

**THESE de DOCTORAT de l'UNIVERSITE PARIS 6**

**Spécialité:**

**Mécanique**

**présentée**

**par Mme Irina Ginzbourg**

**pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'UNIVERSITE PARIS 6**

**Sujet de la thèse:**

**Les problèmes de conditions aux limites dans les méthodes  
de gaz sur réseaux à plusieurs phases**

**à soutenir le**

**devant le jury composé de:**

**Mme Renée Gatignol**

**M. Gérard Labrosse**

**M. Pierre Lallemand**

**M. François Kalaydjian**

**M. Stéphane Zaleski**

**M. Pierre Adler**

**Président**

**Rapporteur**

**Rapporteur**

**Directeur**

# **THESE de DOCTORAT de l'UNIVERSITE PARIS 6**

**Spécialité:**

**Mécanique**

**présentée**

**par Mme Irina Ginzbourg**

**pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'UNIVERSITE PARIS 6**

**Sujet de la thèse:**

**Les problèmes de conditions aux limites dans les méthodes  
de gaz sur réseaux à plusieurs phases**

**à soutenir le  
devant le jury composé de:**

**Mme Renée Gatignol  
M. Gérard Labrosse  
M. Pierre Lallemand  
M. François Kalaydjian  
M. Stéphane Zaleski  
M. Pierre Adler**

**Président  
Rapporteur  
Rapporteur  
  
Directeur**

*A ma fille Marina*

Je tiens à exprimer ma sincère gratitude à **Mme Renée Gatignol** de m'avoir permis de réaliser cette thèse dans le cadre de la formation doctorale de l'Université Paris VI et de m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury.

Grâce à **M Pierre Adler** qui m'a proposé ce sujet de thèse, j'ai pu apprécier de travailler sur des problèmes liés aux Gaz sur Réseaux. Je le remercie très vivement de m'avoir orientée vers des points particulièrement intéressants. Je le remercie également d'avoir mis à ma disposition un nombre important de moyens du Laboratoire des Phénomènes de Transport dans les Mélanges.

J'adresse de vifs remerciements à **MM Pierre Lallemand** et **Gérard Labrosse** d'avoir accepté la charge de rapporteur. Je tenais beaucoup à ce que **M Stéphane Zaleski** fasse partie du jury en raison de sa vaste expérience concernant les méthodes des gaz sur réseau et méthodes de Boltzmann et je le remercie pour sa participation. **MM Dan Rothman** et **Dominique d'Humières**, je vous remercie chaleureusement d'avoir eu la gentillesse de lire ce manuscrit, de m'avoir apporté de précieux conseils et de manière générale, pour toute l'attention portée à mon égard.

Ce travail a été réalisé dans le cadre d'un contrat de **l'Institut Français de Pétrole** à qui j'aimerais exprimer ma reconnaissance ainsi qu'à **M François Kalaydjian** pour son parrainage scientifique et pour son intérêt au travail de recherche effectué.

Je tiens à remercier **M Jean-Claude Lengrand** de m'avoir accueillie au Laboratoire d'Aérothermique du CNRS.

Je remercie **Mme Michel Vignes-Adler** pour ses conseils tant sur le plan administratif que sur le plan scientifique ainsi que **M Jean-François Thovert** pour les divers conseils qui m'ont facilité la mise au point des codes numériques et des techniques de visualisation.

J'adresse ma profonde reconnaissance **M Vladimir Markovich Entov** à qui je dois ma première initiation à la recherche, qui m'a encouragée de loin tout au long de ces trois années de thèse et dont l'amitié m'est très chère.

Cette étude n'aurait pas été possible sans l'aide et les encouragements de **Anne Dussaud**, ma collègue et amie que je remercie pour tout le temps qu'elle a bien voulu me consacrer avec une patience inépuisable. **Anne**, je te remercie d'avoir rendu le quotidien plus agréable.

Une phrase ne suffira pas pour exprimer ma reconnaissance et ma sympathie à **Mme Colette Boussat** pour son soutien chaleureux et sa bonne humeur.

Un grand merci à **Kevin Heffner** pour son aide, son amitié et pour ses nombreux conseils.

Enfin, je ne peux terminer sans ajouter mes sincères remerciements à l'ensemble des thésards et stagiaires du **Laboratoire des Phénomènes de Transport dans les Mélanges**, à **Mme Françoise Legay**, **MM Bernard Prunet Foch** et **Louis GottesDiener**, **M et Mme Christian** et **Danièle Bisch**, **Mme Françoise Baillot**, **Mlle Cristine Dupond**, **MM Alain Testa** et **Paul Tetu** ainsi qu'à toutes les personnes du **Laboratoire d'Aérothermique**.

# Table des Matières.

Résumé.	1
<b>Chapitre 1. Introduction des modèles de gaz sur réseau et des modèles de Boltzmann.</b>	
1.1. Introduction.	8
1.1.1. Historique.	8
1.1.2. Organisation de Chapitre 1.	9
1.2. Les modèles de gaz sur réseau à une vitesse.	10
1.2.1. Définitions et propriétés du modèle LG.	10
1.2.2. Microdynamique.	17
1.2.3. Etude de l'équilibre.	19
1.2.4. Les équations macrodynamiques.	22
1.2.5. Approximation de Boltzmann.	27
1.2.6. Calcul de la viscosité.	29
1.3. Les modèles de Boltzmann.	30
1.3.1. Comparaison de la méthode de Boltzmann avec LG.	30
1.3.2. La méthode LBE.	31
1.3.3. Modèles LBE avec correction de pression.	34
1.3.4. Conditions aux limites.	39
1.4. Modèles multiphasiques.	42
1.4.1. Extensions des modèles de gaz sur réseau pour des écoulements à plusieurs phases.	42
1.4.2. Extensions des modèles de Boltzmann pour des écoulements à plusieurs phases.	51
1.4.3. Modèle <i>liquide-gaz</i> .	54
Appendice 1.A. Introduction de particules immobiles dans les modèles LG.	57
<b>Chapitre 2. Modèle de Boltzmann sur un réseau FCHC: condition d'adhérence à la paroi par les réflexions classiques.</b>	
2.1. Introduction.	60
2.2. Modèle FCHC à $L$ particules immobiles.	62
2.2.1. Equation de Boltzmann avec force extérieure.	62
2.2.2. Solution à l'équilibre.	63
2.2.3. Equations macrodynamiques.	63

2.2.4. La matrice de collision.	65
2.3. Analyse des conditions aux limites au premier ordre.	68
2.3.1. Introduction des réflexions classiques.	68
2.3.2. Analyse des réflexions classiques au premier ordre.	71
2.4. Analyse des conditions aux limites au second ordre.	74
2.4.1. Développement au second ordre des solutions pour les populations. Application à l'écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné.	74
2.4.2. Application à l'écoulement de stagnation.	79
2.4.3. Application à l'écoulement de Poiseuille plan dans un canal incliné à 45°.	80
2.5. Extensions et conclusions.	83

**Chapitre 3. Conditions aux limites à la paroi solide:  
méthodes alternatives aux réflexions classiques.**

3.1. Introduction.	88
3.2. Algorithmes de classe A: une solution inverse avec estimation des champs inconnus par différences finies.	89
3.2.1. La méthodologie inverse: généralités.	89
3.2.2. Algorithmes de classe A.	94
3.3. Algorithmes de classe B: une solution inverse sans estimation des champs inconnus par différences finies.	97
3.3.1. Méthode des "équations linéaires pour les populations inconnues".	97
3.3.2. Modèle LBE avec les réflexions classiques ou avec les méthodes A et B aux limites: schémas numériques.	100
3.3.3. Généralisation des réflexions standards.	102
3.4. Cas particuliers.	109
3.4.1. Comparaison avec une solution exacte pour les probabilités pour un écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné et dans un canal incliné à 45°.	109
3.4.2. Ecoulement de Couette accéléré.	116
3.4.3. Ecoulement en tube carré.	119
3.4.4. Ecoulement près d'un point de stagnation.	123
3.5. Extensions et conclusions.	131
Appendice 3.A. Formulaire des relations pour les dérivées par différences finies.	133
Appendice 3.B. Solutions pour les probabilités dans les géométries particulières.	135
3.B.1. Point près d'un plan.	135

3.B.2. Point dans un coin 2D.	137
3.B.3. Point dans un coin 3D.	138

#### **Chapitre 4. Ecoulement en double phase: conditions à l'interface.**

4.1. Introduction.	140
4.2. Généralités: conditions standards à l'interface.	141
4.3. Modèles 1 et 2 à deux phases.	143
4.4. Conditions sur une interface plane par les Modèles 1 et 2.	150
4.4.1. Continuité de pression.	150
4.4.2. Continuité des vitesses et des contraintes tangentielles.	151
4.5. Tension de surface dans les modèles ILB avec viscosités différentes.	166
4.5.1. Principales méthodes pour déduire la tension de surface.	166
4.5.2. Calcul de la tension de surface d'après la définition mécanique.	172
4.5.3. Tenseurs anisotropes dus à la perturbation.	175
4.5.4. Tension superficielle dans les Modèles 1 et 2.	177
4.5.5. Résultats numériques et conclusions.	180
Appendice 4.A. Analyse du Modèle 1 au premier ordre.	190
Appendice 4.B. Analyse du Modèle 2 au premier ordre.	192
Appendice 4.C. Contributions des vecteurs propres de la matrice de collision sur le réseau FCHC dans le calcul de la tension de surface par le test mécanique.	194
Appendice 4.D. Test mécanique dans un canal incliné avec un angle $\theta = 45^\circ$ .	198
Appendice 4.E. Test mécanique dans un canal incliné avec un angle $0^\circ < \theta < 45^\circ$ .	202

#### **Chapitre 5. Ecoulements à trois phases.**

5.1. Introduction.	205
5.2. Généralisation du Modèle 1 et du Modèle 2 à trois phases.	206
5.2.1. Description des modèles.	206
5.2.2. Tension de surface.	211
5.3. Etalement: éléments de théorie.	213
5.4. Exemple numérique: étalement d'une goutte.	216
<b>Conclusion.</b>	224
<b>Références.</b>	227

Appendice 2.A. Article: " <i>Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model</i> ".	233
--	-----

## Notations et symboles utilisés.

### Symboles caractérisant les paramètres physico-chimiques des fluides.

<b>D</b>	tenseur des taux de déformation
<b>F</b>	force extérieure
<i>h</i>	épaisseur caractéristique
<b>j</b>	courant moyen
<i>Q</i>	débit
<b>P</b>	tenseur du flux de la quantité de mouvement
<i>p</i>	pression
<b>R</b>	rayon de l'étalement
<i>Re</i>	nombre de Reynolds
<i>S<sub>γ</sub></i>	coefficient d'étalement de la phase $\gamma$
<i>T</i>	température
<b>u</b>	vitesse
$\eta$	entropie
$\nu$	viscosité cinématique de cisaillement
$\mu$	viscosité dynamique de cisaillement
$\rho$	densité
$\sigma$	tension de surface
$\tau$	tenseur visqueux des contraintes
$\xi$	viscosité cinématique de compression

### Symboles utilisés pour la définition du modèle de Boltzmann.

<b>A</b>	matrice de collision
<i>b</i>	nombre des particules dans un noeud
<i>b<sub>m</sub></i>	nombre des particules mobiles dans un noeud
<i>C<sub>i</sub></i>	vitesse des particules présentes sur le réseau
<i>C</i>	module de vitesse
<i>C<sub>s</sub></i>	vitesse du son
<i>D</i>	dimension de l'espace
<i>d</i>	densité moyenne par cellule
<i>i</i>	numéro de cellule
<i>L</i>	nombre des particules immobiles



$\bar{L}$	grandeur caractéristique du système
$g$	facteur galiléen
$m$	masse d'une particule
$N_i$	population moyenne
$N_i^{eq.}$	population moyenne à l'équilibre
$N_i^{10}$	écart à l'équilibre au premier ordre proportionnel aux dérivées premières de l'impulsion
$N_i^{1F}$	écart à l'équilibre au premier ordre proportionnel à la force extérieure
$N_i^{2(\rho u)}$	écart à l'équilibre au second ordre proportionnel aux dérivées secondes de l'impulsion
$N_i^{2(\rho)}$	écart à l'équilibre au second ordre proportionnel aux dérivées secondes de la densité
$N_i^{2(\rho F)}$	écart à l'équilibre au second ordre proportionnel aux dérivées premières de $\rho F$
$Q_{i\alpha\beta}$	ensemble des tenseurs invariants du second ordre
$T_{i\alpha\beta\gamma}$	ensemble des tenseurs invariants du troisième ordre
$T_{i\alpha\alpha\beta\beta}$	ensemble des tenseurs invariants du quatrième ordre
$W_i$	paramètre de l'opérateur de collision
$\varepsilon$	rapport entre unité du réseau et le grandeur caractéristique du système
$\lambda$	valeur propre de la matrice de collision
$\tau$	paramètre de relaxation

### Symboles utilisés pour l'analyse des conditions aux parois solides.

$h, H$	largeur du canal
$h', H'$	largeur du canal incliné
$p$	probabilité de réflexion en arrière
$P_\alpha^{-\beta}$	probabilité dans les réflexions généralisées
$z_0$	noeud frontière près de la paroi solide
$Z$	ensemble des noeuds frontières
$Z^{appr.}$	ensemble des noeuds voisins d'un noeud $z_0$ pour estimation des quantités inconnues
$Z_v$	ensemble des noeuds voisins d'un noeud $z_0$ pour estimation des dérivées
$\Delta$	distance entre les derniers noeuds du réseau et la paroi solide
$( )^{d.f.}$	estimation par les différences finies

**Symboles utilisés pour l'analyse des conditions interfaciales.**

$A^{per.}$	constante de perturbation
$C^{per.}$	fonction de perturbation
$\mathbf{f}$	gradient de couleur
$H$	courbure moyenne
$n$	normale
$\mathbf{z}_0$	noeud à l'interface
$\ \psi\ $	saut de $\psi$
$( )^{int.}$	paramètres à l'interface
$( )^R, ( )^B, ( )^V$	paramètres de la phase rouge, bleue et verte

## **Résumé.**

Les méthodes cellulaires pour résoudre les équations de Navier-Stokes prennent leur source dans les modèles de gaz à répartition discrète des vitesses développés en 60-80 par J.E.Broadwell, R.Gatignol et H.Cabannes. Possédant une forme d'automates, discrets dans le temps et l'espace, dans lesquels les états de sortie sont déterminés en fonction des états d'entrée, les méthodes de *gaz sur réseau* ont rapidement gagné de l'importance en Mécanique des Fluides depuis la publication de l'article de U.Frisch, B.Hasslacher et Y.Pomeau en 1986. On peut voir trois raisons principales à ce succès. La première est l'attrait que suscite en recherche toute méthode radicalement nouvelle d'autant plus que la méthode réunit la théorie classique et la performance numérique. La seconde est due au développement des machines massivement parallèles et à leur adaptation aux algorithmes correspondants à ces méthodes. La troisième nous semble également très importante aujourd'hui; ces méthodes discrètes sont bien adaptées au traitement de problèmes à plusieurs phases, puisque l'interface et son mouvement sont déterminés aisément; ceci est un avantage important par rapport aux algorithmes classiques de Mécanique des Fluides.

Le modèle sur lequel porte la présente thèse appartient à la famille des méthodes de Boltzmann développée avec l'hypothèse de chaos moléculaire dans les travaux de G.R.McNamara et G.Zanetti (1988), F.J.Higuera et J.Jimenez (1989) et d'autres comme une alternative possible aux gaz sur réseau. Les variables booléennes qui décrivent la présence ou l'absence des particules de gaz dans une cellule du réseau sont alors remplacées par des variables réelles appelées populations moyennes qui obéissent à l'équation de Boltzmann discrétisée en espace et en temps. Les équations de Navier-Stokes dans le régime incompressible sont déduites du comportement microscopique des particules ou des populations pour ces deux approches.

Néanmoins, lorsque les premiers tests numériques ont été effectués par le modèle LBE pour des écoulements simples, il nous est rapidement apparu que le principal problème était la précision des modèles. De plus nous avons pris conscience que l'insuffisance de la précision provient des conditions imposées aux limites. Pour l'écoulement d'une phase unique dans un milieu poreux, la condition d'adhérence à la surface du solide est la plus importante. La méthode la plus traditionnelle, qui suit les modèles de J.C.Maxwell pour l'interaction de particules de gaz avec les parois solides, consiste en la réflexion des particules (ou des populations) vers l'écoulement quand elles arrivent aux bords solides. Ainsi le plus souvent, les populations inconnues dans les noeuds "frontières" du réseau s'expriment sous la forme d'un mélange qui combine dans une certaine proportion une réflexion en arrière et une réflexion spéculaire. Cependant, pour les calculs quantitatifs, il se pose le problème de savoir où les conditions aux limites sont implantées par ces réflexions classiques et avec quelle

précision on peut prédire la localisation de la surface solide. L'étude de ce problème représente la partie la plus importante de cette thèse.

Le point commun à toutes les études de conditions aux limites proposées dans ce travail consiste en l'exploitation du fait que les populations moyennes possèdent toute l'information nécessaire aux champs macroscopiques déduits du modèle. En effet, elles peuvent être développées en série selon les puissances du petit paramètre  $\varepsilon$ , qui représente le rapport entre le pas du réseau et une dimension caractéristique de l'écoulement; la solution à l'équilibre correspond au terme d'ordre zéro du développement tandis que les dérivées spatiales de densité et de vitesse macroscopiques interviennent comme les coefficients associés aux tenseurs invariants du réseau dans les développements d'ordres supérieurs. La solution au premier ordre est connue dans la littérature parce qu'elle est nécessaire pour déduire les équations macrodynamiques; le développement au second ordre est présenté dans ce travail pour l'équation de Boltzmann linéarisée sur le réseau FCHC que nous allons utiliser pour les simulations en 3D. Lorsque l'équation de Boltzmann linéarisée décrit l'évolution des populations, les collisions entre elles sont complètement définies par la matrice de collision. Une des valeurs propres de cette matrice détermine la viscosité cinématique du modèle; les autres sont relativement indéterminées. Néanmoins le second point important du travail présenté consiste en la démonstration de l'influence des valeurs propres de la matrice de collision sur la précision du calcul dans les modèles de Boltzmann. Plus précisément, on a mis en évidence que la précision dans les conditions aux limites, imposées à une paroi solide ou bien à l'interface, dépend de la valeur propre associée aux tenseurs invariants du troisième ordre du réseau; la valeur propre associée aux tenseurs invariants du quatrième ordre intervient dans le calcul de la tension de surface.

Ainsi notre première démarche a consisté à évaluer la distance, imposée par les équations microscopiques correspondantes aux réflexions classiques, entre les noeuds du réseau où les réflexions classiques sont appliquées et les points où la vitesse s'annule en réalité. L'analyse faite au premier et au second ordre dans le développement des populations montre que les réflexions classiques sur le réseau FCHC conduisent à des distances différentes pour la vitesse normale et tangentielle. D'après l'analyse au premier ordre, quand la dérivée de la vitesse normale est négligeable le long de la paroi, la distance sur laquelle la vitesse tangentielle s'annule s'exprime sous forme analytique en fonction de la proportion entre les réflexions en arrière et spéculaire et de la viscosité de l'écoulement. Cependant, la localisation de la frontière solide déterminée selon cette analyse se trouve insuffisamment précise même pour interpréter la vitesse obtenue dans l'écoulement établi de Poiseuille.

Les populations moyennes développées au second ordre fournissent la solution complète pour les populations dans cet écoulement. Par conséquent, nous avons pu déterminer la localisation *exacte* du plan solide pour l'écoulement de Poiseuille dans un canal non incliné

et dans un canal incliné d'un angle de  $45^\circ$  par rapport aux axes du réseau; la valeur propre associée aux tenseurs invariants du troisième ordre intervient dans la solution; la distance devient infiniment grande quand cette valeur propre approche de zéro. En outre, du fait que les solutions obtenues sont différentes pour des canaux inclinés et non inclinés, on en déduit que la position réelle de la frontière dépend de l'orientation de l'écoulement par rapport aux axes du réseau et que par conséquent dans le cadre des réflexions classiques et pour un écoulement arbitraire, on ne peut pas fixer la frontière avec une précision du second ordre seulement par le choix des valeurs propres de la matrice de collision.

Pour trouver des algorithmes aux limites susceptibles d'améliorer la précision, nous avons introduit deux classes d'algorithmes, appelées A et B, qui sont basés sur la méthodologie *inverse* de la méthodologie des modèles LBE. En effet, nous proposons de construire les populations inconnues dans les noeuds frontières, en utilisant les développements au second ordre pour les populations dans lesquels les dérivées spatiales des quantités macroscopiques sont exprimées par les différences finies selon les champs obtenus par le modèle dans les noeuds voisins et en respectant les conditions aux limites. Néanmoins, le développement des populations et, en premier lieu de la solution à l'équilibre, nécessite les valeurs de la densité et de la vitesse dans les noeuds frontières eux-mêmes. Les algorithmes de classes A et B résolvent ce problème de façons différentes; par les méthodes A, on estime les champs macroscopiques dans ces noeuds avec l'aide de méthodes différentes des gaz sur réseau (différences finies, résolution locale des équations macroscopiques, ...); les méthodes de classe B expriment les champs inconnus en termes des populations inconnues et on obtient un système d'équations pour déterminer ces populations. En particulier, une des méthodes de classe B appelée *réflexions généralisées* représente un mélange de toutes les réflexions possibles dans le noeud mais dans des proportions déterminées numériquement d'après les conditions aux limites désirées.

Ainsi la précision des méthodes A et B est aisément contrôlée; formellement, elle est déterminée par l'ordre des termes pris en considération dans la série pour les populations ainsi que par l'ordre de précision de différences finies utilisées. A l'heure actuelle, nous ne voyons pas d'autre méthode pour imposer les conditions aux limites avec un erreur du troisième ordre par rapport à la grandeur caractéristique du système.

Pour les modèles de Boltzmann à deux phases, nous avons poursuivi le même but, à savoir étudier la précision de l'imposition des conditions aux limites entre deux phases. Les modèles cellulaires à plusieurs phases ont le schéma général suivant: ils sont identiques aux modèles à simple phase dans les coeurs de phases mais au niveau de l'interface, les règles de collisions sont modifiées de façon à introduire divers phénomènes physiques (fluides miscibles ou non miscibles, réactions chimiques, nucléation, ...) au moins qualitativement au

niveau macroscopique. Par conséquent, l'interface n'est pas définie de manière classique, c'est-à-dire comme une surface sur laquelle certaines conditions sont satisfaites, puisqu'on ne précise pas *où* et *comment* les conditions interfaciales sont imposées. Néanmoins pour étudier les conditions obtenues pour la vitesse et pour les contraintes tangentielles, nous sommes revenus en arrière en cherchant la position de l'interface dans les noeuds du réseau où deux phases coexistent simultanément ou entre les noeuds interfaciaux du réseau.

L'analyse est faite au premier et au second ordre pour le modèle ILB (*Immiscible Lattice Boltzmann*) proposé par A.K.Gunstensen (1992) et généralisé dans ce travail afin d'incorporer des densités différentes et des viscosités différentes en volume. Le modèle ajoute une perturbation des populations au niveau de l'interface afin de créer la tension de surface et d'assurer la séparation des phases. Pour l'interface plane, nous déduisons pour les deux modèles généralisés proposés les équations interfaciales qui jouent le même rôle dans l'analyse que les réflexions classiques en simple phase. Dans l'ensemble, nous avons estimé les erreurs imposées par le modèle à l'interface quand des valeurs discontinues de densités, de forces extérieures et de viscosités sont introduites en volume.

D'après l'analyse de ces équations au premier ordre, nous montrons que l'introduction de nombres différents de particules immobiles dans les coeurs des phases, faite dans l'espoir d'obtenir des densités macroscopiques différentes pour le modèle ILB, implique la continuité de la quantité de mouvement à l'interface au lieu de la continuité de vitesse. Avec certaines restrictions imposées sur l'écoulement dans le premier modèle, qui traite l'interface selon la majorité des phases présentes, ces conditions sont satisfaites au milieu des noeuds interfaciaux lorsque les viscosités sont différentes mais que les densités et les forces sont égales. Dans les mêmes conditions, nous déterminons la matrice de collision interfaciale pour le second modèle de façon à satisfaire les conditions de continuité dans le plan du réseau qui divise les volumes des phases. D'après l'expansion de l'étude au second ordre nous obtenons les solutions pour la valeur propre associée aux tenseurs invariants au troisième ordre du réseau qui assurent les solutions exactes pour l'écoulement de Poiseuille à deux phases avec des forces et des viscosités différentes.

La deuxième partie de l'analyse concerne les conditions interfaciales pour les contraintes normales. Elle résulte en la définition de l'anisotropie de pression en fonction des paramètres de modèle qui permet d'estimer analytiquement la tension de surface des deux modèles avec des viscosités différentes ainsi que d'évaluer les fluctuations non physiques de densité dues à la perturbation de l'équation de Boltzmann. Par la résolution analytique de ces équations pour certaines configurations, nous obtenons comme toujours des solutions particulières pour les valeurs propres qui suppriment les courants anormaux apparaissant au niveau de l'interface lorsque celle-ci est inclinée par rapport aux axes du réseau. Cette étude introduit encore une valeur propre de la matrice de collision dans la liste des paramètres qui influencent le comportement macroscopique du modèle. Cependant on conclut que pour des

écoulements généraux, les fluctuations non physiques de la densité et de la vitesse sont inhérentes aux modèles ILB et ne peuvent pas être annihilées.

Ainsi les résultats généraux de ce travail consistent en l'analyse de la précision, dont la connaissance est indispensable pour les applications ultérieures, pour le modèle LBE à simple phase et pour le modèle ILB à double phase sur le réseau FCHC.

