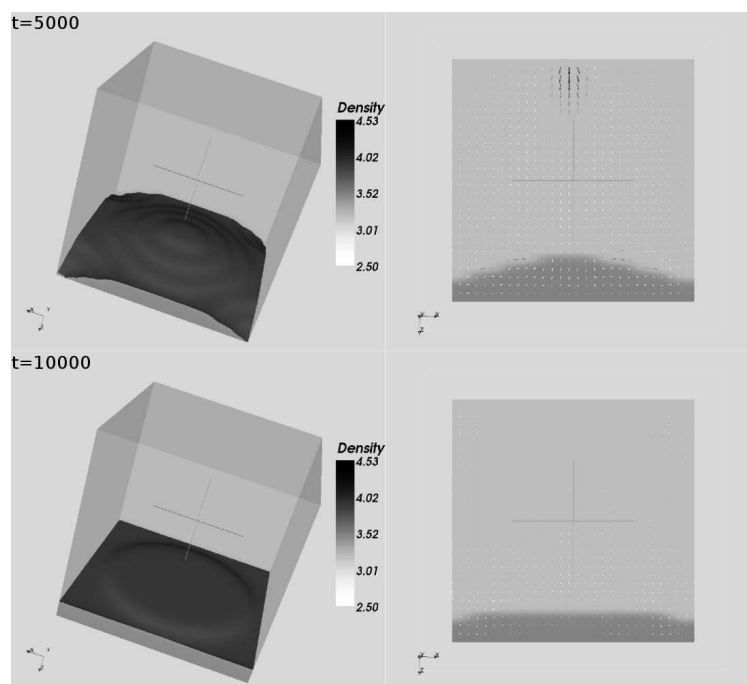


FIG. IV.4: Les deux gouttes, n'ayant pas la même taille et donc des courbures différentes, ont une pression différente. Cette différence de pression conduit à l'évaporation de la plus petite au bénéfice de la plus grande.

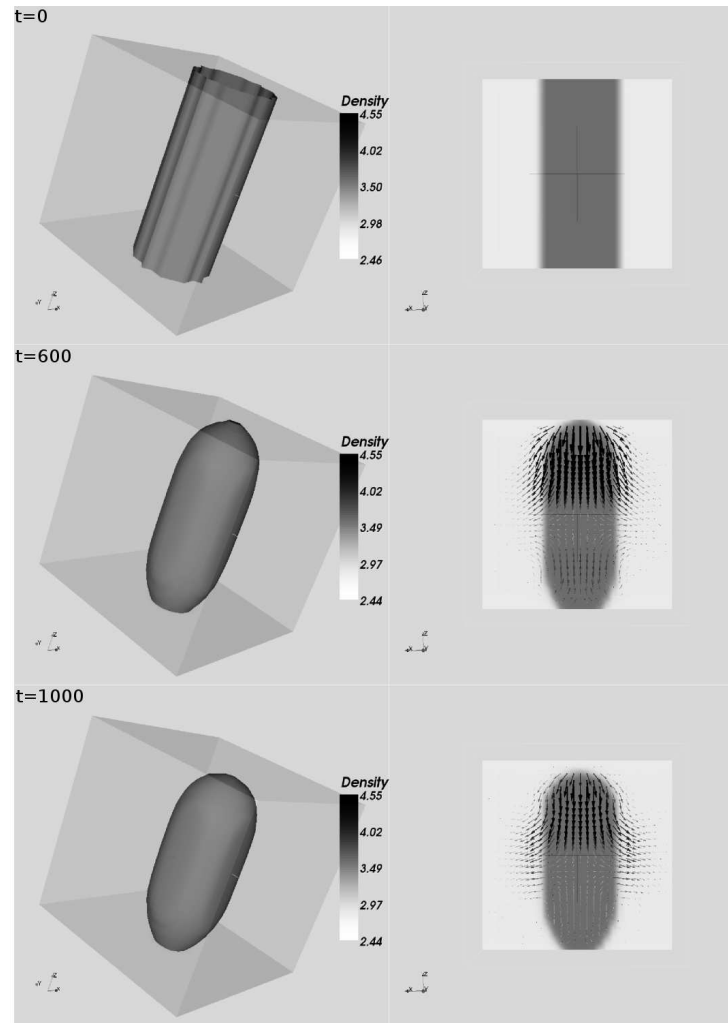


FIG. IV.5: Le liquide a tendance à se courber de façon à former un angle de contact de 140° avec les parois. Bien qu'il n'y ait pas de gravité ici non plus, une dissymétrie se crée et la goutte se détache de la paroi du haut.

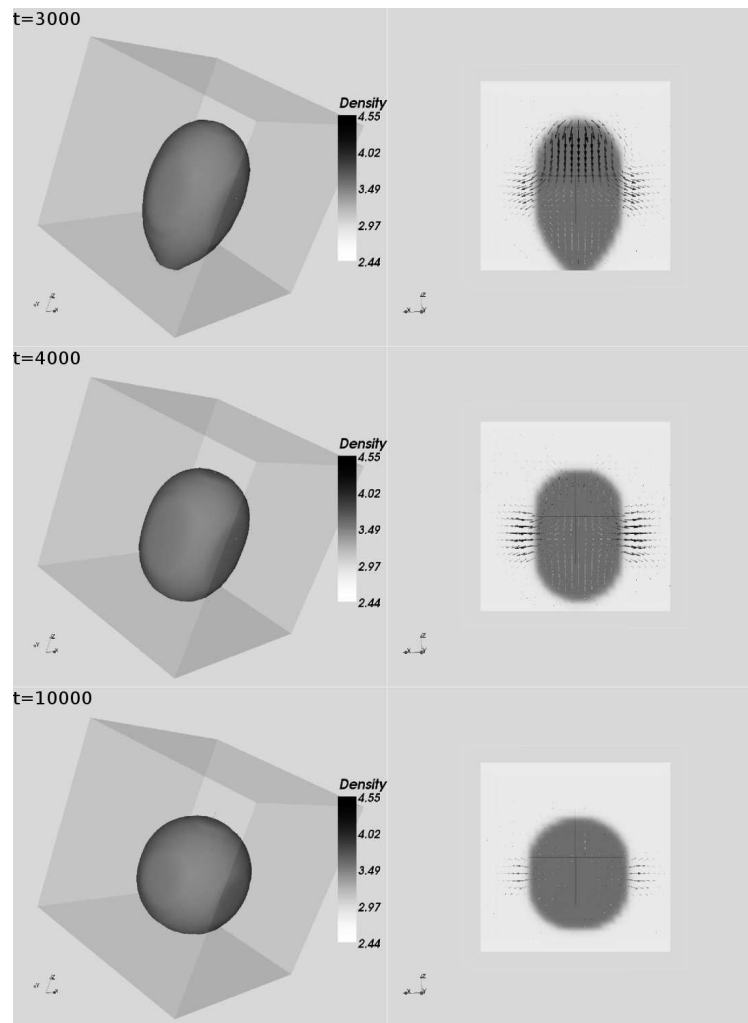


FIG. IV.6: Les effets de la tension de surface, arrondissent la goutte qui finit par se détacher de la paroi. L'angle de contact est tel que la configuration qui minimise les énergies de surface est une goutte sphérique loin des parois plutôt qu'une goutte partiellement accrochée à une paroi.

Ces calculs illustrent bien l'un des aspects les plus intéressants de la méthode BsR. Les méthodes classiques (CFD) de simulation d'écoulements avec changement de phase exigent une certaine forme de suivi de l'interface entre les phases avec un calcul du transfert au travers de cette interface de la matière (masse et volume), de la quantité de mouvement et de la chaleur (pour les cas où il y a des effets thermiques). La méthode BsR élimine ou amoindrit ces difficultés au prix d'un recours à une formulation mésoscopique plus inhabituelle. Le changement de phase se signale alors seulement par un basculement de la masse volumique. Il reste cependant un certain nombre de limitations à la méthode BsR dans ce domaine : par ex. la représentation de fortes différences de densité exige un traitement spécial. Mais nous verrons dans la suite de ce chapitre (et surtout

dans le chapitre suivant) que l'approche BsR possède des atouts tout à fait originaux.

IV.2 Boltzmann sur Réseau pour les dispersions colloïdales avec changement de phase

Dans de nombreux procédés industriels, les particules colloïdales sont séparées de la suspension au moyen de membranes de filtration. La suspension passe à travers la membrane et les particules colloïdales sont accumulées à la surface de la membrane dans une couche visqueuse et concentrée. Ce phénomène s'appelle "polarisation de concentration". S'il y a un écoulement parallèle à la membrane (filtration tangentielle), cette couche atteint rapidement un état quasi-stationnaire, mais dans le cas d'une filtration frontale, il y a seulement un flux de perméation perpendiculaire à la membrane et l'épaisseur de la couche croît continûment avec le temps. En fonction de la vitesse de perméation et des conditions hydrodynamiques, la concentration de colloïde peut devenir suffisamment élevée pour provoquer un changement de phase, menant à la formation d'une couche de gel hautement visqueuse. La présence de cette couche concentrée limite la performance de l'opération de filtration. Ainsi il est d'une importance pratique d'avoir une compréhension claire de ce phénomène. Le changement de phase rapide correspond habituellement à une décomposition spinodale avec croissance de domaines menant à la formation de structures poreuses. Il serait utile de savoir si ce phénomène joue un rôle dans la filtration membranaire et quelle sorte de rôle. La simulation numérique est particulièrement attractive dans de tels cas où l'observation expérimentale est pratiquement impossible. Les modèles macroscopiques donnent une description globale du comportement de cette couche, mais pour obtenir plus de détails sur son comportement il est intéressant de tenter d'explorer des approches différentes comme la méthode BsR. Il est connu que les particules colloïdales en suspension montrent des analogies proches avec des fluides non-idéaux pour lesquels des modèles BsR existent. Les fluides colloïdaux sont plus faciles d'accès que les systèmes liquide-vapeur car les effets thermiques y sont négligeables. Cependant une difficulté supplémentaire apparaît : pour simuler l'écoulement d'une suspension colloïdale avec changement de phase, il est nécessaire de disposer d'un modèle pour le fluide porteur (essentiellement de l'eau) dont l'écoulement est couplé avec le fluide colloïdal. Or la dispersion colloïdale subissant le changement de phase peut atteindre des fractions volumiques élevées et la densité de fluide porteur se trouve alors fortement réduite. De telles variations de densité étant difficile à aborder, nous avons choisi de considérer le fluide global (eau + colloïdes) plutôt que le fluide porteur, car la densité du fluide global est quant à elle presque constante, ce qui permet de le traiter avec un modèle BsR traditionnel pour les fluides incompressibles.

Pour ce système à deux fluides couplés, de nombreux phénomènes interviennent et interagissent : convection et diffusion de masse, séparation de phase avec formation d’une interface entre les phases, couplage entre le fluide porteur et les particules colloïdales, écoulement visqueux du fluide global avec une viscosité non-uniforme. Chacun de ces phénomènes a une échelle de temps et d’espace caractéristique. Les contraintes imposées par ces différentes échelles de temps seront discutées en détail et différentes techniques seront mises en oeuvre pour contourner les difficultés associées aux temps caractéristiques les plus courts.

Dans ce travail, nous avons considéré une solution de protéine comme milieu colloïdal modèle. La filtration membranaire de solutions de protéines est d’une grande importance pour l’industrie alimentaire et pharmaceutique et beaucoup de données sont disponibles concernant la pression osmotique de ces solutions. Les protéines sont des macromolécules portant une charge électrique et les solutions de protéines sont stabilisées par les répulsions électrostatiques entre molécules, alors que les interactions attractives à longue portée sont responsables du changement de phase.

IV.2.1 Modèle pour dispersion colloïdale avec changement de phase

Les particules colloïdales de la suspension peuvent être considérées comme un fluide avec une équation d’état reliant la pression osmotique de la suspension $\Pi(\phi)$ à la fraction volumique de colloïde ϕ . Par exemple, l’équation d’état la plus simple pour des particules colloïdales sans interactions à distance est l’équation de van’t Hoff $\Pi = nk_bT$, avec n la concentration de particules, T la température et k_b la constante de Boltzmann. L’équation de van’t Hoff est équivalente à l’équation d’état d’un gaz parfait, un fluide dont les particules n’ont aucune interaction à longue distance. Dans ce travail, nous considérons une suspension de particules colloïdales avec des interactions attractives à longue distance qui autorisent la possibilité de changement de phase. L’interaction double-Yukawa-sphère-dure a été choisie parce que l’équation d’état correspondante peut être dérivée analytiquement en utilisant l’approximation du “champ sphérique moyen” [2]. Le traitement des colloïdes comme un fluide non-ideal permet d’utiliser le modèle BsR EL [55, 1], qui est basé sur la formulation de la fonctionnelle d’énergie libre de la thermodynamique des systèmes liquide-vapeur avec interfaces [59]. Nous devons aussi modéliser le fluide porteur qui est de l’eau dans la plupart des cas. Cependant quand la fraction volumique de colloïde devient significative, la densité du fluide porteur seul ne peut plus être considérée comme constante et ceci introduit des complications considérables. Plutôt que de décrire le fluide porteur directement par une seconde fonction de distribution, nous avons modélisé le fluide global (eau + colloïde) comme un fluide incompressible. Ce choix est raisonnable si les particules colloïdales ont une masse volumique ($\rho_c = \frac{m_p}{v_p}$, avec m_p la masse d’une particule et v_p le volume d’une particule) proche de celle de l’eau ρ_e . Si

l'on considère le fluide global comme incompressible, on est autorisé à appliquer un modèle BsR pour fluide incompressible. Les équations macroscopiques pour le fluide global correspondant à ce modèle à deux fluides sont :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{IV.15})$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) \quad (\text{IV.16})$$

Pour le fluide colloïdal, nous avons l'équation de Navier-Stokes incompressible avec le tenseur des pressions dérivé de la théorie de Cahn-Hilliard :

$$\partial_t \phi + \partial_\alpha (\phi u_\alpha^c) = 0 \quad (\text{IV.17})$$

$$\begin{aligned} \partial_t (\phi u_\alpha^c) + \partial_\beta (\phi u_\alpha^c u_\beta^c) &= -\frac{1}{\rho_0} \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} \\ &+ \nu_c \partial_\beta [\phi (\partial_\beta u_\alpha^c + \partial_\alpha u_\beta^c + \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma)] + \phi F_\alpha \end{aligned} \quad (\text{IV.18})$$

$\Pi_{\alpha\beta}$ est le tenseur des pressions osmotiques qui est dérivé du modèle d'énergie libre pour une interface :

$$\Pi_{\alpha\beta} = \left(\Pi_0(\phi) - \frac{\kappa}{2} (\rho_0 \partial_\gamma \phi)^2 - \kappa \rho_0^2 \phi \partial_\gamma \gamma \phi \right) \delta_{\alpha\beta} + \kappa (\rho_0 \partial_\alpha \phi) (\rho_0 \partial_\beta \phi) \quad (\text{IV.19})$$

Ici, $\Pi_0(\phi)$ est l'équation d'état du fluide colloïdal et κ est le paramètre relié à la tension de surface, qui est entièrement déterminé par le potentiel d'interaction entre particules colloïdales(cf. III.50).

IV.2.1.1 Modèle Boltzmann sur réseau pour le fluide global

La masse volumique du fluide global dépend de la fraction volumique de colloïdes : $\rho = \phi \rho_c + (1 - \phi) \rho_e$. Mais si $\rho_c \approx \rho_e$, la masse volumique ρ du fluide global est quasiment constante. Pour notre modèle, nous supposons $\rho = \rho_c = \rho_e = \rho_0$. Nous choisissons donc de décrire le fluide global par un modèle BsR $D3Q15$ pour écoulement incompressible [60]. Le jeu de vitesses discrètes \mathbf{v}_i est composé des vecteurs : $(0, 0, 0)$, $(\pm c, \pm c, \pm c)$, $(\pm c, 0, 0)$, $(0, \pm c, 0)$, $(0, 0, \pm c)$ (voir Fig. IV.1). L'équation d'évolution de la fonction de distribution des vitesses \mathbf{v}_i , $f_i(\mathbf{r}, t)$ est :

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i \delta t, t + \delta t) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{IV.20})$$

avec $\bar{\tau} = \frac{\tau}{\delta t}$ où τ est le temps de relaxation et f_i^{eq} la fonction de distribution d'équilibre suivante :

$$f_i^{eq} = w_i \left\{ p + p_0 \left[3 \frac{(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u})}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c^4} - \frac{3}{2} (\mathbf{u})^2 \right] \right\} \quad (\text{IV.21})$$

w_i étants les poids de quadrature : $w_i = 2/9$ pour $i = 0$, $w_i = 1/9$ pour $i = 1, \dots, 6$ et $w_i = 1/72$ pour $i = 7, \dots, 14$. $p_0 = \rho_0 \frac{c^2}{3}$ est la pression de référence. Les champs macroscopiques qui sont ici la pression p et la vitesse \mathbf{u} sont évaluées en sommant la fonction de distribution f_i .

$$p = \sum_i f_i \quad (\text{IV.22})$$

$$p_0 \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{v}_i f_i \quad (\text{IV.23})$$

D'après la procédure de Chapman-Enskog sur réseau, l'équation de Navier-Stokes incompressible est retrouvée à partir du modèle BsR avec $\nu = 1/3(\frac{\tau}{\delta t} - 1/2)\frac{\delta x^2}{\delta t}$, pour la viscosité cinématique du fluide global. Dans ce travail, nous avons eu besoin de considérer l'effet des colloïdes sur la viscosité du fluide global. La formule de Eilers-Chong [61] est utilisée pour la dépendance de la viscosité en fonction de la fraction volumique :

$$\nu(\phi) = \nu_0 \left[1 + \frac{1.25 \phi}{1 - \phi/\phi_{cp}} \right] \quad (\text{IV.24})$$

où ν_0 est la viscosité pour $\phi = 0$ et ϕ_{cp} est un paramètre ajusté à partir de données expérimentales disponibles. Pour introduire cette viscosité variable, le temps de relaxation τ est simplement remplacé par $\tau(\phi) = 3\frac{\delta t^2}{\delta x^2}\nu(\phi) + \frac{\delta t}{2}$. Cette méthode a été testée numériquement pour un écoulement de Poiseuille avec une viscosité variable dans l'espace (voir appendice E).

IV.2.1.2 Modèle Boltzmann sur réseau pour les particules colloïdales en suspension

Pour modéliser la suspension de particules colloïdales, qui est considérée comme un fluide non-idéal, nous utilisons un modèle BsR EL $D3Q15$ [55, 1] (présenté au paragraphe IV.1.3) avec le même jeu de vitesses discrètes que pour le fluide global et la même discrétisation spatio-temporelle. L'équation d'évolution de la fonction de distribution $g_i(\mathbf{x}, t)$ du colloïde est :

$$g_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i \delta t, t + \delta t) - g_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\overline{\tau}_c} [g_i(\mathbf{r}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] + 3 \phi w_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{F} \delta t \quad (\text{IV.25})$$

avec $\overline{\tau}_c = \frac{\tau_{au_c}}{\delta t}$ est le temps de relaxation des colloïdes, qui représente physiquement le temps moyen entre deux collisions de particules colloïdales. g_i^{eq} est la distribution d'équilibre. F_α est le terme de force extérieure qui sera explicité plus loin. Les champs macroscopiques qui sont la fraction volumique ϕ et la vitesse d'ensemble des colloïdes \mathbf{u}^c sont évalués par sommation de la

fonction de distribution g_i :

$$\phi = \sum_i g_i \quad (\text{IV.26})$$

$$\phi \mathbf{u}^c = \sum_i \mathbf{v}_i g_i \quad (\text{IV.27})$$

D'après la procédure de Chapman-Enskog sur réseau (voir appendice F), les équations macroscopiques dérivées à partir de ce modèle sont :

$$\partial_t \phi + \partial_\alpha (\phi u_\alpha^c + \frac{\delta t}{2} \phi F_\alpha) = 0 \quad (\text{IV.28})$$

$$\begin{aligned} \partial_t (\phi u_\alpha^c + \frac{\delta t}{2} \phi F_\alpha) + \partial_\beta (\phi u_\alpha^c u_\beta^c) &= -\frac{1}{\rho_0} \partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} \\ &+ \nu_c \partial_\beta [\phi (\partial_\beta u_\alpha^c + \partial_\alpha u_\beta^c + \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma)] + \phi F_\alpha \end{aligned} \quad (\text{IV.29})$$

avec $\nu_c = \frac{1}{3}(\frac{\tau_c}{\delta t} - \frac{1}{2})\frac{\delta x^2}{\delta t}$ pour la viscosité cinématique du fluide colloïdal qui représente le transfert visqueux de quantité de mouvement par collision entre particules colloïdales. Cette quantité est presque impossible à déterminer expérimentalement : dans le calcul qui suit, elle recevra une valeur arbitraire. Nous pouvons remarquer que ces équations diffèrent des équations (IV.17) et (IV.18) par un faux terme de vitesse $\frac{\delta t}{2} \phi F_\alpha$. Dans la plupart des cas, ce terme est négligeable, mais comme nous le verrons plus tard, pour le régime diffusif, ce terme doit être pris en compte.

Dans ce modèle à deux fluides, le couplage entre les deux fluides se fait de deux façons. Premièrement, il y a une dépendance de la viscosité ν du fluide global en fonction de la fraction volumique du colloïde ϕ . Le second couplage se fait par une force de traînée \mathbf{F} exercée par le fluide porteur sur le colloïde. L'expression pour \mathbf{F} est la force de Stokes corrigé par Happel [62] pour prendre en compte l'effet de la fraction volumique ϕ sur la force de traînée :

$$\mathbf{F} = H(\phi) \frac{6\pi\mu a}{m_p} (\mathbf{u}^e - \mathbf{u}^c) \quad (\text{IV.30})$$

avec μ , la viscosité dynamique du fluide porteur, \mathbf{u}^e sa vitesse, a le rayon des particules colloïdales, et $H(\phi) = \frac{6 + 4\phi^{5/3}}{6 - 9\phi^{1/3} + 9\phi^{5/3} - 6\phi^2}$ la fonction de Happel. Mais cette expression doit être réécrite en fonction de la vitesse \mathbf{u} du fluide global car la vitesse \mathbf{u}^e du fluide porteur n'est pas calculée. La relation entre ces deux vitesses est $\mathbf{u} = \phi \mathbf{u}^c + (1 - \phi) \mathbf{u}^e$. Ainsi la force de traînée s'écrit :

$$\mathbf{F} = H(\phi) \frac{(\mathbf{u} - \mathbf{u}^c)}{\tau_u (1 - \phi)} \quad (\text{IV.31})$$

avec $\tau_u = \frac{m_p}{6\pi\mu a}$ un temps de relaxation qui peut s'interpréter physiquement comme le temps caractéristique nécessaire à une particule colloïdale pour atteindre la même vitesse que le fluide porteur.

IV.2.1.3 Régime diffusif

Pour les applications colloïdales, d'un point de vue macroscopique, une simplification importante peut être faite dans l'équation de quantité de mouvement (IV.29). Cette simplification est l'approximation de diffusion qui consiste à ne garder que les termes qui comptent dans l'équation (IV.29) et à la considérer comme stationnaire par rapport à l'équation de conservation de la masse (IV.28). Les termes d'advection et les contraintes visqueuses sont négligés par de simples arguments d'ordre de grandeur. Ainsi avec cette approximation et l'expression de la force de traînée précédente, les équations macroscopiques du fluide colloïdal deviennent :

$$\partial_t \phi + \partial_\alpha \left[\phi u_\alpha^c + \frac{\delta t}{2} \phi H(\phi) \frac{(u_\alpha - u_\alpha^c)}{\tau_u(1 - \phi)} \right] = 0 \quad (\text{IV.32})$$

$$\partial_\beta \Pi_{\alpha\beta} = \rho_0 \phi H(\phi) \frac{(u_\alpha - u_\alpha^c)}{\tau_u(1 - \phi)} \quad (\text{IV.33})$$

Pour bien comprendre cette approximation de diffusion, considérons un fluide colloïdal idéal. Le tenseur des pressions se réduit à la loi de van't Hoff $\Pi_{\alpha\beta} = \phi \frac{k_b}{v_p} T \delta_{\alpha\beta}$. Pour une solution diluée (c.-à-d. $\phi \ll 1$ et $H(\phi) \rightarrow 1$), l'équation (IV.33) correspond à la première loi de Fick avec un terme de dérive :

$$\phi u_\alpha^c = \phi u_\alpha - D_{th} \partial_\alpha \phi \quad (\text{IV.34})$$

avec $D_{th} = \frac{k_b T}{6\pi\mu a}$ le coefficient de diffusion usuel, issu des travaux d'Einstein [63]. Et pour l'équation de conservation de la masse (IV.32), nous retrouvons la seconde loi de Fick ou l'équation de diffusion :

$$\partial_t \phi + \partial_\alpha [\phi u_\alpha - D \partial_\alpha \phi] = 0 \quad (\text{IV.35})$$

mais avec un coefficient de diffusion différent $D = D_{th}(1 - \frac{\delta t}{2\tau_u})$. Cette différence apparaît dans la procédure de Chapman-Enskog sur réseau lorsque le terme de force n'est pas négligé dans l'expression de $g_i^{(1)}$.

IV.2.2 Validations, implémentation numérique et résultats

IV.2.2.1 Validation du régime diffusif

Pour valider le modèle et le régime diffusif de la suspension, une série de simulations ont été menées pour un profil gaussien de fraction volumique ϕ dans une solution diluée de fluide colloïdal idéal sans mouvement de fluide global (c'est-à-dire $\phi \ll 1$, $\Pi_{\alpha\beta} = \phi \frac{k_b}{v_p} T \delta_{\alpha\beta}$ et $\mathbf{u} = 0$). La

condition initiale est de la forme : $\phi(\mathbf{r}, t = 0) = \phi_0 + A_0 \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{\sigma^2} \right]$. La résolution analytique de l'équation de diffusion (IV.35) montre que pour un champ initial gaussien, le profil de fraction volumique ϕ reste gaussien avec un écart-type qui croît en $t^{1/2}$ et dont la valeur maximale en \mathbf{r}_0 en fonction du temps est : $\phi(\mathbf{r} = \mathbf{r}_0, t) = \phi_0 + \frac{A_0 \sigma}{\sqrt{4D_{num}t + \sigma^2}}$. Ceci nous permet de remonter numériquement au coefficient de diffusion D_{num} et de le comparer au coefficient théorique de diffusion $D_{th} = \frac{k_b T}{6\pi\mu a} = \tau_u \frac{k_b}{m_p} T$. Il est aussi possible de retrouver numériquement le coefficient de diffusion par la première loi de Fick : $\phi u_\alpha^c = -D_{num0} \partial_\alpha \phi$. Compte tenue de la procédure de Chapman-Enskog numérique, le régime diffusif est pertinent si on retrouve $D_{num0} = D_{th}$ et $D_{num} = D_{th}(1 - \frac{\delta t}{2\tau_u})$. Les figures IV.7 montrent les coefficients de diffusion obtenus numériquement pour différentes valeurs de $\delta t/\tau_u$ (les simulations ont été effectuées avec $\tau_c = \delta t$).

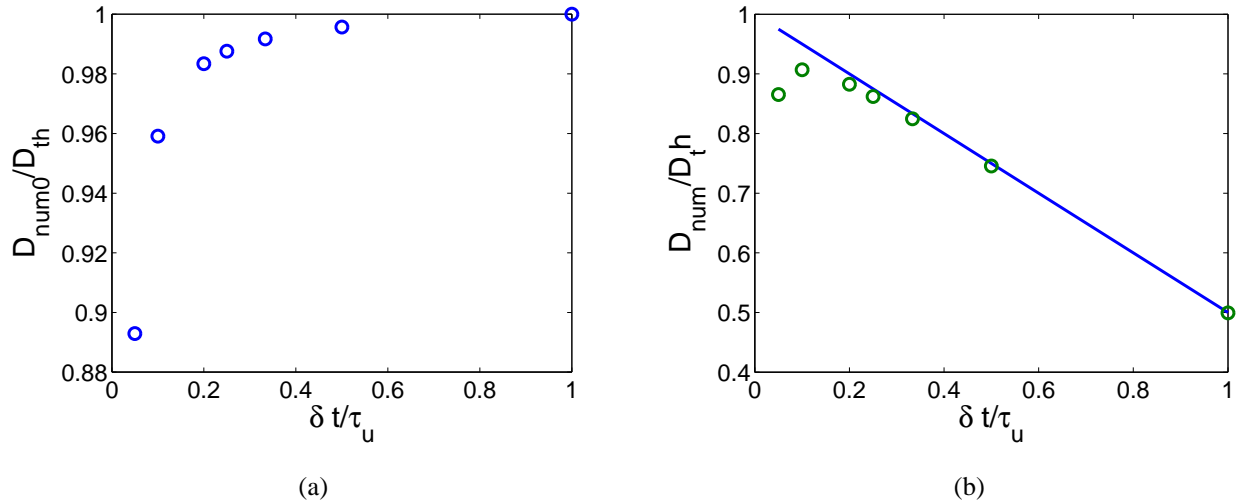


FIG. IV.7: (a) : Comparaison entre le coefficient théorique de diffusion $D_{th} = \frac{k_b T}{6\pi\mu a}$ d'une solution diluée de fluide colloïdal idéal avec D_{num0} obtenu numériquement par la première loi de Fick (IV.34) pour une série de simulations de diffusion d'un profil gaussien de ϕ pour différentes valeurs de $\delta t/\tau_u$; (b) : Les cercles représentent le rapport entre le coefficient de diffusion D_{num} obtenu numériquement à partir l'équation de la diffusion (IV.35) et D_{th} . La ligne représente le rapport théorique $D_{num}/D_{th} = 1 - \frac{\delta t}{2\tau_u}$ prédit par la procédure de Chapman-Enskog sur réseau et l'approximation de diffusion.

Le coefficient de diffusion apparent D_{num0} évalué par la première loi de Fick tend vers la valeur théorique D_{th} lorsque le pas de temps δt tend vers le temps caractéristique τ_u . Ce résultat montre que l'approximation de diffusion devient moins pertinente lorsque le pas de temps décroît. Ce résultat s'explique par le fait que dans l'approximation de diffusion le tenseur des contraintes

visqueuses (qui représente le transfert de quantité de mouvement par chocs entre colloïdes) est négligé. Or l'effet de ce tenseur des contraintes augmente lorsque δ_t diminue car la viscosité du fluide colloïdal a une valeur arbitraire $\nu_c = \frac{1}{6} \frac{\delta x^2}{\delta t}$. Les résultats de la figure IV.7.(b) montrent l'importance de ne pas négliger le terme de force dans l'expression de $g^{(1)}$ dans la procédure de Chapman-Enskog sur réseau. La dépendance en fonction du pas de temps δt du rapport entre les deux coefficients de diffusion est bien reproduite par les simulations.

IV.2.2.2 Analyse linéaire de stabilité

Pour étudier la dynamique de croissance des domaines durant une trempe de fluide colloïdal, nous avons effectué une analyse linéaire de stabilité. Plutôt que de réaliser cette analyse sur le modèle mésoscopique, elle a été effectuée sur le modèle macroscopique correspondant avec l'approximation de diffusion (IV.32), (IV.33) en une dimension et sans mouvement du fluide global.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\phi u^c - \frac{\delta t}{2} H(\phi) \frac{u^c}{\tau_u(1-\phi)} \right] = 0 \quad (\text{IV.36})$$

$$\frac{\partial \Pi_0}{\partial x} + \frac{\kappa}{2} \rho_0^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right] - \kappa \rho_0^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\phi \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] = -\rho_0 \phi H(\phi) \frac{u^c}{\tau_u(1-\phi)} \quad (\text{IV.37})$$

Le système est perturbé autour de ϕ_0 et $u_0 = 0$.

$$\phi(x, t) = \phi_0 + \bar{\phi}(x, t) \quad (\text{IV.38})$$

$$u^c(x, t) = \bar{u}^c(x, t) \quad (\text{IV.39})$$

ϕ_0 est la fraction volumique du point d'équilibre instable comme le montre la figure IV.8. Le système d'équations linéarisées associé pour les perturbations est :

$$\frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \left[\phi_0 - \frac{\delta t H(\phi_0)}{2\tau_u(1-\phi_0)} \right] \frac{\partial \bar{u}^c}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.40})$$

$$\frac{1}{\rho_0} \Pi'_0(\phi_0) \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} - \kappa \rho_0 \frac{\partial^3 \bar{\phi}}{\partial x^3} = -\phi_0 H(\phi_0) \frac{\bar{u}^c}{\tau_u(1-\phi_0)} \quad (\text{IV.41})$$

avec $\Pi'_0 = \frac{\partial \Pi_0}{\partial \phi}$. Dans l'espace de Fourier nous obtenons :

$$\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} - ik \left[\phi_0 - \frac{\delta t H(\phi_0)}{2\tau_u(1-\phi_0)} \right] \tilde{u}^c = 0 \quad (\text{IV.42})$$

$$\frac{-ik}{\rho_0} \Pi'_0(\phi_0) \tilde{\phi} - ik^3 \kappa \rho_0 \tilde{\phi} = -\phi_0 H(\phi_0) \frac{\tilde{u}^c}{\tau_u(1-\phi_0)} \quad (\text{IV.43})$$

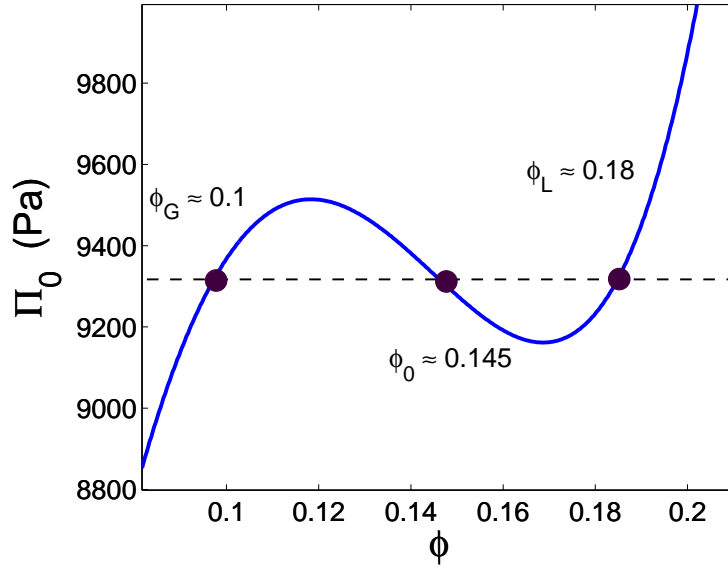


FIG. IV.8: Equation d'état selon Guérin [2] pour un potentiel d'interaction double-Yukawa-sphère-dure. D'après la construction de Maxwell, le système peut montrer deux fractions volumiques coexistantes ϕ_G et ϕ_L . ϕ_0 est la fraction volumique d'équilibre instable.

où $\tilde{\phi}(k, t)$ et $\tilde{u}(k, t)$ sont les transformées de Fourier respectives de $\bar{\phi}(x, t)$ et $\bar{u}(x, t)$. Ainsi $\tilde{\phi}(k, t)$ et $\tilde{u}(k, t)$ sont des combinaisons linéaires de $e^{\omega t}$ avec la relation de dispersion suivante (voir Fig. IV.9) :

$$\omega(k) = \pm \left[\phi_0 \frac{\tau_u(1 - \phi_0)}{H(\phi_0)} - \frac{\delta t}{2} \right] \left[\frac{\Pi'_0}{\rho_0 \phi_0} k^2 + \rho_0 \kappa k^4 \right] \quad (\text{IV.44})$$

Pour illustrer les résultats de l'analyse linéaire de stabilité, des simulations BsR d'une trempe de fluide colloïdal ont été effectuées (voir Fig. IV.10). La condition initiale de fraction volumique est un champ perturbé aléatoirement autour du point d'équilibre instable ϕ_0 . Après quelques pas de temps, les fluctuations aléatoires initiales disparaissent et seules quelques longueurs d'onde caractéristiques persistent. Dans ces simulations, des domaines d'une taille d'environ 18 nm apparaissent tandis que l'analyse linéaire de stabilité prédit l'émergence de domaines de longueur d'onde $\lambda_m = 2\pi \sqrt{\frac{2\rho_0^2 \phi_0 \kappa}{-\Pi'_0}} \approx 20$ nm. Comme la taille des particules colloïdales considérées est de 3.44 nm nous pouvons remarquer que les agrégats colloïdaux sont formés de quelques particules. Ceci est en accord avec le fait que la tension de surface du système colloïdal est faible. Une tension de surface faible autorise la formation d'agrégats qui ont un rapport volume/surface faible.

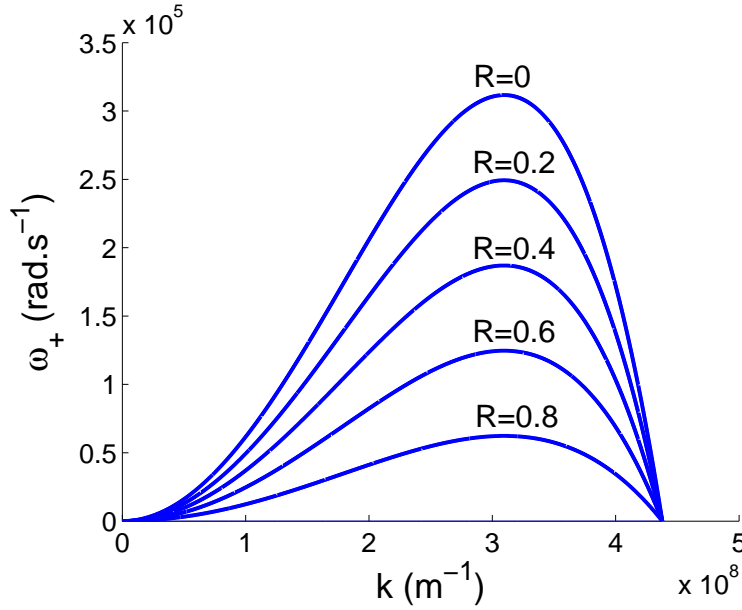


FIG. IV.9: Relation de dispersion $\omega_+(k)$ pour plusieurs valeurs du pas de temps δt . Les résultats sont montrés en fonction du rapport $R = \frac{\delta t H(\phi_0)}{2\phi_0\tau_u(1-\phi_0)}$. Le résultat physique correspond à $\delta t = 0$ (c'est à dire $R = 0$). La discrétisation temporelle change la valeur de $\omega_+(k)$ mais n'affecte pas la valeur de k_m pour laquelle $\omega_+(k)$ est maximale. La valeur k_m est $\sqrt{\frac{-\Pi'_0}{2\rho_0^2\phi_0\kappa}}$.

IV.2.2.3 Méthode de pénalisation

Pour la protéine considérée, la valeur du temps caractéristique de la force de traînée est très faible, $\tau_u = \frac{m_p}{6\pi\mu a} = 2.63 \cdot 10^{-12} s$. Comme le schéma d'intégration temporelle est explicite, la valeur du pas de temps δt doit être inférieure à la valeur de τ_u . Cela signifie, que pour des simulations de situations réalistes, le nombre de pas de temps nécessaire est trop important. Ainsi pour réaliser des simulations réalistes, nous proposons une méthode de pénalisation. Cette méthode repose sur la pertinence de l'approximation de diffusion c'est-à-dire sur la validité de l'équation (IV.33). La méthode que nous proposons consiste à diviser les deux membres de cette équation par un paramètre ε .

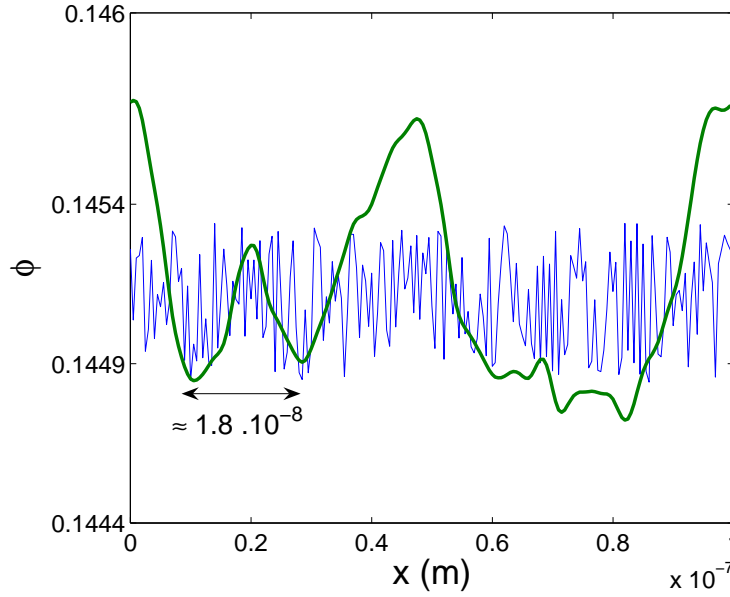


FIG. IV.10: Profil de fraction volumique ϕ . La condition initiale est un champ de fluctuations aléatoires autour du point d'équilibre instable de fraction volumique ϕ_0 . Une longueur d'onde caractéristique autour de 18 nm apparaît après quelques pas de temps ce qui est en accord avec l'analyse linéaire de stabilité.

$$\partial_\beta \frac{\Pi_{\alpha\beta}}{\varepsilon} = \rho_0 \phi H(\phi) \frac{(u_\alpha - u_\alpha^c)}{\varepsilon \tau_u (1 - \phi)} \quad (\text{IV.45})$$

$$\partial_\beta \Pi_{\alpha\beta}^* = \rho_0 \phi H(\phi) \frac{(u_\alpha - u_\alpha^c)}{\tau_u^* (1 - \phi)} \quad (\text{IV.46})$$

avec $\tau_u^* = \varepsilon \tau_u$, $\kappa^* = \kappa/\varepsilon$ et $\Pi_0^* = \Pi_0/\varepsilon$ (ce qui a pour conséquence que $\Pi_{\alpha\beta}^* = \Pi_{\alpha\beta}/\varepsilon$). Le système (*) est différent du système original, mais dans la limite du régime diffusif, nous retrouvons les mêmes équations macroscopiques (IV.32) et (IV.33). Le temps caractéristique τ_u^* peut être choisi par ajustement du paramètre de pénalisation ε ce qui permet d'utiliser des pas de temps beaucoup plus raisonnables pour effectuer des simulations réalistes. Pour valider cette méthode, nous avons effectué des simulations BsR de diffusion d'un profil gaussien de fraction volumique ϕ pour une large gamme de valeurs de ε (de 1 à 10^6) et le coefficient de diffusion observé numériquement ne varie pas avec la valeur ε .

IV.2.3 Premiers résultats

Une première série de résultats a été obtenue par simulation de filtrations frontales d'une solution contenant une protéine (lysozyme) pour laquelle les propriétés physico-chimiques sont disponibles, en particulier son équation d'état [2]. La force ionique du fluide porteur a été choisie de telle façon que le contraste des concentrations entre les deux phases en équilibre ne soit pas trop important : 10% et 18%. La taille du domaine est $100 \times 40 \times 40$ avec $\delta x = 0.5 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-10} \text{ s}$, avec des conditions aux limites périodiques sur les quatre faces perpendiculaires à la membrane. Sur la face d'entrée (opposée à la membrane), la vitesse du colloïde est prise égale à la vitesse du fluide global et la fraction volumique est maintenue constante ($\phi_{in} = 0.145$). Une différence de pression Δp est appliquée entre les deux côtés de la membrane, ce qui conduit à une vitesse du fluide à la membrane, d'expression : $u_m = L_p(\Delta p - \Pi_m)$, avec L_p le coefficient de perméabilité hydraulique de la membrane et Π_m la pression osmotique du colloïde à la membrane. Dans les tests présentés, une valeur moyenne de Π_m a été considérée à la membrane, ainsi u_m est uniforme dans ce plan. Si nous négligeons les effets de la variation spatiale de la viscosité du fluide global (dépendant de la fraction volumique de colloïde), alors du fait des conditions aux limites périodiques sur les faces latérales, l'écoulement du fluide global est spatialement uniforme dans tout le domaine. Ceci implique que le seul effet du fluide global est une force de traînée uniforme. Le champ initial de fraction volumique est aléatoirement perturbé autour de la valeur ϕ_0 choisie dans la zone instable (voir Fig. IV.8) : l'amplitude des perturbations est de 5%.