Le plan du mémoire est le suivant.

Le premier chapitre est une revue bibliographique des principaux travaux se rapportant aux modèles de gaz sur réseau et aux modèles de Boltzmann à phase unique et à plusieurs phases.

Le second chapitre est consacré à la description des résultats importants pour le modèle LBE avec un nombre arbitraire de particules immobiles et à l'analyse de la condition d'adhérence imposée à une paroi solide par les réflexions classiques. Les solutions de l'équation de Boltzmann avec la force extérieure sont développées au second ordre; l'analyse est faite au premier ordre pour un écoulement arbitraire près d'un plan solide; elle est atteinte au second ordre pour l'écoulement de Poiseuille dans un canal non incliné et dans un canal incliné d'un angle de  $45^\circ$ , et pour l'écoulement de stagnation. L'application de l'analyse proposée aux réflexions modifiées est démontrée. Les résultats obtenus sont vérifiés numériquement.

L'introduction des modèles aux limites qui utilisent les différences finies localement près des parois solides et l'exposition des premiers résultats numériques obtenus avec les frontières solides mobiles et immobiles font l'objet du troisième chapitre. Ces modèles nécessitent une analyse de stabilité et une optimisation qui permettent d'évaluer leur efficacité pour des applications numériques.

L'analyse des conditions interfaciales imposées par les deux modèles ILB généralisés est regroupée dans le quatrième chapitre. L'étude est divisée en deux parties indépendantes; dans la première on analyse les conditions de continuité de la vitesse et des contraintes tangentielles selon l'équation de Boltzmann sans perturbation dans des géométries simples; dans la seconde, l'influence de la perturbation sur les solutions est évaluée et les tensions de surface sont déduites pour les deux modèles. Les résultats obtenus sont aussi confirmés par les calculs numériques.

Le cinquième chapitre ne contient pas de solutions analytiques importantes. Les modèles introduits à deux phases sont formellement généralisés à trois phases; les tensions de surface sont ensuite déduites pour les phases prises deux à deux. Une tentative d'analyse quantitative de comportement du modèle est faite pour le calcul numérique de l'étalement d'une goutte en fonction des coefficients d'étalement et des paramètres physiques.



# **Chapitre 1.**

**Introduction des modèles de gaz sur réseau et des modèles  
de Boltzmann.**

## 1.1. Introduction.

### 1.1.1. Historique.

Historiquement, les modèles du gaz sur réseau peuvent être au moins partiellement rattachés aux philosophes grecs et latins, Démocrites, Epicure et Lucrece qui ont fondé les origines des théories atomistiques. On peut sans doute de considérer Bernoulli comme le créateur de la théorie cinétique moderne car il a expliqué le premier les lois expérimentales de la compressibilité des gaz découverts par Mariotte.

Cependant, c'est seulement un siècle après, avec Herapart, Waterston, Joule, Kröning, Clausius, Maxwell et Boltzmann que cette théorie a reçu une base mathématique solide. Maxwell dans l'article "On the Dynamical Theory of Gases" a discuté les propriétés d'un gaz non uniforme mathématiquement. Pour la première fois, on donne les définitions théoriques des coefficients de viscosité, de conductivité thermique et de diffusivité qui sont introduits dans les modèles moléculaires.

Les arguments de Maxwell ont été justifiés par le Théorème H de Boltzmann, établi en 1872. Boltzmann a montré que dans un gaz livré à lui-même, les collisions entre molécules conduisent à la distribution de Maxwell pour les vitesses. Dans le même article, il a formulé les équations intégral-différentielles célèbres que doit satisfaire la fonction de distribution des vitesses indépendamment de l'état du gaz et des forces agissant sur le gaz.

Ainsi, dans la théorie cinétique classique, qui, en citant Bloch "n'est qu'un rameau, le plus parfait et le plus développé, - de la théorie moléculaire de la matière", le gaz est décrit par une fonction de distribution, c'est-à-dire à l'échelle microscopique. Un pas supplémentaire très important a été fait indépendamment par Enskog et Chapman dans les années 1911-1916. Grâce à la procédure qui porte aujourd'hui leurs noms, le passage des équations microscopiques aux équations de Navier-Stokes à grande échelle et aux temps longs est devenu possible.

L'étape suivante dans le développement de la théorie cinétique est due à la complexité des équations de Boltzmann. Tandis que dans la théorie cinétique classique seulement la matière est discrétisée, les modèles simplifiés discrétisent le champ des vitesses autorisées aux particules. Cette simplification a été proposée par Broadwell en 1964; aussi il est juste de le considérer comme le fondateur de la théorie discrète cinétique, dont les équations générales ont été exposées par Gatignol en 1970. Cercignani, Greenberg et Zweifel (1979) ont implanté des particules obéissant à l'équation de Boltzmann sur un réseau cubique tridimensionnel; ils utilisent des différences finies pour exprimer le terme de convection dans l'équation de Boltzmann.

Les gaz sur réseau constituent la troisième principale étape dans l'évolution de la théorie cinétique. On y discrétise alors l'espace, le temps et les vitesses. Le premier modèle de gaz sur réseau est dû à Hardy, Pomeau et de Pazzis (1973) et dénommé HPP. Il s'agit d'un automate, dans lequel le mouvement de particules fictives est synchronisé sur un réseau carré. Lorsque les particules se rencontrent aux noeuds du réseau, elles participent à des collisions au cours desquelles la masse et l'impulsion sont conservées. Ces automates diffèrent des modèles de la théorie discrète cinétique par le caractère discret des positions et du temps ainsi que par le principe d'exclusion introduit dans les modèles du gaz sur réseau. Selon ce principe, il est interdit d'avoir plus d'une particule par direction.

Cependant, le caractère non isotrope des tenseurs de flux de quantité de mouvement, déduits du modèle HPP, a demandé un développement supplémentaire des automates cellulaires. Le problème d'absence d'invariance fut résolu quand Frisch, Hasslacher et Pomeau remplacent le réseau carré par le réseau hexagonal; le modèle FHP qui comprend six vecteurs vitesses est né. La présentation orale du Modèle et des premiers résultats a été faite à l'Académie des Sciences de Paris en 1986.

A trois dimensions, il n'existe pas de réseau à une vitesse (c'est-à-dire avec le même module) qui aurait l'invariance convenable et qui permettrait de paver l'espace. En 1986, d'Humières, Lallemand et Frisch adaptent un réseau quadridimensionnel, dit "Face Centered Hypercubic" (FCHC), aux simulations tridimensionnelles. Récemment, Quin et al (1992), Chen et al (1992) ont développés le modèle de Boltzmann sur le réseau tridimensionnel "Body Centered Cubic" à deux vitesses. Ces derniers modèles conduisent à l'hydrodynamique classique des fluides incompressibles.

### **1.1.2. Organisation de chapitre 1.**

Dans la première Section, nous présentons une classe de modèles de gaz sur réseau dit à une vitesse qui a l'avantage d'englober dans un formalisme unique tous les modèles les plus usuels de la littérature. Elle est largement basée sur l'article très complet de Frisch et al (1987). Le réseau régulier et les mouvements des particules sur celui-ci sont d'abord décrits; on insiste sur les conditions générales auxquelles ces mouvements sont astreints; les deux exemples les plus courants (modèle FHP à deux dimensions; modèle FCHC à "trois dimensions") sont détaillés. Nous montrons ensuite comment on peut déterminer à partir des règles de collision les équations microdynamiques qui permettent de passer d'un pas de temps à l'autre. Ces

équations sont ensuite étudiées à l'équilibre. Lorsqu'il y a mouvement et que celui-ci n'est pas trop intense, on peut procéder par une analyse de perturbation et en déduire les équations macrodynamiques auxquelles obéissent les quantités macroscopiques habituelles telles que la densité et la vitesse. Nous montrons ensuite comment ces équations peuvent se réduire aux équations habituelles de Navier-Stokes et comment on peut en déduire la viscosité dans l'approximation de Boltzmann et en linéarisant l'opérateur de collisions à l'équilibre. Nous donnons aussi dans l'Appendice 1.A une variante utile pour la suite de cette thèse, à savoir l'introduction de particules immobiles.

La deuxième partie de ce Chapitre expose une méthode concurrente des gaz sur réseau qui est celle des modèles de Boltzmann (LBE). Cette méthode au lieu de considérer des mouvements de particules sur le réseau, commence à partir des équations microdynamiques moyennées avec les densités de particules en chaque noeud du réseau. Les variations de ces densités au cours du temps sont déterminées par une matrice de collision dont il faut calculer les différents éléments. Une extension récente de LBE, dite PCLBE (*Pressure Corrected Lattice Boltzmann Equations*), est brièvement décrite. Ces modèles permettent d'éviter les termes non physiques qui apparaissent dans les équations de Navier-Stokes déduites des modèles du gaz sur réseau.

Nous ne discuterons pas les aspects purement numériques dans ce travail. Mentionnons seulement qu'après l'apparition du modèle FHP, Magolus et Toffoli (1987) ont construit des machines spécialement adaptées aux automates cellulaires (CAM-6, CAM-8); des explications sur les capacités de ces machines nouvelles sont données dans Toffoli et Magolus (1991). Clouqueur et d'Humières (1987) ont implanté un calculateur spécialisé RAP-1, très simple par comparaison aux gros ordinateurs, qui permet cependant de travailler simultanément sur les collisions dans plusieurs noeuds avec le quart de la vitesse de CRAY 1; une application efficace du modèle FHP aux super ordinateurs vectorisés est étudiée par Ricardi et al (1991).

## 1.2. Les modèles de gaz sur réseau à une vitesse.

### 1.2.1. Définitions et propriétés du modèle LG.

Considérons une région d'extension caractéristique  $\bar{L}$  de l'espace euclidien à  $D$  dimensions  $\mathbf{R}^D$ . Définissons un réseau  $\mathcal{L}$  comme l'ensemble des points de  $\mathbf{R}^D$  tels que

$$\mathbf{r} = \sum_{\alpha=1}^D m_{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} \quad (1.1)$$

où  $\mathbf{e}_{\alpha}$  désigne un vecteur de base unité de  $\mathbf{R}^D$  et  $m_{\alpha}$  un entier relatif.

On suppose qu'il existe sur les noeuds de ce réseau des particules animées d'une vitesse  $\mathbf{C}_i \in \mathbf{R}^D$ , telle que d'un pas de temps discret au suivant, une particule passe d'un noeud du réseau  $\mathbf{r}$  à l'un de ses plus proches voisins  $\mathbf{r} + \mathbf{C}_i$ . Le temps  $t$  prend des valeurs discrètes  $1, 2, \dots, n, \dots$ . Lorsque la particule arrive au noeud  $\mathbf{r} + \mathbf{C}_i$ , celui-ci peut se trouver occupé également par une ou plusieurs particules ; toutes les particules entrent alors en collision; des règles particulières sont choisies pour décrire la collision, c'est-à-dire la relation entre l'état initial des particules au noeud et l'état final.

Cette description qualitative contient les trois ingrédients nécessaires à la construction d'un automate, à savoir: le réseau, le déplacement des particules, les règles de collision des particules. Schématiquement, on peut dire que le choix du réseau est surtout important pour des problèmes d'isotropie des équations macroscopiques; le choix des règles de collision influe surtout sur les paramètres de ces équations; enfin les déplacements sont très naturels et correspondent aux  $\mathbf{C}_i$ .

Dans les modèles dits à une vitesse, ces choix sont restreints de la manière suivante. Un noeud quelconque  $\mathbf{r}$  du réseau est à égale distance de ses plus proches voisins qui sont au nombre de  $b_m$ . Le module des vitesses

$$c = |\mathbf{C}_i|, \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.2)$$

est constant et égal à cette distance (rappelons que le pas de temps est égal à 1); la vitesse  $\mathbf{C}_i$  permet d'atteindre le  $i$ -ème voisin de  $\mathbf{r}$ . A chacune de ces  $b_m$  possibilités correspond ce qu'on appelle parfois une cellule; on suppose qu'il y a au plus une particule par cellule, c'est-à-dire qu'en  $\mathbf{r}$  il n'y a pas plus d'une particule animée de la vitesse  $\mathbf{C}_i$ .

Dans une vision très géométrique, on peut donc dire que l'ensemble des  $b_m$  plus proches voisins de  $\mathbf{r}$  est égal à l'ensemble des  $\mathbf{r} + \mathbf{C}_i$  ( $i = 1, \dots, b_m$ ). Soit  $\mathcal{G}$  le groupe des isométries du réseau. On suppose que pour toute paire  $(\mathbf{C}_i, \mathbf{C}_j)$  il existe un élément de  $\mathcal{G}$  qui transforme  $\mathbf{C}_i$  en  $\mathbf{C}_j$ . Définissons pour décrire l'état des particules le champ "vectoriel" booléen  $\mathbf{n}(\mathbf{r})$

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \{n_i(\mathbf{r}), i = 1, \dots, b_m\} \quad (1.3a)$$

où  $n_i(\mathbf{r})$  est une variable booléenne valant 1 ou 0 suivant qu'il existe ou non une particule animée de la vitesse  $\mathbf{C}_i$  en  $\mathbf{r}$ . Le déplacement des particules s'effectue de la manière naturelle suivante. Une particule située au noeud  $\mathbf{r}$  et animée de la vitesse  $\mathbf{C}_i$  se déplace au noeud  $\mathbf{r} + \mathbf{C}_i$ ; cette règle se symbolise par

$$n_i(\mathbf{r}) \xrightarrow{\zeta} n_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i) \quad (1.3b)$$

où  $\zeta$  est l'opérateur de propagation.

Il nous reste à définir la collision qui fait passer en un noeud  $\mathbf{r}$  d'un état  $\mathbf{s} = \{s_i = \{0,1\}, i = 1, \dots, b_m\}$  à un état  $\mathbf{s}' = \{s'_i = \{0,1\}, i = 1, \dots, b_m\}$ . On a donc  $2^{b_m}$  états possibles d'entrée et  $2^{b_m}$  états possibles de sortie. La collision peut être soit déterministe, soit aléatoire; dans tous les cas, elle peut être décrite par une probabilité de transition  $A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')$  normée à 1

$$\sum_{\mathbf{s}'} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 1 \quad \forall \mathbf{s} \quad (1.4)$$

Quelques règles sont imposées aux probabilités de transition (outre le fait qu'elles ne dépendent pas de  $\mathbf{r}$ ). On exige d'abord

- la conservation de la masse

$$\sum_i (s'_i - s_i)A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 0 \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}' \quad (1.5a)$$

- la conservation de la quantité de mouvement

$$\sum_i (s'_i - s_i)A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}')\mathbf{C}_i = 0 \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}' \quad (1.5b)$$

$A$  est invariant sous l'action d'un élément  $g$  quelconque du groupe  $\mathcal{G}$ :

$$A(g(\mathbf{s}) \rightarrow g(\mathbf{s}')) = A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \quad (1.6)$$

Cette condition signifie qu'il n'y a pas de direction privilégiée de l'espace.

Enfin on exige l'équation de *bilan semi-détaillé*

$$\sum_{\mathbf{s}} A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') = 1 \quad \forall \mathbf{s}' \quad (1.7)$$

### •Invariance

La notion d'invariance va jouer un rôle important dans ces automates et il est important d'en rappeler les propriétés essentielles.

Un tenseur  $\mathbf{T}$  est invariant par rapport à  $\mathcal{G}$  si

$$\mathbf{T} = g(\mathbf{T}) \quad \forall g \in \mathcal{G} \quad (1.8)$$

Un ensemble de tenseurs  $\{T_{i\alpha_1 \dots \alpha_k}, i = 1, \dots, b_m\}$  d'ordre  $k$  est invariant par rapport à  $\mathcal{G}$  si quelque soit l'élément  $g \in \mathcal{G}$  tel que

$$\mathbf{C}_i = g(\mathbf{C}_j)$$

on a

$$\mathbf{T}_i = g(\mathbf{T}_i) \quad (1.9)$$

Par exemple, l'ensemble des  $\mathbf{C}_i$  a été supposé invariant par rapport à  $\mathcal{G}$ . On suppose de plus les propriétés suivantes.

Considérons un élément  $\mathbf{C}_i$  et  $\mathcal{G}_i$  le sous-groupe de  $\mathcal{G}$  qui laisse  $\mathbf{C}_i$  invariant et donc l'hyperplan  $\pi_i$ , orthogonal à  $\mathbf{C}_i$  invariant. On suppose que

$$\{ \mathbf{v} = g(\mathbf{v}), \forall g \in \mathcal{G}_i \} \Rightarrow \{ \mathbf{v} = 0 \} \quad \forall \mathbf{v} \in \pi_i ; \quad (1.10a)$$

et que pour une transformation linéaire  $\mathbf{L}$  de  $\pi_i$

$$\{ \mathbf{L} \circ g = g \circ \mathbf{L}, \forall g \in \mathcal{G}_i \} \Rightarrow \{ \mathbf{L} = \alpha \mathbf{I} \} \quad (1.10b)$$

On peut déduire quelques propriétés de ces hypothèses (voir aussi dans Frisch et al, 1987).

Puisque la transformation  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$  appartient à  $\mathcal{G}$ , l'ensemble  $\{\mathbf{C}_i, i = 1, \dots, b_m\}$  est invariant par cette transformation.

Du fait de (1.9) et d'après la propriété (1.10a) on déduit que un ensemble  $\mathbf{v}_i$  de vecteurs invariants par  $\mathcal{G}$  est proportionnel à  $\mathbf{C}_i$

$$\mathbf{v}_i = \lambda \mathbf{C}_i \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.11)$$

et qu'un ensemble de tenseurs du second ordre  $\mathbf{T}_i$  qui est invariant par  $\mathcal{G}$  est de la forme

$$\mathbf{T}_i = \lambda \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i + \mu \mathbf{I} \quad (1.12)$$

En conséquence directe, un tenseur invariant du second ordre est nécessairement l'identité

$$\mathbf{T} = \mu \mathbf{I} \quad (1.13)$$

Enfin nous avons en application de (1.13) pour les moments du second ordre:

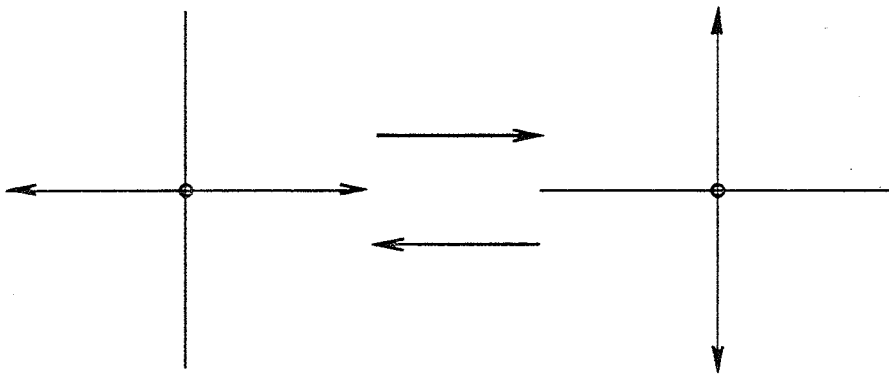
$$\sum_i \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i = \frac{b_m c^2}{D} \mathbf{I} \quad (1.14)$$

puisque c'est un tenseur invariant par tout élément de  $\mathcal{G}$ .

Les tenseurs invariants du 3-ème ordre sont nuls puisque la transformation  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$  appartient à  $\mathcal{G}$ ; par conséquent, tous les moments de la vitesse d'ordre impair sont nuls.

• *Exemples*

Historiquement, le modèle HPP a été introduit le premier (Hardy et al, 1973). Les particules se déplacent sur un réseau carré avec  $b_m = 4$  vitesses possibles  $(\pm 1, 0)$ ,  $(0, \pm 1)$ . Ces règles de collision, illustrées sur la Figure 1-1, peuvent être exposées comme suit: si deux particules arrivent à un noeud avec des directions opposées, elles le quittent après collision dans la direction perpendiculaire. Nous ne détaillerons pas plus ce modèle car le tenseur du flux de quantité de mouvement déduite de ce modèle n'est pas isotrope (voir les formules (1.53)); donc son comportement à grande échelle n'est cependant pas identique à celui d'un fluide réel.



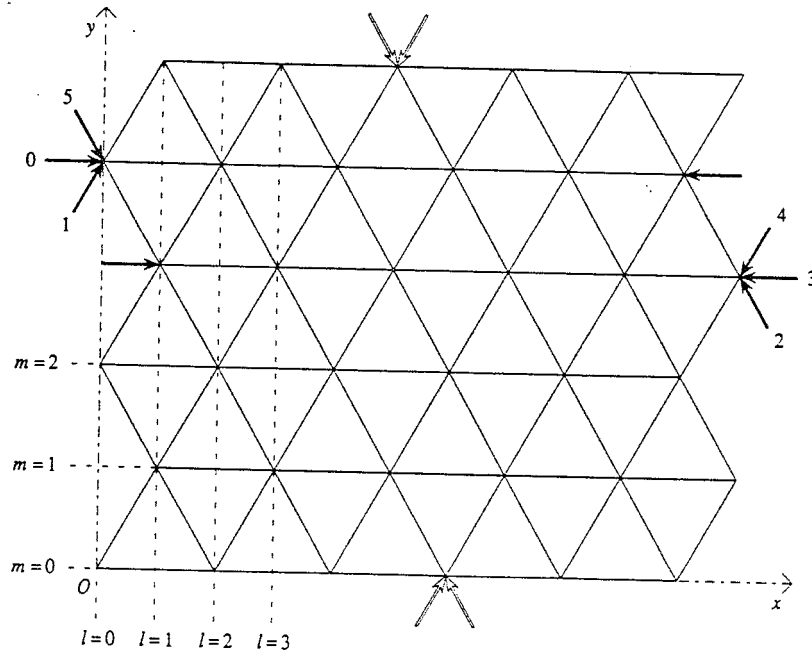
**Figure 1-1:** Deux collisions possibles dans le modèle HPP.

De ce fait, le modèle HPP a été abandonné au profit du modèle FHP (Frisch, Hasslacher, Pomeau, 1986). Dans ce modèle bidimensionnel, les particules se déplacent selon un réseau hexagonal; elles peuvent prendre  $b_m = 6$  vitesses différentes qui correspondent aux 6 directions du réseau

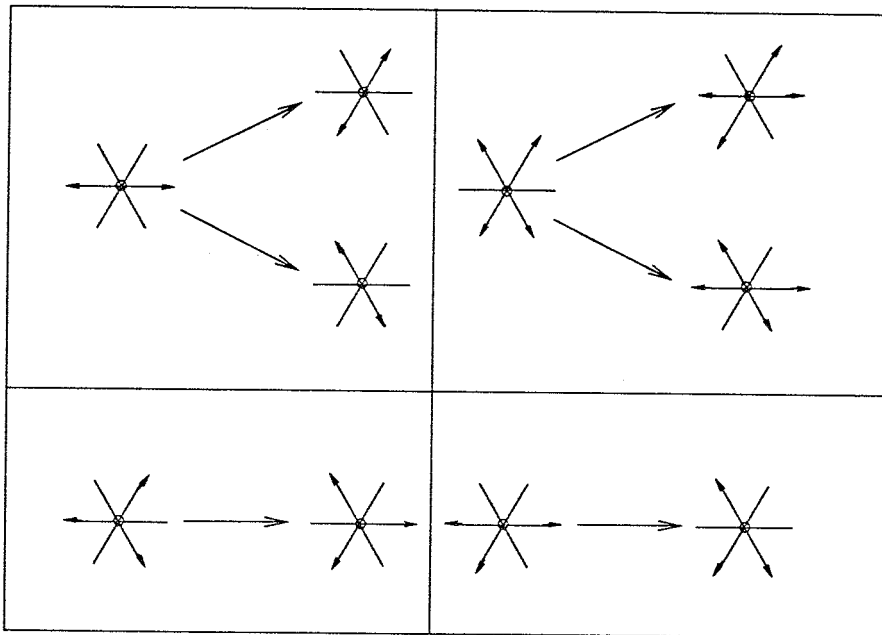
$$C_i = \left\{ \cos\left(\frac{(i-1)\pi}{3}\right), \sin\left(\frac{(i-1)\pi}{3}\right) \right\} \quad i = 1, \dots, 6 \quad (1.15a)$$

Des exemples des règles de collision sont brièvement résumés dans la Figure 1-2. L'ensemble des règles de collision est donné dans d'Humières et Lallemand (1987). Ce modèle présente toutes les propriétés nécessaires d'isotropie pour les tenseurs d'ordre 4 qui apparaissent dans les équations de Navier-Stokes; il a été illustré par ses fondateurs (d'Humières et al, 1985) par la simulation de l'allée de Von Karman derrière une plaque.





a.



b.

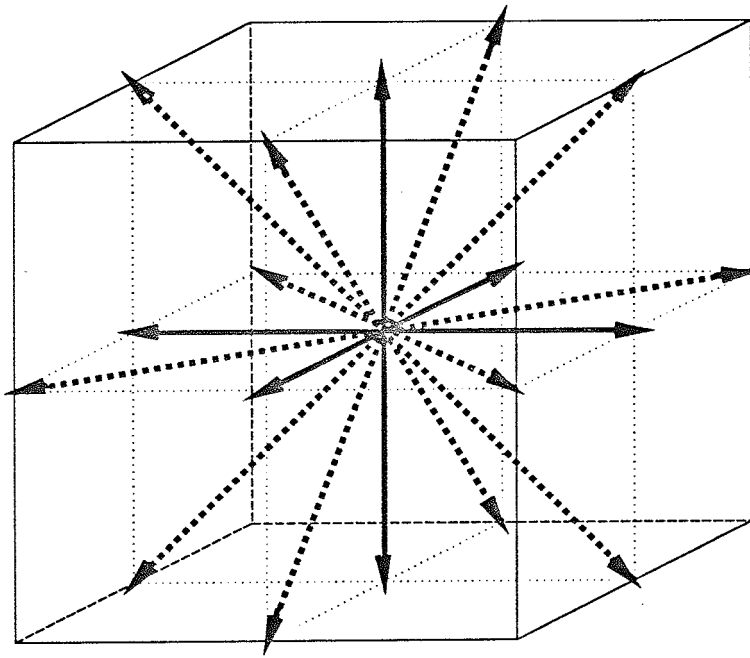
Figure 1-2: (a) Réseau triangulaire ( FHP ) avec  $y = \frac{\sqrt{3}}{2} m$ ,  $x = \frac{l}{2}$  (Cornubert et al, 1991)

(b) Règles de collision pour le modèle FHP sans particules immobiles.