Les calculs montrent que le changement de phase se produit dans une couche proche de la membrane, où la séparation initiale crée des "gouttes" de phases condensées ou diluées. La morphologie de ces zones est similaire à celles observées dans les simulations de trempe et l'épaisseur de la couche est également comparable en dimension aux domaines émergeant lors de la trempe. Ceci est également en accord avec l'analyse linéaire de stabilité, même si celle-ci n'a pas été faite en considérant un écoulement d'ensemble du fluide. La situation de la figure IV.11) correspond à $5 \mu\text{s}$ après le début de la séparation de phase : l'enveloppe est une surface d'isoconcentration qui permet de situer la phase dense. Quant au comportement dans le temps, la concentration près de la membrane oscille : la couche condensée est instable tant que la quantité de matière accumulée n'est pas suffisante pour former une interface complète (et stable). Ceci est illustré par la figure IV.12 qui montre la concentration à la membrane en fonction du temps.

Il est connu que la vitesse de perméation dans l'ultrafiltration de solutions contenant des macromolécules (comme les protéines) est limitée par la présence de ces couches de solution concentrée, qui le plus souvent se solidifient par gélification. La structure détaillée de ces couches n'est pas observable expérimentalement, mais il est sûr que celle-ci joue un rôle considérable pour la détermi-

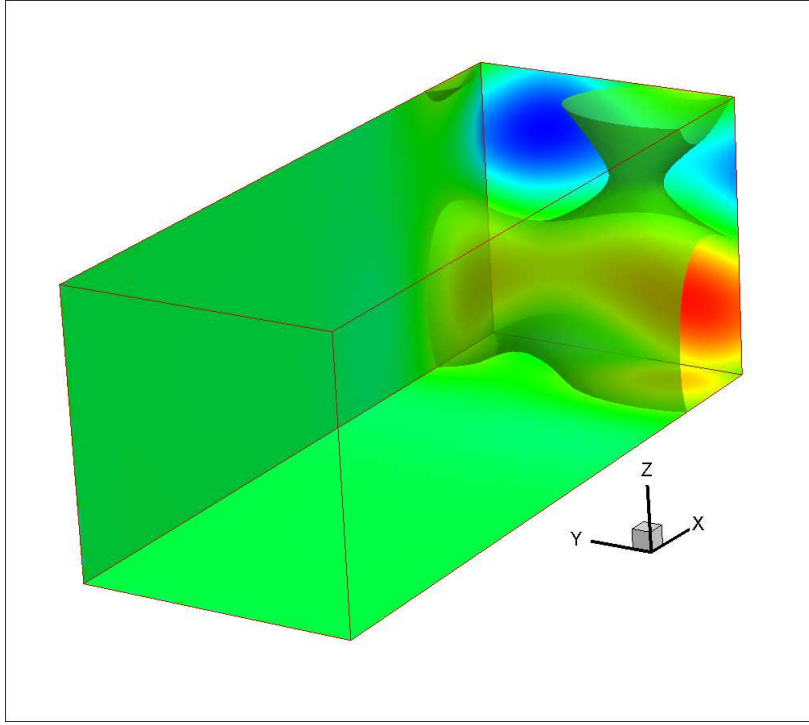


FIG. IV.11: Représentation de la fraction volumique ϕ de colloïdes, $5\mu s$ après le début de la séparation de phase. La taille du domaine est $100 \times 40 \times 40$ avec $\delta x = 0.5 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-10} \text{ s}$. Un écoulement global d'environ 10^{-4} m.s^{-1} est imposé dans la direction x mais les colloïdes sont bloqués à la membrane. La condition initiale est un champ aléatoire autour de la fraction volumique instable $\phi_0 = 0.145$.

nation des performances de filtration. Une question à laquelle nous souhaitons répondre concerne la possibilité que cette décomposition spinodale puisse, sous certaines conditions, mener à la formation de structures poreuses. Les résultats présents suggèrent que la cinétique de séparation de phase soit en effet assez rapide pour permettre la formation de structures près de la membrane.

Pour capturer la cinétique de séparation de phase en utilisant une approche BsR, il est nécessaire d'atteindre de hautes résolutions spatiales et temporelles. L'épaisseur de l'interface "liquide-vapeur" doit être résolue, ce qui impose des pas d'espace de valeur faible ($\approx 0.5 \text{ nm}$) : ainsi la taille totale du domaine de simulation ne peut pas être très importante. Dans ce travail, l'effet de cette limite a été minimisé en utilisant des conditions aux limites périodiques dans les directions parallèles à la surface de la membrane, mais même ainsi la taille du domaine limite la taille et le nombre de "gouttes" formées pendant la séparation de phase.

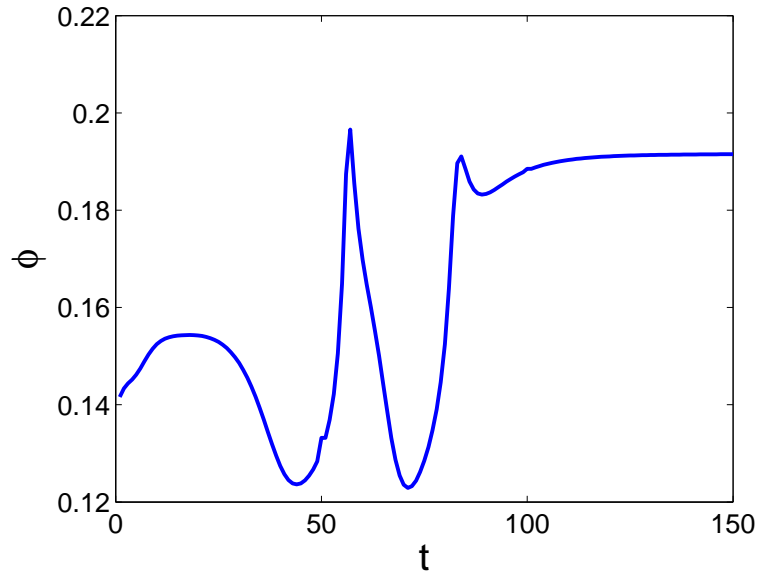


FIG. IV.12: Représentation de la fraction volumique à la surface de la membrane en fonction du temps. Du fait de l'écoulement global, il y a une accumulation de colloïdes à la surface de la membrane. Des oscillations sont observées car il n'y a pas assez de matière pour former une interface stable.

IV.3 Conclusions du chapitre

Dans l'essai présenté ci-dessus, une difficulté a été éliminée en considérant une membrane de perméabilité uniforme et en négligeant la variation de la viscosité de sorte que l'effet du fluide porteur a été remplacé par une force de traînée vers la membrane. Mais ceci n'est pas réaliste car à cette échelle, les membranes présentent une surface rugueuse et une perméabilité non-uniforme [64]. En principe, le modèle présenté ici est capable de représenter ces phénomènes via la résolution BsR pour le fluide global. Cependant, pour implémenter cette méthodologie dans l'exemple présenté, la faible valeur de δx et la valeur physique de la viscosité du fluide porteur imposent un pas de temps très petit ($\sim 10^{-14}s$, c'est à dire quatre ordres de grandeur en dessous du pas de temps requis pour la résolution BsR du colloïde). Ceci est particulièrement pénalisant car un nombre extrêmement élevé de pas de temps serait alors nécessaire pour atteindre la zone de concentration instable à la surface de la membrane en partant d'une concentration initialement stable. Dans les tests présentés ci-dessus nous rencontrions déjà des difficultés alors que nous n'étions pourtant contraints que par le pas de temps de la résolution BsR : la concentration initiale a du être imposée à une valeur instable dès le début de la simulation et l'écoulement vers la membrane a été fixé à

une valeur environ dix fois trop importante par rapport aux situations rencontrées en pratique.

Cette difficulté pourrait être partiellement levée en utilisant un pas de temps plus élevé dans les premiers instants où le profil de concentration à la membrane se développe puis en choisissant un pas de temps adapté pour obtenir les calculs détaillés lorsque la condition de séparation de phase est atteinte. Quant à la vitesse élevée de l'écoulement vers la membrane, il a été montré par les calculs $1D$ que pour une vitesse plus faible, la durée de la phase oscillante est plus longue avant la formation complète de l'interface. Ainsi dans un vrai procédé de filtration, la cinétique de séparation de phase serait favorisée par rapport aux résultats de calculs présentés ici.

Evidemment un pas de temps de l'ordre de $10^{-14} s$ n'est pas utilisable en pratique pour ce type d'applications. Un travail plus complet est nécessaire à la fois au niveau strictement numérique et au niveau de la formulation dans le style de la méthode de pénalisation décrite à la section IV.2.2. Des phénomènes physiques ont déjà été implicitement négligés, comme la relaxation de la double couche électrique autour des particules colloïdales : le temps de relaxation de la double couche est de l'ordre de $10^{-3} s$ [65], et notre équation d'état des colloïdes est dérivée sous l'hypothèse de l'équilibre de la double couche. Il n'y a donc aucun sens physique à analyser, avec ce modèle, des échelles de temps de $10^{-14} s$ et des efforts seront fournis à la suite de ce travail pour tenter de lever ces contraintes.

Chapitre V

Boltzmann-sur-Réseau pour les écoulements diphasiques avec transferts d'énergie

Nous avons été en mesure au chapitre II de proposer un schéma permettant la simulation d'écoulements de gaz anisothermes. La raison pour laquelle nous nous intéressons aux écoulements anisothermes est que l'un de nos objectifs applicatifs est le refroidissement de l'électronique. Cependant les dispositifs efficaces dans ce contexte font appel aux phénomènes de transition de phase liquide-vapeur (évaporation au contact du composant électronique et condensation à la source froide). Notre travail ne peut donc avoir de conséquences concrètes dans ce domaine que si nous sommes en mesure d'étendre la proposition faite au chapitre II aux écoulements diphasiques. Nous essayons donc dans ce dernier chapitre d'amorcer, en ce sens, une synthèse des éléments théoriques présentés aux chapitres II et III. La matière présentée est beaucoup moins aboutie que celle des chapitres II et IV (monophasique anisotherme et diphasique isotherme), cependant :

- nous avons pu mettre en oeuvre une série de premières simulations multi-dimensionnelles d'écoulements de diazote en présence de transition de phase au voisinage du point critique ;
- un cap important a été franchi en termes de stabilité numérique sur la base de l'analyse de l'interface liquide-vapeur détaillée au chapitre III et de l'expérience acquise au chapitre IV sur les interfaces en écoulement isotherme.

Il est apparu dans ce travail (comme lors de l'extension au terme collisionnel ES-BGK du paragraphe II.3.6.6) que l'augmentation de complexité correspondant au passage du monophasique au diphasique ne pose aucune difficulté particulière en ce qui concerne le modèle de vitesses discrètes. La véritable difficulté s'est avérée être liée à la discrétisation spatiale.

V.1 Rappel du modèle cinétique

La plupart des modèles Boltzmann-sur-réseau existant pour simuler des écoulements anisothermes de fluides diphasiques sont basés sur des modèles isothermes (cf. Chapitre IV). A partir de ces modèles les effets thermiques sont pris en compte par l'ajout d'un scalaire passif ou par une résolution de l'équation macroscopique de la chaleur [48, 66, 67, 68]. Martys [69] a également proposé un modèle Boltzmann discret pour fluide non-idéal conservant l'énergie sans toutefois l'appliquer à des écoulements diphasiques. En ce qui nous concerne ici, nous repartons de l'équation cinétique continue introduite au chapitre III, à savoir l'équation de Boltzmann-Enskog (III.51) :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} - \nabla V_m \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = I_1 \quad (\text{V.1})$$

Dans cette équation, le terme I_1 représente le terme collisionnel qui tient compte de la taille des particules et des répulsions intermoléculaires en considérant les particules comme des sphères dures. Et le terme V_m est le potentiel moyen obtenu par approximation de champ moyen de la partie attractive des interactions intermoléculaires. Ces deux termes I_1 et V_m s'écrivent en fonction des dérivées spatiales des champs macroscopiques ρ , \mathbf{u} et T :

$$\begin{aligned} I_1 &= \chi \Omega_0 \\ &- b\rho\chi f^{eq}(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \left[\nabla \ln(\rho^2\chi) + \frac{3}{5}(C^2 - \frac{5}{6})\nabla \ln T \right] \\ &- b\rho\chi f^{eq} \frac{2}{5} \left[2\mathbf{CC} : \nabla \mathbf{u} + (C^2 - \frac{5}{2})\nabla \cdot \mathbf{u} \right] \end{aligned} \quad (\text{V.2})$$

$$V_m = -2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho \quad (\text{V.3})$$

Le terme I_1 nécessite un modèle pour Ω_0 qui est le terme collisionnel de Boltzmann que nous pouvons approximer par BGK ou ES-BGK. Il est nécessaire également d'avoir un modèle pour la fonction de corrélation à deux corps χ . Dans ce travail nous nous limitons au modèle relatif à l'équation d'état de van der Waals c'est-à-dire $\chi = \frac{1}{1-b\rho}$. Nous rappelons également que les paramètres a et κ rendent compte de la partie attractive du potentiel intermoléculaire (paragraphe III.2.2).

V.2 Modèle de vitesses discrètes

Au chapitre II, la détermination du jeu de vitesses discrètes a été pensée en vue d'une résolution de l'équation de Boltzmann-BGK à un ordre de précision correspondant à l'ordre 1 du développement de Chapman-Enskog. Pour discrétiser l'espace des vitesses dans le but de résoudre l'équation de Boltzmann-Enskog, la même démarche peut s'appliquer. Comme pour l'équation de Boltzmann-BGK, nous choisissons de résoudre l'équation de Boltzmann-Enskog à l'ordre 1 de Chapman-Enskog en incluant les effets thermiques (voir paragraphe II.3.2).

Les termes d'interactions supplémentaires dans l'équation de Boltzmann-Enskog ne posent pas de difficultés particulières lors du développement de Chapman-Enskog. Pour ce qui nous intéresse ici, il est juste important de remarquer que le terme I_1 peut s'écrire comme la somme du terme collisionnel de l'équation de Boltzmann et du produit d'un polynôme d'ordre 3 en \mathbf{v} par f^{eq} .

$$I_1 = \chi \Omega_0 + P_3(\mathbf{v}) f^{eq} \quad (\text{V.4})$$

En retenant l'approximation BGK pour le terme de collision Ω_0 , nous pouvons trouver une expression pour $f^{(1)}$ de la même façon que pour l'équation de Boltzmann-BGK au chapitre I en remplaçant les dérivées spatiales et temporelles de f par les dérivées de f^{eq} .

$$\frac{\partial f^{eq}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} - \nabla V_m \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} \approx -\frac{\chi}{\tau} f^{(1)} + P_3(\mathbf{v}) \quad (\text{V.5})$$

$$\begin{aligned} f^{(1)} &\approx -\frac{\tau}{\chi} \left[\frac{\partial f^{eq}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} - \nabla V_m \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} \right] \\ &+ \frac{\tau}{\chi} P_3(\mathbf{v}) f^{eq} \end{aligned} \quad (\text{V.6})$$

Aux chapitres I et II, nous avons montré en effectuant toute la procédure de Chapman-Enskog que le terme entre crochets s'écrivait également comme le produit de f^{eq} par un polynôme d'ordre 3 en \mathbf{v} . Ce qu'il est important de retenir à cette étape, c'est que les termes supplémentaires d'interaction n'augmentent pas l'ordre du polynôme en \mathbf{v} : $f^{(1)}$ reste le produit de f^{eq} et d'un polynôme en \mathbf{v} d'ordre 3. Pour pouvoir utiliser la quadrature de Gauss-Hermite, nous avons ensuite utilisé le fait que f^{eq} pouvait se développer comme le produit d'une gaussienne centrée en 0 par un polynôme d'ordre 4. Ceci est inchangé et, en reprenant toutes les étapes, il apparaît que la quadrature de Gauss-Hermite doit comme précédemment, être capable d'évaluer les moments d'ordre 10 d'une gaussienne centrée en 0. Autrement dit, pour résoudre l'équation de Boltzmann-Enskog, à l'ordre 1 de Chapman-Enskog, il est possible de garder le même jeu de vitesses discrètes que pour la résolution de l'équation de Boltzmann-BGK défini par II.41.

V.3 Discrétisation spatio-temporelle

Les mêmes schémas d'intégration, que ceux présentés au chapitre II, peuvent être utilisés dans ce nouveau contexte : schéma de Euler au premier ordre pour l'intégration temporelle et schéma amont au premier ou au second ordre pour le terme de transport $\mathbf{v} \cdot \nabla f$. D'un point de vue numérique, la seule difficulté supplémentaire provient de la discrétisation des dérivées spatiales des champs macroscopiques intervenant dans le terme de collision I_1 et dans le potentiel moyen V_m . Les premiers essais de résolutions numériques sans approfondissement particulier se sont montrés totalement infructueux, conduisant à de fortes divergences. La résolution divergeait encore, même lorsque les simulations étaient effectuées à partir d'un état initial correspondant à un état d'équilibre liquide-vapeur. Pour concevoir un schéma numérique adapté, nous avons repris le point de vue mésoscopique sur l'équilibre liquide-vapeur abordé en fin de chapitre III.

V.3.1 Point de vue mésoscopique sur l'équilibre liquide-vapeur

Comme il a été vu au chapitre III, au niveau mésoscopique, l'équilibre liquide-vapeur à l'interface est obtenu par compensation entre les termes de transport, d'attraction et de répulsion d'Enskog.

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} - \nabla V_m \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f^{eq} = -b\rho\chi f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla \ln(\rho^2\chi) \quad (\text{V.7})$$

Il est à remarquer que seules les dérivées spatiales de la masse volumique ρ sont non-nulles à l'équilibre puisque l'équilibre implique l'annulation des dérivées spatiales de la vitesse \mathbf{u} et de la température T . C'est pourquoi, dans un premier temps, nous regardons avec attention les dérivées spatiales de ρ qui interviennent dans le potentiel moyen V_m et le terme de répulsion d'Enskog. En développant le terme $\nabla_{\mathbf{v}} f^{eq}$ et en remplaçant V_m par son expression, l'équation précédente s'écrit :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} - [2a\nabla\rho + \kappa\nabla\nabla^2\rho] \cdot \mathbf{v} \frac{f^{eq}}{rT} = -b\rho\chi f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla \ln(\rho^2\chi) \quad (\text{V.8})$$

Cette équation fait apparaître le fait qu'à l'équilibre, cette égalité doit être vérifiée pour chaque vitesse \mathbf{v} indépendamment les unes des autres. Ainsi, il apparaît clairement que pour pouvoir numériquement obtenir une interface à l'équilibre, le schéma des dérivées spatiales de ρ ne pas être choisi indépendamment du schéma utilisé pour le terme de transport $\mathbf{v} \cdot \nabla f$. Pour illustrer la dépendance entre ces schémas numériques, prenons l'exemple d'un équilibre liquide-vapeur en 1D dans le cas extrême où $\kappa = 0$. Physiquement cela correspond au cas où l'interface serait d'épaisseur nulle

et d'un point de vue numérique cela correspond au cas où la masse volumique ρ passerait d'une valeur à l'autre sur une maille comme le montre la figure V.1.

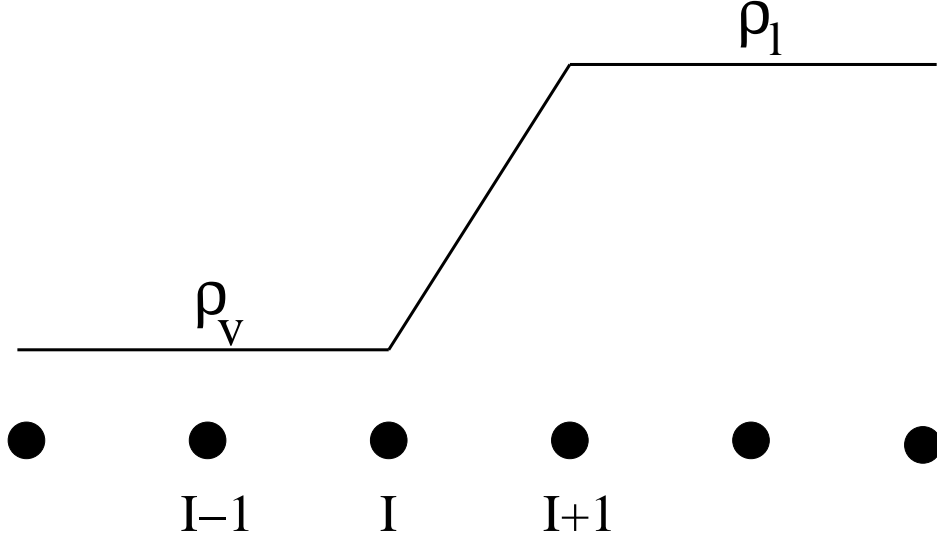


FIG. V.1: Illustration d'un équilibre liquide-vapeur lorsque $\kappa = 0$ c'est à dire lorsque la masse volumique passe de ρ_v à ρ_l d'un nœud à l'autre .

Examinons les contributions de chacun des termes de l'équation (V.8) au nœud I . Pour les vitesses positives (particules se déplaçant de gauche à droite), et pour un schéma amont au premier ordre, le terme de transport s'écrit numériquement de la façon suivante :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq}|_{(I, \mathbf{v} > 0)} = \mathbf{v} \frac{f_I^{eq} - f_{I-1}^{eq}}{\delta x} \quad (\text{V.9})$$

$$= 0 \quad (\text{V.10})$$

En revanche pour les vitesses négatives, l'évaluation du terme de transport n'est pas nulle (nous utilisons ci-dessous le fait que la distribution d'équilibre s'écrit $f^{eq} = \rho p_{\mathbf{v}}^{eq}$) :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq}|_{(I, \mathbf{v} < 0)} = \mathbf{v} \frac{f_{I+1}^{eq} - f_I^{eq}}{\delta x} \quad (\text{V.11})$$

$$= p_{\mathbf{v}}^{eq} \mathbf{v} \frac{\rho_{I+1} - \rho_I}{\delta x} \quad (\text{V.12})$$

$$= p_{\mathbf{v}}^{eq} \mathbf{v} \frac{\rho_l - \rho_v}{\delta x} \quad (\text{V.13})$$

Le terme de transport étant différent en fonction de la vitesse, il est compréhensible que les termes d'interaction doivent aussi être évalués de façons différentes en fonction de la vitesse. Une question

se pose alors : pour les vitesses positives, le terme de transport étant nul, le terme d'attraction $(-2a\nabla\rho\frac{f^{eq}}{rT})$ se compense-t-il avec le terme de répulsion $(-b\rho\chi f^{eq}\nabla\ln(\rho^2\chi))$ ou bien ces termes sont-ils nuls tous les deux ? Pour répondre à cette question, revenons à la signification physique de ces termes. Formellement le terme d'attraction dépend de tout le champ de ρ mais le développement champ moyen permet de remplacer cette dépendance sur tout le champ par une dépendance sur les dérivées spatiales de ρ au point considéré. Ainsi, pour les particules au noeud I venant du noeud $I - 1$, le terme d'attraction doit être nul car durant leur trajet, ces particules n'ont pas "vu" de variation de masse volumique. Les termes d'attraction et de répulsion sont donc tous les deux nuls. En revanche pour les vitesses négatives, les particules venant du noeud $I + 1$ pour aller au noeud I , ont ressenti des forces du fait de la variation de masse volumique et ce sont ces forces qui compensent le terme de transport.

V.3.2 Reformulation des termes d'interaction pour une situation d'équilibre liquide-vapeur

Afin de concevoir une approximation numérique des termes d'interaction, nous allons commencer par les reformuler. Reprenons encore l'exemple de la figure V.1 d'un équilibre liquide-vapeur pour lequel $\kappa = 0$. L'équation (V.8) traduisant cet équilibre au niveau mésoscopique peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = 2a\nabla\rho \cdot \mathbf{v} \frac{f^{eq}}{rT} - b\rho\chi f^{eq} \mathbf{v} \cdot \nabla \ln(\rho^2\chi) \quad (\text{V.14})$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = -\frac{f^{eq}}{rT} \mathbf{v} \cdot \left[rT \frac{b}{\rho} \nabla(\rho^2\chi) - 2a\nabla\rho \right] \quad (\text{V.15})$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = -\frac{f^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla [\rho^2 rT b\chi - a\rho^2] \quad (\text{V.16})$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = -\frac{f^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla [\rho rT(1 + b\rho\chi) - a\rho^2 - \rho rT] \quad (\text{V.17})$$

Cette reformulation permet de faire apparaître l'équation d'état de van der Waals $p_b = \rho rT(1 + b\rho\chi) - a\rho^2$ que nous avons identifiée au chapitre III en utilisant le développement de Chapman-Enskog pour l'équation de Boltzmann-Enskog.

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = -\frac{f^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla [p_b - \rho rT] \quad (\text{V.18})$$

D'un point de vue physique le terme $\nabla [p_b - \rho rT]$ est proportionnel à la force totale exercée sur les particules, intégrant les interactions attractives et répulsives. Cette formulation est bien entendu

compatible avec le point de vue macroscopique d'un équilibre liquide-vapeur. En remplaçant f^{eq} par ρp_v^{eq} , le terme de transport s'annule avec le terme en $\nabla(\rho r T)$ du membre de droite et l'équilibre se traduit par la continuité de la pression p_b d'une phase à l'autre :

$$\nabla p_b = 0 \quad (\text{V.19})$$

La réécriture des termes d'interaction en fonction du gradient de pression p_b permet d'obtenir numériquement, à l'équilibre, les égalités suivantes au noeud I :

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f^{eq} = -\frac{f_I^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla [p_b - \rho r T] \quad (\text{V.20})$$

pour les vitesses positives :

$$\mathbf{v} \frac{f_I^{eq} - f_{I-1}^{eq}}{\delta x} = -\frac{f_I^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho_I} \mathbf{v} \frac{[p_{b,I} - \rho_I r T] - [p_{b,I-1} - \rho_{I-1} r T]}{\delta x} \quad (\text{V.21})$$

et pour les vitesses négatives :

$$\mathbf{v} \frac{f_{I+1}^{eq} - f_I^{eq}}{\delta x} = -\frac{f_I^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho_I} \mathbf{v} \frac{[p_{b,I+1} - \rho_{I+1} r T] - [p_{b,I} - \rho_I r T]}{\delta x} \quad (\text{V.22})$$

Ce type de reformulation des forces d'interactions en fonction du gradient de la pression a déjà été utilisée pour des modèles BsR pour des fluides diphasiques isothermes [70, 71, 52].

V.3.3 Reformulation des termes d'interaction pour une situation hors d'équilibre en 1D

Dans la section précédente, nous avons raisonné sur un état d'équilibre liquide-vapeur avec $\kappa = 0$ de façon à appréhender le schéma de discrétisation des termes d'interaction dépendant des dérivées de la masse volumique. A partir de ces contraintes sur l'état d'équilibre, nous pouvons proposer un schéma de discrétisation pour les termes d'interaction en 1D avant de le généraliser. Pour bien séparer les difficultés, l'équation cinétique (V.1) peut s'écrire de la façon suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \chi \Omega_0 + J_\rho + J_{\mathbf{u}} + J_T \quad (\text{V.23})$$

où J_ρ regroupe les termes contenant les dérivées spatiales issus de I_1 et de V_m . Les termes $J_{\mathbf{u}}$ et J_T s'identifient respectivement aux regroupements des termes contenant les dérivées spatiales de \mathbf{u} et de T issus de I_1 . La discrétisation des termes $J_{\mathbf{u}}$ et J_T ne pose pas de problème particulier car

ceux-ci, disparaissant à l'équilibre, ne sont pas critique en ce qui concerne la stabilité numérique d'un état d'équilibre liquide-vapeur. Le terme sur lequel il faut porter une attention particulière est J_ρ car c'est celui-ci qui compense le terme de transport au sein de l'interface. Les résultats obtenus dans la section précédente, à l'équilibre et dans le cas où $\kappa = 0$, conduisent à l'expression suivante de J_ρ :

$$J_\rho^{eq} = -\frac{f^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho} \mathbf{v} \cdot \nabla [p_b - \rho r T] \quad (\text{V.24})$$

Le cas général (T non-uniforme et $\mathbf{u} \neq 0$) peut être abordé simplement étant donné que seules les dérivées de ρ sont à prendre en compte. Cela conduit à l'expression suivante de J_ρ :

$$J_\rho = -\frac{f^{eq}}{rT} \frac{1}{\rho} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla \rho \frac{\partial [p_b - \rho r T]}{\partial \rho} \quad (\text{V.25})$$

$$= \frac{f^{eq}}{\rho} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla \rho - \frac{f^{eq}}{\rho r T} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla \rho \frac{\partial p_b}{\partial \rho} \quad (\text{V.26})$$

Pour autant, la discrétisation de ce terme ne va pas se faire par une discrétisation directe de $\nabla \rho$, car nous souhaitons retrouver J_ρ à l'équilibre les égalités (V.21) et (V.22). Cette contrainte conduit au schéma amont suivant :

$$J_\rho|_{(I, \mathbf{v} > 0)} = \frac{f_I^{eq}}{\rho_I} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_I) \frac{\rho_I - \rho_{I-1}}{\delta x} \quad (\text{V.27})$$

$$- \frac{f_I^{eq}}{\rho_I r T_I} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_I) \frac{p_{b,I} - p_{b,I-1}^*}{\delta x}$$

$$J_\rho|_{(I, \mathbf{v} < 0)} = \frac{f_I^{eq}}{\rho_I} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_I) \frac{\rho_{I+1} - \rho_I}{\delta x} \quad (\text{V.28})$$

$$- \frac{f_I^{eq}}{\rho_I r T_I} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_I) \frac{p_{b,I+1}^* - p_{b,I}}{\delta x}$$

avec $p_{b,I-1}^* = p_b(\rho_{I-1}, T_I)$ qui est différent de l'expression de la pression $p_b(\rho_{I-1}, T_{I-1})$ au noeud $I - 1$. De même $p_{b,I+1}^* = p_b(\rho_{I+1}, T_I)$

V.3.4 Généralisation

La démarche précédente peut se généraliser à la fois en plusieurs dimensions et lorsque κ est non-nul. Dans ce cas, les forces n'apparaissent plus par le gradient de la pression p_b mais par les

dérivées du tenseur des pressions $P_{\alpha\beta}$. En $2D$, l'équation cinétique diffère par quelques coefficients de l'équation (V.1).

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \left(\frac{\mathbf{F}}{m} - \nabla V_m \right) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = \chi \Omega_0 \quad (\text{V.29})$$

$$- b\rho\chi f^{eq}(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \left[\nabla \ln(\rho^2\chi) + \frac{1}{2}(C^2 - 1)\nabla \ln T \right] \quad (\text{V.30})$$

$$- b\rho\chi f^{eq} \frac{1}{2} [2\mathbf{CC} : \nabla \mathbf{u} + (C^2 - 2)\nabla \cdot \mathbf{u}] \quad (\text{V.31})$$

En généralisant la stratégie précédente pour les termes d'interaction, en explicitant tous les termes tensoriels et en adoptant comme convention d'écriture $U_\alpha = (v_\alpha - u_\alpha)$, l'équation ci-dessus s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f &= \chi \Omega_0 \\ + \frac{f^{eq}}{\rho} (U_x \partial_x \rho + U_y \partial_y \rho) \\ - \frac{f^{eq}}{\rho r T} [U_x (\partial_x^* P_{xx} + \partial_y^* P_{xy}) + U_y (\partial_y^* P_{yy} + \partial_x^* P_{yx})] \\ - f^{eq} b \rho \chi \left[\frac{U_x U_y}{2rT} (\partial_x u_y + \partial_y u_x) \right. \\ + \left(\frac{U^2}{4rT} - 1 + \frac{U_x^2}{2rT} \right) \partial_x u_x + \left(\frac{U^2}{4rT} - 1 + \frac{U_y^2}{2rT} \right) \partial_y u_y \Big] \\ - f^{eq} b \rho \chi \frac{1}{T} \left(\frac{U^2}{4rT} - \frac{1}{2} \right) (U_x \partial_x T + U_y \partial_y T) \end{aligned} \quad (\text{V.32})$$

La signification du symbole $*$ dans les dérivées des composantes du tenseur des pressions sera explicitée plus loin. Dans cette nouvelle écriture le terme d'attraction V_m et les termes de répulsion relatifs aux dérivées de la masse volumiques ρ sont inclus dans les dérivées du tenseur des pressions et les dérivées de ρ .

Voici l'algorithme que nous avons utilisé, en $2D$, avec une intégration temporelle Euler premier ordre et un schéma de transport amont premier ordre :

1. à partir du champ de f initial, évaluation des champs macroscopiques ρ , \mathbf{u} et T et calcul de f^{eq} .
2. évaluation du terme de transport $\mathbf{v} \cdot \nabla f$ au noeud (I, J) par un schéma amont premier ordre (voir chapitre II).
3. évaluation du terme de force extérieure : $\frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f \approx \frac{\mathbf{F}_{I,J}}{m} \cdot (\mathbf{u}_{I,J} - \mathbf{v}) f_{I,J}^{eq}$

4. évaluation du terme collisionnel de Boltzmann (approximation *BGK* par exemple) : $\chi\Omega_0 = -\frac{1}{1-b\rho_{I,J}} \frac{f_{I,J} - f_{I,J}^{eq}}{\tau}$
5. évaluation du terme $\frac{f^{eq}}{\rho}(U_x\partial_x\rho + U_y\partial_y\rho)$ avec un schéma amont premier ordre pour les dérivées de ρ en fonction de la vitesse \mathbf{v} .
6. évaluation des dérivées de ρ pour calculer les composantes du tenseur des pressions :

$$\begin{aligned} P_{xx} &= p_b(\rho, T) - \kappa\rho\nabla^2\rho - \frac{\kappa}{2}|\nabla\rho|^2 + \kappa(\partial_x\rho)^2 = P_{xx}(\rho, \partial_x\rho, \partial_y\rho, \nabla^2\rho, T) \\ P_{yy} &= p_b(\rho, T) - \kappa\rho\nabla^2\rho - \frac{\kappa}{2}|\nabla\rho|^2 + \kappa(\partial_y\rho)^2 = P_{yy}(\rho, \partial_x\rho, \partial_y\rho, \nabla^2\rho, T) \\ P_{xy} &= P_{yx} = \kappa(\partial_x\rho)(\partial_y\rho) = P_{xy}(\partial_x\rho, \partial_y\rho) = P_{yx}(\partial_x\rho, \partial_y\rho) \end{aligned}$$

Nous rappelons que physiquement le tenseur des pressions est une généralisation du concept de pression pour les systèmes avec des interactions internes et que formellement ce tenseur des pressions est une fonctionnelle du champ de ρ , mais que dans le cadre de l'approximation de champ moyen, cette dépendance sur le champ de ρ est approximée par une dépendance sur les premières dérivées spatiales de ρ . Ceci a pour conséquence que pour l'évaluation des composantes du tenseur des pressions, il faut considérer, en chaque point, ρ , $\partial_x\rho$, $\partial_y\rho$ et $\nabla^2\rho$ comme des variables indépendantes. D'un point de vue numérique, cela implique que pour le tenseur des pressions, les dérivées de ρ ne doivent pas être évaluées par un schéma amont en fonction de la vitesse \mathbf{v} . Nous avons utilisé ici, des schémas différences finies centrées deuxième ordre.

7. évaluation du terme $\frac{f^{eq}}{\rho r T} [U_x(\partial_x^* P_{xx} + \partial_y^* P_{xy}) + U_y(\partial_y^* P_{yy} + \partial_x^* P_{yx})]$. Formellement le tenseur des pressions dépend de ρ et T . Donc, les dérivées de ses composantes peuvent s'écrire sous la forme : $\partial_\alpha P_{\alpha\beta} = \partial_\alpha \rho \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial \rho} + \partial_\alpha T \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial T}$. Le symbole $*$ indique que seule la dépendance à ρ doit être considérée, autrement dit, $\partial_\alpha^* P_{\alpha\beta} = \partial_\alpha \rho \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial \rho}$. Cependant, la notation $*$ est volontaire, car numériquement ce n'est pas $\partial_\alpha \rho \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial \rho}$ qui doit être évalué. Si ce terme était évalué cela conduirait à une solution d'équilibre physiquement non-pertinente. Par exemple, pour la configuration 1D décrite précédemment (Fig. V.1), le profil à l'équilibre serait tel que $\frac{\partial p_b}{\partial \rho} = 0$ au lieu de la solution physique $\nabla p_b = 0$. Le calcul des dérivées du tenseur des pressions est effectué par un schéma amont premier ordre en fonction de la vitesse \mathbf{v} . Par l'exemple le terme $\partial_x^* P_{xx}$ au noeud (I, J) pour les vitesses positives selon x est évalué par :

$$\partial_x^* P_{xx}|_{I,J} = \frac{P_{xx}(I, J) - P_{xx}^*(I-1, J)}{\delta x} \quad (\text{V.33})$$

avec $P_{xx}^*(I-1, J) \neq P_{xx}(I-1, J)$ car $P_{xx}^*(I-1, J)$ est évalué avec la température $T_{I,J}$ du noeud (I, J) et non pas la température $T_{I-1,J}$ du noeud $(I-1, J)$. Ceci permet d'évaluer correctement le terme $\partial_x^* P_{xx} = \partial_x \rho \frac{\partial P_{xx}}{\partial \rho}$. Les autres dérivées $\partial_\alpha^* P_{\alpha\beta}$ sont calculées de la même façon.

8. les autres termes, issus du terme collisionnel d'Enskog, contenant les dérivées de \mathbf{u} et de T ne présentent pas de difficultés particulières car ceux-ci disparaissent à l'équilibre, dans le sens où, ne compensant pas le terme de transport comme les autres termes d'interaction, ils peuvent être évalués indépendamment du schéma numérique de transport. Mais par simplicité et cohérence, nous avons choisi d'évaluer les dérivées de \mathbf{u} et de T par un schéma amont premier ordre en fonction de la vitesse \mathbf{v} .

9. intégration temporelle par un schéma Euler premier ordre :

$$\begin{aligned}
 f_{I,J}^{t+1} &= f_{I,J} - \delta t \mathbf{v} \cdot \nabla f - \delta t \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f + \delta t \chi \Omega_0 \\
 &+ \delta t \frac{f^{eq}}{\rho} (U_x \partial_x \rho + U_y \partial_y \rho) \\
 &- \delta t \frac{f^{eq}}{\rho r T} [U_x (\partial_x^* P_{xx} + \partial_y^* P_{xy}) + U_y (\partial_y^* P_{yy} + \partial_x^* P_{yx})] \\
 &- \delta t f^{eq} b \rho \chi \left[\frac{U_x U_y}{2rT} (\partial_x u_y + \partial_y u_x) \right. \\
 &+ \left(\frac{U^2}{4rT} - 1 + \frac{U_x^2}{2rT} \right) \partial_x u_x + \left(\frac{U^2}{4rT} - 1 + \frac{U_y^2}{2rT} \right) \partial_y u_y \Big] \\
 &- \delta t f^{eq} b \rho \chi \frac{1}{T} \left(\frac{U^2}{4rT} - \frac{1}{2} \right) (U_x \partial_x T + U_y \partial_y T)
 \end{aligned} \tag{V.34}$$

V.4 Validations et premiers résultats

Afin de valider et d'illustrer le modèle proposé, des simulations numériques d'écoulement ou de situations d'équilibre liquide-vapeur ont été effectuées et comparées à des résultats analytiques lorsque cela était possible.

V.4.1 Profil d'interface

Le modèle de densité d'énergie libre de van der Waals permet de prévoir le profil de masse volumique solution d'un équilibre liquide-vapeur. La minimisation de la fonctionnelle d'énergie

libre conduit au profil de masse volumique suivant [59] :

$$\rho(x) = \int \sqrt{\frac{-2W[\rho(x)]}{\kappa}} dx \quad (\text{V.35})$$

avec $-W(\rho) = p_0 - \mu_0\rho + \psi$ où ψ est la densité d'énergie libre, p_0 la pression de saturation et μ_0 le potentiel chimique d'équilibre entre la vapeur et le liquide. Cette équation est implicite car elle fait apparaître le profil de masse volumique dans l'intégrale. Pour lever cet implicite, il est possible d'écrire la position $x(\rho)$ en fonction de la masse volumique :

$$x(\rho) = x_0 \pm \left(\frac{\kappa}{2}\right)^{1/2} \int_{\rho_v}^{\rho_l} [W(\rho)]^{-1/2} d\rho \quad (\text{V.36})$$

La fonction W est entièrement déterminée par l'équation d'état du fluide tout comme les bornes d'intégration ρ_v et ρ_l . Le profil de masse volumique peut être déterminé en évaluant numériquement cette intégrale pour plusieurs valeurs du paramètre κ qui contrôle la largeur d'interface et la tension de surface. La figure V.2 illustre différents profils d'interface obtenus par simulation de Boltzmann-Enskog comparés à ceux obtenus par résolution de l'intégrale (V.36). Il s'agit de tests numériques pour un fluide modèle éloigné de toute condition réaliste, mais communément employé dans la littérature [53, 54].

V.4.2 Condensation sur parois

L'exemple précédent concernait une situation d'équilibre liquide-vapeur pour laquelle les effets thermiques n'interviennent pas. Ceux-ci jouent un rôle uniquement dans la dynamique vers l'établissement de l'état d'équilibre. Afin de mettre en évidence les effets thermiques, il est nécessaire d'examiner les dynamiques à partir de situations initiales hors d'équilibre. Il est difficile de valider notre modèle avec des exemples académiques d'écoulements avec changement de phase et transfert d'énergie dont la dynamique est connue car de tels exemples n'existent pas à notre connaissance. Toutefois, il est possible de faire des simulations où le changement de phase et les effets thermiques interviennent et analyser si la dynamique et l'état d'équilibre semblent pertinents.

Des simulations de condensation sur paroi ont été effectuées pour un fluide de van der Waals. Les caractéristiques du fluide sont proches du diazote : une température critique $T_c = 126.2 \text{ K}$, une masse volumique critique $\rho_c = 314.02 \text{ kg.m}^{-3}$, une constante massique $r = 296.69 \text{ J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$, un temps de collision $\tau = 10^{-10} \text{ s}$ et un paramètre $\kappa = 1.0^{-14} \text{ m}^7.\text{kg}^{-1}.\text{s}^{-2}$. La valeur de ce dernier paramètre a été volontairement multipliée par un facteur 100 de façon à permettre des simulations avec des pas de temps et d'espace "raisonnables". Compte tenue de la relation entre κ

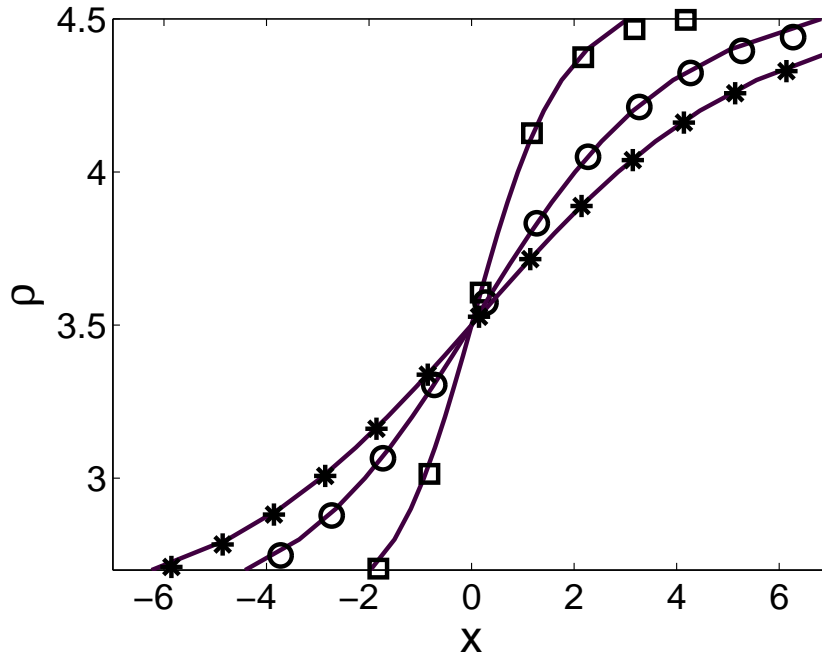


FIG. V.2: Comparaison des profils d'interface liquide-vapeur obtenus par simulation avec les résultats théoriques (traits pleins). Les simulations ont été effectuées pour un fluide de van der Waals de température critique $T_c = 4/7 K$ et de masse volumique critique $\rho_c = 3.5 kg.m^{-3}$. Les paramètres de simulation sont $T = 0.98T_c$, $\tau = 0.1 s$, $\delta x = 1 m$ et $\delta t = 0.01 s$. Les trois profils correspondent à trois valeurs de κ : $0.01 m^7.kg^{-1}.s^{-2}$ (carrés), $0.05 m^7.kg^{-1}.s^{-2}$ (cercles) et $0.1 m^7.kg^{-1}.s^{-2}$ (étoiles).