La possibilité d'obtenir des équations hydrodynamiques convenables à la grande échelle dépend cruciallement de l'isotropie de ces tenseurs. A trois dimensions, on ne peut pas utiliser un modèle cubique à une vitesse du fait de ces problèmes et on doit employer un réseau à 4 dimensions, dit FCHC (Hyper Cubique à Face Centrée), adapté aux problèmes tridimensionnels par d'Humières et al (1986). Ce modèle est composé de 24 vitesses, toutes de même module  $\sqrt{2}$ , qui sont  $(\pm 1, \pm 1, 0, 0)$  et les 6 permutations possibles

$$C_i \in \left\{ \begin{array}{l} (\pm 1, \pm 1, 0, 0), (\pm 1, 0, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, 0, \pm 1) \\ (0, \pm 1, \pm 1, 0), (0, \pm 1, 0, \pm 1), (0, 0, \pm 1, \pm 1) \end{array} \right\}, \quad c = \sqrt{2} \quad (1.15b)$$

Ce modèle est illustré sur la Figure 1-3. Les solutions obtenues par le modèle FCHC s'appellent aussi "pseudo 4D", puisqu'il suffit d'imposer des conditions périodiques dans la quatrième dimension (il n'y a pas de force dans cette dimension) pour obtenir un écoulement tridimensionnel 3D qui satisfait les équations macroscopiques standard au moins pour les régimes incompressibles (à faible nombre de Mach).



**Figure 1-3:** Les 24 vitesses du modèle FCHC. En pointillé, les vitesses avec une quatrième composante nulle. En trait continu, les vitesses avec une quatrième composante non nulle; il y a effectivement deux vitesses en chaque point puisque cette dernière composante peut prendre deux valeurs  $\pm 1$ .

### 1.2.2. Microdynamique.

#### •Equations microdynamiques

On a vu (voir (1.4) et suivantes) que les collisions pouvaient comporter un élément aléatoire. Le champ booléen aléatoire  $\xi_{ss'}$  va tenir compte de ce fait. Ce champ ne dépend ni du noeud, ni du temps; il est tel que sa valeur moyenne soit égale à la probabilité de transition

$$\langle \xi_{ss'} \rangle = A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}' \quad (1.16)$$

Nous supposons également qu'il n'y a qu'un seul état  $\mathbf{s}'$  possible (qui peut varier selon le tirage)

$$\sum_{\mathbf{s}'} \xi_{ss'} = 1 \quad \forall \mathbf{s} \quad (1.17)$$

Soit donc l'état  $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$ . Le produit

$$\prod_j n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1 - s_j} \quad (1.18)$$

n'est non nul que si  $\mathbf{s}$  coïncide avec  $\mathbf{n}$ . Si on multiplie par  $\xi_{ss'}$ , le produit est différent de 0 pour  $\mathbf{s}'$ . Donc en tenant compte de la propagation (1.3b), on obtient

$$n_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} s_i' \xi_{ss'} \prod_j n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1 - s_j} \quad (1.19)$$

Comme nous avons l'identité évidente d'après les explications précédentes,

$$\sum_{\mathbf{s}} s_i \prod_j n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1 - s_j} = n_i \quad (1.20)$$

on en déduit puisque  $\xi_{ss'}$  n'est par définition égal à 1 que pour un seul élément  $\mathbf{s}'$

$$n_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = n_i(\mathbf{r}, t) + \Delta_i(\mathbf{n}), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.21a)$$

$$\Delta_i(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{s}, \mathbf{s}'} (s_i' - s_i) \xi_{ss'} \prod_j n_j^{s_j} (1 - n_j)^{1 - s_j} \quad (1.21b)$$

Ce sont les équations microdynamiques recherchées qui permettent de passer algébriquement du temps  $t$  au temps  $t + 1$ . Ainsi du fait qu'on a remplacé le champ continu par un champ Booléen discret, l'évolution est gouvernée non plus par des équations aux dérivées partielles mais par des équations logiques Booléennes.

Ces équations nous permettent d'exprimer aisément le fait que les règles de collision doivent respecter la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, c'est-à-dire

$$\sum_i n_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = \sum_i n_i(\mathbf{r}, t) \quad (1.22a)$$

$$\sum_i n_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1)\mathbf{C}_i = \sum_i n_i(\mathbf{r}, t)\mathbf{C}_i \quad (1.22b)$$

ou, par équivalence,

$$\sum_i \Delta_i(\mathbf{n}) = 0 \quad (1.23a)$$

$$\sum_i \Delta_i(\mathbf{n})\mathbf{C}_i = 0 \quad (1.23b)$$

### •Exemples

Seuls les exemples bidimensionnels admettent une expression suffisamment simple pour pouvoir être donnée.

Pour le modèle HPP du réseau carré nous avons (voir Figure 1-1)

$$\Delta_i(\mathbf{n}) = n_{i+1}n_{i+3}(1-n_i)(1-n_{i+2}) - n_in_{i+2}(1-n_{i+1})(1-n_{i+3}) \quad (1.24)$$

où les indices sont évalués modulo 4.

Pour le modèle FHP du réseau hexagonal lorsque la collision est triple, par exemple, nous avons (voir Figure 1-2b)

$$\Delta_i(\mathbf{n}) = n_{i+1}n_{i+3}n_{i-3}(1-n_i)(1-n_{i+2})(1-n_{i-2}) - n_in_{i+2}n_{i-2}(1-n_{i+1})(1-n_{i+3})(1-n_{i-3}) \quad (1.25)$$

où les indices sont évalués modulo 6.

Pour déduire l'ensemble des règles optimales pour le modèle FCHC, Hénon (1987a) impose des restrictions supplémentaires sur les collisions, parmi lesquelles les conditions les plus importantes sont:

- toute collision est une isométrie du groupe  $\mathcal{O}$ ;
- l'isométrie dépend seulement de la quantité de mouvement des particules dans l'état  $s$ .

Quand quelques isométries sont possibles, on fait un choix aléatoire; par exemple, on peut prendre celle qui minimise la viscosité.

Nous ne donnerons pas les règles de collision de cette classe de modèles, d'une part du fait de leur nombre (voir la réduction de table de collision par Somers et Rem, 1992), et d'autre part du fait qu'il existe une autre manière de procéder avec les modèles de Boltzmann qui sera présentée dans la Partie 1.3.

### 1.2.3. Etude de l'équilibre.

#### •Description statistique globale

Après avoir introduit les équations microdynamiques, on peut décrire l'ensemble des particules dans une démarche classique de mécanique statistique.

Définissons un espace des phases  $\Gamma$  comme l'ensemble de tous les cas possibles  $\mathbf{s}(\bullet) = \{s_i(\mathbf{r}), i = 1, \dots, b_m, \mathbf{r} \in \mathcal{L}\}$ . Considérons un ensemble d'états initiaux, chacun ayant une certaine probabilité  $P(\mathbf{s}(\bullet), 0) \geq 0$  qui satisfait la condition de normalisation

$$\sum_{\mathbf{s}(\bullet) \in \Gamma} P(\mathbf{s}(\bullet), 0) = 1 \quad (1.26)$$

Du fait des propriétés statistiques des variables booléennes  $\xi_{ss'}$ , le champ  $\mathbf{n}(\mathbf{r}, t)$  est un processus de Markov. L'équation de Liouville qui décrit l'évolution de la probabilité est une équation de Chapman-Kolmogorov

$$P(\zeta^{-1}\mathbf{s}'(\bullet), t+1) = \sum_{\mathbf{s}(\bullet) \in \Gamma} \prod_{\mathbf{r} \in \mathcal{L}} A[\mathbf{s}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{s}'(\mathbf{r})] P[\mathbf{s}(\bullet), t] \quad (1.27)$$

où  $\zeta$  est l'opérateur de propagation défini dans (1.3b). Cette probabilité nous permet de définir des quantités moyennes

$$\langle q[\mathbf{n}(\bullet), t] \rangle = \sum_{\mathbf{s}(\bullet) \in \Gamma} q[\mathbf{s}(\bullet)] P[\mathbf{s}(\bullet), t] \quad (1.28)$$

avec les exemples classiques

- population moyenne :  $N_i(\mathbf{r}, t) = \langle n_i(\mathbf{r}, t) \rangle$
- densité moyenne:  $\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i N_i(\mathbf{r}, t)$
- courant moyen (quantité de mouvement):  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \sum_i N_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i$
- vitesse moyenne:  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)}$

(1.29)

En moyennant les conditions de conservation locales (1.22), on obtient de façon évidente

$$\sum_i N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = \sum_i N_i(\mathbf{r}, t) \quad (1.30a)$$

$$\sum_i N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) \mathbf{C}_i = \sum_i N_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i \quad (1.30b)$$

•**Solution à l'équilibre de l'équation de Liouville**

Pour un réseau de taille finie, on s'attend à ce que la distribution de probabilité soit indépendante du noeud considéré; ceci se comprend bien par analogie avec la diffusion d'un soluté dans un volume fini où la probabilité finale est une constante. Donc

$$P[(s'(\bullet))] = \prod_{r \in \mathcal{Z}} p[s(\mathbf{r})] \quad (1.31)$$

De la même façon, on s'attend à ce que toutes les cellules d'un même noeud soient équivalentes et donc

$$p[s] = \prod_j N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} \quad (1.32)$$

Cette solution peut se vérifier par substitution dans l'équation (1.27) (voir les détails dans Frisch et al, 1987).

Enfin les  $N_i$ , appelées *populations moyennes*, sont donnés à l'équilibre par une distribution de Fermi-Dirac quand on suppose la condition de bilan semi-détaillé

$$N_i^{eq} = \frac{1}{1 + \exp(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{C}_i)} \quad (1.33)$$

où  $h$  et  $\mathbf{q}$  sont un scalaire et un vecteur arbitraires.

•**Perturbations de l'équilibre**

Supposons maintenant que le fluide s'écoule avec une vitesse  $\mathbf{u}$  qui est en module petite devant  $c$

$$u = |\mathbf{u}| \ll c \quad (1.34)$$

Posons

$$F(x) = \frac{1}{1 + e^x} \quad (1.35)$$

Alors dans le cas d'une vitesse  $\mathbf{u}$  non nulle, on peut penser que les coefficients  $h$  et  $\mathbf{q}$  de la distribution de Fermi-Dirac en dépendent

$$N_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = F[h(\rho, \mathbf{u}) + \mathbf{q}(\rho, \mathbf{u}) \cdot \mathbf{C}_i] \quad (1.36)$$

L'argument de  $F$  doit être inchangé dans la transformation ( $\mathbf{u} \rightarrow -\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{C}_i \rightarrow -\mathbf{C}_i$ ). Ceci entraîne

que  $h$  est une fonction paire de  $\mathbf{u}$  et  $\mathbf{q}$  une fonction impaire. Un développement limité de ces quantités s'écrit

$$h(\rho, \mathbf{u}) = h_0 + h_2 u^2 + O(u^4) \quad (1.37a)$$

$$\mathbf{q}(\rho, \mathbf{u}) = q_1 \mathbf{u} + O(u^3) \quad (1.37b)$$

Nous pouvons introduire ces développements dans l'équation de Fermi-Dirac, exprimée par un développement de Taylor en  $h_0$

$$N_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = F(h_0) + F'(h_0) (q_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + h_2 u^2) + 0.5 F''(h_0) (q_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i)^2 + O(u^3) \quad (1.38)$$

De plus, si la vitesse est nulle, toutes les directions sont équiprobables et donc par application directe de (1.28) - (1.29) on a

$$N_i^{eq, \mathbf{u}=0} = F(h_0) = \rho / b_m. \quad (1.39)$$

Ensuite les coefficients  $q_1$  et  $h_2$  peuvent être exprimés en fonction des grandeurs physiques. Pour ce faire, on substitue (1.38) dans les formules (1.29) pour  $\rho$  et  $\rho \mathbf{u}$ ; on utilise le fait que tous les moments d'ordre impair des  $\mathbf{C}_i$  sont nuls. On déduit alors avec l'aide de la relation (1.14) le résultat final

$$N_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \stackrel{def.}{=} N_i^0(\mathbf{r}, t) = d + \frac{\rho D}{c^2 b_m} \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + d \frac{D(D+2)}{2c^4} g(\rho) \mathbf{u} \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{u} + O(u^3), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.40)$$

où  $d$  désigne la densité par cellule

$$d = \frac{\rho}{b_m} \quad (1.41a)$$

$g(\rho)$  désigne le facteur galiléen

$$g(\rho) = \frac{D}{D+2} \frac{b_m - 2\rho}{b_m - \rho} \quad (1.41b)$$

$\mathbf{Q}_i$  est le tenseur invariant du second ordre

$$\mathbf{Q}_i = \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i - \frac{b_m c^2}{D} \mathbf{I} \quad (1.41c)$$

Notons que  $g(\rho)$  s'annule pour  $\rho = b_m/2$ , c'est-à-dire quand il y a autant de particules que de vides.

### 1.2.4. Les équations macrodynamiques.

#### •Généralités

Dans le paragraphe précédent, la vitesse  $\mathbf{u}$  était supposée petite de façon à se placer près de l'équilibre (voir (1.34)). Ici on suppose de plus que la maille élémentaire est petite devant le milieu entier et que  $\rho = O(1)$ . Comme la maille est censée être de taille 1, le milieu est au moins de taille  $\varepsilon^{-1}$

$$\varepsilon = \frac{1}{L} \ll 1. \quad (1.42)$$

On suit une méthode de Chapman-Enskog pour déduire l'hydrodynamique à partir des équations microdynamiques (1.30). Pour cela, on introduit les variables continues

$$\mathbf{r}_1 = \varepsilon \mathbf{r}, \quad t_1 = \varepsilon t, \quad t_2 = \varepsilon^2 t; \quad (1.43a)$$

les opérateurs de dérivation peuvent s'écrire

$$\nabla = \varepsilon \nabla^1, \quad \partial_t = \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2} \quad (1.43b)$$

où  $\nabla$  désigne  $\nabla_{\mathbf{r}}$ ,  $\nabla^1 \stackrel{def.}{=} \nabla_{\mathbf{r}_1}$ .

On peut développer les populations moyennes par rapport à cette variable  $\varepsilon$

$$N_i(\mathbf{r}, t) = N_i^0(\mathbf{r}, t) + \varepsilon N_i^{10}(\mathbf{r}, t) + O(\varepsilon^2), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.44)$$

où les perturbations sont telles qu'elles ne doivent pas contribuer aux valeurs de la densité et de la quantité de mouvement lorsque les équations microscopiques sans addition de force extérieure sont étudiées. Ce dernier cas est considéré dans le Chapitre 2 (voir équations (1.21) et (2.1)).

Pour déduire les équations de Navier-Stokes, il suffit de développer les populations au premier ordre en  $\varepsilon$  (voir (1.44)). On suppose que  $N_i^{10}$  n'influe pas sur la densité et la quantité de mouvement

$$\sum_i N_i^{10}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad \sum_i N_i^{10}(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i = 0 \quad (1.45a)$$

De manière générale et du fait des propriétés tensorielles, on peut écrire que

$$N_i^{10}(\mathbf{r}, t) = \sigma \mathbf{C}_i \cdot \nabla^1 \rho + (\psi \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i + \chi \mathbf{I}) : \nabla^1 (\rho \mathbf{u}), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.45b)$$

Donc en tenant compte de la nullité des moments impairs des  $\mathbf{C}_i$ , de (1.14) et de (1.45a) on obtient



$$\sigma = 0, \quad \psi \frac{b_m c^2}{D} + \chi b_m = 0 \quad (1.45c)$$

Il ne reste donc que la quantité  $\psi$  pour définir la relation constitutive (1.45b).

On développe les populations moyennes jusqu'au second ordre:

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \partial_t N_i + \mathbf{C}_i \cdot \nabla N_i + \frac{1}{2} \mathbf{C}_i \mathbf{C}_i : \nabla \nabla N_i + \mathbf{C}_i \cdot \nabla \partial_t (N_i) + \frac{1}{2} \partial_t \partial_t (N_i) \quad (1.46)$$

On peut ensuite injecter dans les développements (1.46) la solution en équilibre  $N_i^0$  sous la forme (1.40) et l'écart à l'équilibre au premier ordre  $N_i^{(1)}$  (1.45b)-(1.45c), exprimés dans les variables continues (1.43). On substitue ensuite les relations (1.46) dans les conditions de conservations locales (1.30). Ceci nous entraîne deux équations, l'une d'ordre 1 et l'autre d'ordre 2. Prenons l'exemple de la première équation (1.30a); on obtient alors aisément

$$\text{à l'ordre } \varepsilon: \quad \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.47a)$$

$$\text{à l'ordre } \varepsilon^2: \quad \partial_t^2 \rho = 0 \quad (1.47b)$$

En fait, on va revenir aux variables physiques et additionner ces deux équations, ce qui entraîne l'équation de continuité:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.48)$$

Le cas de la seconde application (1.30b) (c'est-à-dire de la quantité de mouvement) se traite de la même façon, on a besoin en plus de relations constitutives pour les  $N_i^{(1)}$ . Si on revient aux variables physiques, on obtient une équation de type Navier-Stokes

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot \mathbf{P} = 0 \quad (1.49)$$

où le tenseur du flux de quantité de mouvement  $\mathbf{P}$  s'exprime par

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}^{(0)} + \mathbf{P}^{(1)} \quad (1.50a)$$

avec les relations auxiliaires

$$P_{\alpha\beta} = \sum_i C_{i\alpha} C_{i\beta} N_i = P_{\alpha\beta}^{0+} + P_{\alpha\beta}^{1-}, \quad (1.50b)$$

$$P_{\alpha\beta}^{0+} = \frac{c^2}{D} \rho + \rho \frac{D(D+2)}{2c^4 b_m} g(\rho) T_{\alpha\beta\gamma\delta} u_\gamma u_\delta + O(\varepsilon u^3) \quad (1.51a)$$

$$P_{\alpha\beta}^{1-} = \left( \Psi + \frac{D}{2c^2 b_m} \right) T_{\alpha\beta\gamma\delta} \partial_\gamma (\rho u_\delta) + O(\varepsilon^2 u^2) \quad (1.51b)$$

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \sum_i C_{i\alpha} C_{i\beta} Q_{i\gamma\delta} \quad (1.52)$$

Si les tenseurs jusqu'à l'ordre 3 qui sont invariants dans le groupe  $\mathcal{C}$  sont isotropes, il n'en va pas de même pour les tenseurs  $T_{\alpha\beta\gamma\delta}$  d'ordre 4 qui ne sont pas obligatoirement isotropes. Par exemple, on peut montrer qu'à deux dimensions le modèle HPP n'est pas isotrope

$$P_{\alpha\alpha}^{0+} = \frac{c^2}{D} \rho + \rho \frac{D(D+2)}{2c^4 b_m} g(\rho) (u_\alpha^2 - u_\beta^2), \quad \alpha = 1, \beta = 2 \text{ ou } \alpha = 2, \beta = 1$$

$$P_{\alpha\beta}^{0+} = 0, \quad \alpha \neq \beta \quad (1.53)$$

On connaît la forme générale des tenseurs isotropes dans les espaces de dimension  $D$  (par exemple voir Wolfram, 1986)

$$T_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{b_m c^4}{D(D+2)} (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta}) \quad (1.54)$$

Pour les réseaux FHP et FCHC, les tenseurs d'ordre 4 sont de la forme (1.54). En injectant (1.54) dans (1.51), on obtient le tenseur du flux de la quantité de mouvement  $\mathbf{P}$  (1.50a) sous la forme

$$\mathbf{P}^{(0)} = C_s^2 \rho \left[ 1 - g(\rho) \frac{u^2}{c^2} \right] \mathbf{I} + \rho g(\rho) \mathbf{u} \mathbf{u} + O(\varepsilon u^4) \quad (1.55a)$$

$$\mathbf{P}^{(1)} = -\nu \left[ \nabla(\rho \mathbf{u}) + \nabla(\rho \mathbf{u})' - \frac{2}{D} \mathbf{I} \cdot \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] + O(\varepsilon^2 u^2) \quad (1.55b)$$

L'expression générale des constantes est

$$C_s^2 = \frac{c^2}{D} - \text{vitesse du son} \quad (1.56)$$

$$\nu = -\frac{c^4 b_m}{D(D+2)} \Psi(\rho) - \frac{c^2}{2(D+2)} - \text{viscosité cinématique de cisaillement.} \quad (1.57)$$

Il ne reste en principe à déterminer que la quantité inconnue  $\psi(\rho)$  qui est définie par la relation constitutive (1.45b). En conséquence, on va utiliser le terme "viscosité cinématique de cisaillement" ou bien "viscosité cinématique" quand on parle de viscosité (1.57) à la différence de la viscosité cinématique de compression  $\xi$  qui intervient dans l'équation de Navier-Stokes pour un fluide visqueux (par exemple, voir Landau et Lifshitz, 1963; Wolfram, 1986)

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \rho \nu \nabla \cdot \nabla \mathbf{u} + \left[ \zeta + \frac{\nu}{D} \right] \rho \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (1.58)$$

### • Les équations de Navier-Stokes

Ainsi l'équation macroscopique de quantité de mouvement (1.49) avec (1.55)-(1.57) est de la forme

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho g(\rho) \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot [\nu(\rho) \nabla (\rho \mathbf{u})] + \nabla \cdot \left[ \nu(\rho) \frac{D-2}{D} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) \right] + O(\varepsilon u^3) + O(\varepsilon^2 u^2) + \dots \quad (1.59a)$$

où

$$p(\rho, u^2) = C_s^2 \rho \left( 1 - g(\rho) \frac{u^2}{c^2} \right) \quad (1.59b)$$

Cette équation ressemble à l'équation habituelle de Navier-Stokes (1.58) en  $D$  dimensions. Notons que la viscosité  $\xi$  est nulle dans (1.59a) ce qui n'est pas le cas si on rajoute des particules immobiles.

Donnons quelques commentaires généraux sur les équations (1.59). Lorsque la vitesse est petite, la pression devient proportionnelle à la densité de la même façon que pour un gaz parfait isotherme

$$p = C_s^2 \rho \quad (1.60)$$

Nous nous restreindrons ici au cas du régime hydrodynamique avec des petits nombres de Mach. Ce régime est caractérisé par le fait que les variations de densité ne sont prises en compte que dans le terme de pression. Ainsi (1.59) implique

$$\rho_0 \partial_t \mathbf{u} + \rho_0 g(\rho_0) \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p(\rho, u^2) + \rho_0 \nu(\rho_0) \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1.61)$$

Donc cette équation du fait de la présence du facteur  $g(\rho_0)$  dans le terme inertiel n'est pas invariante dans un changement de repère inertiel caractérisé par la transformation

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{V}t, t' = t \quad (1.62a)$$

On peut cependant faire un changement de variables qui permet d'obtenir les équations de Navier-Stokes non compressibles quand  $g(\rho_0)$  est constant (voir les détails dans Wolfram, 1986; Frisch et al, 1987):

$$t \rightarrow t / g(\rho_0), v \rightarrow g(\rho_0)v \quad (1.62b)$$

Par conséquent, le nombre de Reynolds macroscopique s'exprime sous la forme:

$$Re = \bar{L}\bar{u} \frac{g(\rho_0)}{v(\rho_0)} \quad (1.62c)$$

La transformation (1.62b) limite le domaine d'applicabilité des gaz sur réseau au régime non compressible:  $\rho = \rho_0$ . En outre, cette procédure devient impossible à utiliser lorsque des densités différentes doivent être imposées dans les modèles à plusieurs phases. Cependant cette difficulté pourra être tournée par l'introduction de particules au repos (immobiles). Les principaux modèles avec des particules immobiles sont brièvement décrits dans l'Appendice 1.A. Un modèle avec un nombre arbitraire de particules immobiles de même masse que les particules mobiles est discuté dans le Chapitre 2. De plus, la pression (1.59b) dépend de manière non physique de la vitesse  $u^2$ . On verra plus tard que ce problème pourra être résolu dans les Modèles de Boltzmann quand l'hypothèse de bilan semi-détaillé est omise.

Pour le modèle FCHC, on peut montrer que les 3 premières composantes de vitesse vérifient une équation du type de Navier-Stokes (avec les défauts indiqués au-dessus) et que donc des conditions périodiques dans la quatrième dimension  $x_4$  peuvent être imposées. Ceci est équivalent à dire qu'en réalité on peut utiliser un réseau à deux vitesses:

$$|\mathbf{C}_i| = \sqrt{2} \quad \text{si} \quad C_{i4} = 0 \quad \text{ou} \quad |\mathbf{C}_i| = 1 \quad \text{si} \quad C_{i4} = \pm 1 \quad (1.63)$$

Par conséquent, on n'a que 18 vitesses à suivre numériquement (voir Figure 1-3), c'est-à-dire 12 vitesses à quatrième composante nulle, et  $6 = 12/2$  vitesses à quatrième composante non nulle.

### 1.2.5. Approximation de Boltzmann sur réseau.

*"Suppose that at a certain instant the velocity of every molecule in a mass of gas in a uniform state under no forces is reversed; the value of  $\mathcal{H}$  will be unaltered by this process. The molecules will now retrace their previous paths. Since, in general,  $\partial\mathcal{H}/\partial t < 0$  before the change, one infers that  $\partial\mathcal{H}/\partial t > 0$  after the change, which contradicts the H-theorem. Thus a paradox arises."*

S.Chapman et T.G. Cowling

L'approximation de Boltzmann consiste à supposer que les particules entrant en collision ne sont pas corrélées; cette hypothèse est appelée hypothèse de Boltzmann ou hypothèse de chaos moléculaire. Ainsi on peut donner les équations microdynamiques (1.21) sous la forme

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \Delta_i^B(\mathbf{n}), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.64a)$$

$$\Delta_i^B(\mathbf{n}) = \sum_{s,s'} (s'_i - s_i) \xi_{ss'} \prod_j N_j^{s_j} (1 - N_j)^{1-s_j} \quad (1.64b)$$

La solution par l'équation de Boltzmann est en principe limitée aux faibles densités; notons que la forme des équations macroscopiques déduites du modèle de gaz sur réseau à une vitesse est obtenue indépendamment de cette hypothèse qui intervient seulement dans le calcul des coefficients de transport (voir, par exemple, le calcul de la viscosité cinématique dans la section suivante). En outre, la conséquence la plus importante de l'hypothèse de Boltzmann est l'existence du Théorème H due à Hénon (voir Frisch et al, 1987):

Théorème H global

$$\text{Soit } \mathcal{H}(t) = \sum_{\mathbf{r} \in \mathcal{L}} \sum_{i=1}^{b_m} [N_i(\mathbf{r}, t) \ln N_i(\mathbf{r}, t) + (1 - N_i(\mathbf{r}, t)) \ln(1 - N_i(\mathbf{r}, t))] \quad (1.65)$$

*La fonction  $\mathcal{H}$  est non croissante lorsque le gaz sur réseau évolue.*

Une preuve de ce théorème exploite la condition de bilan semi-détaillé. On peut comparer le Théorème H sous la forme (1.65) pour un gaz sur réseau avec le Théorème H classique dans la théorie cinétique des gaz (voir Cercignani, 1969; Chapman et Cowling, 1960).

Soit une fonction  $f$  qui satisfait l'équation de Boltzmann. Soit  $\mathcal{H} = \iint f \log f d\zeta dr$ , où  $\zeta$  est la vitesse des particules.

$$\text{Théorème H (classique): } \frac{d\mathcal{H}}{dt} \leq 0.$$

Cela suggère d'interpréter  $\mathcal{H}$  comme l'information sur la dynamique microscopique de système. En effet, l'entropie  $\eta$  du gaz contient une partie de l'information macroscopique. Il n'est pas très surprenant donc que

$$\eta = -k\mathcal{H}$$

Cette relation a été découverte par Boltzmann en 1872. En effet, l'entropie, définie pour un état uniforme et stable, se généralise de cette manière aux états non uniformes ou instables.

Le Théorème H est très important parce qu'il montre que l'équation de Boltzmann entraîne une irréversibilité: la valeur de  $\mathcal{H}$  diminue toujours (stabilité interne); donc l'équation de Boltzmann décrit l'évolution du système vers un état avec une valeur minimale de  $\mathcal{H}$ , c'est-à-dire vers équilibre  $N_i^{eq}$  (voir (1.40))

$$\forall i \quad N_i^{eq}(\mathbf{r}, t) = N_i^0(\mathbf{r}, t) = \text{const} \quad (1.66)$$

Cela signifie que la solution à l'équilibre annule l'opérateur de collision dans l'équation de Boltzmann (1.64b)

$$\Delta_i^B(N^0) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, b_m \quad (1.67)$$

Si on applique à l'opérateur  $\Delta_i^B$ (1.64b) un développement de Taylor autour de l'équilibre  $\mathbf{N}^{0,u=0}$  avec une vitesse égale à zéro (voir (1.39)), on obtient

$$\left\{ \Delta_i^B(\mathbf{N}^{0,u=0}) = 0 \right\} \Rightarrow \left\{ \Delta_i^B = \sum_j A_{ij}(N_j - N_j^{0,u=0}) + \dots \right\}. \quad (1.68a)$$

L'opérateur de collision linéarisé  $A_{ij}$  est défini d'après le développement de Taylor:

$$A_{ij} = \left[ \frac{\partial \Delta_i^B}{\partial N_j} \right]_{\mathbf{N}^{0,u=0}} \quad (1.68b)$$

Si les termes d'ordre  $O(u^2)$  dans la solution en équilibre sont négligés et si on suppose que la matrice de collision conserve la quantité de mouvement (voir (1.69c)), on peut remplacer  $\mathbf{N}^{0,u=0}$  sur  $\mathbf{N}^0$  dans l'expression (1.68a); on obtient alors l'équation de Boltzmann (1.64) sous la forme linéarisée:

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_j, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=1}^{b_m} A_{ij}(N_j - N_j^0). \quad (1.69a)$$

En général, les conditions de conservation de la masse et de l'impulsion sont imposées sur la matrice  $\mathbf{A}$  de la manière suivante:

$$\sum_{j=1}^{b_m} A_{ij} = 0 \quad (1.69b)$$

$$\sum_{j=1}^{b_m} A_{ij} C_{j\alpha} = 0 \quad \forall \alpha = 1, \dots, D \quad (1.69c)$$

En particulier, on impose ces conditions dans les modèles standard LBE (*Lattice Boltzmann Equation*) mais pas dans leurs extensions comme les modèles PCLBE (*Pressure Corrected Lattice Boltzmann Equation*).

### 1.2.6. Calcul de la viscosité.

Nous avons vu qu'un coefficient  $\psi(\mathbf{r})$  s'était introduit dans l'expression (1.57) de la viscosité en conséquence de la relation constitutive pour  $N_i^{l0}$  (voir (1.45)). Le calcul de la viscosité par les méthodes de la théorie fluctuation-dissipation peut se faire de deux façons. La première dite "noisy hydrodynamique" conduit à la formule pour la viscosité en termes de fonctions de corrélations temporelles microscopiques à l'équilibre. Cette solution est donnée par Frisch et al (1987) avec l'hypothèse que les fluctuations sont stationnaires à l'équilibre. La deuxième approche due à Rivet (1987a) part de la perturbation de l'équation de Liouville autour de l'équilibre; la viscosité s'exprime ensuite à l'aide de corrélations spatio-temporelles du champ Booléen à l'équilibre par les formules de Green - Kubo. Cela permet des évaluations numériques de la viscosité par les méthodes de Monte-Carlo.

Cependant, l'évaluation des coefficients de transport par l'approximation de Boltzmann est la méthode qui est la plus simple en apparence. Il existe dans la littérature une dérivation explicite de la viscosité due à Hénon (1987b). Cette formule est basée sur l'approximation de Boltzmann où l'opérateur de collision est écrit sous la forme:

$$A_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_{s,s'} (s_i - s_i')(s_j - s_j') A(\mathbf{s} \rightarrow \mathbf{s}') d^{p-1} (1-d)^{b_m - p - 1}, \quad p = \sum_i s_i \quad (1.70)$$

Nous allons rapidement déterminer ce coefficient  $\psi(\mathbf{r})$  à partir de l'équation de Boltzmann linéarisée (1.69). On développe les équations (1.69) avec l'expression (1.44) pour  $N_i$ ;  $N_i^0$  est donnée par la solution à l'équilibre (1.40). Si on se sert également des équations macrodynamiques d'ordre  $\varepsilon$  pour exprimer les dérivées temporelles en fonction des dérivées spatiales, on obtient

$$\frac{D}{b_m c^2} \mathbf{Q}_i : \nabla^1(\rho \mathbf{u}) = \sum_j A_{ij} N_j^{l0} \quad (1.71)$$

Donc en injectant l'expression (1.45) de  $N_i^{l0}$  dans (1.71), on a

$$\left[ \frac{D}{b_m c^2} \mathbf{Q}_i - \psi \sum_j A_{ij} \mathbf{Q}_j \right] : \nabla^1(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1.72)$$

Cette identité doit être vraie pour tout  $\nabla^1(\rho \mathbf{u})$ . Donc

$$\psi = \frac{D}{b_m c^2} \frac{\sum_i \mathbf{Q}_i : \mathbf{Q}_i}{\sum_{j,i} A_{ij} \mathbf{Q}_j : \mathbf{Q}_i} \quad (1.73)$$

On injecte ensuite cette valeur dans (1.57) pour exprimer la viscosité cinématique  $\nu$ .

La comparaison de l'approximation de Boltzmann (1.73) avec les résultats selon les formules Green-Kubo et les expériences numériques, basées sur la relaxation d'un cisaillement périodique et d'une onde sonore, est donnée dans Rivet (1987a et b). Ces résultats peuvent également servir à mieux cerner le statut de l'approximation de Boltzmann.

### 1.3. Les modèles de Boltzmann.

#### 1.3.1. Comparaison de la méthode de Boltzmann avec LG.

Les modèles de Boltzmann ont été introduits par McNamara et Zanetti (1988), Higuera et Jimenez (1989) et d'autres comme une alternative aux gaz sur réseau. L'idée consiste à partir directement des équations microdynamiques moyennées (1.64), où interviennent les populations moyennes  $N_i$  de particules. Puisqu'on ne considère plus les particules elles-mêmes, il n'est plus nécessaire de préciser les règles de collisions elles-mêmes, mais dans l'approximation de Boltzmann, la matrice de collision  $\mathbf{A}$  qui intervient dans l'équation (1.69a).

Remarquons que le stockage correspondant à la matrice  $\mathbf{A}$  est très réduit par comparaison avec la matrice de collision, mais que le stockage des variables réelles  $N_i$  est beaucoup plus important que celui des variables booléennes  $n_i$ . Par conséquent, les temps de calculs selon l'équation de Boltzmann s'avèrent supérieurs à ceux effectués selon les gaz sur réseau bien qu'on n'ait pas besoin dans le cas de Boltzmann d'effectuer des moyennes sur les champs.

Néanmoins, les modèles de Boltzmann évitent le bruit intrinsèque et améliorent considérablement la précision des résultats. Notons que la modélisation de certains phénomènes physiques a besoin de bruit pour initialiser le processus (voir Appert, 1993).

Un des avantages importants des modèles de Boltzmann est la facilité de la définition des coefficients de transport en fonction des valeurs propres de la matrice de collision. Ces coefficients peuvent donc être évalués analytiquement tandis que les formules correspondantes aux relations de fluctuations-dissipation nécessitent les efforts numériques supplémentaires. De la même façon, les prédictions théoriques dans les développements d'ordre supérieur  $O(\varepsilon^k)$ ,  $k > 0$ , des populations moyennes  $N_i$  (voir (1.44)) sont beaucoup plus aisément maîtrisées car on



peut injecter la forme constitutive pour les termes  $N_i^k$  dans la partie droite de l'équation de Boltzmann (1.69a) et, en utilisant les relations concernant les formes d'ordres inférieurs dans la partie gauche, on peut déduire tous les coefficients entrant dans le développement  $N_i^k$ . Cela sera illustré par le calcul de la viscosité de cisaillement dans cette Section et par le développement des populations à l'ordre  $O(\varepsilon^2)$  dans le Chapitre suivant.

En outre, il est important de noter que l'extension des modèles de Boltzmann (modèles PCLBE) due à H.Chen et al (1992) permet d'éviter complètement tous les défauts qui apparaissent dans les équations macrodynamiques déduites du gaz sur réseau. Ces modèles se fondent sur le fait que dans les simulations numériques par l'équation de Boltzmann, on peut oublier la nature de chaque population moyenne  $N_i$  qui est la probabilité de trouver une particule de vitesse  $C_i$  en un site  $i$ . Cela signifie qu'on peut permettre aux populations moyennes d'être supérieures à un. Par conséquent, les termes d'ordre  $O(u^2)$  dans la solution en équilibre peuvent être assortis de manière à conduire automatiquement à un facteur galiléen  $g(\rho)$  égal à 1 et à la formule "physique" pour la pression. On suppose néanmoins que les populations restent non négatives et suivent à l'équilibre la distribution de Maxwell.

### 1.3.2. La méthode LBE.

#### •La matrice de collision

Les modèles LBE partent des équations microdynamiques (1.69a). La matrice  $A$  va être déterminée à partir de considérations générales de conservation (1.69b)-(1.69c) et d'entropie. Nous donnerons dans ce paragraphe un exposé assez complet de cette méthode mais relatif au modèle FCHC à 4 dimensions. On peut également consulter Higuera et al (1989) qui ont développé ce modèle de Boltzmann en réseau FHP avec particules au repos et en réseau FCHC sans particules au repos.

Le champ de vitesse du modèle FCHC est donné par les 24 possibilités (1.15b) indiquées sur la Figure 1-3. Par des considérations d'isotropie de l'espace, il est évident que les coefficients  $a_{ij}$  de la matrice ne dépendent que de l'angle entre les deux vecteurs  $C_i$  et  $C_j$ . Il est aisé de montrer que les divers vecteurs ont entre eux 5 angles possibles. Ainsi la grande matrice  $A$  est formée des cinq coefficients inconnus

$$a_0, a_{60}, a_{90}, a_{120}, a_{180} \quad (1.74)$$

En ordonnant de manière arbitraire les vecteurs vitesses, on peut calculer l'angle entre deux vecteurs quelconques et déterminer le coefficient correspondant. La matrice est bien évidemment symétrique puisque l'angle entre deux vecteurs ne dépend pas de l'ordre entre ces deux vecteurs. De plus, aucun vecteur vitesse ne joue de rôle particulier et l'ensemble est

invariant dans toute transformation faisant passer d'un vecteur à l'autre. Des compléments sur ces transformations et le groupe correspondant peuvent se trouver dans Wolfram (1986) et dans Davis (1979).

Les coefficients de  $\mathbf{A}$  doivent être tels que les conservations de la masse et de la quantité de mouvement soient vérifiées (voir (1.69)). La première de ces conditions est scalaire, mais la seconde est vectorielle. Elles correspondent à  $D + 1$  conditions. Cela signifie aussi que la matrice  $\mathbf{A}$  a  $D + 1$  valeurs propres nulles. Ces deux conditions entraînent que

$$\begin{aligned} a_0 + 8a_{60} + 6a_{90} + 8a_{120} + a_{180} &= 0 \\ a_0 + 4a_{60} - 4a_{120} - a_{180} &= 0 \end{aligned} \quad (1.75)$$

Les valeurs propres non nulles de la matrice  $\mathbf{A}$  sont données par

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{3}{2}(a_0 + 6a_{90} + a_{180}), & \text{multiplicité } 2 \\ \lambda_2 &= \frac{3}{2}(a_0 - a_{180}), & \text{multiplicité } 8 \\ \lambda_\psi &= a_0 - 2a_{90} + a_{180}, & \text{multiplicité } 9 \end{aligned} \quad (1.76)$$

Les vecteurs propres associés à la valeur propre  $\lambda_\psi$  sont des tenseurs invariants du second ordre  $Q_{i\alpha\beta}$  (voir (1.41c)). Donc la valeur propre  $\lambda_\psi$  est particulièrement importante puisqu'elle intervient dans le calcul de la viscosité (voir (1.73)). Ainsi, d'après la relation (1.73) ou directement selon (1.72)

$$\psi = \frac{D}{b_m c^2} \frac{1}{\lambda_\psi} \quad (1.77)$$

et donc (voir (1.57))

$$\mathbf{v} = -\frac{c^2}{D+2} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\lambda_\psi} \right) \quad (1.78)$$

Cette formule est également vraie pour le réseau FHP ( $D = 2$ ,  $c^2 = 1$ ). De la même façon, il est important de noter que les vecteurs propres sont indépendants des coefficients de la matrice  $\mathbf{A}$ . Toutes ces quantités sont rassemblées dans le Chapitre 2 où des particules immobiles sont ajoutées dans le modèle.

En considérant l'entropie associée à ce modèle, on peut montrer (voir Higuera et Jimenez, 1989) que les valeurs propres de  $\mathbf{A}$  doivent vérifier la condition suivante pour assurer la stabilité linéaire localement

$$-2 < \lambda \leq 0 \quad (1.79)$$

On a maintenant une certaine liberté de choix pour déterminer les coefficients de la matrice  $A$ . Une première manière qui est naturelle consiste à les déduire des règles de collision du modèle FCHC. C'est la méthode utilisée par exemple par Higuera et Jimenez (1989) qui partent de l'ensemble optimal des règles du modèle FCHC. Mais on peut procéder de manière très différente, par exemple, se donner trois valeurs propres arbitraires comprises entre - 2 et 0, sans aucune référence aux règles de collision. C'est ce que font Higuera et al (1989) qui choisissent  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  égales à - 1. Quant à la troisième valeur  $\lambda_\psi$ , on la choisit d'après la condition (1.78) pour obtenir la viscosité cinématique désirée.

### •Exemples numériques

Un moyen simple dû à Succi et al (1989) pour ajouter une force de volume extérieure est précisé dans le Chapitre 2; le problème des conditions aux limites est abordé dans la Section 1.3.4. et ensuite dans les Chapitres 2 et 3. Mentionnons néanmoins quelques publications en concentrant notre attention sur les calculs à 3 dimensions qui utilisent le réseau FCHC.

L'écoulement derrière un cylindre est obtenu par Higuera et Succi (1989) par la méthode LBE. L'opérateur de collision suit des règles optimales pour le modèle hexagonal avec particules immobiles (FHP-III). Leurs simulations numériques confirment que les résultats obtenus par LBE ne présentent pas les fluctuations typiques des méthodes de gaz sur réseau. Higuera et al (1989) ont effectué des calculs à deux dimensions dans un canal avec des obstacles disposés périodiquement. Le réseau FCHC a été exploité avec deux opérateurs de collision: un opérateur défini soit d'après les règles de collisions optimales soit avec la matrice de collision (1.74)-(1.76). En accord avec la théorie, des nombres de Reynolds plus élevés sont atteints dans le deuxième cas quand la viscosité peut être ajustée à volonté proche de zéro même si l'ensemble des règles de collision correspondant à la matrice obtenue n'existe pas.

Succi et al (1989) ont appliqué le modèle en 3 dimensions. Ils l'ont d'abord testé dans le cas d'un tube de section carré et ont obtenu un bon accord avec la solution classique. Ils ont ensuite vérifié la loi de Darcy pour un milieu poreux tridimensionnel. D'autres calculs ont été également effectués en milieu poreux par Cancelliere et al (1990) avec des modèles de sphères pénétrables.

Enfin, citons l'étude de Succi et al (1991) qui montrent que LBE reproduit correctement les propriétés statistiques de turbulence développée en deux dimensions. En outre, l'efficacité numérique de LBE est trouvée supérieure à celle de la méthode spectrale.

### 1.3.3. Modèles LBE avec correction de pression.

#### • Modèles PCLBE en 2D et en 4D

Dans les modèles de Boltzmann on a une certaine liberté dans le choix de la solution d'équilibre lorsqu'on néglige la condition de bilan semi-détaillé. Dans ce cas, les solutions d'équilibre ne sont pas limitées par la distribution de Fermi-Dirac; elles sont donc de la forme générale (voir (1.38) pour comparaison):

$$N_i^0(\mathbf{r}, t) = d + d_1 \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + d_2 (\mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i)^2 + d_3 u^2 + O(u^3) \quad (1.80a)$$

où  $d, d_1 - d_3$  sont des constantes à déterminer.

Si le modèle contient une population immobile de vitesse nulle dans chaque noeud (par analogie avec les particules au repos dans l'Appendice 1.A), leur solution d'équilibre est donnée par

$$N_0^0(\mathbf{r}, t) = d^0 + d_3^0 u^2 + O(u^4) \quad (1.80b)$$

où les constantes  $d^0$  et  $d_3^0$  doivent être déterminées. Pour ce faire, on part des conditions

$$\sum_{j=0}^{b_m} N_j^0 = \sum_{j=0}^{b_m} N_j \stackrel{def.}{=} \rho \quad (1.81a)$$

$$\sum_{j=1}^{b_m} N_j^0 \mathbf{C}_j = \sum_{j=1}^{b_m} N_j \mathbf{C}_j \stackrel{def.}{=} \rho \mathbf{u} \quad (1.81b)$$

Le calcul des coefficients est détaillé dans Grunau (1993). On vérifie tout d'abord la condition de conservation de la masse (1.81a) de façon que

$$db_m + d^0 = \rho \quad (1.82a)$$

$$d_2 \frac{c^2}{D} b_m + d_3 b_m + d_3^0 = 0 \quad (1.82b)$$

De plus la condition (1.81b) implique comme d'habitude (voir (1.44), (1.A.3a) dans l'Appendice 1.A)

$$d_1 = \frac{D}{b_m c^2} \rho \quad (1.82c)$$

Ensuite, selon la procédure de Chapman-Enskog avec les tenseurs invariants d'ordre 4 (1.54), on obtient pour les modèles FHP et FCHC le tenseur de flux de quantité de mouvement sous la forme (voir (1.55a), (1.A.3))

$$\mathbf{P}^{(0)} = (\alpha_1 \rho + \alpha_2 \frac{u^2}{c^2}) \mathbf{I} + \alpha_3 \mathbf{u} \mathbf{u} + O(\epsilon u^3) \quad (1.83a)$$

avec

$$\alpha_1 = C_s^2(d, d^0) = \frac{c^2}{D(1+f)}, \quad f = \frac{d^0}{db_m}; \quad \alpha_2 = d_2 \frac{c^6 b_m}{D(D+2)} + d_3 \frac{c^4 b}{D}; \quad \alpha_3 = d_2 \frac{2c^4 b_m}{D(D+2)} \quad (1.83b)$$

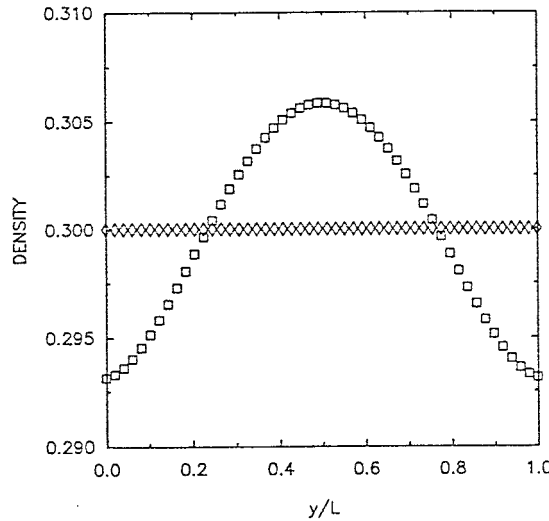
On détermine donc le coefficient  $d_2$  d'après la condition d'invariance galiléenne et ensuite le coefficient  $d_3$  pour ajuster la pression sous la forme (1.60)

$$\alpha_3 = \rho, \quad (1.84a)$$

$$\alpha_2 = 0 \quad (1.84b)$$

Ainsi les modèles PCLBE permettent éviter deux défauts importants des gaz sur réseau: l'absence d'invariance galiléenne et une dépendance non physique de la pression  $p(u^2)$ .

Les solutions à l'équilibre pour les modèles PCLBE sont données aussi par H.Chen et al (1992); ces solutions sont vérifiées numériquement. Même l'écoulement simple d'un canal périodique unidimensionnel montre la différence entre LBE et PCLBE. Dans ce cas, la densité doit être constante. Cela est exact selon les résultats par PCLBE (voir Figure 1-4), mais pas par LBE, car la pression, déduite de ces modèles, dépend de  $u^2$  (voir (1.59)). Par conséquent, la densité est élevée au milieu du canal, où la vitesse est plus grande, pour avoir une pression constante au travers du canal.



**Figure 1-4:** Comparaison entre la densité par le modèle LBE ("carrés") et par le modèle PCLBE ("diamants") dans le canal unidimensionnel périodique (H.Chen et al, 1992). La force extérieure est égale à  $10^{-4}$  (unités de réseau).

Notons qu'il reste encore la liberté du choix des densités  $d$  et  $d^0$  qui sont reliées par la relation (1.82a). Par conséquent, le rapport  $d^0/d$  n'est pas obligatoirement égal à un nombre entier comme dans LBE avec particules immobiles (voir Chapitre 2) où la population  $N_0$  est traitée comme la somme des populations moyennes égales de  $L$  particules immobiles:

$$d^k = d, \quad d^0 = d^k L, \quad k = 1, \dots, L, \quad L \in \mathbb{N},$$

Ces modèles sont précisés dans le Chapitre 2; ils sont aussi décrits dans Gunstensen et Rothman (1989), Gunstensen (1992), Appert (1993). Ainsi en principe, dans les modèles de Boltzmann on n'a plus besoin de cette restriction (voir aussi les constantes  $d^k$  dans (1.A.2) de l'Appendice 1.A).