et la tension de surface (III.32), le fluide simulé à une tension de surface 10 fois plus importante que celle du diazote. Avec ces paramètres les pas d'espace et de temps requis pour rendre compte de l'interface et de la dynamique à cette échelle sont : $\delta x = 20 nm$ et $\delta t = 10^{-11} s$. Le champ de masse volumique initial est aléatoirement perturbé avec une amplitude de 10 % autour de $\rho_0 = 250 kg.m^{-3}$ à la température $T_0 = 126 K$ (ce qui correspond à une phase vapeur). Les simulations ont été effectuées pour un domaine carré maillé 50×50 avec des conditions aux limites périodiques selon l'axe x et des conditions aux limites thermiques sur les côtes perpendiculaires à l'axe y qui représentent des parois thermostatées (température identique sur les deux parois). Deux séries de simulations ont été réalisées : une série avec une température de paroi $T_{p1} = 122 K$ et une série avec une température de paroi $T_{p2} = 120 K$. Pour ces deux situations, le fluide va évoluer vers un état d'équilibre avec la température imposée par la température des parois. Comme le montre la courbe de saturation V.3 dans le plan $(T - \rho)$, l'état d'équilibre atteint par le fluide doit être

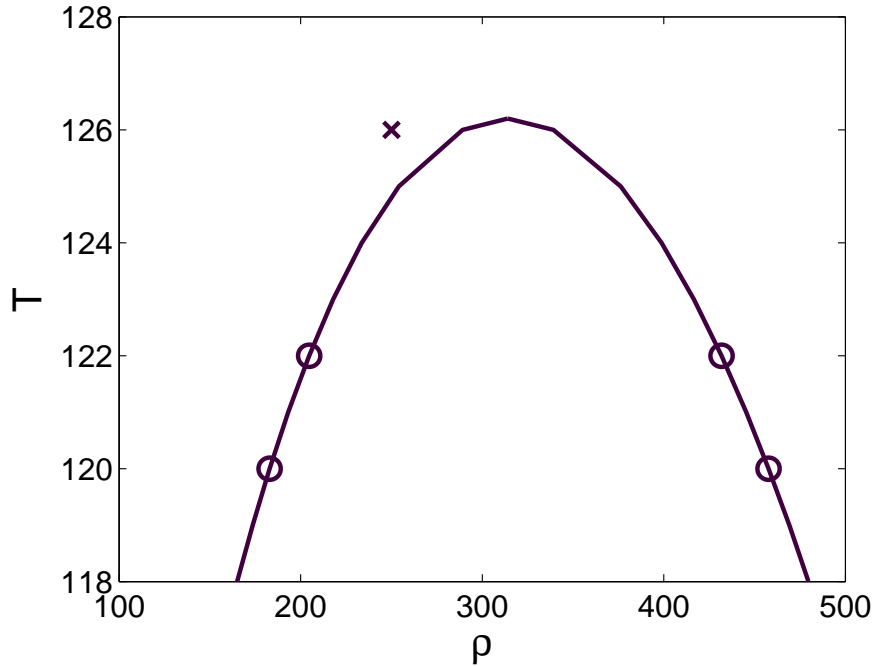


FIG. V.3: Courbe de saturation du diazote dans le plan $(T - \rho)$. A l'instant initial, le fluide est sous forme vapeur (représenté par la croix). Les cercles représentent les masses volumiques du fluide à l'état final qui est imposé par la température des parois ($T_{p1} = 122\text{ K}$ pour la simulation 1 et $T_{p2} = 120\text{ K}$ pour la simulation 2).

diphasique. Les figures V.4 et V.5 représentent les champs de masse volumique et de température pour différents instants pour la première simulation avec la température de parois $T_{p1} = 122\text{ K}$.

Pour cette première simulation, le fluide se condense aux parois dans les premiers instants et forme ainsi un film liquide qui s'épaissit au fur et à mesure de la condensation. On remarque qu'à $t = 5000\ \delta t$ le fluide au milieu du domaine atteint une température inférieure à la température des parois. Ce refroidissement est probablement dû à la détente adiabatique qui se produit suite à la condensation sur les parois. Les films liquides s'épaississant, les effets de tension de surface courbent les films pour former des gouttes aux parois ($t = 22500\ \delta t$). Entre $t = 50000\ \delta t$ et $t = 100000\ \delta t$, les deux gouttes du haut coalescent à cause des effets de tension de surface. Ensuite la taille de la goutte du bas augmente au détriment de celle du haut. L'état à $t = 1200000\ \delta t$ n'est pas encore l'état d'équilibre final car la température n'est pas tout à fait homogène et il reste un champ de vitesses non-nulles au sein du fluide, mais le système semble se diriger vers un état d'équilibre diphasique avec une goutte accrochée à la paroi ce qui est compatible avec la

thermodynamique de l'équilibre. La simulation n'a pas été poursuivie jusqu'à son terme car la dynamique est très lente à partir de $t = 1200000 \delta t$.

La figure V.6 représente les champs de masse volumique et de température pour différents instants pour la seconde simulation avec la température de parois $T_{p_2} = 120 K$. Bien que les conditions de cette deuxième simulation soient relativement proches de la première (T_{p_2} très proche de T_{p_1}), la dynamique observée et l'état final sont très différents. Dans les premiers instants, des films liquides se créent aux parois par condensation du fluide. Comme pour la première configuration, la condensation engendre une détente adiabatique qui refroidit le fluide au milieu du domaine à une température inférieure à celle des parois. Mais cette fois, le refroidissement est tel que des gouttes se forment au centre du domaine ($t = 10000 \delta t$). Les gouttes ainsi formées ne peuvent croître et disparaissent au bénéfice des films liquides aux parois. Enfin l'état à $t = 150000 \delta t$ n'est pas un état d'équilibre. L'état d'équilibre vers lequel le système doit se diriger est un état avec un seul film liquide en haut ou en bas afin de minimiser l'énergie d'interface. Compte tenue de la lente évolution du système à partir de $t = 150000 \delta t$ la simulation n'a pas été poursuivie. Le champ de vitesse représenté à $t = 150000 \delta t$ est dissymétrique ce qui montre bien que le système n'a pas atteint son état d'équilibre mais il est difficile de prévoir lequel des deux films persistera.

Il est difficile d'analyser et d'interpréter plus avant les dynamiques observées pour ces deux configurations, mais cet exemple illustre le niveau de complexité de ce type d'écoulements où le changement de phase et les effets thermiques sont couplés.

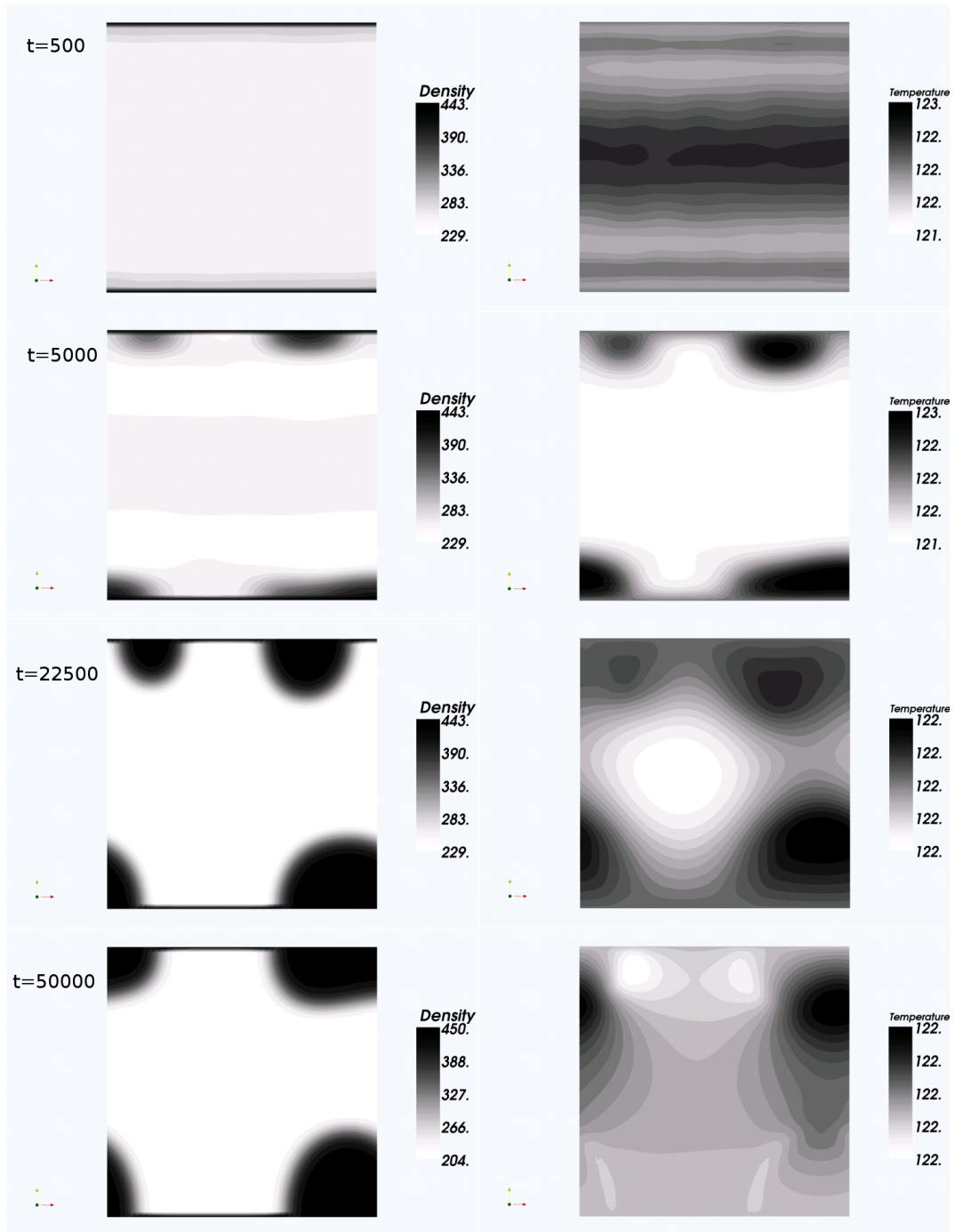


FIG. V.4: Champs de masse volumique (colonne de gauche) et de température (à droite). Les conditions de simulation sont : un maillage de 50×50 , $\delta x = 20 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-11} \text{ s}$. Les parois (en haut et en bas) ont une température $T_{p1} = 122 \text{ K}$. Dans les premiers instants le fluide se condense aux parois puis ces phases liquides forment des gouttes accrochées aux parois.

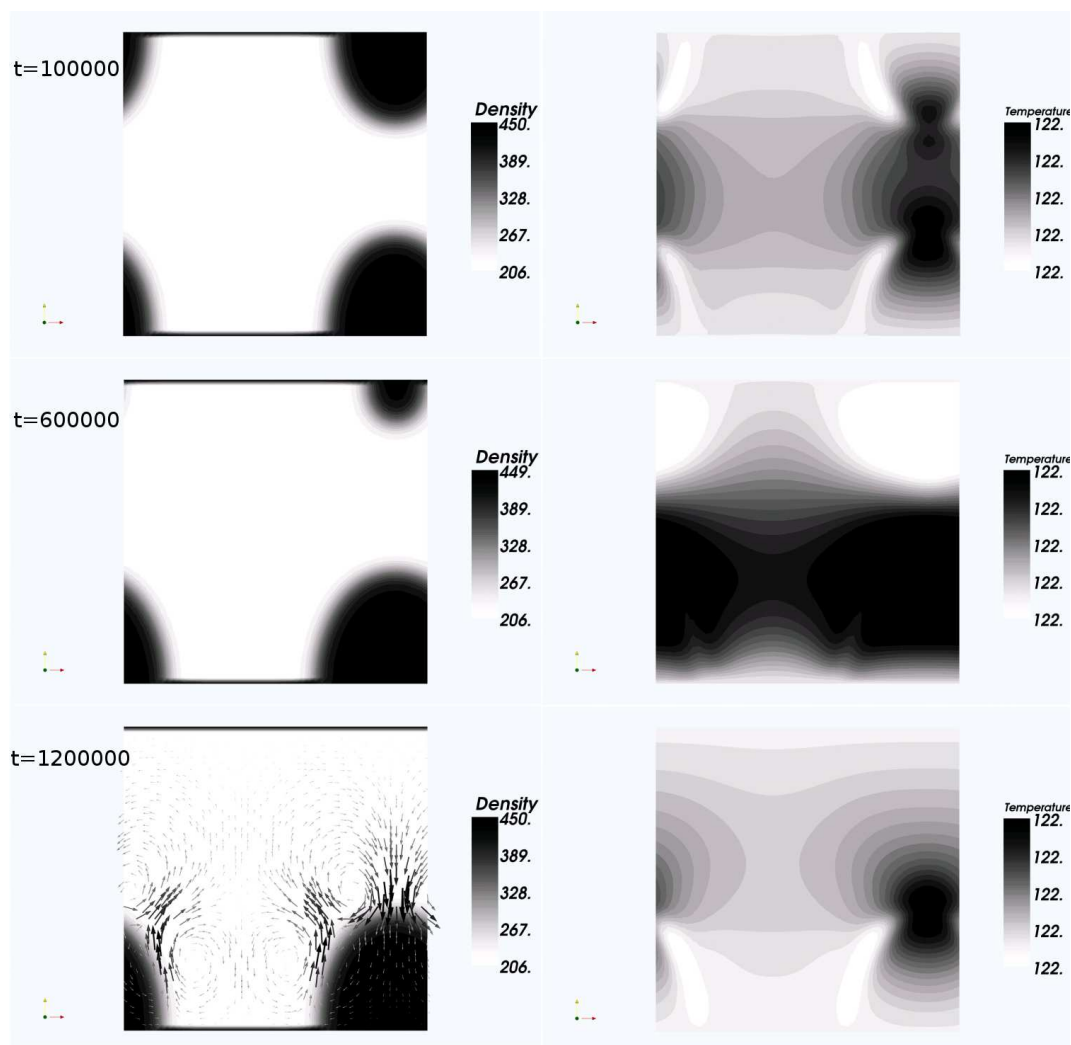


FIG. V.5: La goutte du haut disparaît au bénéfice de la goutte inférieure. Compte tenu du pas de temps la durée totale de la simulation est de $12 \mu s$.

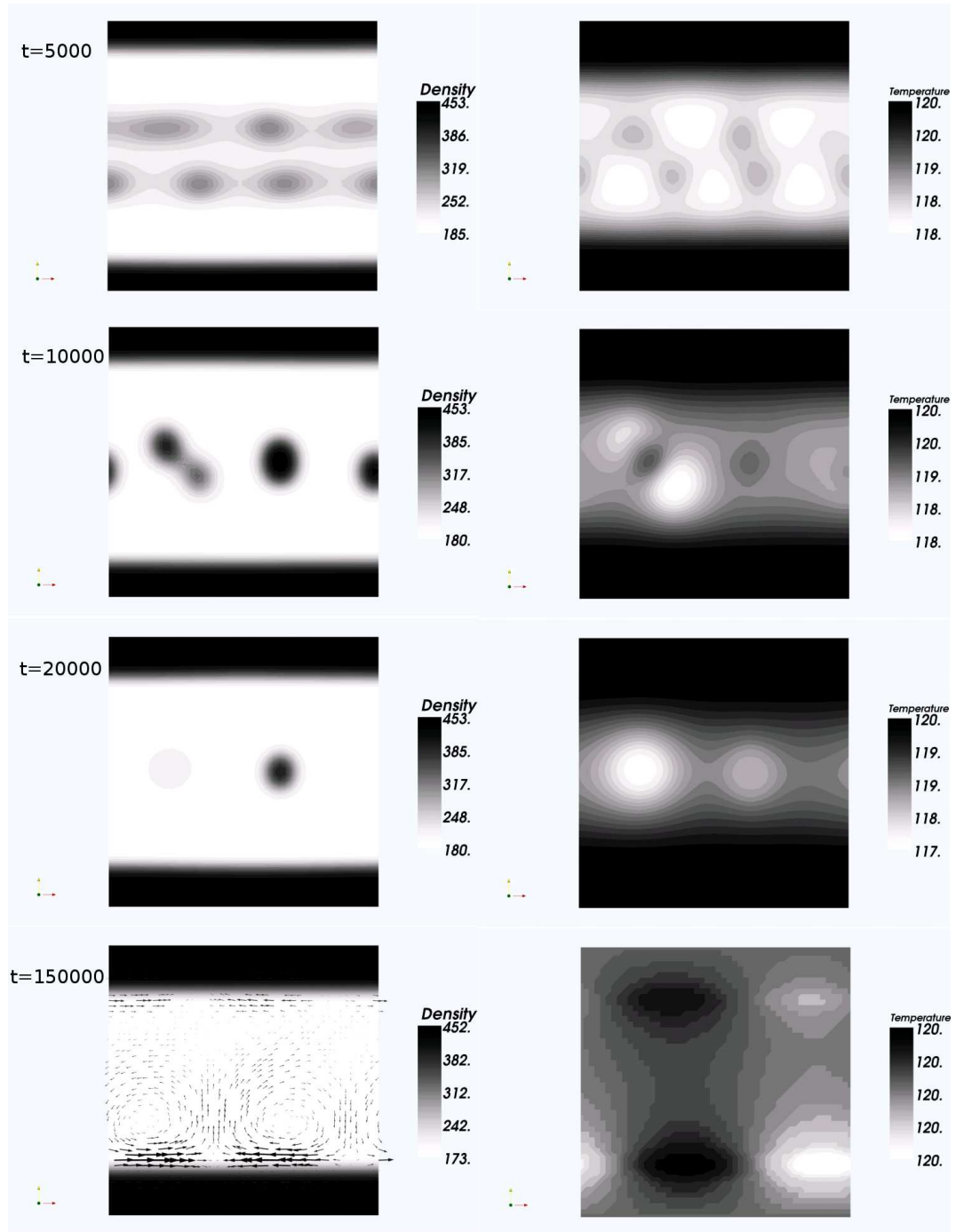


FIG. V.6: Champs de masse volumique (colonne de gauche) et de température (à droite). Les conditions de simulation sont : un maillage de 50×50 , $\delta x = 20 \text{ nm}$ et $\delta t = 10^{-11} \text{ s}$. Les parois (en haut et en bas) ont une température $T_{p1} = 120 \text{ K}$. La durée totale de la simulation est de $1.5 \mu\text{s}$. Le sous-refroidissement au sein du fluide permet la formation de gouttes ($t = 10000 \delta t$) mais ces gouttes disparaissent au bénéfice des films liquides sur les parois.

Conclusions et perspectives

Le modèle BsR proposé au dernier chapitre, qui est basé sur une discrétisation de l'équation de Boltzmann-Enskog étendue, a été numériquement mis en oeuvre afin de mener des simulations d'un fluide réaliste (paramètres van der Waals du diazote) avec changement de phase et prise en compte des effets thermiques. Nous avons uniquement été contraints d'augmenter la tension de surface de façon à épaissir les interfaces liquide-vapeur et ralentir la dynamique. La taille des domaines de simulation ($\approx 100 \mu m \times 100 \mu m$) et les temps d'intégrations ($\approx 10 \mu s$) sont certes réduits mais bien plus étendus que ceux accessibles avec la dynamique moléculaire ($\approx 10 ns$). De ce point de vue, la modélisation mésoscopique apparaît déjà comme un bon compromis entre les descriptions macroscopique et microscopique car elle permet d'intégrer des phénomènes physiques à petites échelles (interactions interparticulaires) et en même temps appréhender ce qui se passe à l'échelle du système. La suite naturelle de ce travail exploratoire sera :

- d'affiner notre modèle d'interaction fluide-paroi (en posant un modèle mésoscopique à la paroi et non plus la simple satisfaction d'une contrainte macroscopique donnée) ;
- de tenter de réduire les contraintes numériques (mais au-delà de quelques améliorations pouvant être espérées en jouant sur le schéma d'intégration temporelle, peu de pistes crédibles émergent à ce jour).

Mais surtout, un premier outil de simulation étant disponible, la communauté des spécialistes diphasiques est maintenant en mesure d'identifier précisément la place que peut prendre ce type de modèles dans le contexte actuel (couplage avec la diffusion thermique dans la paroi, transferts thermiques dans les films minces, dynamiques de croissance ...). Nos priorités dépendront directement de cette identification.

Concernant notre modèle à deux fluides pour la dispersion colloïdale (chapitre IV), qui a été pensé "macroscopiquement" et pour lequel nous avons employé des schémas BsR de la littérature, il pourrait être intéressant de repartir d'un modèle purement mésoscopique de type Enskog à deux espèces (fluide porteur + colloïde). Ce choix semblait irréaliste au début de notre travail, avant l'obtention des résultats du chapitre V sur la modélisation des dynamiques des interfaces à partir d'un modèle cinétique. Aujourd'hui, compte tenue du savoir-faire acquis sur la discrétisation de

l'équation de Boltzmann-Enskog, un modèle cinétique à deux espèces pourrait être implémenté en faisant appel à des approximations et simplifications introduites à l'échelle mésoscopique (collisions entre particules colloïdales négligées, masse des particules du fluide porteur négligeable devant la masse des particules colloïdales ...). Outre l'élégance conceptuelle de cette démarche, on assurerait une continuité parfaite entre les deux points de vue sur le système (mésoscopique et macroscopique), ce qui élargirait nos possibilités en termes d'analyse et d'approximations. Par exemple, en suivant cette démarche, ce qui correspond au chapitre IV à l'approximation de diffusion et à la méthode de pénalisation (que nous avons dû introduire dans le but de négliger la viscosité du fluide colloïdal) se traduirait simplement, au niveau du modèle mésoscopique, par la suppression du terme collisionnel colloïde-colloïde. On pourrait ainsi explorer successivement l'ensemble des temps caractéristiques qui nous limitent aujourd'hui en terme de champ d'applications.