La simplification suivante, introduite par H.Chen et al (1992), Qian et al (1992) consiste à imposer une matrice de collision diagonale:

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{\tau} \mathbf{I}, \quad (1.85a)$$

l'opérateur de collisions  $\Delta_i^B$  est donc de la forme

$$\Delta_i^B = -\frac{1}{\tau} \mathbf{I} [N_i(\mathbf{r}, t) - N_i^0(\mathbf{r}, t)] \quad (1.85b)$$

où  $\tau$  est une constante appelée *paramètre de relaxation*. Les conditions (1.23) de conservation sont alors satisfaites grâce au choix de la solution à l'équilibre (voir (1.81)) bien que les conditions supplémentaires de conservation (1.69b)-(1.69c) imposées sur la matrice  $\mathbf{A}$  soient violées. Par analogie avec la formule (1.78), la viscosité cinématique dans ces modèles est donnée par la relation

$$\nu = \frac{c^2(2\tau - 1)}{2(D+2)}, \quad (1.86a)$$

(voir (1.78) pour une comparaison), c'est-à-dire avec

$$\lambda_\psi = -\frac{1}{\tau}. \quad (1.86b)$$

L'existence du Théorème H pour les gaz sur réseau signifie que quelle que soit la distribution initiale, le système de particules converge vers l'équilibre (distribution de Fermi-Dirac) qui correspond au maximum d'entropie. Cependant, il n'y a pas de Théorème H pour les modèles PCLBE dans lesquels la distribution à l'équilibre est choisie de manière à conduire au mieux aux équations macrodynamiques. Par conséquent, ces modèles peuvent avoir des instabilités numériques pour certaines valeurs du paramètre  $\tau$ ; on voit ainsi que la viscosité (1.86a) devient négative quand  $\tau < \frac{1}{2}$ . En pratique, LBE diverge quand les populations passent par des valeurs négatives durant le processus itératif; cela arrive si la vitesse devient trop grande. Ce problème est traité par Grunau (1993). Avec l'aide de l'analyse de Fourier, il montre que les modèles PCLBE doivent être stables pour  $\tau > \frac{1}{2}$ . Cependant, cette analyse de stabilité

linéaire néglige les termes d'ordre  $O(u^2)$  dans la solution d'équilibre; donc on peut s'attendre à des instabilités numériques même dans cet intervalle. L'analyse plus profonde qui été développée par Sterling et Chen (1993), est discutée brièvement dans Grunau (1993). Ils incluent les fluctuations spatiales des populations autour de l'équilibre. Ils montrent qu'en réalité les modèles avec  $\tau > \frac{1}{2}$  sont stables seulement jusqu'à une certaine valeur critique de vitesse moyenne  $\bar{u}^c(\tau)$  qui dépend également des autres paramètres du modèle. Pour les valeurs  $\tau$  supérieures à une certaine limite, la vitesse  $\bar{u}^c$  devient constante.

### •Modèles PCLBE en 3D

Nous avons déjà utilisé dans la section précédente et dans l'Appendice 1.A le modèle à deux vitesses: vitesse non nulle des populations mobiles et vitesse nulle des populations immobiles. Néanmoins, il existe un réseau cubique en 3D dit *cubique à corps centré* à deux vitesses qui a assez de symétries pour en déduire des équations macroscopiques invariantes. Il comprend des vitesses de deux types:

$$\begin{aligned} \text{classe I: } \mathbf{C}_i &\in \{\text{circ}(\pm 1, 0, 0)\}, c_i = |\mathbf{C}_i| = 1 \\ \text{classe II: } \mathbf{C}_i &\in \{(\pm 1, \pm 1, \pm 1)\}, c_{II} = |\mathbf{C}_i| = \sqrt{3} \end{aligned} \quad (1.87)$$

Alors, seulement 14 populations mobiles sont présentes dans chaque noeud du réseau (d'où une économie en mémoire et en temps de calcul). La procédure pour déduire les équations macrodynamiques est la même que précédemment. On part de l'ensemble des solutions en équilibre de la forme générale (voir (1.80a)):

$$N_i^{0(c)}(\mathbf{r}, t) = d^{(c)} + d_1^{(c)} \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + d_2^{(c)} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i)^2 + d_3^{(c)} u^2 + O(u^3) \quad (1.88a)$$

où  $^{(c)}$  désigne le numéro de classe des vitesses (voir (1.87)); le numéro 0 est réservé aux populations immobiles (voir (1.80b)). On détermine ensuite les coefficients de manière à ajuster la forme correcte de pression et mettre le facteur galiléen à 1. Les coefficients qui ne sont pas fixés par ces conditions, peuvent être choisis à volonté; par exemple, Grunau (1993) a imposé

$$d^{(0)} = d^{(I)} = 8d^{(II)}; \quad d_k^{(I)} = 8d_k^{(II)}, k = 1, 2, 3 \quad (1.88b)$$

Par conséquent, on obtient l'équation de quantité de mouvement de Navier-Stokes sous une forme correcte au moins dans le régime incompressible avec (voir les formules (1.83a) avec (1.83b) et (1.86) pour comparaison avec FHP ou FCHC)

$$C_s^2 = \frac{3}{8}, \quad \nu = \frac{(2\tau - 1)}{6} \quad (1.88c)$$

Notons que le problème du choix de la solution à l'équilibre de façon à satisfaire au mieux l'hydrodynamique réelle a été abordé par Koelman (1991) qui a déterminé les solutions pour les réseaux 2D rectangulaires à 8 vitesses non nulles et par Qian et al (1992) qui donne la liste des résultats pour les réseaux cubiques de une à quatre dimensions. Une population immobile est aussi incluse dans ces modèles. Les deux partent des solutions à l'équilibre sous la forme

$$N_i^{0(c)}(\mathbf{r}, t) = w_i^{(c)} \rho \left\{ 1 + \frac{1}{C_s^2} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i) + \frac{1}{2C_s^4} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i)^2 - \frac{1}{2C_s^2} \mathbf{u}^2 \right\} + O(u^3) \quad , \quad (1.89a)$$

où tous les  $w_i^{(c)}$  pour les vitesses  $i$  d'une classe sont égales

$$w_i^{(c)} = w^{(c)} \quad \text{si} \quad i \in \text{classe } (c) \quad (1.89b)$$

Les coefficients  $w_i^{(c)} \rho$  présentent en effet les solutions à l'équilibre avec une vitesse égale à zéro; Koelman (1991) définit ces coefficients de manière à ce que les moments d'ordres 1, 2 et 4 de la distribution  $w_i^{(c)} \rho_0$  soient égaux à ceux de la distribution des vitesses de Maxwell dans l'état d'équilibre thermique

$$f(\xi) = \rho_0 \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{D/2} \exp \left[ -\frac{m\xi^2}{2kT} \right], \quad C_s^2 = \frac{kT}{m}.$$

Qian et al (1992) déterminent  $w_i^{(c)}$  d'après les conditions d'invariance des tenseurs d'ordre 4, déduites de la solution à l'équilibre, et d'invariance galiléenne. Ils obtiennent une vitesse du son constante pour tous les réseaux cubiques

$$C_s^2 = \frac{1}{3} \quad (1.89c)$$

La viscosité cinématique est définie de la même façon (1.88c).

Notons que pour le réseau cubique à 14 vitesses mobiles (1.87), la solution de Qian donne

$$w^{(0)} = 2w^{(l)} = 16w^{(ll)}; \quad (1.89d)$$

elle diffère donc de la solution (1.88a) avec (1.88b), choisie par Grunau (1993). Cela explique la différence dans les constantes (1.88c) et (1.89c) obtenues.

Pour le réseau FCHC, les solutions (1.80)-(1.84) dans le paragraphe précédant coïncident avec celle de Qian et al (1992) si on impose dans les expressions à l'équilibre (1.80)

$$d^0 = \frac{1}{3} \rho; \quad d = \frac{1}{36} \rho \quad (1.89e)$$

S.Chen et al (1992) confirment numériquement les résultats analytiques pour la viscosité en mesurant la décroissance de l'énergie dans l'écoulement de Beltrami avec conditions périodiques



$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \nu \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}).$$

La plus petite viscosité réalisée est de l'ordre  $10^{-3}$  avec un nombre de Reynolds  $Re \approx 10^{+3}$ . Par comparaison des quelques écoulements classiques tridimensionnels obtenus avec la méthode spectrale et avec PCLBE, on conclue donc que les modèles PCLBE pourraient présenter une autre approche possible pour les simulations de turbulence isotrope.

#### 1.3.4. Conditions aux limites.

La première investigation du problème aux limites pour l'équation de Boltzmann a été donnée dans une addition à l'article de Maxwell (1879). Ce travail n'a pas perdu de son actualité; on peut trouver une analyse détaillée du point de vue moderne dans Cercignani (1969).

Maxwell a considéré le problème des conditions aux limites en fonction de la distribution déterminée par l'équation de Boltzmann. Pour le premier modèle, il a proposé que la surface solide est absolument élastique. Dans ce cas, les molécules se réfléchissent sur le solide comme sur la surface unie d'un miroir; par conséquent, le gaz ne peut pas agir sur la surface avec une force ayant une direction différente de la normale. Nous allons dire dans ce cas que la réflexion est spéculaire (voir Figure 1-5). Ensuite, il a introduit des modèles plus compliqués dans lesquels le gaz peut induire des forces tangentielles. Il conclut l'article par la remarque selon laquelle il vaut mieux considérer une surface comme quelque chose d'intermédiaire entre une surface réfléchissante comme un miroir et une surface absorbante. Il a donc introduit un paramètre phénoménologique  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ), dit coefficient d'accommodation, qui n'est pas lié directement à la structure de la surface. Si  $\alpha = 0$  (réflexion spéculaire), le flux réfléchi ne "sent" pas la surface; quand  $\alpha = 1$  (réflexion par diffusion), le flux réfléchi perd l'information du flux incident arrivé (sauf pour le nombre des particules qui est conservé).

Le problème de la validité du Théorème H est abordé par Cercignani (1969) pour l'équation classique de Boltzmann avec réflexions standards à la paroi ( $\alpha = 0$  et  $\alpha = 1$ ); il montre qu'elle est satisfaite dans ces deux cas.

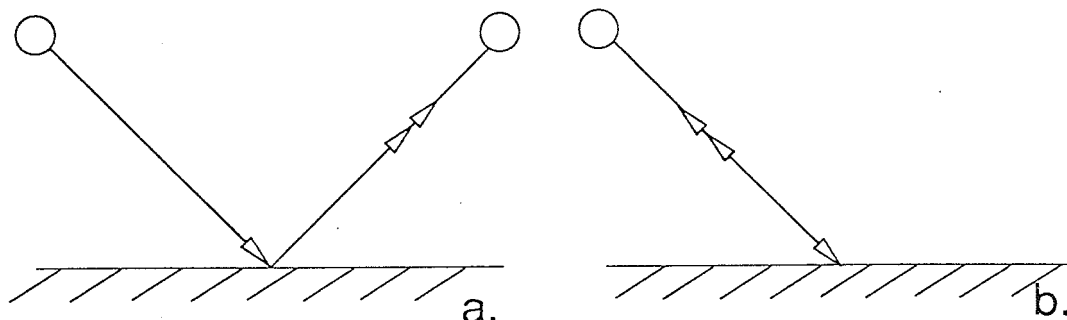


Figure 1-5: (a) réflexion spéculaire; (b) réflexion en arrière.

En effet pour les conditions aux limites dans les modèles de gaz sur réseau et dans les modèles de Boltzmann, on se trouve dans la même situation. Lavallée et al (1989, 1991) discutent le problème du choix des réflexions dans ces modèles. Ils indiquent quelques raisons pour lesquelles la réflexion en arrière des populations, dite rebond, doit être remplacée par un mélange de réflexions en arrière et de réflexions spéculaires (voir Figure 1-5). La première raison est que selon l'expérience de Knudsen (1939), les molécules arrivées sur une surface sous un angle fixé, rebondissent de façon équiprobable dans toutes les directions. Les auteurs concluent alors que pour un gaz sur réseau, cela équivaut à un mélange de réflexions en arrière et de réflexions spéculaires avec des proportions égales. La deuxième raison est que l'hypothèse de chaos moléculaire n'est plus valable si l'interaction avec la surface est purement déterministe parce que dans ce cas les particules sont corrélées avant collision. Néanmoins, l'hypothèse de Boltzmann est vraie dans le sens statistique pour une combinaison avec des proportions égales de réflexions en arrière et de réflexions spéculaires.

La première contribution théorique à l'étude des conditions aux limites imposées par le modèle FHP est due à Cornubert et al (1991). Ils montrent qu'un mélange de probabilité  $p$  et  $(1 - p)$  pour les rebonds et les réflexions spéculaires est isotropique, c'est-à-dire qu'il ne modifie pas l'équilibre local en volume. Ainsi on voit bien l'analogie entre le paramètre phénoménologique  $\alpha$  et la probabilité  $p$ . Ensuite ils analysent avec l'aide d'un développement des populations moyennes au *premier ordre* le problème de la localisation réelle de la paroi solide lorsqu'un mélange des réflexions est imposé dans les derniers noeuds du réseau FHP.

Deux orientations de la frontière imaginaire par rapport aux axes du réseau sont considérées. Dans le cas dit *parallèle*, un plan solide est parallèle à l'axe  $x$ ; par conséquent, les conditions aux limites pour les populations  $N(y)$  dans le cas de l'écoulement stable sont (voir Figure 1-2a)

$$\begin{aligned} N_1(0) &= pN_4\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + (1-p)N_5\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \\ N_2(0) &= pN_5\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) + (1-p)N_4\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.90)$$

Les résultats suivants sont obtenus. La quantité de mouvement  $\rho \mathbf{u}$  s'annule à une distance  $\Delta_y$  des noeuds  $y = 0$ ; on obtient pour la vitesse normale

$$\Delta_y = 0 \quad (1.91a)$$

et

$$\rho u_y \equiv 0 \quad \text{si} \quad y \leq 0. \quad (1.91b)$$

La condition d'adhérence pour la vitesse tangentielle est satisfaite à la distance

$$\Delta_y = \sqrt{3} \left[ \frac{1}{4} + 2v \left( \frac{1-p}{p} \right) \right]. \quad (1.91c)$$

Ainsi le rebond ( $p = 1$ ) correspond à la localisation d'un plan imaginaire au milieu des derniers noeuds à l'intérieur du gaz et les premiers noeuds à l'extérieur du volume.

Pour l'orientation *perpendiculaire* de la frontière, les conditions aux limites pour les populations  $N(x)$  sont (voir Figure 1-2a)

$$\begin{aligned} N_0(0) &= N_3(-1), \quad N_0\left(\frac{1}{2}\right) = N_3\left(-\frac{1}{2}\right), \\ N_1(0) &= pN_4\left(-\frac{1}{2}\right) + (1-p)N_2\left(-\frac{1}{2}\right), \\ N_5(0) &= pN_2\left(-\frac{1}{2}\right) + (1-p)N_4\left(-\frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (1.92)$$

Les résultats alors sont essentiellement les mêmes que dans le cas précédant. Soit  $\Delta_x$  la distance entre les noeuds  $x = 0$  (Fig.1-2a) et les points où la vitesse s'annule. On obtient alors

$$\Delta_x = 0 \quad \text{pour } \rho u_x, \quad (1.93a)$$

$$\Delta_x = \left[ \frac{1}{4} + 2v \left( \frac{1-p}{p} \right) \right] \text{ pour } \rho u_y; \quad (1.93b)$$

ainsi, la vitesse parallèle à paroi solide imaginaire s'annule aussi au milieu des derniers noeuds intérieurs  $x = 0$  et les premiers noeuds extérieurs  $x = -0.5$ ; la différence entre  $\Delta_y$  (1.91c) et  $\Delta_x$  (1.93b) est due à la structure du réseau FHP.

Selon ces résultats, dans pratiquement toutes les simulations avec LG ou LBE, la localisation de la frontière solide au milieu des noeuds a été supposée. En réalité, les termes du second ordre peuvent influencer de façon très importante la position réelle de la frontière, comme on le verra dans le Chapitre 2 de cette thèse. Des résultats récents pour le problème aux limites dus à Ziegler (1993) et Skordos (1993) sont discutés dans les Chapitres 2 et 3, respectivement. Dans ce dernier chapitre, des algorithmes différents des réflexions classiques sont introduits pour contrôler l'erreur de position des frontières mobiles ou immobiles. Dans ce cas, près des frontières nous avons recours à la méthode des différences finies pour exprimer les dérivées qui viennent dans le développement des populations moyennes. Ainsi le problème de l'influence des conditions aux limites imposées sur la stabilité du modèle devient particulièrement important. Ceci fera donc l'objet de recherches ultérieures.

## 1.4. Modèles multiphasiques.

*"Three types of problems arise in the numerical treatment of free boundaries:*

*(1) their discrete representation,*

*(2) their evolution in time, and*

*(3) the manner in which boundary*

*conditions are imposed on them."*

C.W.Hirt et B.D.Nichols.

### 1.4.1. Extensions des modèles de gaz sur réseau pour des écoulements à plusieurs phases.

#### •Les premiers modèles

Une difficulté essentielle dans les simulations à plusieurs phases est la présence de frontières libres sur lesquelles les paramètres physiques peuvent être discontinus. Le problème peut, en principe, être attaqué naïvement par une discrétisation directe des équations macroscopiques; cela constitue une approche *explicite*. Cependant, pour décrire précisément les instabilités caractéristiques des zones interfaciales, le nombre de points de discrétisation augmente tellement que les méthodes explicites deviennent inefficaces. Ainsi ce problème a exigé l'apparition de techniques nouvelles qualitativement différentes.

Une génération nouvelle de modèles commence depuis le développement par Hirt et Nichols au début des années 80 d'une méthode VOF (*Volume of Fluid*) dans laquelle l'interface est traitée implicitement (consulter la littérature sur VOF dans Hirt et Nichols, 1981); la position de l'interface est approchée par des morceaux linéaires en fonction du degré d'occupation du volume cellulaire par chaque phase; les conditions interfaciales sont ensuite imposées à l'interface ainsi construite. La description des interfaces par cette méthode est couplée aux algorithmes classiques pour le calcul des champs macrodynamiques dans chaque phase; VOF diffère de ses prédécesseurs par l'introduction d'une fonction de Heavyside  $F$  qui décrit l'occupation de chaque cellule; les dérivées de cette fonction déterminent la localisation de l'interface où on impose des conditions interfaciales diverses. La méthode est aisée à paralléliser et il y a relativement peu de difficultés pour passer de 2D à 3D.

Les méthodes multiphasiques qui proviennent des modèles de gaz sur réseau appartiennent à la même génération de méthodes *implicites* qui ne discrétisent pas explicitement l'interface. Contrairement aux méthodes VOF, les conditions interfaciales macroscopiques ne figurent pas dans les modèles; néanmoins les interactions entre les particules microscopiques sont choisies de manière à avoir le comportement des interfaces réelles au niveau macroscopique. Les modèles à plusieurs phases gardent donc les avantages et la simplicité des codes numériques caractéristiques des modèles à simple phase et de plus,

des systèmes (mélanges, émulsions, fluides non miscibles, ..) et des phénomènes physiques très variés (nucléation, évaporation, réactions chimiques, instabilités, ... ) peuvent être simulés, au moins qualitativement, uniquement par modification des règles de collisions. Ainsi, le développement de ces méthodes numériques est particulièrement attrayant pour la résolution des problèmes multiphasiques.

En effet dès que les modèles de gaz sur réseau ont été développés par Frisch et al (1986), les premières tentatives d'étendre ces modèles aux simulations à deux phases apparaissent. Un des premiers modèles est celui de Burges et Zaleski (1987). Ils introduisent des populations booléennes de deux types pour décrire deux phases (chaude et froide, par exemple); une phase diffère de l'autre à l'étape de collision grâce aux forces de gravité incorporées dans le modèle classique par une modification des règles de collision. Dans l'approximation de Boltzmann, les équations de Navier-Stokes et de diffusion sont déduites du modèle; l'estimation pour le coefficient de diffusion, faite avec l'aide de l'expansion de Chapman-Enskog, est vérifiée par les simulations numériques; des instabilités de type Rayleigh-Bénard (1901) (voir aussi Edwards et al, 1991) ont été observées; cela confirme que le régime de convection peut être réalisé avec l'aide des automates cellulaires.

Clavin et al (1988) ont considérablement développé les possibilités des modèles de gaz sur réseau par introduction de réactions entre les espèces. D'abord ils étendent la table des collisions pour le réseau FHP afin d'inclure  $3^7$  états possibles parmi les  $2^{14}$  existants quand un bit supplémentaire est ajouté pour décrire la couleur de chaque particule. Les collisions sont alors modifiées de façon à conserver la masse de chaque phase (couleur) dans un noeud ainsi que la quantité de mouvement totale; ils confirment que les instabilités de Kelvin-Helmholtz, typiques d'une couche turbulente mixte, sont obtenues par le modèle quand les nombres de Reynolds sont assez élevés. Ils décrivent aussi comment des réactions chimiques et des phénomènes de nucléation peuvent être modélisés par les modèles cellulaires. Pour cela, ils permettent aux particules de changer leur couleur selon les règles microscopiques introduites de manière à réunir ensemble des particules de la même couleur. Ainsi ces "réactions" entre particules représentent un des modèles qui modélisent la séparation des fluides au niveau macroscopique.

Nous allons maintenant présenter le modèle appelé ILG (*Immiscible Lattice Gaz*) qui exploite l'idée selon laquelle la décomposition des phases peut être assurée par séparation des particules au niveau microscopique. Il existe déjà beaucoup d'extensions et d'applications de ILG parmi lesquelles le modèle ILB (*Immiscible Lattice Boltzmann*). Les extensions de l'équation de Boltzmann à plusieurs phases sont décrites dans la Section suivante; dans la dernière section de ce chapitre nous rassemblons les modèles *liquide-gaz* qui sont développés pour les deux approches, celle de gaz sur réseau et celle de Boltzmann. Nous donnons en

détail les modèles ILG et ILB, ceux dernier est particulièrement bien adapté à l'étude des conditions interfaciales effectuée dans ce travail.

### •Modèle ILG

La tension de surface a été introduite dans les modèles de gaz sur réseau par Rothman et Keller (1988). Le modèle ILG assure la décomposition spinodale; il consiste en l'introduction de deux champs "vectoriels" booléens  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{b}$  pour décrire des particules de deux espèces (ou de couleurs rouge et bleue) qui évoluent sur un réseau FHP 2D. Donc, chaque noeud du réseau est caractérisé par l'état  $\mathbf{s}$

$$\mathbf{s} = \{r_i = (0,1), b_i = (0,1), i = 1, \dots, b_m\} \quad (1.94a)$$

Le principe d'exclusion est respecté car on a

$$r_i + b_i < 2, \quad \forall i = 1, \dots, b_m \quad (1.94b)$$

Pour inclure des interactions entre les particules, on calcule dans chaque noeud un gradient de couleur  $\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)$ , qui est censé être perpendiculaire à l'interface, et un flux de couleur  $\mathbf{q}(r_i, b_i)$

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{b_m} \mathbf{C}_i [\rho_R(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t) - \rho_B(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t)] \quad (1.95a)$$

$$\mathbf{q}(r_i, b_i) = \sum_{i=1}^{b_m} (r_i - b_i) \mathbf{C}_i \quad (1.95b)$$

où  $\rho_R$  et  $\rho_B$  sont les masses rouge et bleue définies à chaque noeud du réseau

$$\rho_R = \sum_{i=1}^{b_m} r_i, \quad \rho_B = \sum_{i=1}^{b_m} b_i \quad (1.95c)$$

On construit ensuite des opérateurs de collision  $\Delta_i^r$  et  $\Delta_i^b$

$$\Delta_i^r: r_i \rightarrow r_i', \quad \Delta_i^b: b_i \rightarrow b_i' \quad (1.95d)$$

Ils conservent la masse de chaque phase et la quantité de mouvement totale de manière à maximiser la fonction

$$\mathbf{q}(r_i', b_i') \cdot \mathbf{f} \quad (1.95e)$$

en chaque noeud du réseau; les particules  $r_i'$  et  $b_i'$  se déplacent ensuite dans les noeuds voisins selon l'équation de l'évolution (1.21a) des gaz sur réseau. Naturellement, lorsqu'ils sont définis

de cette façon, les opérateurs de collision tendent à envoyer les particules vers les noeuds occupés par les particules de la même couleur; donc ils créent un flux anti-diffusion, qui permet au modèle d'avoir une tension de surface.

Faisons encore quelques remarques sur cet algorithme. Une différence principale avec le modèle LG en simple phase est que les collisions ne sont plus locales car le gradient de couleur  $\mathbf{f}$  dépend de la distribution des phases dans les noeuds voisins; ceci est un défaut de l'algorithme du point de vue des calculs parallèles. Néanmoins, puisque seulement l'orientation de  $\mathbf{f}$  (et non son module) est importante pour définir le résultat de collision (voir (1.95e)), on peut discrétiser l'ensemble de toutes les orientations possibles entre  $0^\circ$  et  $2\pi$  pour stocker les résultats des collisions avant les itérations.