Au-delà de ces deux domaines (systèmes de refroidissement diphasique et procédé de filtration membranaire), un élément important de notre travail était d'identifier dans la littérature BsR ce qui relevait de schémas heuristiques, comme alternative à la résolution de Navier-Stokes (ou tout autre modèle macroscopique), en opposition à des schémas numériques pouvant être considérés comme une discrétisation rigoureuse de l'équation de Boltzmann. Cette clarification a été principalement rendue possible grâce au travail de He et Luo [22, 23]. Ces auteurs ont démontré que certains schémas BsR pour écoulements isothermes peuvent être rigoureusement interprétés comme des discrétisations particulières de l'équation de Boltzmann-BGK à un ordre de précision équivalent à l'ordre 1 du développement de Chapman-Enskog. Nous nous sommes appuyés sur ces travaux pour aboutir aux principaux résultats des chapitres II et V : un modèle BsR pour écoulements anisothermes et une discrétisation de l'équation de Boltzmann-Enskog étendue pour modéliser les écoulements liquide-vapeur anisothermes. Outre ces propositions, la vision de BsR comme une discrétisation de l'équation de Boltzmann ouvre des perspectives en terme de modélisation. Cela nous a permis d'employer le modèle collisionnel ES-BGK, à la place du traditionnel modèle BGK, afin d'obtenir à l'échelle macroscopique le nombre de Prandtl souhaité. Cela nous a également autorisé à discrétiser l'équation de Boltzmann-Enskog avec le même jeu de vitesses discrètes que celui déterminé au chapitre II pour le modèle BsR pour les écoulements anisothermes. Parmi les perspectives ouvertes par cette vision, il serait par exemple envisageable de concevoir un modèle BsR pour des situations de hors d'équilibre plus lointain en augmentant l'ordre de la quadrature en fonction des besoins, en particulier dans le contexte de la micro-fluidique diphasique.

Outre cette clarification quant à la place de la description mésoscopique dans les schémas BsR existants, ce travail s'est appuyé en permanence sur une méthodologie consistant à aborder les "systèmes complexes" par la complémentarité des points de vue : *hors d'équilibre mésoscopique*,

hors d'équilibre macroscopique, *équilibre mésoscopique* (thermodynamique statistique de l'équilibre) et *équilibre macroscopique* (thermodynamique axiomatique). Cette diversité de regards sur la complexité va au-delà des questions d'échelle et les points essentiels relèvent plus souvent de l'identification et de la compréhension des concepts d'*équilibre*, de *proche équilibre* et de *hors d'équilibre lointain*, que de considérations strictement associées à la taille du système. En ce sens, les phénomènes physiques à petite échelle (interactions fluide-paroi, interface liquide-vapeur ...) ne relèvent pas forcément de situations loin de l'équilibre. C'est le cas par exemple, du modèle d'interface liquide-vapeur de Cahn-Hilliard qui est un modèle thermodynamique à l'équilibre alors que l'interface peut avoir une épaisseur constituée de quelques particules.

En tout cas, c'est certainement l'imbrication et la clarification de l'ensemble de ces concepts et points de vue qui nous ont permis de franchir les étapes les plus déterminantes lors de la mise en oeuvre des modèles proposés au cours de cette thèse :

- le schéma BsR pour écoulements anisothermes du chapitre II a découlé directement de nos efforts de clarification de ce qui pouvaient relever d'une description mésoscopique ou d'une description macroscopique dans la littérature BsR.
- l'approximation de diffusion et la méthode de pénalisation qui en découle pour le modèle de fluide colloïdal du chapitre IV a nécessité d'apprendre à traduire dans un formalisme mésoscopique une hypothèse de stationnarité ne portant que sur l'une des deux équations macroscopiques.
- la proposition faite au chapitre V concernant les écoulements diphasiques anisothermes, c'est-à-dire la représentation de phénomènes hors d'équilibre, n'a pu être mise en oeuvre numériquement que grâce à l'analyse détaillée d'une interface liquide-vapeur à l'équilibre.

Annexe A

Procédure de Chapman-Enskog sur réseau

Nous appelons procédure de Chapman-Enskog sur réseau le développement qui consiste à dériver les équations macroscopiques continues à partir d'un modèle Boltzmann-sur-Réseau. Cette procédure fait intervenir une prise de moyenne similaire à la procédure de Chapman-Enskog mais tient compte des schémas numériques utilisés. La procédure de Chapman-Enskog sur réseau présentée ici se décompose en deux étapes. La première consiste à écrire l'équation cinétique continue que l'équation d'évolution discrète doit résoudre. Ensuite, à partir de l'équation cinétique obtenue, la procédure de Chapman-Enskog standard peut être appliquée.

A.1 Effets du schéma numérique

Le point de départ est l'équation d'évolution sur réseau :

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i \delta t, t + \delta t) = f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{\delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{A.1})$$

Pour prendre en compte les effets numériques, nous faisons un développement à l'ordre 2 en δt de $f_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}_i \delta t, t + \delta t)$:

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{r}, t) + \delta t \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i + \frac{\delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right)^2 f_i &= f_i(\mathbf{r}, t) - \frac{\delta t}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{r}, t)] \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

$$\delta t \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i + \frac{\delta t^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right)^2 f_i = -\frac{\delta t}{\tau} [f_i - f_i^{eq}] \quad (\text{A.3})$$

Cela signifie qu'à l'ordre 2 en δt l'équation d'évolution discrète est une résolution de l'équation cinétique suivante :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right)^2 f_i = -\frac{1}{\tau} [f_i - f_i^{eq}] \quad (\text{A.4})$$

Cette équation correspond à l'équation de Boltzmann-BGK avec des termes supplémentaires dans le membre de gauche qui ont une origine purement numérique.

A.2 Ordre 0 de la procédure de Chapman-Enskog

L'ordre de 0 de la procédure de Chapman-Enskog consiste à moyenner l'équation cinétique en approximant f_i par f_i^{eq} . En remplaçant f_i par f_i^{eq} dans l'équation A.4, les termes provenant de la prise de moyenne des dérivées secondes de f_i^{eq} sont négligeables par rapport aux autres termes. Ainsi à l'ordre 0 de la procédure de Chapman-Enskog sur réseau, les effets numériques ne jouent pas. Les équations macroscopiques dérivées sont les équations du fluide parfait :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) u_\alpha = -\frac{1}{\rho} \partial_\alpha p \quad (\text{A.6})$$

avec $p = \rho c_s^2$. Dans le cas d'un réseau $D2Q9$, la "vitesse du son du réseau" est $c_s = \frac{1}{3} \frac{\delta x}{\delta t}$.

A.3 Ordre 1 de la procédure de Chapman-Enskog

L'ordre 1 de la procédure consiste à développer f_i autour de f_i^{eq} : $f_i \approx f_i^{eq} + f_i^{(1)}$. L'estimation de $f_i^{(1)}$ se fait à partir de l'équation A.4 en négligeant les dérivées $f_i^{(1)}$ par rapport aux dérivées de f_i^{eq} :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i^{eq} + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right)^2 f_i^{eq} \approx -\frac{1}{\tau} f_i^{(1)} \quad (\text{A.7})$$

Pour les mêmes raisons qu'à l'ordre 0, les dérivées secondes de f_i^{eq} sont négligeables. Ainsi l'estimation de la partie hors d'équilibre $f_i^{(1)}$ n'est pas affectée par les effets numériques.

$$f_i^{(1)} \approx -\tau \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i^{eq} \quad (\text{A.8})$$

Les équations de l'hydrodynamique à l'ordre 1 correspondent à la prise de moyenne de l'équation A.4 par sommation sur les vitesses discrètes.

$$\sum_i \chi \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right)^2 (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) \right] = 0 \quad (\text{A.9})$$

avec χ les invariants collisionnels. Compte tenue de l'expression de $f^{(1)}$, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \sum_i \chi \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) (f_i^{eq} + f_i^{(1)}) - \frac{\delta t}{2\tau} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i^{(1)} \right. \\ \left. + \frac{\delta t}{2} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right)^2 f_i^{(1)} \right] = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Les dérivées secondes de $f^{(1)}$ sont négligeables par rapport aux autres termes.

$$\sum_i \chi \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i^{eq} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla \right) f_i^{(1)} \right] = 0 \quad (\text{A.11})$$

Comme le montre cette dernière équation, les effets numériques apparaissent au niveau de la contribution de la partie hors d'équilibre $f^{(1)}$. Plutôt que de faire toute la procédure de Chapman-Enskog, il est possible d'utiliser les résultats de la procédure présentée au chapitre I. La procédure est identique, il faut simplement remarquer que $f^{(1)}$ est remplacée par $\left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right) f^{(1)}$. Comme $f^{(1)}$ est à l'origine des flux dissipatifs, les équations macroscopiques obtenues sont les mêmes que celles obtenues au chapitre I avec un facteur correctif sur la viscosité qui est le seul coefficient de transport dissipatif pour un écoulement isotherme.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{A.12})$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + u_\beta \partial_\beta \right) u_\alpha = -\frac{1}{\rho} \partial_\alpha p + \nu \nabla^2 u_\alpha + \frac{\nu}{3} \partial_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (\text{A.13})$$

$$(\text{A.14})$$

avec la viscosité $\nu = c_s^2 \tau \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau} \right)$.

Les effets numériques, qui se manifestent sur la valeur de la viscosité, ne proviennent pas de la discrétisation de l'espace des vitesses. Ils ont comme origine les schémas numériques utilisés pour l'intégration temporelle et l'évaluation du terme de transport. Sofonea et Sekerka [39] ont effectué la procédure de Chapman-Enskog pour différents schémas numériques temporels et spatiaux.

Annexe B

Energy-conserving lattice Boltzmann thermal model in two dimensions

abstract

A discrete velocity model is presented for Lattice Boltzmann thermal fluid dynamics. This model is implemented and tested in two dimensions with a finite difference scheme. Comparison with analytical solutions shows an excellent agreement even for wide temperature differences. An alternative approximate approach is then presented for traditional lattice transport schemes.

B.1 Introduction

Over the last decade, it has been demonstrated that the Lattice Boltzmann Method (LBM) is an effective approach method for simulating a wide variety of isothermal fluid flows [1]. In the case of thermal fluid flows, LBM with a multi-speed approach under a single-relaxation-time BGK approximation [2], suffers from numerical instabilities [3]. To avoid these instabilities, the passive scalar approach [4] or introduction of a separate thermal distribution [5] can be used. Vahala *et al.* [7] have proposed a multi-speed model with a higher-order-isotropy velocity model and multiple relaxation times to stabilize the numerical scheme and to have a variable Prandtl number. In [7] a model was suggested based on Gauss-Hermite quadrature that is a straightforward extension of the ‘a priori’ derivation of the Lattice Boltzmann equation by He and Luo [9, 10]. To include thermal effects, heat conduction and viscous heat dissipation, the quadrature must be used to evaluate the moments of f to the eighth order. So the Lattice Boltzmann Thermal model needs 5 discrete velo-

cities in one dimension and 25 discrete velocities in two dimensions.

In this work we test different ways of implementating the proposed approach. The main difficulty arises from the fact that the quadratures are based on the equilibrium distribution function, which introduces an explicit temperature dependence. So the set of discrete velocities resulting from the quadrature is spatially inhomogeneous. To overcome this difficulty several solutions can be envisaged. As far as the macroscopic velocity is concerned, this constraint is removed by a ‘low-Mach-number’ type of approximation. If a development equivalent to ‘low Mach number’ is derived for small temperature differences, a formulation is obtained that would require, to ensure a precision equivalent to the Chapman-Enskog expansion, the exact evaluation of moments up to order 10 (cf Appendix B.6). We have not chosen this solution, rather we propose adapting the quadrature to 25 discrete velocities by choosing a reference temperature for the evaluation of the velocity modules and we take account of the temperature variations by systematically recalculating the weight factors. This system was implemented using a finite-difference scheme and has been validated for a series of academic examples that show that the scheme performs very well even for quite wide temperature differences. The second part of this work shows the difficulties involved in the implementation of this velocity discretization within a traditional lattice-transport approach. The various possibilities in this direction are explained and a first series of tests is presented.

B.2 Discrete velocity model for thermal applications

In this section, a velocity space discretization is presented for the Boltzmann equation under the BGK approximation [2] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau} (f - g) \quad (\text{B.1})$$

where $f \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ is the single-particle distribution function at location \mathbf{r} , microscopic velocity \mathbf{v} and time t , τ is the relaxation time and $g \equiv g(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ is the Boltzmann-Maxwell equilibrium distribution function :

$$g = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp \left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2RT} \right) \quad (\text{B.2})$$

where R is the ideal gas constant and D is the dimension. The macroscopic variables (the density ρ , the velocity \mathbf{u} and the temperature T) are the moments of the distribution function :

$$\rho = \int f \, d\mathbf{v} \quad (\text{B.3})$$

$$\rho \mathbf{u} = \int \mathbf{v} f \, d\mathbf{v} \quad (\text{B.4})$$

$$\frac{1}{2} \rho D R T = \frac{1}{2} \int (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 f \, d\mathbf{v} \quad (\text{B.5})$$

As proposed by He and Luo [9, 10], the set of discrete velocities selected in the present work is the result of a direct discretisation of the continuous Boltzmann equation. This requires that a quadrature be used for the evaluation of the three preceeding integrals that appear in the equilibrium distribution function. Furthermore, the order of the quadrature must suit the accuracy required. For macroscopic applications, it is sufficient for the quadrature to satisfy exactly the macroscopic equations under the first-order Chapman-Enskog expansion. Under the low-Mach-number approximation, using a Gauss-Hermite quadrature [11], this requires integrals of the form

$$I_n = \int \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT}\right) P_n(\mathbf{v}) d\mathbf{v} \quad (\text{B.6})$$

to be computed exactly, where P_n is any polynomial up to order six for isothermal applications and up to order eight for thermal applications. Using a Cartesian decomposition, this procedure leads, for thermal applications, to a set of five discrete velocity co-ordinates and five quadrature weights for each dimension. These discrete velocities are $v_0 = 0$, $v_1 = -v_2 = \sqrt{(5 - \sqrt{10}) RT}$ and $v_3 = -v_4 = \sqrt{(5 + \sqrt{10}) RT}$ and the quadrature weights are

$$w_i = 2^6 5! \sqrt{2\pi RT} H_6\left(\frac{v_i}{\sqrt{2RT}}\right)^{-2} \quad (\text{B.7})$$

where H_6 is the 6th-order Hermite polynomial. In two dimensions for instance, the moments of the distribution function are evaluated as

$$\int \mathbf{v}^n f \, d\mathbf{v} = \int \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT}\right) \frac{\mathbf{v}^n f}{\exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT}\right)} d\mathbf{v} \approx \sum_i \sum_j w_i w_j \frac{\mathbf{v}_{i,j}^n f_{i,j}}{\exp\left(-\frac{\mathbf{v}_{i,j}^2}{2RT}\right)} \quad (\text{B.8})$$

where \mathbf{e}_x and \mathbf{e}_y are the two unit vectors of the Cartesian co-ordinate system, $\mathbf{v}_{i,j} = v_i \mathbf{e}_x + v_j \mathbf{e}_y$ and $f_{i,j} \equiv f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{i,j}, t)$. As the quadrature order is high enough to ensure satisfaction of the macroscopic equations under the first-order Chapman-Enskog expansion, such a discrete-velocity model

should lead to exact simulations of macroscopic gas dynamics, including energy conservation (but with a fixed Prandtl number because of the BGK approximation). However, this model cannot be implemented as is : the discrete velocities are functions of the local temperature and so are variable in space. The corresponding discretized version of the Boltzmann equation could therefore only be solved using cumbersome interpolation schemes in the velocity space. A first approximate solution could be to make a Taylor expansion of the equilibrium distribution function around a reference temperature T_{ref} . This raises to order ten the polynomials P_n for which I_n must be computed exactly. This requires seven discrete velocities for each dimension, thus severely increasing computation requirements. Another approximate solution was preferred, in which the discrete velocities are fixed, corresponding to a given reference temperature, but the quadrature weights are recomputed for an exponential ponderation function depending on the local temperature T . This local adjustment of the quadrature weights takes into account the fact that for macroscopic applications the distribution function is close to the equilibrium distribution at the local temperature. For this approximate thermal model, the discrete velocities are therefore $v_0 = 0$, $v_1 = -v_2 = \sqrt{(5 - \sqrt{10}) RT_{ref}}$ and $v_3 = -v_4 = \sqrt{(5 + \sqrt{10}) RT_{ref}}$ and the quadrature weights are obtained locally as the solutions of the following linear system [11] :

$$K_0 = \int e^{-\frac{v^2}{2RT}} dv = \sum w_i \quad (\text{B.9})$$

$$K_2 = \int v^2 e^{-\frac{v^2}{2RT}} dv = \sum w_i v_i^2 \quad (\text{B.10})$$

$$K_4 = \int v^4 e^{-\frac{v^2}{2RT}} dv = \sum w_i v_i^4 \quad (\text{B.11})$$

with $K_0 = \sqrt{2\pi RT}$, $K_2 = RT K_0$ and $K_4 = 3(RT)^2 K_0$. The solution of this system leads to following simple expressions for the local weights :

$$w_0 = K_0 - \frac{(v_1^2 + v_3^2) K_2 - K_4}{v_1^2 v_3^2} \quad (\text{B.12})$$

$$w_1 = \frac{v_3^2 K_2 - K_4}{2v_1^2 (v_3^2 - v_1^2)} \quad (\text{B.13})$$

$$w_3 = \frac{K_4 - v_1^2 K_2}{2v_3^2 (v_3^2 - v_1^2)} \quad (\text{B.14})$$

B.3 Finite-difference implementation and testing

Numerical simulations were performed to test the validity of the above described discrete-velocity model. A classical Euler scheme is used for temporal integration and a second upwind

finite-difference scheme is used for transport [13]. Boundary conditions are those of [14]. A series of academic simulation examples is presented below to illustrate the ability of the model to deal with compressibility and thermal effects. The first example concerns viscosity effects. We consider the decay of a vortex as described in [15]. The initial velocity conditions are :

$$u_x = (y_0 - y)\omega_0 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{L^2}\right) \quad (\text{B.15})$$

$$u_y = (x - x_0)\omega_0 \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^2}{L^2}\right) \quad (\text{B.16})$$

where $r_0 = (x_0, y_0)$ is the center of the vortex, L is the characteristic length of the initial vortex and ω_0 is the vorticity at the center. Figure B.1 displays the analytical and simulated vorticity decays at vortex center, ω_{max} . The next two examples concern compressibility. Figure B.2 shows the vertical density profile corresponding to stratification by gravity of an isothermal horizontal gas layer. Figure B.3 shows the speed of sound evaluated by simulating propagation of a density wave. The last two examples concern thermal effects. Figure B.4 illustrates simulation results for Couette flow and Figure B.5 shows estimated energy fluxes in a pure-conduction configuration. In all cases, the accuracy levels obtained in terms of density, velocity and temperature fields at the stationary limit are quite satisfactory. The points requiring more specific attention are the energy flux estimations and the prediction of unstationary dynamics. The fact that discrete velocities are fixed at a reference temperature T_{ref} implies that, even though the quadrature weights are adjusted to the local temperature T , the quadrature order is not high enough for rigorous macroscopic simulations. The associated biases are therefore direct functions of the temperature difference $T - T_{ref}$. The simulation results reported in Figure B.5 indicate however that acceptable accuracy is obtained even for strong deviations from the reference temperature. Configurations with 10% temperature differences could be simulated with a 0.5% accuracy on energy fluxes at the stationary limit. Configurations with 30% temperature differences gave 5% accuracy in flux. The corresponding accuracy levels in terms of characteristic times in the unstationary phases are very similar.

Note : In the applications tested and even for very large temperature differences, the present model showed no pathological numerical instabilities. However, strong instabilities appeared (in accordance with the multi-speed thermal lattice Boltzmann literature [3]) when the quadrature weights were kept constant and spatially uniform at the values corresponding to the reference temperature. So adjusting the quadrature weights to suit the local temperature seems useful in terms of numerical stability independently of accuracy considerations.

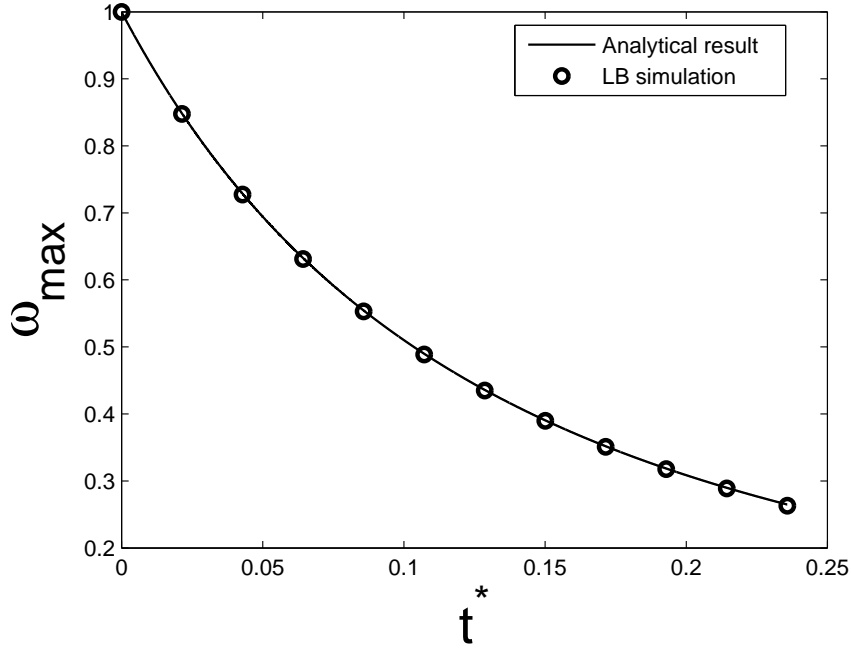


FIG. B.1: Vorticity as a function of the dimensionless time $t^* = \nu t/L^2$ with $\nu = RT\tau$ the kinematic viscosity. The solid line represent the analytical result : $\omega_{\max}(t^*) = \frac{\omega_0}{(1+4t^*)^2}$. The crosses represent the LB simulations.