Le comportement de ce modèle a été beaucoup étudié numériquement et théoriquement. Les premières expériences numériques de Rothman et Keller (1988) ont montré que cet algorithme modélise la séparation des fluides d'un mélange; cependant il été observé que la décomposition est seulement obtenue pour des densités cellulaires qui sont supérieures à une certaine valeur  $d_c$  ( $d_c \approx 0.2$  pour une concentration de chaque phase  $\theta = 0.5$ ). Plusieurs essais ont été faits pour confirmer ce point théoriquement. D'abord, le coefficient de diffusion  $D$  en fonction de la concentration  $\theta$  et de la densité  $d$  a été estimé par Rothman et Zaleski (1989) avec l'aide de l'approximation de Boltzmann et selon la procédure de Chapman-Enskog; ensuite, la ligne  $d_c(\theta)$ , où le coefficient de diffusion  $D$  s'annule, est déduite analytiquement. La ligne  $d_c(\theta)$  est proche de la ligne de décomposition spinodale  $d_c^{\text{exp.}}(\theta)$  de ILG définie à partir des expériences numériques de la façon suivante:

$$\begin{aligned} &\text{pour } d > d_c^{\text{exp.}}(\theta) \text{ les phases se séparent} \\ &\text{pour } d < d_c^{\text{exp.}}(\theta) \text{ les mélanges sont stables.} \end{aligned}$$

En outre quand les densités sont très petites et que donc l'approximation de Boltzmann est valide, l'estimation théorique est en bon accord avec les résultats de calcul direct de  $D$  selon la loi de Fick:

$$\mathbf{J} = -D \nabla \theta \quad (1.96)$$

Récemment, une confirmation supplémentaire des valeurs  $d_c^{\text{exp.}}(\theta)$  a été obtenue par l'estimation de la tension de surface du modèle ILG par Adler et al (1994). Ils partent de la définition mécanique de la tension de surface  $\sigma$ , appelée aussi *coefficient de tension superficielle*

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} (p_n - p_t) dz \quad (1.97)$$

où  $z$  est une direction perpendiculaire à l'interface;  $p_n$  et  $p_t$  sont les composantes normales et tangentielles du tenseur des pressions  $\mathbf{P}$  qui est anisotrope près de l'interface

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} p_i \\ p_i \\ p_n \end{pmatrix} \quad (1.98)$$

En théorie,  $\sigma$  défini d'après la relation (1.97) est le même que celui qui intervient dans la loi de Laplace pour une goutte de rayon  $R$ :

$$\Delta p = p_{in} - p_{out} = \frac{n\sigma}{R}, \quad n = \begin{cases} 1, & 2D \\ 2, & 3D \end{cases} \quad (1.99)$$

où  $p_{in}, p_{out}$  sont les pressions à l'intérieur et à l'extérieur d'une goutte (pour des explications supplémentaires sur la définition mécanique, on peut consulter Rowlinson et Widom, 1982); une discussion approfondie à propos du calcul de  $\sigma$  d'après la définition (1.97) se trouve dans le Chapitre 4). Notons seulement pour la clarté des exemples numériques cités dans cette section, que lorsque l'interface plane stable est obtenue par un modèle quelconque, on peut mesurer  $\sigma$  directement selon la définition (1.97) en exprimant la pression en termes des solutions pour les populations moyennes; une mesure de ce type est généralement appelée *test mécanique* dans la suite. Par analogie, lorsqu'une bulle immobile de rayon  $R$  se trouve au sein d'un autre fluide, les pressions intérieure et extérieure sont calculées par l'équation d'état du modèle selon la densité obtenue; on dit alors que le *test de la bulle* est effectué pour la tension de surface  $\sigma$ .

La tension de surface  $\sigma(d)$  estimée par Adler et al (1994) avec l'aide de l'approximation de Boltzmann pour les opérateurs de collision (1.95d)-(1.95c) s'annule quand  $d < d_c \approx 0.2$  et quand  $d \rightarrow 1$ , c'est-à-dire pour les densités très petites et très grandes, qui ne permettent pas d'anisotropies dans la pression. Ainsi les résultats numériques de la décomposition spinodale confirment le calcul de la tension superficielle; cependant la fonction prédite pour  $\sigma(d)$  est vérifiée seulement qualitativement par les mesures dans les tests mécaniques avec des interfaces inclinées ou dans les tests de bulle. Une certaine divergence observée entre les valeurs numériques et les prédictions théoriques est attribuée à l'influence de l'approximation de Boltzmann, puisqu'en effet l'interface dans ces modèles est créée par des corrélations entre particules.

Pour conclure la description du modèle ILG, qui se trouve parmi les modèles multiphasiques principaux, notons que Adler et al (1994) montrent d'après des calculs numériques que les fluctuations au niveau de l'interface dans ILG se comportent de manière classique; pour une épaisseur de l'interface  $h(x)$ , l'amplitude des fluctuations  $|A_q|^2$  décroît comme l'inverse du carré du vecteur d'onde en accord avec la théorie classique pour l'interface en équilibre

$$h(x) = \sum_q A_q e^{-iqx}, \quad |A_q|^2 \propto \frac{1}{q^2}. \quad (1.100)$$



• *Extensions et applications du modèle ILG*

Rothman (1990) a décrit des expériences numériques de drainage et d'imbibition. En cas de drainage, le milieu poreux est mouillé par le fluide sortant (Fig.1-6a); en imbibition, au contraire, le fluide entrant mouille le milieu poreux (Fig.1-6b). On voit bien que le procédé dans le deuxième cas est beaucoup moins dramatique que dans le cas du drainage quand le front est très irrégulier. Des équations phénoménologiques ont été testées pour deux fluides non miscibles dans un milieu poreux 2D

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_R(\theta) &= \frac{k_{RR}(\theta)k}{\mu_R} \mathbf{X}_R + \frac{k_{RB}(\theta)k}{\mu_R} \mathbf{X}_B \\ \mathbf{J}_B(\theta) &= \frac{k_{BR}(\theta)k}{\mu_B} \mathbf{X}_R + \frac{k_{BB}(\theta)k}{\mu_B} \mathbf{X}_B, \quad \mathbf{X}_\alpha = -\nabla p_\alpha + \rho_\alpha \mathbf{F}_\alpha, \quad \alpha = \{R, B\} \end{aligned} \quad (1.101)$$

où  $\mathbf{F}$  est la force de volume extérieure. Ces équations postulent une modification de la loi de Darcy pour inclure l'influence d'un fluide sur le mouvement du second. Une dépendance linéaire (1.101) a été observée seulement quand la capillarité est négligeable, c'est-à-dire pour un assez grand niveau de la force extérieure  $\mathbf{F}$ . Les courbes observées pour les coefficients  $k_{ij}$ , appelés aussi *perméabilités relatives*, sont en accord qualitatif avec les expériences physiques de Kalaydjan (1990); la violation de la symétrie de la matrice  $\mathbf{k}$  qui a été observée pour certaines concentrations  $\theta$  est attribuée à la stationnarité insuffisante des solutions obtenues.

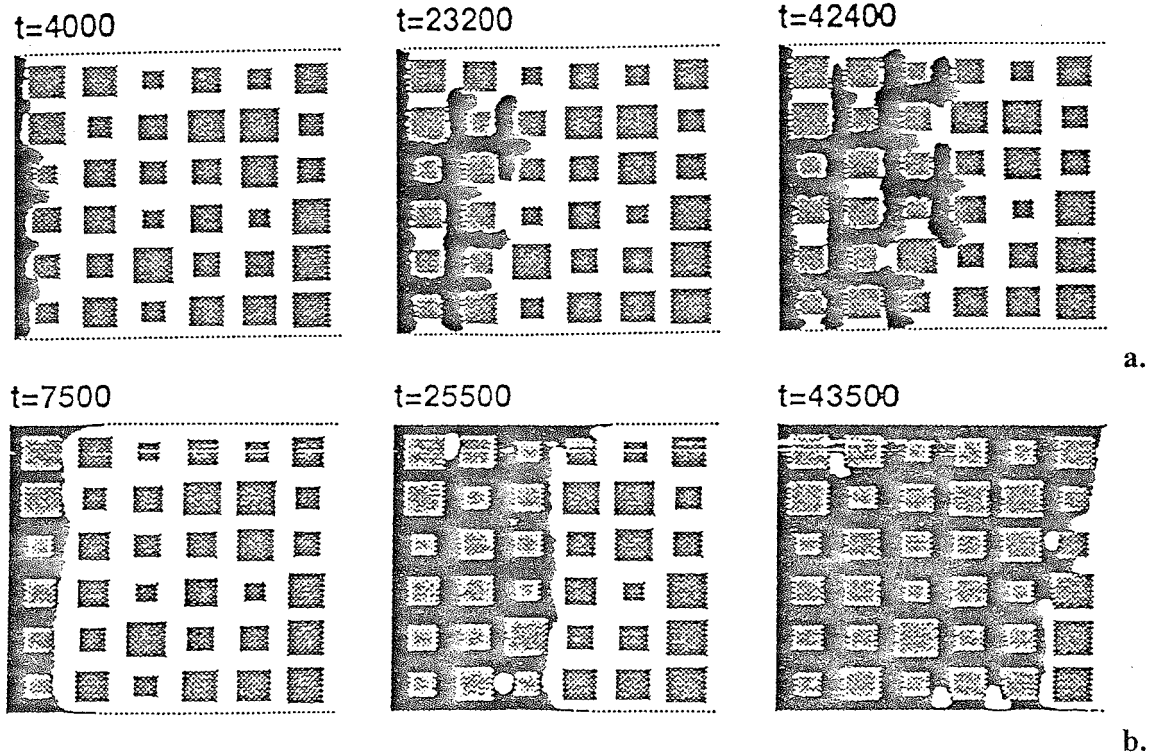


Figure 1-6: Simulations en milieu poreux 2D (Rothman, 1990). Nombre capillaire  $Ca \approx 10^{-2}$ ; le temps est donné en nombre d'itérations; le solide est grisé. (a) drainage: le fluide mouillant (blanc) sort; (b) imbibition: le fluide mouillant (noir) entre.

Des résultats 2D hétérogènes, quand la mouillabilité du solide a une certaine distribution, sont discutés dans Santos (1991).

Le Modèle ILG peut être modifié de nombreuses façons; citons quelques exemples. Un modèle très proche mais qui utilise seulement l'information locale est introduit par Rem et Somers (1988); par conséquent leur algorithme est mieux adapté aux calculs parallèles que la version de ILG décrite ci-dessus. Ceci est atteint grâce à un coloriage des trous ( $n_i = 0$ ); donc on a seulement une espèce de particules dont la présence ou l'absence dans la cellule  $i$  est déterminée par la variable booléenne  $n_i$ ,  $i = 1, \dots, b_m$ , comme dans le LG classique à simple phase; cependant, un bit supplémentaire  $n_i^{col}$  décrit la couleur d'une particule ou bien d'un trou

$$n_i^{col} = (0,1), i = 1, \dots, b_m \quad (1.102a)$$

Les particules sont donc décrites de la façon suivante

$$s_i = (n_i, n_i^{col}) = \begin{cases} (1,1) & \text{pour les particules d'une espèce} \\ (1,0) & \text{pour les particules de l'autre espèce} \end{cases} \quad \begin{matrix} (1.102b) \\ (1.102c) \end{matrix}$$

Les trous s'écrivent par analogie. La collision conserve la masse de chaque couleur dans le noeud et la quantité de mouvement totale. Pour séparer les fluides avant propagation, les règles de collision sont choisies de manière à envoyer les particules (1.102c) dans la direction du flux local

$$\mathbf{f}^{loc} = \sum_{i=1}^{b_m} n_i^{col} \mathbf{C}_i . \quad (1.102d)$$

Par conséquent, les particules (1.102b) seront envoyées dans la direction opposée. La couleur des trous est redéfinie après collision de façon à établir le flux local  $\mathbf{f}^{loc}$  le plus proche possible de celui avant collision (1.102d). Grunay (1993) donne certaines modifications de ce modèle. La tension de surface a été déduite analytiquement de la loi de Laplace par Somers et Rem (1991); cela sera discuté dans le Chapitre 4.

Des fluides miscibles avec diffusion contrôlée sont obtenus par Holme et Rothman (1991) quand ils ont divisé le pas de collision de ILG en deux étapes: d'abord on sélectionne une configuration arbitraire dans chaque noeud du réseau en respectant les lois de conservation; ensuite on effectue une collision identique à celle de ILG. Les calculs numériques confirment que la tension de surface disparaît dans ce modèle; néanmoins du fait des fluctuations statistiques, le modèle a été abandonné au profit du modèle de Boltzmann

pour les fluides miscibles; nous reviendrons à ce dernier dans la Section suivante où les modèles de Boltzmann multiphasiques sont discutés.

Citons quelques applications des modèles multiphasiques qui prennent leur origine dans les modèles ILG.

Les modèles ILG, introduits initialement pour des simulations à deux phases, peuvent être facilement généralisés pour des phases multiples. Pour cela il suffit d'introduire un gradient de couleur  $\mathbf{f}^k$  et un flux de couleur  $\mathbf{q}^k$  pour chaque phase  $k$  indépendamment (voir (1.95a) et (1.95b))

$$\mathbf{f}^k(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{b_m} \rho_k(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t) \mathbf{C}_i \quad (1.103a)$$

$$\mathbf{q}^k(\mathbf{n}^k) = \sum_{i=1}^{b_m} n_i^k \mathbf{C}_i \quad (1.103b)$$

La collision, qui respecte comme toujours la masse de chaque phase et la quantité de mouvement totale dans le noeud, prend un état qui maximise la somme

$$\sum_k \alpha_k \mathbf{f}^k \cdot \mathbf{q}^k(\mathbf{n}^k) \quad (1.104a)$$

où  $\alpha_k$  sont des constantes;  $\alpha_k = 1$  correspond aux collisions de ILG (voir (1.95e)). Ce modèle a été utilisé par Rothman (1991) pour modéliser des émulsions. L'émulsion "numérique" consiste en un fluide émulsionnant et un ensemble de bulles non miscibles; chaque bulle est traitée par le modèle (1.103)-(1.104) comme une phase indépendante avec

$$\alpha_f = -0.5 \text{ pour le fluide, } \alpha_k = 1 \text{ pour les bulles, } k \rightarrow \infty \quad (1.104b)$$

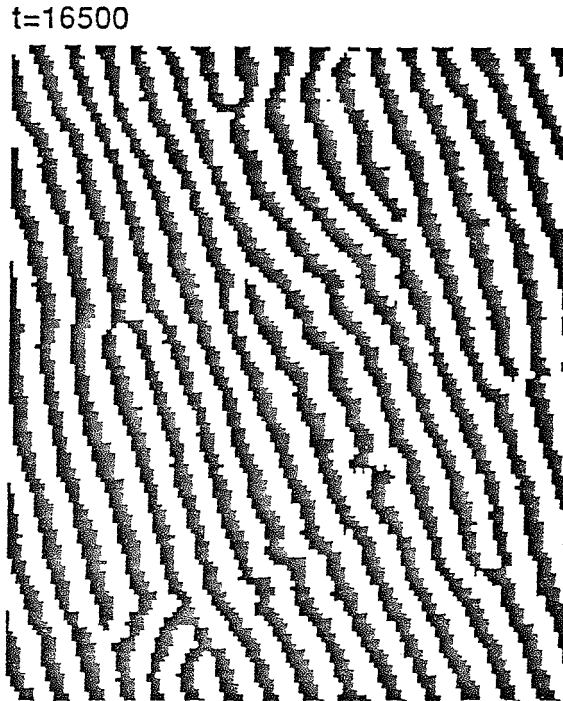
Néanmoins, on démontre que sur le réseau FHP les collisions dans ce système (qui consiste formellement de  $k+1$  ( $k \rightarrow \infty$ ) espèces) peuvent être déterminées selon les règles pour seulement trois espèces, qui sont le fluide et deux bulles. Ce modèle a été encore raffiné par l'introduction d'interactions compétitives entre les particules (voir Rothman, 1991 et 1993). Ces interactions sont incluses dans le modèle par modification des règles de collision (1.95e) de la manière suivante. On change la direction du flux, qui est anti-diffusion par les collisions (1.95e), en maximisant la fonction

$$(\mathbf{f}_e - \alpha \mathbf{f}_e^{(l)}) \cdot \mathbf{q}(r_i, b_i) \quad (1.105a)$$

où  $\alpha$  est une constante,  $\mathbf{f}_e$  un vecteur unité dans la direction de gradient de couleur  $\mathbf{f}$  (1.95a); le vecteur  $\mathbf{f}^{(l)}$  est responsable des interactions de portée  $l$

$$\mathbf{f}^{(l)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{b_m} C_i [\rho_R(\mathbf{r} + l\mathbf{C}_i, t) - \rho_B(\mathbf{r} + l\mathbf{C}_i, t)], \quad \mathbf{f}_e^{(l)} = \frac{\mathbf{f}^{(l)}}{|\mathbf{f}^{(l)}|} \quad (1.105b)$$

Il été montré que cette modification permet la formation de structures différentes, depuis des bulles ordonnées jusqu'à des bandes aléatoires dont un exemple est donné sur la Figure 1-7.



**Figure 1-7:** Résultat de simulation avec l'aide d'interactions compétitives pour un mélange de deux fluides avec des concentration égales (Rothman, 1991); une portée de l'interaction  $l = 0.5$ ,  $\alpha = 1$  (voir équations (1.105)).

Des modèles qualitativement différents sont introduits par Burgess et al (1988) (voir aussi Hayot, 1991) pour simuler les instabilités de Saffman - Taylor. En effet, quand le fluide moins visqueux déplace un fluide plus visqueux dans un milieu poreux 2D, les instabilités dans la zone de séparation des fluides ressemblent aux instabilités de Saffman-Taylor en cellule de Hele-Shaw (on peut consulter la littérature concernée dans Holme et Rothman, 1991; Burgess et Hayot, 1989). La formation de "doigts" est typique pour ces instabilités. Dans les modèles de Burgess et Hayot (1988), l'interface est traitée de manière explicite, comme un ensemble de noeuds et de liens du réseau; on construit l'interface à chaque itération en indiquant à chaque lien comment il doit se déformer en fonction de l'impulsion arrivée dans les noeuds extrêmes pour ce lien. Les particules mêmes qui se trouvent après propagation à l'interface effectuent des réflexions en arrière ou spéculaire (Figure 1-5). Burgess et al (1989) ont montré que cet algorithme modélise correctement les instabilités de type de Saffman - Taylor dans la zone de séparation de deux fluides non miscibles.

### 1.4.2. Extensions des modèles de Boltzmann pour des écoulements à plusieurs phases.

#### •Modèles ILB

De la même façon que l'équation de Boltzmann avec opérateur de collision linéarisé a été déduite de l'équation d'évolution booléenne (voir (1.21) et (1.69a)), les modèles appelés ILB (*Immiscible lattice-Boltzmann*) ont été développés par Gunstensen et al (1991) à partir des modèles ILG. Une modification importante consiste en l'introduction de perturbation de populations dans les noeuds proches de l'interface afin de créer la tension de surface dans le modèle de Boltzmann. La perturbation  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  des populations totales  $N_i$  (voir (1.29)) conserve la masse et la quantité de mouvement totale

$$N_i = R_i + B_i, \quad R_i = \langle r_i \rangle, \quad B_i = \langle b_i \rangle, \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.106a)$$

En général  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  est de la forme

-Modèles à deux phases

$$\delta N_i(\mathbf{r}, t) = A^{per} |\mathbf{f}| \cos 2 \vartheta_i, \quad i = 1, \dots, b_m \quad \text{pour 2D FHP} \quad (1.106b)$$

$$\delta N_i(\mathbf{r}, t) = A^{per} |\mathbf{f}| \left\{ \frac{(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f})^2}{(\mathbf{f} \cdot \mathbf{f})^2} - \frac{1}{2} \right\}, \quad i = 1, \dots, b_m \quad \text{pour 3D FCHC} \quad (1.106c)$$

où  $\vartheta_i$  est un angle entre la vitesse  $\mathbf{C}_i$  et le gradient de couleur  $\mathbf{f}$  défini dans (1.95a);

-Modèles à trois phases (Gunstensen et Rothman, 1991b; Gunstensen, 1992)

$$\delta N_i(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1,2,3} \delta N_i^k(\mathbf{r}, t) \quad (1.106d)$$

où chaque perturbation  $\delta N_i^k$  est définie d'après (1.106b) - (1.106c), mais chaque phase possède son propre gradient de couleur (1.103a). Donc les perturbations (1.106) augmentent les populations dans les directions parallèles au gradient de couleur; l'équation de Boltzmann sans particules immobiles avec la perturbation devient (voir (1.69a))

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=1}^{b_m} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{r}, t) + \delta N_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.107)$$

Ainsi l'équation de Boltzmann est définie dans les termes des populations totales; néanmoins, avant chaque pas de propagation, les populations  $N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1)$  sont coloriées suivant les mêmes critères (1.95e) ou (1.104a) pour deux ou trois phases.

De point de vue de la population totale, l'équation de Boltzmann (1.107) est identique à celle en simple phase quand la perturbation est égale à zéro, c'est-à-dire dans le coeur de chaque phase. Par conséquent, la distribution à l'équilibre (voir (1.33)), l'écart à l'équilibre au premier ordre (voir (1.44)-(1.45)) et donc les équations macrodynamiques sont les mêmes dans les volumes que pour les modèles de Boltzmann à simple phase. Cependant, près de l'interface, la situation change pour deux raisons. D'abord, comme on verra dans le Chapitre 4, la perturbation (1.106) provoque l'apparition de termes supplémentaires avec des tenseurs anisotropes dans les solutions pour les populations; grâce à ces termes, le modèle possède une tension de surface. Le deuxième point où les modèles ILB diffèrent des modèles LBE se manifeste explicitement quand on désire introduire des paramètres discontinus (par exemple des viscosités ou des densités différentes) dans les phases. Dans ce cas, le problème du choix de la matrice interfaciale (voir (1.107)) apparaît et de plus, les conditions interfaciales deviennent plus délicates. En effet, bien que le problème de la continuité des vitesses et des tenseurs de contraintes tangentielles existe même pour des phases identiques, il n'a jamais été discuté pour les modèles ILG et ILB à notre connaissance. Probablement, on a supposé que ces conditions sont automatiquement vérifiées par l'équation de Boltzmann pour des phases identiques, mais l'interface est traitée implicitement et on ne précise pas *où* et *comment* ces conditions sont satisfaites.

Le problème des conditions interfaciales pour deux modèles ILB généralisés de manière à introduire des viscosités et des nombres de particules immobiles différentes dans les phases est discuté dans le Chapitre 4. Notons qu'une généralisation du modèle ILB de ce type a été faite en même temps par Grunay (1993); le modèle PCLBE à simple phase est utilisé pour déterminer la solution à l'équilibre; la matrice diagonalisée (1.85a) remplace la matrice traditionnelle (voir (1.74)-(1.76)). Le choix de Grunay pour le paramètre de relaxation à l'interface est décrit par les relations (4.25)-(4.26) dans le Chapitre 4; il suit une approche classique pour déduire les paramètres moyens dans la zone transitoire des valeurs discontinues aux limites de cette zone; néanmoins, à notre connaissance, l'erreur imposée dans les conditions aux limites par cette solution n'est pas encore estimée.

#### • *Applications des modèles ILB*

Citons quelques applications faites avec les modèles ILB. Gunstensen (1992) a vérifié que son algorithme assure la séparation des phases du mélange; il compare aussi les résultats selon deux approches, ILG et ILB, par des exemples de formation de points triples stables et instables. Nous allons revenir à ces simulations dans le Chapitre 5. La cinétique de croissance des domaines a été étudiée par Grunay (1993) et Grunay et al (1993); l'influence de la mouillabilité sur la croissance de régions occupées par chaque phase dans le milieu poreux est

également étudiée. Ceci constitue la première tentative d'étudier en détail la dynamique modélisée par ILB.

La capacité de l'algorithme à simuler la solution de l'équation de Stokes a été testée en comparant la vitesse théorique d'écoulement à deux phases dans un tube de section circulaire avec la vitesse numérique obtenue par un modèle immiscible de Boltzmann 3D (voir Gunstensen, 1992; Gunstensen et Rothman, 1993). Ils ont également comparé les résultats numériques aux équations phénoménologiques (1.101). Le mouvement est produit par les forces extérieures exercées sur chaque phase indépendamment; lorsque la force est grande on observe une dépendance linéaire et de plus les conditions de symétrie pour la matrice  $\mathbf{k}$  (voir (1.101)) sont satisfaites. Cependant la dépendance devient non linéaire pour une petite force quand la force mais aussi la distribution des phases influence le flux du fait des effets capillaires.

La loi de Darcy avec des termes de couplage  $k_{RB}$  et  $k_{BR}$  nuls dans (1.101) sont est retrouvée par Grunay (1993); ses résultats pour la perméabilité relative se trouvent en bon accord (à moins de 5%) avec les mesures expérimentales. Il a aussi montré que les modèles 2D ne sont pas adéquats pour les simulations en milieu poreux même si l'échantillon est très petit dans la troisième direction. Grunay (1993) mesure aussi des angles de contact établis en fonction du coloriage de la surface solide; les valeurs rapportées sont dans l'intervalle ( $21^\circ$ ,  $180^\circ$ ).

Parmi les modèles de Boltzmann à deux phases, mentionnons encore le modèle miscible de Holme et Rothman (1991) déjà cité dans la section précédente. Dans ce cas, les interactions entre les particules de couleurs différentes sont incluses dans la grande matrice de collision; cela signifie que l'équation de Boltzmann est développée pour décrire l'évolution de populations de chaque phase et pas seulement des populations totales comme dans le modèle ILB (voir (1.107)). De la même manière que dans Hénon (1987b), ils obtiennent une formule pour le coefficient de diffusion du modèle en fonction de l'une des valeurs propres de la matrice de collision. Ainsi ce premier algorithme utilise seulement l'information locale dans chaque noeud et il peut être considéré comme la contrepartie du modèle de gaz sur réseau de d'Humières et al (1988). Pour obtenir un coefficient de diffusion le plus petit possible avec un régime stable, une redistribution d'une petite fraction de chaque population après collision est ajoutée à l'algorithme pour l'opposer au gradient de couleur. Ils déduisent de cette redistribution une addition au coefficient de diffusion. L'évaluation théorique du coefficient de diffusion coïncide bien avec l'expérience numérique 2D pour les fluides au repos. Ils rapportent aussi quelques résultats de simulation en cellule de Hele-Shaw; la viscosité du mélange est prise égale à la moyenne barycentrique des viscosités des phases séparées. Grâce à l'absence de tension superficielle entre fluides miscibles, une instabilité différente de celle de Saffman - Taylor est possible.