B.4 Implementation within the standard Lattice Boltzmann algorithm

When attempting to implement the above discrete-velocity model in standard Lattice Boltzmann schemes, the first difficulty is that $v_3 \neq 2v_1$ and $v_4 \neq 2v_2$. Independently of the temperature, we find $v_3/v_1 = v_4/v_2 \approx 2.1$. Therefore, if the time step δt is adjusted so that information is exactly transported from one node to an adjacent node at speed v_1 (or v_2) during δt , then the information transported at speed v_3 (or v_4) does not fall exactly on the lattice. In order to bypass this difficulty with an approximate approach, we suggest imposing arbitrarily $v_3 = 2v_1$ and $v_4 = 2v_2$, and making use of the same quadrature weight adjustment as in Sec. B.2, function of the local temperature. This leads to the following discrete velocity set : $v_0 = 0$, $v_1 = -v_2 = \sqrt{(5 - \sqrt{10}) RT_{ref}}$ and $v_3 = -v_4 = 2v_1$. The quadrature weights are those of Eq. B.12. As already mentioned, such a procedure of weight adjustment for a fixed set of velocities does not ensure a high enough order of quadrature. Furthermore, unlike the velocity set derived with the Gauss-Hermite procedure, this

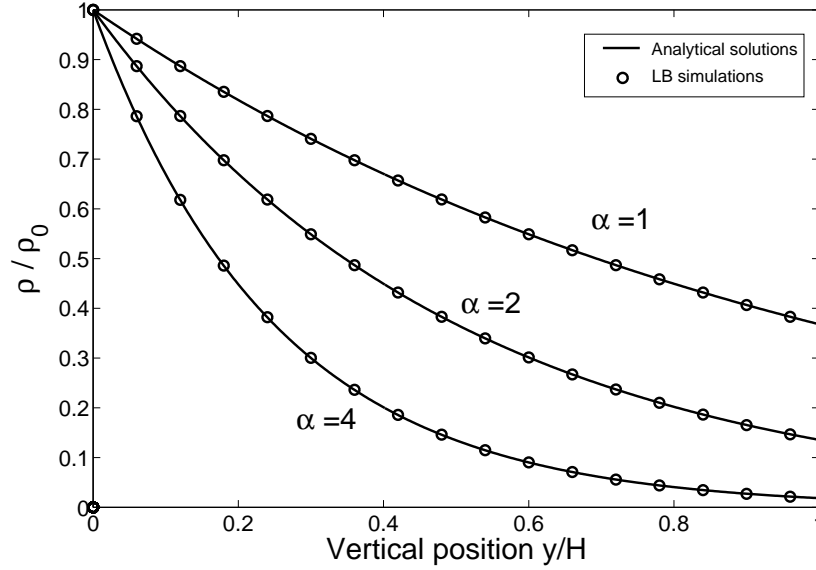


FIG. B.2: A gravity force is introduced in the model as proposed by [6]. Vertical density profiles are compared with analytical macroscopic solutions at the stationary limit for an isothermal gas layer of thickness H . Simulations are performed for three values of $\alpha = \frac{gH}{RT}$ where g is the acceleration due to gravity.

scheme will not be precise in the limit of small temperature differences. In order to test the level of accuracy that can be achieved with such an approximate approach, this new discrete-velocity model is implemented in the following lattice Boltzmann scheme [5] :

$$\bar{f}(\mathbf{r} + \mathbf{v}_{i,j}\delta t, \mathbf{v}_{i,j}, t + \delta t) = \bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{i,j}, t) - \frac{\delta t}{\tau + 0.5\delta t} [\bar{f}(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{i,j}, t) - g(\mathbf{r}, \mathbf{v}_{i,j}, t)] \quad (\text{B.17})$$

with $\bar{f} = f + \frac{\delta t}{2\tau} (f - g)$. When the resulting lattice Boltzmann model is tested on the same five test cases as in the previous section, the accuracy achieved in terms of density, velocity and temperature fields in the stationary limit are quite similar to those obtained with the more accurate quadrature set and the finite-difference scheme. However the estimated energy fluxes and the characteristic times in the unstationary phases are much less accurate. In Figure 5 the error on the energy flux does not vanish in the quasi-isothermal limit : a residual error of more than 10% is observed and similar biases are observed concerning temporal evolution.

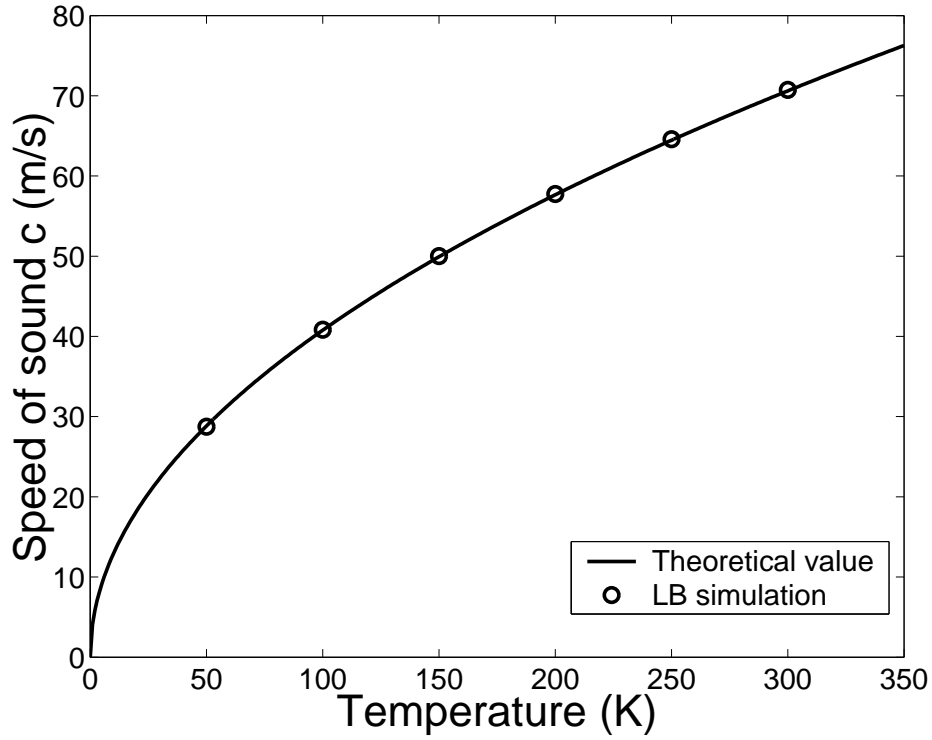


FIG. B.3: The speed of sound was estimated for various temperatures and compared with the theoretical value $c = \sqrt{2RT}$. Following the idea proposed by [13], the density distribution was initialized as a step profile with a small difference in density and the speed of sound is directly estimated by simple front tracking.

B.5 Conclusions

For implementation in traditional lattice Boltzmann schemes, a degraded “double-speed” version of the proposed discrete velocity model can be used for approximate simulations. However, results are unsatisfactory in simulating energy flux. So far we have performed two complementary test studies to try to bypass this flux-estimation difficulty. In both cases, the idea was to go back to the accurate discrete velocity model of Sec. B.2 using an interpolation procedure. In the first study, we interpolated $f_{i,j}$ outside the nodes in geometrical space. When a linear interpolation was used, strong numerical instabilities were observed. Practical simulations could only be performed with a quadratic interpolation [7, 8]. The corresponding accuracy for energy-flux estimation is grid dependent and tends to that of the finite-difference scheme in the limit of an infinite number of nodes. We observed that residual errors lower than those of Sec. B.4 could easily be reached with reasonable spatial meshing. In the second test study, the interpolation was performed in the velocity

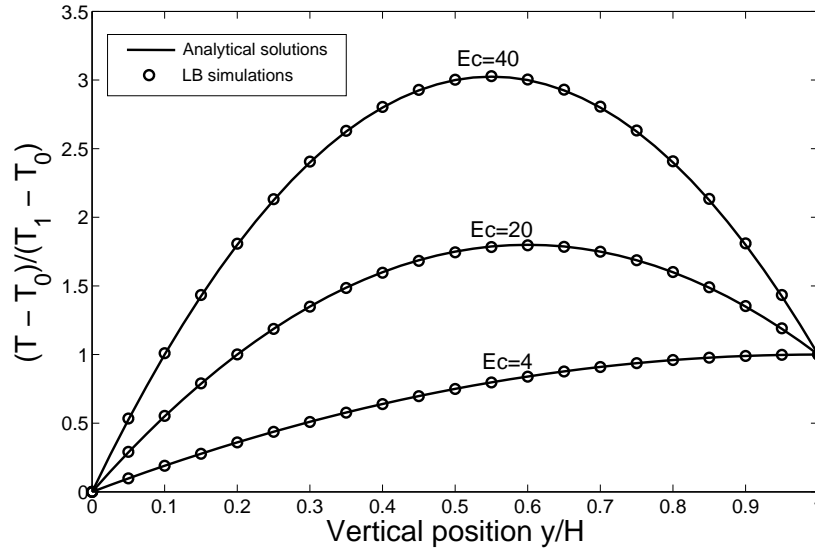


FIG. B.4: Heat dissipation is tested in traditional Couette flow with a temperature gradient [5] for a gas layer of thickness H . The wall at location $y = 0$ is fixed and its temperature is T_0 . The wall located at $y = H$ moves with a constant speed and its temperature is T_1 . The simulation points are in complete agreement with the analytical solution for different Eckert numbers ($Ec=[4;20;40]$).

space so as to estimate the distribution function for the non-double speed assuming that f follows the Maxwellian form of the local equilibrium distribution function (cf Appendix B.7). Here the accuracy is not lattice dependent : there was a 3% residual error for energy flux which is significantly better than the residual error of the above “double-speed” model. These last preliminary test studies were only performed in one dimension. For extension to two dimensions, difficulties arise in terms of boundary conditions.

On the whole it can be concluded that using a finite-difference lattice Boltzmann scheme, excellent accuracy levels can be obtained with the set of five discrete velocities corresponding to the Gauss-Hermite quadrature, together with a local adjustment of the quadrature weights as a function of temperature. This could be performed without great difficulty because the finite-difference approach is not restricted to velocity sets that exactly link lattice nodes in one time step.

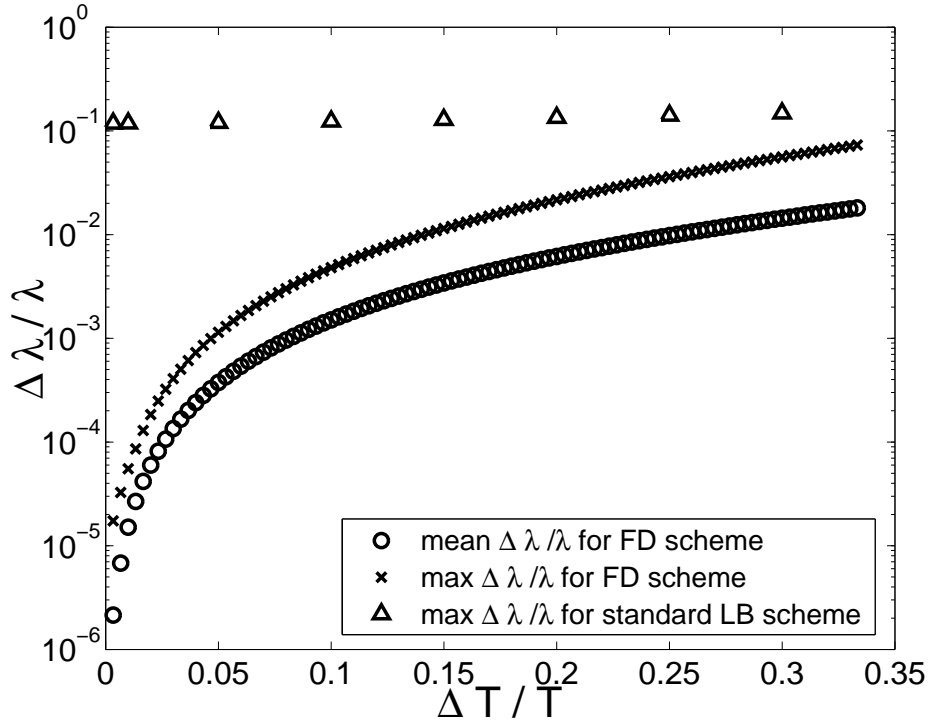


FIG. B.5: The relative error in thermal conductivity is shown for different values of $\Delta T/T$. From the Chapman-Enskog expansion, the thermal conductivity is $\lambda = \frac{D+2}{2} R^2 T \tau$. The mean (circles) and maximum (crosses) relative errors incurred using the finite-difference scheme tend asymptotically towards 0 for quasi-isothermal situations. The sensitivity to the reference temperature is indicated by the maximum error, as it occurs where the temperature is minimum or maximum, i.e. $T - T_{ref} = \Delta T/2$. However the maximum relative error inherent in a traditional lattice scheme (triangles) shows the presence of a residual error.

Appendix

B.6 Determination of quadrature order

For heat transfer applications, thermal fluxes must be correctly evaluated and therefore the moments of the distribution function must be correctly evaluated up to the third moment. Here the first order Chapman-Enskog expansion is used to show that this constraint is equivalent to a correct evaluation of the first six moments of the local equilibrium distribution function (paragraph A1). Under the low-Mach and low- ΔT approximations, the equilibrium distribution function is written

as the product of a centered Gaussian with a fourth order \mathbf{v} polynomial (paragraph A2), which leads to the use of tenth order Gauss-Hermite quadrature (paragraph A3).

B.6.1 Chapman-Enskog procedure

The Chapman-Enskog procedure is used to recover the macroscopic equations. This consists in expanding the distribution function f around the equilibrium function g and in evaluating the mean value of the product of the Boltzmann equation by all collisional invariants.

$$\int \chi \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f \right) d\mathbf{v} = 0 \quad (\text{B.18})$$

with χ a collisional invariant ($1, \mathbf{v}$ and $\frac{1}{2}\mathbf{v}^2$). At zero order the integral (B.18) is evaluated with $f = g$ leading to the hydrodynamic equations for perfect fluids (without dissipative effects). To recover the dissipative terms, the distribution function f is expanded around the equilibrium function g .

$$f \approx g + f^{(1)} \quad (\text{B.19})$$

Replacing f in the Boltzmann equation by $g + f^{(1)}$ leads to :

$$\frac{\partial (g + f^{(1)})}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla (g + f^{(1)}) = -\frac{f^{(1)}}{\tau} \quad (\text{B.20})$$

and neglecting $f^{(1)}$ on the left hand side, $f^{(1)}$ may be written :

$$f^{(1)} \approx -\tau \left(\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla g \right) \quad (\text{B.21})$$

The temporal and spatial derivatives of g are direct functions of the spatial derivatives of ρ , u and T , which leads to :

$$\begin{aligned} f^{(1)} \approx & -\tau g \left\{ \frac{1}{T} [(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot \nabla T] \left[\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2RT} - \frac{5}{2} \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{2RT} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \left[(v_i - u_i)(v_j - u_j) - \frac{1}{3} \delta_{ij} (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

So, in the general case, $f^{(1)}$ can be written as $f^{(1)} \approx g \cdot P_3(\mathbf{v})$, and for isothermal applications $f^{(1)} \approx g \cdot P_2(\mathbf{v})$.

B.6.2 Equilibrium expansion

For thermal applications, the equilibrium distribution function g is expanded around $u = 0$ (low-Mach-number approximation) and around $T = T_0$, where T_0 is a reference temperature.

$$\begin{aligned}
g &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2RT}\right) \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{RT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right] \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2R(T_0 + \theta)}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{RT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right] \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) \exp\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0} \frac{\theta}{T_0}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{RT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right] \\
&\approx \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) \cdot \left(1 + \frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0} \frac{\theta}{T_0}\right) \cdot \left[1 + \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}}{RT} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u})^2}{2(RT)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2RT}\right] \\
&\approx \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) \cdot P_4(\mathbf{v}) \tag{B.23}
\end{aligned}$$

with $\theta = T - T_0$, and $P_4(\mathbf{v})$ is a fourth-order \mathbf{v} polynomial. So the equilibrium distribution function g is approximated by the product of centered Gaussian function with a fourth-order \mathbf{v} polynomial.

B.6.3 Required quadrature orders

For thermal applications, moments of f are addressed up to the third : $\int P_3(\mathbf{v}) f d\mathbf{v}$. Then $f \approx g + f^{(1)} = g \cdot P_3(\mathbf{v})$ and $g \approx \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) \cdot P_4(\mathbf{v})$. So the quadrature must evaluate the moments of a Gaussian function up to order 10 : $\int P_{10}(\mathbf{v}) \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) d\mathbf{v}$. For isothermal applications, only the first two moments of f are addressed. Then $f \approx g + f^{(1)} = g \cdot P_2(\mathbf{v})$ and $g \approx \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) \cdot P_2(\mathbf{v})$. So the quadrature must evaluate the moments of a Gaussian function up to order 6 : $\int P_5(\mathbf{v}) \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_0}\right) d\mathbf{v}$.

B.7 Extrapolation in velocity space

The discrete velocity set corresponding to the Gauss-Hermite quadrature is such that $v_3 \neq 2v_1$ and $v_4 \neq 2v_2$ (cf Figure B.6).

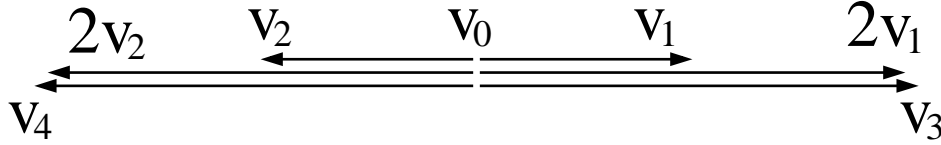


FIG. B.6: Discrete velocities set.

So, in one dimension, for the traditional lattice Boltzmann algorithm, we compute f_0, f_1, f_2, f_{2v_1} and f_{2v_2} . Then f_3 and f_4 are extrapolated assuming f_i has a Maxwellian form :

$$f_i \approx A \exp \left(-\frac{(v_i - B)^2}{C} \right) \quad (\text{B.24})$$

To extrapolate f_3 , the coefficients A, B and C are determined with f_0, f_1 and f_{2v_1} and to extrapolate f_4 another set of coefficients is used corresponding to f_0, f_2 and f_{2v_2} . Finally the macroscopic variables ρ, u and T are calculated with f_0, f_1, f_2, f_3 and f_4 .

Bibliographie

- [1] S. Chen and G.D. Doolen, *Ann. Rev. Fluid Mech.* **30**, 329 (1998)
- [2] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross and M. Krook, *Phys. Rev.* **94**, 511 (1954)
- [3] G. McNamara, A.L. Garcia and B.J. Alder, *J. Stat. Phys* **81**, 395 (1995)
- [4] X. Shan, *Phys. Rev. E* **55**, 2780 (1997)
- [5] X. He, S. Chen and G.D. Doolen, *J. Comp. Phys* **146**, 282-300 (1998)
- [6] X. He, X. Shan and G.D. Doolen, *Phys. Rev. E* **57**, R13 (1998)
- [7] G. Vahala, P. Pavlo, L. Vahala and N. Martys , *J. Modern Phys. C.* **9**, 1247-1261 (1998)
- [8] P. Pavlo, G. Vahala and L. Vahala, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3960 (1998)
- [9] X. He and L-S. Luo, *Phys. Rev. E* **55**, R6333 (1997)
- [10] X. He and L-S. Luo, *Phys. Rev. E* **56**, 6811 (1997)
- [11] P.J. Davis and P. Rabinowitz, *Methods of Numerical Integration*, 2nd ed. (Academic, New York, 1984).
- [12] U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau and J.P. Rivet, *Complex Syst.* **1**, 649 (1987)
- [13] M. Watari and M. Tsutahara, *Phys. Rev. E* **67**, 036306 (2003)
- [14] M. Watari and M. Tsutahara, *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng., Sre. B* **68**, 676 (2002)
- [15] M. Bouzidi, D. d'Humières, P. Lallemand and L-S. Luo , *J. Comput. Phys.* **172**, 704 (2001)

Annexe C

Conditions aux limites thermiques

Pour les schémas Boltzmann-sur-réseau traditionnels pour les fluides isothermes, il existe différents choix possibles de conditions aux limites comme le rebond arrière (“bounce-back”) qui assure la conservation de la masse et une vitesse de glissement nulle à la paroi. Ce type de condition aux limites est difficilement applicable aux schémas différences finies et multi-vitesses comme le notre. De plus, nous souhaitons pouvoir imposer une température de paroi. Les conditions aux limites que nous avons utilisées peuvent être qualifiées de macroscopiques dans le sens où elles ne sont pas dérivées d’un modèle physique des interactions fluide-paroi à l’échelle mésoscopique. Ces conditions aux limites sont telles qu’elles reproduisent les conditions aux limites macroscopiques, c’est à dire, imposer les grandeurs macroscopiques voulues à la paroi (vitesse, température etc ...). Pour décrire les conditions aux limites, prenons l’exemple d’une paroi (schématisée par la figure (C.1)) pour laquelle sont imposées une vitesse de glissement u_p et une température T_p .

Les conditions aux limites utilisées consistent à dire qu’au noeud n_0 la fonction de distribution $f_i(n_0)$ est proche de l’équilibre défini par les variables macroscopiques ρ_p , u_p et T_p .

$$f_i(n_0) = f_i^{eq}(n_0) + f_i^{neq}(n_0) \quad (C.1)$$

avec $f_i^{eq}(n_0)$ la distribution d’équilibre au noeud n_0 et $f_i^{neq}(n_0)$ la partie hors d’équilibre de la fonction de distribution. Ceci permet d’imposer la vitesse u_p et la température T_p par l’intermédiaire de la fonction d’équilibre. Mais il est aussi nécessaire de connaître la masse volumique ρ_p au noeud n_0 . Nous avons choisi d’extrapoler linéairement ρ_p en fonction des masses volumiques ρ_1 et ρ_2 respectivement aux noeuds ρ_1 et ρ_2 . De la même façon la partie hors d’équilibre $f_i^{neq}(n_0)$ a été extrapolée linéairement avec les noeuds n_1 et n_2 . L’ajout de cette partie hors d’équilibre est nécessaire pour assurer la continuité des flux dissipatifs car ceux-ci ne sont bien sûr pas pris en

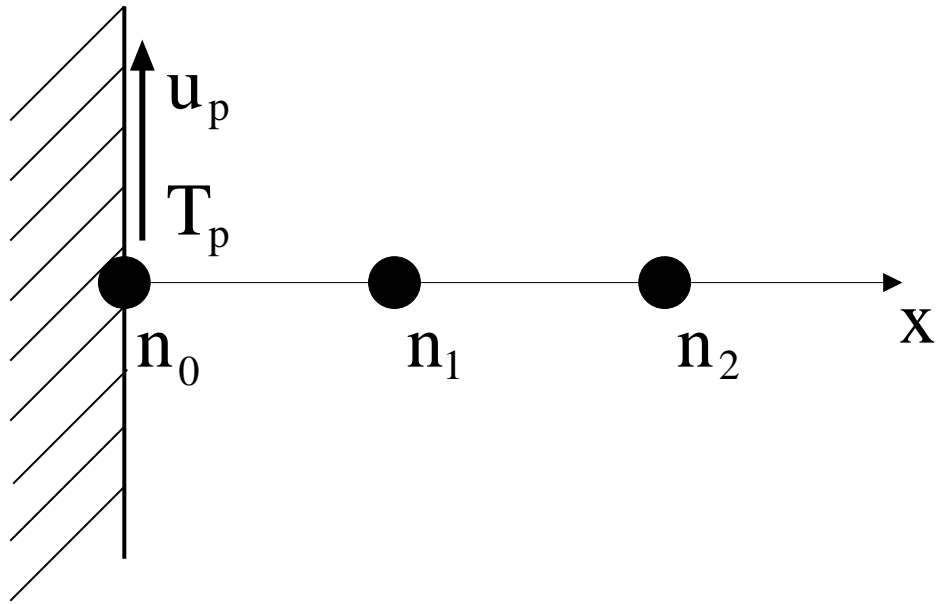


FIG. C.1: schéma d'une paroi dont on veut imposer au noeud n_0 une vitesse de glissement u_p et une température de paroi T_p .

compte dans la partie à l'équilibre $f_i^{eq}(n_0)$.