### 1.4.3. Modèle *liquide-gaz*.

Le modèle *liquide-gaz*, introduit par Appert et Zaleski (1990) et développé ensuite sous la forme booléenne et Boltzmann, constitue une généralisation importante des modèles ILG et ILB. Si dans les modèles ILG et ILB les interactions entre les particules existent implicitement, par moyenne des gradients de couleur, dans les modèles *liquide-gaz* ces interactions deviennent "palpables" car l'idée principale de la méthode consiste en l'échange d'une certaine impulsion entre noeuds situés à une portée  $l$  l'un de l'autre. Cela permet d'exercer des forces attractives entre les particules d'une même espèce sur le réseau. Cette procédure respecte le principe d'exclusion, la conservation de la masse et l'impulsion totale des couples de noeuds; les détails de l'échange diffèrent d'une version à l'autre. Par exemple, le premier modèle introduit, dit *maximal*, échange la plus grande impulsion possible à chaque itération; cependant, il est possible de prévoir et de stocker tous les résultats des ces collisions modifiées au début de simulation. Dans la version simplifiée, dite *minimal*, "on cherche des couples de particules en train de s'éloigner l'une de l'autre" (Appert, 1993); ces particules, qui sont également distantes de  $l$ , sont renvoyées à la rencontre l'une de l'autre.

Un mélange de deux fluides, piloté par l'équation classique de l'évolution de gaz sur réseau ou bien de Boltzmann, augmentées par des interactions, se sépare en deux phases de densités différentes (voir sur Figure 1-8) dû à l'irréversibilité des interactions introduites; la phase liquide (plus lourde) est formée des particules qui interagissent entre elles tandis que la phase gazeuse obéit à un LG classique. Par exemple, pour la version de Boltzmann avec une population immobile, les équations pour les populations moyennes (voir (1.107)) sont de la forme

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=0}^{b_m} A_{ij} N_j^{neg}(\mathbf{r}, t) + \delta N_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, b_m \quad (1.108a)$$

où  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  est maintenant l'opérateur d'interaction;  $N_0$  remplace la somme de  $L$  populations moyennes égales. Appert (1993) a choisi un opérateur qui ne provient pas directement des interactions dans les modèles booléens mais qui respecte localement la masse des populations et la quantité de mouvement globale, à savoir

$$\delta N_i(\mathbf{r}, t) = \mu \Gamma_i, \quad \Gamma_i = f[\tilde{\rho}(\mathbf{r} + 0.5\mathbf{C}_i)] - f[\tilde{\rho}(\mathbf{r} - 0.5\mathbf{C}_i)], \quad i = 0, \dots, b_m \quad (1.108b)$$

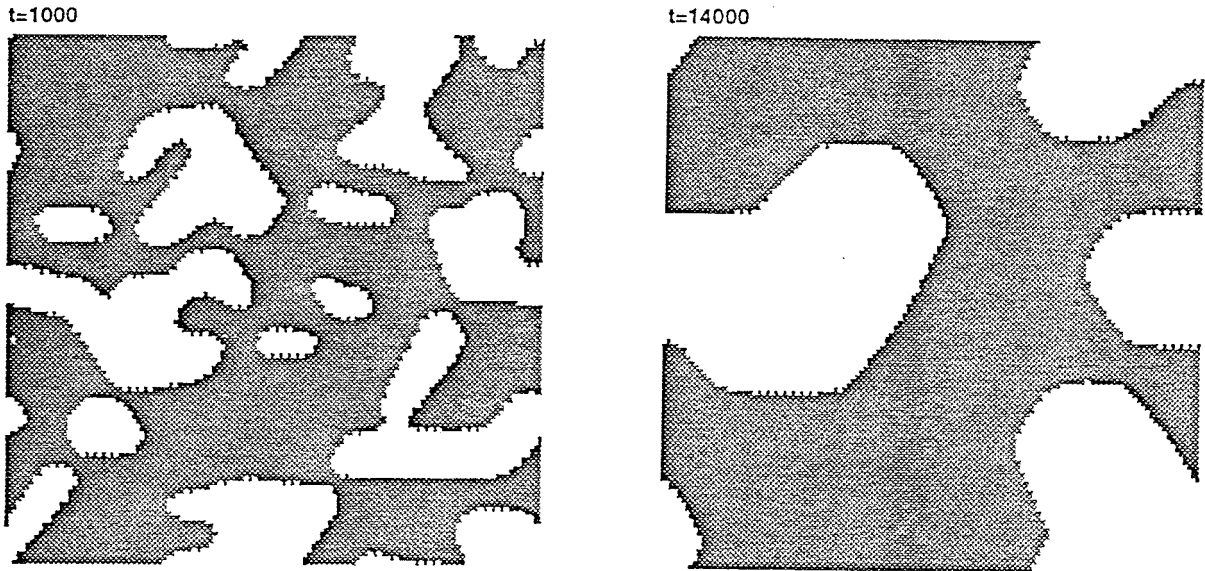
$$f(x) \stackrel{def.}{=} x^n [(b_m + M_c)^2 - x]^n \quad (1.108c)$$

où  $\mu, n$  sont des constantes;

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r} \pm 0.5\mathbf{C}_i) \stackrel{def.}{=} \tilde{\rho}(\mathbf{r}) \tilde{\rho}(\mathbf{r} \pm \mathbf{C}_i) \quad (1.108d)$$

En principe, le modèle de Boltzmann (1.108) n'a été appliqué que pour le réseau FHP.





**Figure 1-8:** Séparation de phase obtenue avec le modèle de Boltzmann de type *liquide-gaz* (Appert, 1993). Les zones blanches (grises) correspondent à une densité cellulaire  $d < 0.4$  ( $d > 0.4$ ).

Le fait que les deux phases, induites par les interactions, ont des densités très différentes, est probablement le point le plus intéressant des modèles *liquide-gaz* par comparaison avec les modèles ILG ou ILB. Actuellement, les densités d'équilibre qui dépendent de la version du modèle ainsi que de la portée  $l$  de l'interaction, ne peuvent pas être prédites. Néanmoins, les équations macrodynamiques sont déduites pour le modèle *minimal* et pour le modèle de Boltzmann d'après les conditions de solubilité (au premier et au second ordre) des équations moyennées d'évolution (l'approximation de Boltzmann est supposée pour le modèle booléen, la distribution de Fermi-Dirac est prise à l'équilibre). Les résultats suivants sont obtenus.

Pour le modèle *minimal booléen*, le facteur galiléen  $g$  et les viscosités de compression et de cisaillement dépendent des détails des interactions; actuellement on n'a pas de solution pour ajuster  $g$  à 1; l'expression obtenue pour la pression contient aussi une dépendance non physique de vitesse en carré (voir (1.59)); cependant, lorsqu'on y substitue une vitesse nulle, l'équation d'état devient de type Van der Waals\*. Pour le Modèle de Boltzmann, ces paramètres macroscopiques ne sont pas modifiés par des interactions contrairement à la pression; cette dernière dépend de façon non linéaire de la densité; la pression a une zone de décomposition spinodale pour  $\frac{\partial p}{\partial \rho} < 0$ .

\*Soit un fluide de sphères lourdes et attractives de rayon  $R$ . Dans ce cas, la pression a la forme (voir Widom, 1981)

$$p = p_{hs} - a\rho^2, \quad a = -\frac{1}{2} \int_{|r|>R} \phi_{\text{attr.}}(\mathbf{r}) dV$$

où  $p_{hs}$  est la pression dans le fluide sans attraction,  $a$  est le paramètre de Van der Waals,  $\phi_{\text{attr.}}$  est un potentiel intermoléculaire.

Pour le modèle *minimal* booléen il n'y a pas pour le moment de prédictions théoriques pour la tension superficielle  $\sigma$ ; par conséquent on peut opérer seulement par des mesures numériques faites d'après le test mécanique ou le test de la bulle; ces calculs montrent que  $\sigma$  varie de façon linéaire en fonction de la valeur de la portée  $l$ . Néanmoins, dans le cas du modèle de Boltzmann, le calcul de  $\sigma$  est devenu possible selon la même procédure que celle utilisée dans Gunstensen et al (1991) et Gunstensen (1992) pour les modèles ILB. Cette approche, qui utilise explicitement les relations constitutives pour les populations ainsi que l'égalité des viscosités, est discutée en détail dans le Chapitre 4. Notons seulement que cette procédure permet d'exprimer  $\sigma$  en fonction des interactions (1.108b) effectuées dans chaque noeud du réseau de la même façon que pour les équations (1.107) avec perturbation; la comparaison entre ces prédictions et les calculs numériques n'est pas encore rapportée à notre connaissance.

Le modèle promet d'être efficace pour modéliser des phénomènes où un grand contraste entre les phases joue un rôle important; les premiers résultats d'évaporation dans le milieu poreux sont déjà obtenus.

Les problèmes nombreux qui restent encore ouverts pour les modèles *liquide-gaz* sont discutés dans la conclusion de la thèse de Appert (1993); certains sont déjà mentionnés dans ce paragraphe; comme pour les modèles ILG et ILB, l'étude des conditions interfaciales imposées par le modèle semble importante pour évaluer les capacités d'application du modèle.

## Appendice 1.A.

### Introduction de particules immobiles dans les modèles LG.

d'Humières et Lallemand (1987) ont construit des modèles avec particules immobiles sur la base des modèles de Frisch et al (1987) à une vitesse. Leurs modèles incluent  $b_r$  particules au repos de vitesse  $\mathbf{C}_{0k} = 0$ ,  $k = 0, 1, \dots, b_r - 1$ . Ces particules immobiles diffèrent par leurs masses

$$m^k = 2^k, \quad k = 0, 1, \dots, b_r - 1. \quad (1.A.1a)$$

On suppose que les particules mobiles ont une masse

$$m^0 = 1. \quad (1.A.1b)$$

Soit  $N_{0k}$  ( $k = 0, 1, \dots, b_r - 1$ ) la population moyenne  $k$  de particules immobiles au contraire des populations mobiles  $N_{i0}$ ,  $i = 1, \dots, b_m$ . Lorsqu'on exige la condition de bilan semi-détaillé, la distribution de Fermi -Dirac décrit les populations des particules en équilibre

$$N_{ik}^{eq.} = \frac{1}{1 + \exp[m^k(h + \mathbf{q} \cdot \mathbf{C}_i)]}, \quad k = 0, 1, \dots, b_r - 1, \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.A.2)$$

Selon le même développement que précédemment, on obtient les fonctions inconnues  $h$  et  $\mathbf{q}$  en fonction des quantités macroscopiques (voir (1.40) pour une comparaison avec les modèles sans particules immobiles)

$$N_{i0}^{eq.}(\mathbf{r}, t) = d + \frac{\rho D}{c^2 b_m} \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + d_2(\mathbf{u} \cdot \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{u}) + d_3 u^2 + O(u^3), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (1.A.3a)$$

$$N_{0k}^{eq.}(\mathbf{r}, t) = d^k + d_3^k u^2 + O(u^4), \quad k = 0, 1, \dots, b_r - 1; \quad (1.A.3b)$$

avec

$$d_2 = dg(\rho) \frac{D(D+2)}{2c^4} \frac{\rho}{\rho_m}, \quad d_3 = d_2 \left( \frac{c^2}{D} - C_s^2 \right), \quad d_3^k = -\frac{d^k}{d} \frac{1-d^k}{1-d} m^k C_s^2 d_3 \quad (1.A.3c)$$

où  $\rho$  est la densité macroscopique,  $\rho_m$  la masse des particules mobiles

$$\rho = \sum_{k=0}^{b_r-1} m^k d^k + \rho_m, \quad \rho_m = d b_m, \quad (1.A.4a)$$

la vitesse du son est donnée par (voir (1.56))

$$C_s^2 = \frac{c^2}{D(1+f)}, \quad f = \frac{\sum_{k=0}^{b_r-1} [m^k]^2 d^k (1-d^k)}{d(1-d)b_m}, \quad (1.A.4b)$$

le facteur galiléen s'exprime sous la forme (voir (1.41))

$$g(\rho, \rho_m) = \frac{D}{D+2} \frac{b_m - 2\rho_m}{b_m - \rho_m} \frac{\rho}{\rho_m} \quad (1.A.4c)$$

Donc on a les constantes  $d$  et  $d^k$ ,  $k = 0, 1, \dots, b_r - 1$ , à déterminer.

Par conséquent, le tenseur  $\mathbf{P}^{(0)}$  a la même forme (1.55a), mais le facteur galiléen (1.A.4c)  $g(\rho, \rho_m)$  peut être choisi soit de façon à obtenir l'invariance ( $g(\rho, \rho_m) = 1$ ) par le choix du nombre des particules immobiles et des densités, soit de façon à éviter une dépendance non physique de la pression  $p(u^2)$  ( $g(\rho, \rho_m) = 0$ ) par le choix de la densité. Donc en supposant la solution de Fermi-Dirac à l'équilibre, il reste impossible de satisfaire les deux conditions même avec l'aide des particules immobiles.

L'écart à l'équilibre du premier ordre est modifié dans le modèle de la façon suivante (voir (1.45))

$$\begin{aligned} N_i^{10}(\mathbf{r}, t) &= (\psi \mathbf{Q}_i + \chi_m \mathbf{I}) : \nabla^1(\rho \mathbf{u}), \quad i = 1, \dots, b_m; \\ N_{0k}^{10}(\mathbf{r}, t) &= \chi_k \nabla^1 \cdot (\rho \mathbf{u}), \quad k = 0, \dots, b_r; \\ \chi_m b_m + \sum_{k=0}^{b_r-1} m^k \chi_k &= 0 \end{aligned} \quad (1.A.5)$$

Par conséquent, la viscosité de cisaillement  $\nu$  est définie de la même façon (1.57), mais la viscosité de compression  $\zeta$  est différente de zéro (voir (1.58))

$$\zeta = -\frac{b_m c^2}{D} \chi_m - \frac{1}{2} \left( \frac{c^2}{D} - C_s^2 \right) \quad (1.A.6)$$

Avec l'aide de l'équation de Boltzmann linéarisée, les coefficients  $\psi$ ,  $\chi_m$  et  $\chi_k$  sont déduits par d'Humières et Lallemand (1987) d'après la matrice de collision construite pour ce cas.

Ainsi dans le cas limite  $b_r = 0$  on revient au modèle classique à une vitesse. Néanmoins, pour ajuster l'invariance galiléenne avec les modèles de ce type, il suffit de prendre toutes les particules de même masse, par exemple, égale à 1. Le modèle est décrit en détail dans le Chapitre 2, puisqu'il sert de point de départ à notre travail.

Dans les modèles de Dubrulle et al (1990) avec des particules immobiles la condition de bilan semi-détaillé est violée au contraire du modèle considéré. Par conséquent, la solution en équilibre ainsi que les coefficients du transport et le facteur galiléen dépendent du détail des collisions. On maximise ensuite ce facteur galiléen afin d'élever le nombre de Reynolds (1.62c).

le facteur galiléen s'exprime sous la forme (voir (1.41))

$$g(\rho, \rho_m) = \frac{D}{D+2} \frac{b_m - 2\rho_m}{b_m - \rho_m} \frac{\rho}{\rho_m} \quad (1.A.4c)$$

Donc on a les constantes  $d$  et  $d^k$ ,  $k = 0, 1, \dots, b_r - 1$ , à déterminer.

Par conséquent, le tenseur  $\mathbf{P}^{(0)}$  a la même forme (1.55a), mais le facteur galiléen (1.A.4c)  $g(\rho, \rho_m)$  peut être choisi soit de façon à obtenir l'invariance ( $g(\rho, \rho_m) = 1$ ) par le choix du nombre des particules immobiles et des densités, soit de façon à éviter une dépendance non physique de la pression  $p(u^2)$  ( $g(\rho, \rho_m) = 0$ ) par le choix de la densité. Donc en supposant la solution de Fermi-Dirac à l'équilibre, il reste impossible de satisfaire les deux conditions même avec l'aide des particules immobiles.

L'écart à l'équilibre du premier ordre est modifié dans le modèle de la façon suivante (voir (1.45))

$$\begin{aligned} N_i^{10}(\mathbf{r}, t) &= (\psi \mathbf{Q}_i + \chi_m \mathbf{I}) : \nabla^1(\rho \mathbf{u}), \quad i = 1, \dots, b_m; \\ N_{0k}^{10}(\mathbf{r}, t) &= \chi_k \nabla^1 \cdot (\rho \mathbf{u}), \quad k = 0, \dots, b_r; \\ \chi_m b_m + \sum_{k=0}^{b_r-1} m^k \chi_k &= 0 \end{aligned} \quad (1.A.5)$$

Par conséquent, la viscosité de cisaillement  $\nu$  est définie de la même façon (1.57), mais la viscosité de compression  $\zeta$  est différente de zéro (voir (1.58))

$$\zeta = -\frac{b_m c^2}{D} \chi_m - \frac{1}{2} \left( \frac{c^2}{D} - C_s^2 \right) \quad (1.A.6)$$

Avec l'aide de l'équation de Boltzmann linéarisée, les coefficients  $\psi$ ,  $\chi_m$  et  $\chi_k$  sont déduits par d'Humières et Lallemand (1987) d'après la matrice de collision construite pour ce cas.

Ainsi dans le cas limite  $b_r = 0$  on revient au modèle classique à une vitesse. Néanmoins, pour ajuster l'invariance galiléenne avec les modèles de ce type, il suffit de prendre toutes les particules de même masse, par exemple, égale à 1. Le modèle est décrit en détail dans le Chapitre 2, puisqu'il sert de point de départ à notre travail.

Dans les modèles de Dubrulle et al (1990) avec des particules immobiles la condition de bilan semi-détaillé est violée au contraire du modèle considéré. Par conséquent, la solution en équilibre ainsi que les coefficients du transport et le facteur galiléen dépendent du détail des collisions. On maximise ensuite ce facteur galiléen afin d'élever le nombre de Reynolds (1.62c).

## **Chapitre 2.**

**Modèle de Boltzmann sur un réseau FHC: condition d'adhérence à la paroi par les réflexions classiques.**

## 2.1. Introduction.

Nous allons utiliser dans cette thèse un modèle de Boltzmann sur un réseau FCHC avec un nombre arbitraire  $L$  de populations immobiles. Ce modèle a été développé parallèlement par Gunstensen (1992). Les populations immobiles dans ce modèle décrivent l'évolution des  $L$  particules au repos de masse identique égale à 1; ainsi  $L$  est supposé être entier. Les solutions à l'équilibre sont prises sous la forme de la distribution de Fermi-Dirac; dans ce cas, les populations moyennes sont comprises dans l'intervalle entre 0 et 1. Les développements principaux pour la solution à l'équilibre sont basés sur les résultats de d'Humières et Lallemand (1987) décrits dans l'Appendice 1.A. Leurs solutions sont obtenues dans le cas de  $b_r$  particules de masse variables  $m^k = 2^k \{k = 0, \dots, b_r - 1\}$ .

Dans notre analyse théorique des problèmes aux limites, la restriction que les populations moyennes sont inférieures à un n'est jamais utilisée; en outre, les termes d'ordre  $O(u^2)$  dans la solution en équilibre sont souvent négligés dans l'étude des conditions aux limites en simple phase et en double phase. Puisque les coefficients reliés aux termes d'ordre  $O(u^2)$  ne jouent jamais un rôle important dans les résultats exposés, nous supposons que l'analyse des modèles de Boltzmann avec une forme quelconque de la distribution à l'équilibre peut être développée par analogie; cependant les résultats vont dépendre du type de réseau ainsi que de la forme de matrice de collision appliquée. Par exemple, les modèles de Boltzmann avec une matrice de collision diagonalisée (1.85) ont seulement un paramètre libre qui de plus détermine la viscosité cinématique du modèle; par conséquent, on ne peut pas y choisir les valeurs propres comme dans les modèles de Boltzmann avec une matrice de collision traditionnelle.

On suit la méthode classique de Frisch et al (1987) pour déduire les équations macroscopiques avec l'aide de la distribution à l'équilibre et l'approximation de Boltzmann. Nous montrons que l'augmentation des populations par une certaine quantité de mouvement, incorporée dans l'équation de Boltzmann par Succi et al (1989) pour imposer une force de volume extérieure, conduit à l'apparition d'un terme supplémentaire dans le développement des populations. Du fait de la présence de ce terme dans la solution pour les populations, la formule standard pour la vitesse macroscopique est un peu modifiée.

Après exposition du modèle principal, nous déterminons les conditions aux limites pour un mélange de probabilité  $p$  pour les rebonds et  $(1 - p)$  pour les réflexions spéculaires. Le problème de la localisation exacte de la paroi solide se pose.

Le paramètre  $\varepsilon$  représente le rapport entre le pas du réseau et la dimension caractéristique du système. Nous analysons d'abord ce problème au premier ordre  $O(\varepsilon)$  dans les développements classiques des populations pour l'écoulement arbitraire stationnaire 3D près d'un plan solide. Cela suit à peu près le travail de Cornubert et al (1991) pour le modèle FHP dans le cas d'écoulement à deux dimensions. Avec une précision du premier ordre  $O(\varepsilon)$ , la vitesse normale s'annule dans le noeud où les réflexions sont appliquées, tandis que la distance entre ce noeud et le point où s'annule la vitesse tangentielle dépend de la probabilité  $p$ , la viscosité cinématique ainsi que la dérivée de la vitesse normale le long de la paroi.

Nous développons ensuite les populations au second ordre afin d'approfondir l'analyse de la condition d'adhérence imposée par le modèle. Ces développements nous permettent d'obtenir les solutions exactes pour les probabilités  $p$  en fonction de deux valeurs propres de la matrice de collision et de la distance où nous souhaitons annuler la vitesse dans un écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné et dans un canal incliné avec un angle  $\theta = 45^\circ$  par rapport aux axes du réseau FCHC. Dans le cas de la réflexion en arrière, cette distance est déterminée seulement par les valeurs propres indépendamment de la largeur du canal. En général les réflexions standards introduisent des erreurs qui sont au mieux d'ordre  $O(\varepsilon^2)$  par rapport au plan solide imaginaire qui se trouve à une distance 0.5 des noeuds où les réflexions sont appliquées; dans les cas particuliers des écoulements de Poiseuille non incliné et incliné à  $45^\circ$ , on peut obtenir les solutions exactes si on choisit bien les valeurs propres de la matrice de collision.

Ainsi on a mis en évidence la nécessité de modifier les réflexions classiques pour avoir une même précision du second ordre, c'est-à-dire une erreur d'ordre  $O(\varepsilon^3)$ , dans la condition d'adhérence et dans les équations macroscopiques déduites de modèles de Boltzmann en volume. Ceci est particulièrement important pour les applications de ces modèles à des simulations en milieu poreux.

Un article déjà publié sur les conditions aux limites à la paroi solide a été inclus tel quel dans cette thèse dans l'Appendice 2.A. Le lecteur peut y trouver des éclaircissements sur des points particuliers. Le contenu de cet article consacré à la réflexion en arrière est généralisé pour une combinaison de réflexions en arrière et spéculaire dans ce chapitre; l'étude détaillée des conditions aux limites au premier ordre ainsi que l'analyse de l'algorithme aux limites modifié de Ziegler (1993) sont également ajoutées .



## 2.2. Modèle FCHC à $L$ particules immobiles.

### 2.2.1. Equation de Boltzmann avec force extérieure.

Nous allons exposer un modèle de Boltzmann sur un réseau FCHC avec  $b_m = 24$  particules mobiles de vitesses  $\mathbf{C}_i$  ( $i = 1, \dots, b_m$ ) et  $L$  particules immobiles de vitesse  $\mathbf{C}_0 = 0$ . Les populations moyennes de vitesse  $\mathbf{C}_i$  ( $i = 0, \dots, b_m$ ) sont notées  $N_i(\mathbf{r}, t)$ . Les populations immobiles sont ajoutées au modèle de Boltzmann discuté dans la Section 1.3.2 pour avoir la possibilité d'exiger que le facteur galiléen  $g(\rho)$  soit égal à 1. Les détails sur le modèle sont réunis dans l'Appendice 2.A. Résumons les résultats généraux ainsi que les développements actuels.