Annexe D

Coefficients de la distribution d'équilibre du modèle BsR (EL) $D3Q15$

La distribution d'équilibre f_i^{eq} est un développement en série sur la vitesse locale :

$$f_i^{eq} = A_i + B_i v_{i\alpha} u_\alpha + C_i u_\alpha u_\alpha + D_i v_{i\alpha} v_{i\beta} u_\alpha u_\beta + G_{i\alpha\beta} v_{i\alpha} v_{i\beta} \text{ pour } i > 0 \quad (D.1)$$

$$f_0^{eq} = \rho - \sum_{i=1}^{14} f_i^{eq} \quad (D.2)$$

Un jeu possible de valeurs pour les coefficients A_i , B_i , C_i , D_i et $G_{i\alpha\beta}$ est :

$$A_i = \frac{3w_i}{c^2} (p_b - \frac{\kappa}{2} (\partial_\alpha \rho)^2 - \kappa \partial_{\alpha\alpha} \rho + \nu u_\alpha \partial_\alpha \rho) \quad (D.3)$$

$$B_i = \frac{3w_i \rho}{c^2} \quad C_i = -\frac{3w_i \rho}{2c^2} \quad D_i = \frac{9w_i \rho}{2c^4} \quad (D.4)$$

$$G_{i\gamma\gamma} = \frac{1}{2c^4} (\kappa (\partial_\gamma \rho)^2 + 2\nu u_\gamma \partial_\gamma \rho) \text{ pour } 1 \leq i \leq 6 \quad (D.5)$$

$$G_{i\gamma\gamma} = 0 \text{ pour } i \geq 7 \quad (D.6)$$

$$G_{i\gamma\delta} = \frac{1}{16c^4} (\kappa (\partial_\gamma \rho)(\partial_\delta \rho) + \nu (u_\gamma \partial_\delta \rho + u_\delta \partial_\gamma \rho)) \quad (D.7)$$

où p_b est l'équation d'état du fluide, ν la viscosité cinématique et κ le paramètre relié à la tension de surface. Les coefficients w_i ont pour valeurs : $w_i = 2/9$ pour $i = 0$, $w_i = 1/9$ pour $i = 1, \dots, 6$ et $w_i = 1/72$ pour $i = 7, \dots, 14$.

Annexe E

Ecoulement de Poiseuille avec viscosité non-uniforme

Pour tester la possibilité de faire varier la viscosité spatialement, nous avons effectué des simulations numériques d'un écoulement de Poiseuille avec une viscosité non-uniforme dans l'espace. L'écoulement est engendré par une force externe F_x selon l'axe x dans un canal de largeur L_y . La viscosité dépend linéairement de l'ordonnée y dans le canal : $\nu(y) = \nu_0 + \alpha y$. Le profil de vitesse au stationnaire est tel que la force visqueuse égale la force externe F_x :

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial y} \left(\nu(y) \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \quad (\text{E.1})$$

Compte tenue de l'expression de $\nu(y)$ et d'une vitesse de glissement nulle aux parois, l'intégration de cette équation conduit au profil de vitesse suivant :

$$u_x(y) = F_x \frac{(L_y - y) \ln(\nu_0) + y \ln(\nu_0 + \alpha L_y) - L_y \ln(\nu_0 + \alpha y)}{2\alpha [\ln(\nu_0) - \ln(\nu_0 + \alpha L_y)]} \quad (\text{E.2})$$

La figure E.1 compare les résultats de simulations BsR et l'expression analytique du profil de vitesse dans le canal.

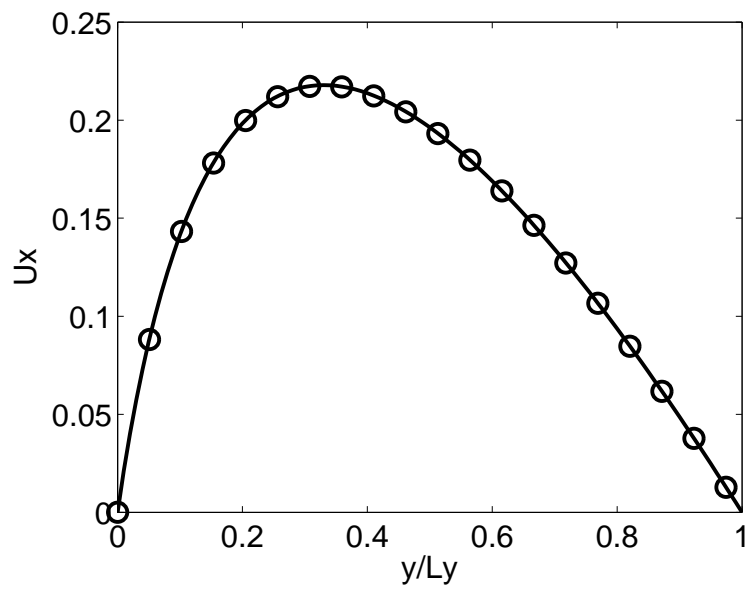


FIG. E.1: Profil de vitesse pour un écoulement de Poiseuille avec une viscosité non-uniforme dans le canal. L'expression de la viscosité est : $\nu(y) = \nu_0 + \alpha y$. La ligne représente le profil analytique et les cercles représentent les simulations BsR.

Annexe F

Procédure de Chapman-Enskog sur réseau

Dans cet appendice, nous effectuons la procédure de Chapman-Enskog sur réseau sur le modèle BsR (EL) avec un terme de force extérieure. L'équation d'évolution est de la forme :

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{v}_i \delta t, t + \delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\delta t}{\tau_c} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + 3 \phi w_i v_{i\alpha} F_\alpha \delta t \quad (\text{F.1})$$

Cette équation est développée au second ordre du pas de temps δt :

$$(\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) g_i + \frac{\delta t}{2} (\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha)^2 g_i = -\frac{1}{\tau_c} [g_i - g_i^{eq}] + \phi w_i v_{i\alpha} F_\alpha \quad (\text{F.2})$$

L'ordre zéro de la procédure de Chapman-Enskog consiste à approximer g_i par g_i^{eq} . Et les dérivées seconde de g_i^{eq} sont négligeables com-pa-rées aux dérivées premières.

$$(\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) g_i^{eq} = \phi w_i v_{i\alpha} F_\alpha \quad (\text{F.3})$$

Ensuite pour retrouver les lois de conservation macroscopiques, nous prenons les sommes des équations (F.3), $\sum_i (F.3)$ et $\sum_i v_{i\alpha} (F.3)$ et nous obtenons :

$$\partial_t \phi + \partial_\alpha (\phi u_\alpha) = 0 \quad (\text{F.4})$$

$$\partial_t (\phi u_\alpha) + \partial_\beta P_{\alpha\beta} + \partial_\beta (\phi u_\alpha u_\beta) + \nu_c \partial_\beta (u_\alpha \partial_\beta \phi + u_\beta \partial_\alpha \phi + \delta_{\alpha\beta} u_\gamma \partial_\gamma \phi) = \phi F_\alpha \quad (\text{F.5})$$

Ici $\nu_c = \frac{1}{3} \left(\frac{\tau_c}{\delta t} - \frac{1}{2} \right) \frac{\delta x^2}{\delta t}$ est la viscosité cinématique du fluide colloïdal. Pour le premier ordre de la procédure, g_i est approximée par $g_i^{eq} + g_i^{(1)}$. En utilisant l'équation (F.2), nous pouvons obtenir une expression pour $g_i^{(1)}$ en considérant les dérivées premières de g_i^{eq} du membre de gauche de l'équation.

$$(\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) g_i^{eq} = -\frac{1}{\tau_c} g_i^{(1)} + \phi w_i v_{i\alpha} F_\alpha \quad (\text{F.6})$$

$$g_i^{(1)} = -\tau_c (\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) g_i^{eq} + \tau_c \phi w_i v_{i\alpha} F_\alpha \quad (\text{F.7})$$

Ainsi avec cette expression pour g_i , l'équation (F.2) est équivalente à :

$$\begin{aligned} (\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) g_i^{eq} + \left(1 - \frac{\delta t}{2\tau_c}\right) (\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) g_i^{(1)} + \frac{\delta t}{2} (\partial_t + v_{i\alpha} \partial_\alpha) (\phi w_i v_{i\beta} F_\beta) \\ = -\frac{1}{\tau_c} g_i^{(1)} + \phi w_i v_{i\alpha} F_\alpha \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

Après sommation de l'équation (F.8) et en négligeant les termes qui sont en carré du nombre de Mach, nous retrouvons les équations macroscopiques de conservation de second ordre en δt .

$$\partial_t \phi + \partial_\alpha (\phi u_\alpha + \frac{\delta t}{2} \phi F_\alpha) = 0 \quad (\text{F.9})$$

$$\partial_t (\phi u_\alpha + \frac{\delta t}{2} \phi F_\alpha) + \partial_\beta (\phi u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta P_{\alpha\beta} + \nu_c \partial_\beta [\phi (\partial_\beta u_\alpha + \partial_\alpha u_\beta + \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma)] + \phi F_\alpha \quad (\text{F.10})$$

Nous remarquons qu'à cause du terme de force, il y a dans les deux équations un terme de vitesse parasite $u_{parasite} = \frac{\delta t}{2} F_\alpha$, qui est négligeable dans la plupart des cas. Cette vitesse parasite apparaît également dans les modèles BsR traditionnels si le terme de force n'est pas négligé dans l'expression de $g_i^{(1)}$ (F.6).

Bibliographie

- [1] A. Dupuis and J.M. Yeomans. Modeling droplets on superhydrophobic surfaces : Equilibrium states and transitions. *Langmuir*, 21 :2624, 2005.
- [2] H Guérin. High-temperature expansion of the mean spherical approximation for hard-core two-Yukawa simple and chain fluids. *Fluid Phase Equilibr.*, 47 :218, 2004.
- [3] C. Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. Springer-Verlag, 1987.
- [4] S. Harris. *An Introduction To The Theory Of The Boltzmann Equation*. Dover publications, 2004.
- [5] R.L. Liboff. *Kinetic theory*. Prentice Hall International Paperback Editions, 1990.
- [6] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, and B. Roulet. *Physique statistique*. Hermann, Paris, 1996.
- [7] L.E. Reichl. *A modern course in statistical physics*. John Wiley and Sons, Inc., 1998.
- [8] R. Balian, J.F. Gregg, and D. Ter Haar. *From microphysics to macrophysics : Methods and applications*. Springer-Verlag, 1991.
- [9] G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, 1994.
- [10] P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, and M. Krook. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys. Rev.*, 94 :511, 1954.
- [11] J. Lowell and H. Holway. Kinetic theory of shock structure using an ellipsoidal distribution function. *Rarefied Gas Dyn*, 1 :193, 1965.
- [12] Y Zheng and H. Struchtrup. Burnett equations for the ellipsoidal statistical BGK model. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 16 :97, 2004.
- [13] P. Andries, P. Le Tallec, J. Perlat, and B. Perthame. The gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl numbers. *Eur. J. of Mech. : B Fluids*, 19 :813, 2000.
- [14] N. Pottier. *Physique statistique hors d'équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire*. Note de cours de DEA de physique des solides de la région parisienne, 2000.

- [15] S. Succi. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond*. Oxford University Press, 2001.
- [16] U. Frisch, B. Hasslacher, and Y. Pomeau. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :1505, 1986.
- [17] S. Wolfram. Cellular automaton fluids 1 : Basic theory. *J. Stat. Phys.*, 45 :471, 1986.
- [18] G. McNamara and G. Zanetti. Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata. *Phys. Rev. Lett.*, 61 :2332, 1988.
- [19] F.J. Higuera and J. Jimenez. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhys. Lett*, 9 :663, 1989.
- [20] Y.H. Qian, D. d'Humières, and P. Lallemand. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys. Lett.*, 17 :479, 1992.
- [21] H. Chen, S. Chen, and W.H. Matthaeus. Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method. *Phys. Rev. A*, 45 :R3539, 1992.
- [22] X He and L-S. Luo. A priori derivation of the lattice Boltzmann equation. *Phy. Rev. E*, 55 :R6333, 1997.
- [23] X. He and L-S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann : from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, 56 :6811, 1997.
- [24] P.J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Academic, New York, 2 edition, 1984.
- [25] F. Rogier and J. Schneider. A direct method for solving the Boltzmann equation. *Transp. Th. Stat. Phys.*, 23 :313, 1994.
- [26] C. Buet. A discrete-velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics. *Transp. Th. Stat. Phys.*, 25 :33, 1996.
- [27] T. Ohwada. Higher order approximation methods for the Boltzmann equation. *J. Comput. Phys.*, 139 :1, 1998.
- [28] M.J. Clifton. Evaluation de la résistance hydraulique d'un empilement régulier de sphères par la méthode Boltzmann-sur-Réseau. *Communication privée*, 2007.
- [29] A.A. Zick and G.M. Homsy. Stokes flow through periodic arrays of spheres. *J. Fluid Mech.*, 115 :13, 1982.
- [30] D. d'Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, and L-S. Luo. Multiple relaxation time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philos Tran Roy Soc Lond A*, 360 :437, 2002.

- [31] M. Bouzidi, M. Firdaouss, and P. Lallemand. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries. *Phys. of Fluids*, 13 :3452, 2001.
- [32] P. Lallemand and L-S. Luo. Hybrid finite-difference thermal lattice Boltzmann equation. *Int. J. Modern Phys. B*, 17 :41, 2003.
- [33] X. Shan. Simulation of Rayleigh-Bénard convection using a lattice Boltzmann method. *Phys. Rev. E*, 55 :2780, 1997.
- [34] X. He and G.D. Doolen. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in the incompressible limit. *J. Comput. Phys.*, 146 :282, 1998.
- [35] P. Pavlo, G. Vahala, and L. Vahala. Higher order isotropic velocity grids in lattice methods. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :3960, 1998.
- [36] G. Vahala, P. Pavlo, L. Vahala, and N.S. Martys. Thermal lattice-Boltzmann models (TLBM) for compressible flows. *Int. J. Modern Phys. C*, 9 :1247, 1998.
- [37] M. Watari and M. Tsutahara. Two-dimensional thermal model of the finite-difference lattice Boltzmann method with high spatial isotropy. *Phys. Rev. E*, 67 :036306, 2003.
- [38] B. Piaud, S. Blanco, R. Fournier, and M.J. Clifton. Energy-conserving lattice Boltzmann thermal model in two dimensions. *J. Stat. Phys.*, 121 :119, 2005.
- [39] V Sofonea and R.F. Sekerka. Viscosity of finite difference lattice Boltzmann models. *J. Comput. Phys.*, 184 :422, 2003.
- [40] M. Watari and M Tsutahara. Boundary conditions for finite-difference lattice Boltzmann method. *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng.*, 68 :676, 2002.
- [41] X. He, X. Shan, and G.D. Doolen. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. *Phys. Rev. E*, 57 :R13, 1998.
- [42] J.W. Cahn and J.E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. interfacial free energy. *J. Chem. Phys.*, 28 :258, 1957.
- [43] R Evans. The nature of the liquid-vapor interface and other topics in the statistical mechanics of non-uniform, classical fluids. *Adv. in Phys.*, 28 :143, 1979.
- [44] S. Chapman and Cowling. *The mathematical theory of non-uniform gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [45] X. He and G.D. Doolen. Thermodynamic foundations of kinetic theory and lattice Boltzmann models for multiphase flows. *J. Stat. Phys.*, 107 :309, 2002.
- [46] D.A. McQuarrie. *Statistical Mechanics*. Harper and Row, New York, 1976.
- [47] S. Chen and G.D. Doolen. Lattice Boltzmann method for fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30 :329, 1998.

- [48] R.R. Nourgaliev, T.N. Dinh, T.G. Theofanous, and D. Joseph. The lattice Boltzmann equation method : theoretical interpretation, numerics and implications. *Int. J. Multiphase Flow*, 29 :117, 2003.
- [49] X. Shan and H. Chen. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys. Rev. E*, 47 :1815, 1993.
- [50] X. Shan and H. Chen. Simulation of non-ideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, 49 :2941, 1994.
- [51] X. Shan and G.D. Doolen. Multicomponent lattice Boltzmann model with interparticle interaction. *J. Stat. Phys.*, 81 :379, 1995.
- [52] V. Sofonea, A. Lamura, G. Gonnella, and A. Cristea. Finite difference lattice Boltzmann model with flux limiters for liquid-vapor systems. *Phys. Rev. E*, 70 :046702, 2004.
- [53] M.R. Swift, W.R. Osborn, and J.M. Yeomans. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids. *Phys. Rev. Lett*, 75 :830, 1995.
- [54] M.R. Swift, S.E. Orlandini, W.R. Osborn, and J.M. Yeomans. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary-fluid systems. *Phys. Rev. E*, 54 :5041, 1996.
- [55] A.J. Briant, A.J. Wagner, and J.M. Yeomans. Lattice Boltzmann simulations of contact line motion. I. liquid-gas systems. *Phys. Rev. E*, 69 :031602, 2004.
- [56] A.J. Briant, P. Papatzacos, and J.M. Yeomans. Lattice Boltzmann simulations of contact line motion in a liquid-gas systems. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 360 :485, 2002.
- [57] J.W. Cahn. Critical point wetting. *J. Chem. Phys.*, 66 :3667, 1977.
- [58] P.G. de Gennes. Wetting : statics and dynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 57 :827, 1985.
- [59] J.S. Rowlinson and B. Widom. *Molecular Theory of Capillarity*. Clarendon Press, Oxford, 1982.
- [60] X. He and L-S. Luo. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. *J. Stat. Phys*, 88 :927, 1997.
- [61] Erik Kissa. *Dispersions : Characterization, Testing and Measurement*. Marcel Dekker, New York, 1999.
- [62] J. Happel. Viscous flow in multiparticle systems, slow motion of fluids relative to beds of spherical particles. *A.I.Ch.E. Journal*, 4 :197, 1958.
- [63] Albert Einstein. *Investigation on the Theory of the Brownian Movement*. Dover Publications, New York, 1956.
- [64] A. Bessi eres, M. Meireles, R Coratger, J. Beauvillain, and V. Sanchez. Investigations of surface properties of polymeric membranes by near field microscopy. *J. Membrane Sci.*, 109 :271, 1996.

- [65] C.S. Mangelsdorf and L.R. White. Dielectric response of a dilute suspension of spherical colloidal particles to an oscillating electric field. *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, 93 :3145, 1997.
- [66] T. Seta and K Kono. Thermal lattice Boltzmann method for liquid-gas two phase flows in two dimensions. *JSME Int. J*, 47 :572, 2004.
- [67] R Zhang and H Chen. Lattice boltzmann method for simulations of liquid-vapor thermal flows. *Phys. Rev. E*, 67 :066711, 2003.
- [68] P Yuan and L Schaefer. A thermal lattice boltzmann two-phase flow model and its application to heat transfer problems - part 1. theoretical foundation. *J. of Fluids Eng.*, 128 :142, 2006.
- [69] N.S. Martys. Energy conserving discrete Boltzmann equation for nonideal systems. *Int. J. Mod. Phys. C*, 7 :1367, 1999.
- [70] X. He, S. Chen, and R. Zhang. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multi-phase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability. *J. Comput. Phys.*, 152 :642, 1999.
- [71] A. Cristea and V. Sofonea. Finite difference lattice Boltzmann model for liquid vapour systems. *Proceedings of the Romanian Academy, Series A*, 3 :87, 2002.

UNIVERSITE TOULOUSE III - PAUL SABATIER

Doctorat d'Université, spécialité Energétique et Transfert - Soutenue le 4 juillet 2007

Benjamin PIAUD

Résumé

MODELISATION MESOSCOPIQUE DES ECOULEMENTS AVEC CHANGEMENT DE PHASE A PARTIR DE L'EQUATION DE BOLTZMANN-ENSKOG. INTRODUCTION DES EFFETS THERMIQUES.

Mots-clés : Transition de phase liquide-vapeur, modélisation cinétique, equation de Boltzmann, agrégation de particules colloïdales.

Ce travail de thèse concerne la modélisation et la simulation des écoulements diphasiques avec changement de phase par des équations cinétiques de type Boltzmann. Ce travail est motivé par deux applications distinctes pour lesquelles la compréhension et l'analyse fine des mécanismes et des dynamiques de changement de phase sont nécessaires. Le premier thème concerne la mise au point de dispositifs passifs de refroidissement diphasiques pour la micro-électronique. Le seconde thématique concerne la formation de dépôts de filtration résultant de l'agrégation de particules colloïdales à la surface d'une membrane dans des procédés de filtration membranaire. Pour les applications de type colloïdal, un modèle à deux fluides est proposé en adaptant des méthodes Boltzmann-sur-Réseau de la littérature pour la résolution de l'écoulement. Enfin, dans une partie plus exploratoire, un méthode de résolution originale de l'équation de Boltzmann-Enskog est proposée afin de traiter des écoulements avec changement de phase en incluant les effets thermiques.

Abstract

MESOSCOPIC MODELING OF TWO-PHASE FLOW WITH PHASE CHANGE USING THE BOLTZMANN-ENSKOG EQUATION. INTRODUCTION OF THERMAL EFFECTS.

keywords : liquid-vapor transition, kinetic modelisation, Boltzmann equation, aggregation of colloidal particles.

In this post-graduate research, kinetic equations of the Boltzmann type were used to model and simulate two-phase flows with phase change. This work was aimed at two different applications where it is important to understand and finely analyze the mechanisms and dynamics of phase change. The first topic is related to the development of two-phase passive cooling devices for micro-electronics. The second application is the aggregation of colloidal particles that results in the formation of deposits on the surface of a membrane during the process of membrane filtration. For the colloid application, a two-fluid model is proposed that adapts existing Lattice-Boltzmann methods to solve the flow. Finally, in a more exploratory part, an original method is proposed to solve the Boltzmann-Enskog equation, to deal with flows with phase change including thermal effects.