Soit  $\mathbf{F}$  la force extérieure; elle est imposée dans le modèle en ajoutant en chaque noeud du réseau une densité de particules  $\delta N_i^F(\mathbf{r}, t)$  suivant Succi et al (1989). Les populations moyennes au temps  $t + 1$  sont déduites des populations au temps  $t$  à l'aide de l'équation de collision linéarisée (dite *équation de Boltzmann avec force extérieure*) suivante:

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t + 1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=0}^{24} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{r}, t) W_j + \delta N_i^F(\mathbf{r}, t) \quad , \quad i = 0, \dots, b_m \quad (2.1a)$$

où

$$\delta N_i^F(\mathbf{r}, t) = \frac{D}{c^2 b_m} \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \quad (2.1b)$$

$$D = 4 \text{ est la dimension de l'espace; } c^2 = (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i) \equiv 2, \quad \forall i = 1, \dots, 24 \quad (2.1c)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=0}^{24} N_i(\mathbf{r}, t) W_i \text{ est la densité moyenne par noeud; } \quad (2.1d)$$

$$\begin{cases} W_0 = L \\ W_i = 1, \quad i = 1, \dots, b_m \end{cases} \quad (2.1e)$$

$$\mathbf{N}^{neq.} = \mathbf{N} - \mathbf{N}^{eq.} \quad (2.1f)$$

Remarquons qu'il n'y a pas de création globale de masse par addition du terme  $\delta N_i^F(\mathbf{r}, t)$  du fait de l'isotropie du réseau, mais qu'il y a la création de quantité de mouvement (voir (1.14)):

$$\sum_{i=1}^{b_m} \delta N_i^F(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i = \rho \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \quad (2.1g)$$

### 2.2.2. Solution à l'équilibre.

En appliquant les résultats de d'Humières et Lallemand (1987) pour le cas de  $L$  particules de masse identique égale à 1 (voir formules (1.A.3) de l'Appendice 1.A) avec

$$d^k = d, \quad m^k = 1, \quad k = 1, \dots, L \quad (2.2)$$

nous obtenons (voir aussi (1.40) pour une comparaison avec le modèle sans particules immobiles)

$$N_i^{eq}(\mathbf{r}, t) \stackrel{def.}{=} N_i^0(\mathbf{r}, t) = d + d'\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + dG(\rho) \mathbf{u}^\dagger \cdot \{ \mathbf{Q}_i + (c^2 / D - C_s^2) \mathbf{I} \} \cdot \mathbf{u}, \quad i=1, \dots, 24 \quad (2.3a)$$

$$N_0^{eq}(\mathbf{r}, t) \stackrel{def.}{=} N_0^0(\mathbf{r}, t) = d - C_s^2 dG(\rho) \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \quad (2.3b)$$

où

$$d = \rho / b \quad - \text{densité par cellule} \quad (2.3c)$$

$$b = b_m + L \quad - \text{nombre de particules dans un noeud} \quad (2.3d)$$

$$C_s^2 = \frac{c^2 b_m}{Db} \quad - \text{vitesse du son} \quad (2.3e)$$

$$g(\rho) = \frac{D}{D+2} \frac{b}{b_m} \frac{1-2d}{1-d} \quad - \text{facteur galiléen} \quad (2.3f)$$

$$G(\rho) = g(\rho) \frac{D(D+2)}{2c^4} \frac{b}{b_m}, \quad d' = \frac{D}{c^2 b_m} \quad (2.3g)$$

Le tenseur invariant du second ordre  $\mathbf{Q}_i$  est défini par la formule (1.41c). Ainsi, pour le réseau FCHC

$$g(\rho) = 1 \quad \text{si} \quad d = \frac{L-12}{2(6+L)}, \quad L > 12 \quad (2.3h)$$

### 2.2.3. Equations macrodynamiques.

Les équations macrodynamiques sont déduites dans l'Appendice 2.A pour le modèle avec particules immobiles en suivant les développements de la littérature. La seule différence est due à la force extérieure  $\mathbf{F}$  dans l'équation de Boltzmann (2.1a). Dans ce cas, le terme du premier ordre  $N_i^1(\mathbf{r}, t)$  peut se décomposer en deux parties

$$\begin{aligned} N_i^j(\mathbf{r}, t) &= N_i^{j0}(\mathbf{r}, t) + N_i^{jF}(\mathbf{r}, t) \\ N_i(\mathbf{r}, t) &= N_i^0(\mathbf{r}, t) + \varepsilon N_i^j(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.4a)$$

Le premier terme  $N_i^{j0}(\mathbf{r}, t)$  est censé être une fonction linéaire du gradient de quantité de mouvement; cette fonction doit être invariante par rapport au groupe des isométries du réseau (voir (1.45) et (1.A.5)). Le second terme  $N_i^{jF}$  est une fonction linéaire de la force extérieure. Après des développements classiques basés sur des considérations de linéarité et d'invariance, nous obtenons

$$N_i^{j0}(\mathbf{r}, t) = (\psi \mathbf{Q}_i + \chi \mathbf{I}) : \nabla^j(\rho \mathbf{u}), \quad \psi = \frac{d^j}{\lambda_\psi}, \quad \chi = -\frac{L}{b^2 b^o b_m}, \quad \nabla = \varepsilon \nabla^j, \quad i=1, \dots, 24$$

$$N_0^0(\mathbf{r}, t) = -\frac{b_m}{L} \chi \mathbf{I} : \nabla^j(\rho \mathbf{u}), \quad d^j = \frac{\nabla^j}{\varepsilon^j b_m} \quad (2.4b)$$

$$N_i^{jF} = -\frac{1}{2} d^j \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{C}_i, \quad i=1, \dots, 24; \quad \mathbf{F} = \varepsilon \mathbf{f}; \quad \sum_{i=1}^{24} N_i^{jF} \mathbf{C}_i = -\frac{1}{2} \mathbf{f} \quad (2.4c)$$

où  $\lambda_\psi$  est la valeur propre associée avec le tenseur  $\mathbf{Q}_i$  (voir (1.41c), (2.8c)); l'opérateur  $\nabla^j$  est le même que dans (1.43b).

Notons que les coefficients dans les termes  $N_i^{j0}$  et  $N_i^{jF}$  peuvent être déterminés directement en développant l'équation de Boltzmann (2.1a) au premier ordre comme ceci a été fait dans la Section 1.2.6 pour déterminer le coefficient  $\psi$ . Ainsi, les termes  $N_i^{j0}$  et  $N_i^{jF}$  ne changent pas la densité locale, mais la quantité de mouvement dans un noeud est modifiée par le terme  $N_i^{jF}$ ; par conséquent, le terme  $N_i^{jF}$  conduit à une modification de la formule traditionnelle pour la vitesse macroscopique  $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$  (voir dans (1.29)) :

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_{i=1}^{24} N_i(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i}{\rho(\mathbf{r}, t)} + \frac{\mathbf{F}}{2}. \quad (2.5)$$

L'addition du terme  $\frac{\mathbf{F}}{2}$  devient importante pour les noeuds où les vitesses sont faibles, en particulier près d'une paroi solide.

Les équations macrodynamiques déduites avec l'aide de la solution en équilibre (2.3a) et des relations (2.4b) et (2.4c) pour la densité  $\rho$  (2.1d) et la vitesse  $\mathbf{u}$  (2.5) sont

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.6a)$$

$$\partial_t(\rho\mathbf{u}) + \mathbf{u} \cdot \nabla \rho g(\rho)\mathbf{u} = -\nabla p + \rho\mathbf{F} + \nabla \cdot [\nu(\rho)\nabla(\rho\mathbf{u})] + \nabla \cdot \left[ \left\{ \nu(\rho) \frac{D-2}{D} + \zeta \right\} \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) \right] + O(\varepsilon u') + O(\varepsilon^2 u^2) + \dots \quad (2.6b)$$

avec

$$p(\rho, u^2) = C_s^2 \rho \left( 1 - g(\rho) \frac{u^2}{c^2} \right) \quad (2.6c)$$

$$\xi = -\frac{c^2 b_m}{D} \chi - \frac{1}{2} \left( \frac{c^2}{D} - C_s^2 \right) - \text{viscosité cinématique de compression} \quad (2.6d)$$

La viscosité cinématique de cisaillement  $\nu$  est définie par la formule (1.78) de la même façon que pour les modèles sans particules immobiles.

La force de volume extérieure  $\mathbf{F}$  et la viscosité de compression  $\zeta$  dans l'équation (2.6b) constituent une petite différence entre ces équations et l'équation (1.59a) dans le Chapitre précédent.

#### 2.2.4. La matrice de collision.

La matrice de collision  $\mathbf{A}$  correspondante à l'équation (2.1a) est de la forme

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} c^o & b^o & \dots & b^o \\ b^o & & & \\ & \mathbf{A}' & & \\ \dots & & & \\ b^o & & & \end{pmatrix} \quad (2.7a)$$

où la matrice  $\mathbf{A}'$  (24 x 24) correspond aux collisions entre les particules mobiles; il s'agit donc de la matrice étudiée dans la Section 1.3.2 qui fait intervenir les cinq coefficients inconnus (1.74); ses valeurs propres sont calculées dans Succi et al (1989); les termes  $b^o$  correspondent aux collisions entre particules immobiles et mobiles; le terme  $c^o$  correspond aux collisions entre particules immobiles. Les 7 coefficients de la matrice  $\mathbf{A}$

$$a_0, a_{60}, a_{90}, a_{120}, a_{180}, b^o, c^o \quad (2.7b)$$

doivent également vérifier les conditions de conservation de la masse et de la quantité de mouvement

$$\sum_{j=1}^{24} A_{ij}' = -b^o L, \quad b^o b_m = -c^o L, \quad (2.7c)$$

$$\sum_{j=1}^{24} A_{ij}' C_{j\gamma} = 0 \quad \forall \gamma = 1, \dots, D.$$

Les conditions (2.7c) entraînent les 3 relations suivantes pour les coefficients de la matrice **A**:

$$\begin{aligned} a_0 + 8 a_{60} + 6 a_{90} + 8 a_{120} + a_{180} &= -b^0 L, & b^0 b_m &= -c^0 L, \\ a_0 + 4 a_{60} - 4 a_{120} - a_{180} &= 0 \end{aligned} \quad (2.7d)$$

Nous avons pu calculer analytiquement les valeurs propres et les vecteurs propres de **A** et exprimer les vecteurs propres en termes de tenseurs invariants du réseau FCHC.

Les tenseurs invariants du second ordre ont déjà été beaucoup discutés dans la littérature parce qu'ils interviennent dans la forme générale de l'écart à l'équilibre au premier ordre  $\mathbf{N}^1(\mathbf{r}, t)$ . Cependant les tenseurs invariants du troisième et du quatrième ordres du réseau FCHC n'ont pas encore été exploités à notre connaissance. Dans l'analyse des conditions aux limites, il est indispensable de développer les populations aux ordres supérieurs. Ainsi, pour déterminer les coefficients dans la série en puissances de  $\varepsilon$  de manière à satisfaire l'équation de Boltzmann, on aura besoin de relier les tenseurs invariants du réseau FCHC aux vecteurs propres de la matrice de collision. Les tenseurs invariants d'ordre 3 sont discutés dans l'Appendice 2.A et ceux d'ordre 4 dans l'Appendice 4.C. Donnons les vecteurs propres de la matrice de collision **A** sous la forme:

- un tenseur invariant d'ordre zéro  $e^0$ :  $e_0^0 = L$ ,  $e_i^0 = 1$ ,  $i = 1, \dots, 24$  (2.8a)

associé à la valeur propre nulle de multiplicité 1;

- tenseurs invariants du premier ordre  $C_{i\alpha}$ ,  $\alpha = 1, \dots, D$

associés à la valeur propre nulle de multiplicité  $D$ ; (2.8b)

- tenseurs invariants du second ordre  $Q_{i\alpha\beta}$ ,  $\alpha = 1, \dots, D$ ,  $\beta = 1, \dots, D$

$$Q_{i\alpha\beta} = C_{i\alpha} C_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta} c^2/D, \quad i = 1, \dots, b_m; \quad Q_{0\alpha\beta} = 0$$

associés à la valeur propre  $\lambda_\psi$  de multiplicité 9

$$\lambda_\psi = a_0 - 2a_{90} + a_{180}.$$

Ces tenseurs vérifient

$$\sum_{i=1}^{24} Q_{i\alpha\beta} = 0; \quad \sum_{i=1}^{24} Q_{i\alpha\beta} C_{i\gamma} = 0, \quad \forall \gamma = 1, \dots, D; \quad (2.8c)$$

- tenseurs invariants du troisième ordre  $T_{i\alpha\beta}$

$$T_{i\alpha\beta} = C_{i\beta} - 3C_{i\alpha}^2 C_{i\beta}, \quad i = 1, \dots, b_m; \quad T_{0\alpha\beta} = 0$$

associés à la valeur propre  $\lambda_2$  de multiplicité 8

$$\lambda_2 = \frac{3}{2} (a_0 - a_{180}).$$

Ces tenseurs vérifient

$$\sum_{i=1}^{24} T_{i\alpha\beta} = 0; \quad \sum_{i=1}^{24} T_{i\alpha\beta} C_{i\gamma} = 0, \quad \forall \gamma = 1, \dots, D; \quad (2.8d)$$

- tenseurs invariants du quatrième ordre  $T_{i\alpha\beta\beta}$

$$T_{i\alpha\beta\beta} = C_{i\alpha}^2 C_{i\beta}^2 - \frac{1}{2} Q_{i\alpha\alpha} - \frac{1}{2} Q_{i\beta\beta} - \frac{1}{6}, \quad \forall \alpha \neq \beta; \quad T_{0\alpha\alpha\beta\beta} \equiv 0; \quad (2.8e)$$

associés à la valeur propre  $\lambda_1$  de multiplicité 2

$$\lambda_1 = \frac{3}{2} (a_0 + 6a_{90} + a_{180}) + 12 \frac{b^0 L}{b_m}.$$

Ces tenseurs vérifient

$$\sum_{i=1}^{24} T_{i\alpha\beta\beta} = 0; \quad \sum_{i=1}^{24} T_{i\alpha\beta\beta} C_{i\gamma} = 0, \quad \forall \gamma = 1, \dots, D; \quad (2.8d)$$

Enfin, le vecteur propre  $e^{im}$  est dû à l'introduction des particules immobiles dans le modèle

$$e_0^{im} = -\frac{b_m}{L}, \quad e_i^{im} = 1, \quad i = 1, \dots, 24.$$

Il est associé à la valeur propre  $\lambda_c$  de multiplicité 1

$$\lambda_c = -b^0 \left( \frac{b_m}{L} + L \right)$$

Ces tenseurs vérifient aussi les conditions de conservation de la masse et de la quantité de mouvement

$$\sum_{i=1}^{24} e_i^{im} = -e_0^{im} L, \quad \sum_{i=1}^{24} e_i^{im} C_{i\gamma} = 0 \quad \forall \gamma = 1, \dots, D. \quad (2.9)$$

La valeur propre  $\lambda_\psi$  est particulièrement importante puisqu'elle intervient dans le calcul de la viscosité cinématique (1.78) comme dans les modèles de Boltzmann sans particules immobiles.

Donc parmi les 7 coefficients inconnus de la matrice  $\mathbf{A}$ , 4 sont déterminés par les 3 conditions générales de conservation (2.7d) et par le choix de la viscosité (1.78), mais les 3 autres sont relativement indéterminés. L'analyse linéaire de stabilité par Higuera et Jiminez

(1989) impose que les valeurs propres de  $\mathbf{A}'$  sont comprises entre -2 et 0. Cependant on peut procéder de manière très différente et se donner, par exemple, trois valeurs propres arbitraires entre -2 et 0, sans aucune référence aux règles de collision; généralement, on choisit ces valeurs propres de sorte que la collision annule les fluctuations des populations

$$(1 + \lambda) = 0 \Rightarrow \lambda = -1 \text{ pour } \lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_c\} \quad (2.10)$$

Rappelons que cela est aussi discuté dans la Section 1.3.2.

Nous allons montrer qu'un choix arbitraire des valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  dans l'intervalle (-2, 0) peut être dangereux puisque  $\lambda_2$  détermine la précision des modèles en simple phase dans la condition d'adhérence aux parois solides et en double phase dans les conditions interfaciales, alors que  $\lambda_1$  intervient dans le calcul de coefficient de la tension superficielle dans les modèles en double phase.

### 2.3. Analyse des conditions aux limites au premier ordre.

#### 2.3.1. Introduction des réflexions classiques.

Dans le cadre de l'étude des problèmes d'écoulement d'une phase unique dans un milieu poreux, la condition à la limite la plus importante est celle qui doit être mise à la surface du solide. Au départ, on suppose donc qu'un certain nombre de noeuds du réseau  $\mathbf{r}_s$  appartient à la phase solide et un certain nombre  $\mathbf{r}_L$  à la phase liquide. Nous dirons que la population moyenne  $N_i''(\mathbf{z}_0, t)$  de vitesse  $\mathbf{C}_i$  obtenue selon l'équation de Boltzmann (2.1a) dans un noeud  $\mathbf{z}_0$

$$N_i''(\mathbf{z}_0, t + 1) \stackrel{def.}{=} N_i(\mathbf{z}_0, t) + \sum_{j=0}^{24} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{z}_0, t) W_j + \delta N_i^F(\mathbf{z}_0, t) \quad (2.11a)$$

arrive sur une surface solide si

$$\mathbf{z}_0 + \mathbf{C}_i = \mathbf{r}_s. \quad (2.11b)$$

L'équation de Boltzmann s'écrit avec l'aide des populations  $N_i''(\mathbf{z}_0, t + 1)$  comme

$$N_i(\mathbf{z}_0 + \mathbf{C}_i, t + 1) = N_i''(\mathbf{z}_0, t + 1) \quad (2.12)$$

Soit l'ensemble  $\mathbf{Z}$  des noeuds du réseau  $\mathbf{z}_0$  voisins d'une paroi solide où certaines populations doivent se réfléchir à la paroi. Notons par l'indice  $\alpha$  les populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$  qui vont vers la paroi à partir du noeud  $\mathbf{z}_0$  avec la vitesse  $\mathbf{C}_{+\alpha}$ ; cet indice varie dans l'intervalle  $I_0(\mathbf{z}_0) = \{1, \dots, l_0\}$  où  $l_0$  dépend de la géométrie locale.

Par analogie avec les réflexions des particules dans les modèles du gaz sur réseau sur la surface solide, on suppose dans ce chapitre que les populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $\alpha \in I_0(\mathbf{z}_0)$ , se réfléchissent à la paroi. Cette analogie est discutée aussi par Ziegler (1993).

Notons alors par l'indice  $-\alpha$  les populations  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$  réfléchies à partir des populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$ . Les vitesses des populations  $\alpha$  et  $-\alpha$  sont donc reliées par la condition

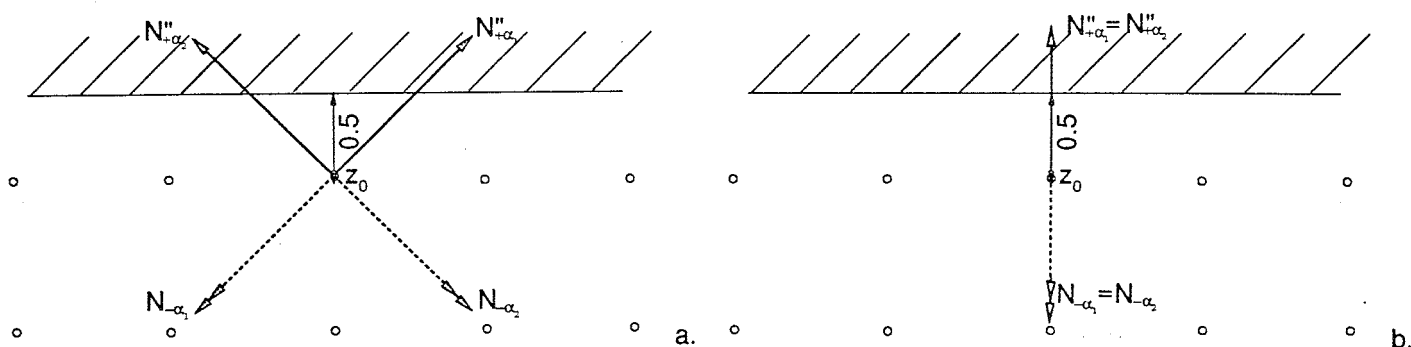
$$C_{-\alpha} = -C_{+\alpha} \quad (2.13)$$

Cependant, la définition du réseau FCHC entraîne des simplifications supplémentaires. En effet on peut distinguer deux types de populations: des populations  $N_{\pm\alpha}$  avec une vitesse  $C_{\pm\alpha}$  perpendiculaire à la paroi solide (dites "*populations droites*") et les populations dites "*inclinées*" (voir Figure 2-1). Donc, d'après les propriétés du réseau FCHC, la quatrième composante de la vitesse  $C_{\pm\alpha}$  est différente de zéro pour les populations droites et égale à zéro pour les populations inclinées. Evidemment, les populations  $N_i$  dont seule la quatrième composante de la vitesse diffère, sont égales. Par conséquent, on peut diminuer le nombre de populations inconnues  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$  si on remplace chaque paire de populations "droites" par leur somme.

En réalité, on applique le plus souvent la condition dite *bounce back* ou *rebond en arrière* (voir aussi Succi et al, 1989; Cornubert et al, 1991) qui peut être donnée sous la forme suivante d'après les relations (2.11)-(2.13)

$$N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t) = N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t). \quad (2.14)$$

Lorsque les populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$  arrivent sur une surface solide, elles repartent en arrière au même pas de temps.



**Figure 2-1:** introduction des populations "inclinées" (a) et des populations "droites" (b).

Introduisons un mélange de probabilité  $p$  et  $(1 - p)$  pour les rebonds et les réflexions spéculaires sur un réseau FCHC dans un point simple avec un seul plus proche voisin solide (dit "*point près d'un plan solide*"; voir Figure 2-2a).



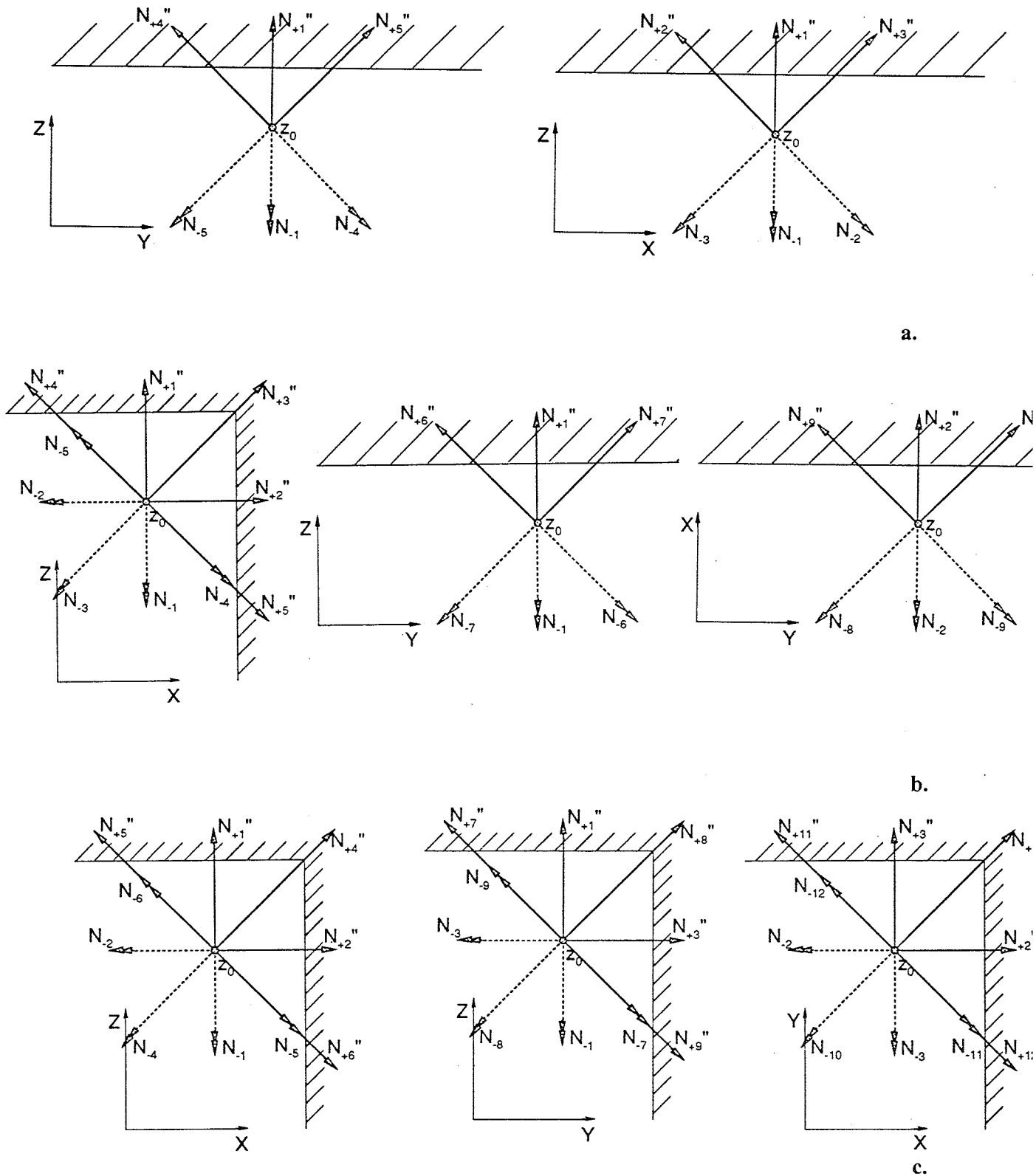


Figure 2-2: Principales géométries: (a) Point près d'un plan; (b) Point dans un coin 2D; (c) Point dans un coin 3D.

Dans ce cas, les deux populations  $N_{-\alpha_1}(\mathbf{z}_0, t)$  et  $N_{-\alpha_2}(\mathbf{z}_0, t)$  (voir Figure 2-1) sont déterminées par la relation

$$\begin{aligned} N_{-\alpha_1}(\mathbf{z}_0, t) &= pN_{+\alpha_1}''(\mathbf{z}_0, t) + (1-p)N_{+\alpha_2}''(\mathbf{z}_0, t) \\ N_{-\alpha_2}(\mathbf{z}_0, t) &= pN_{+\alpha_2}''(\mathbf{z}_0, t) + (1-p)N_{+\alpha_1}''(\mathbf{z}_0, t) \end{aligned} \quad (2.15)$$

Par conséquent, la réflexion en arrière est un cas particulier de (2.15) avec  $p \equiv 1$ . Notons que les deux réflexions conservent la masse localement; en effet la masse partie d'un noeud  $\mathbf{z}_0$  avec des populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $\alpha \in I_0(\mathbf{z}_0)$ , revient dans le même noeud.

Nous n'imposons pas de restrictions sur les "probabilités"  $p$ , qui ne sont donc pas obligées d'être entre 0 et 1.

Naïvement on peut penser que la paroi solide définie comme le lieu où les vitesses s'annulent, est située en  $\mathbf{r}_s$  donnée par (2.11b) ou en  $\mathbf{z}_0$ . En réalité, la position de la frontière est une fonction des paramètres physiques de l'écoulement, des valeurs propres de la matrice  $\mathbf{A}$  ainsi que de la géométrie locale dans un point  $\mathbf{z}_0$ .

### 2.3.2. Analyse des réflexions classiques au premier ordre.

Nous allons illustrer d'abord la méthode d'analyse des conditions aux limites (2.15) pour un écoulement près d'un plan solide par le développement classique (1.44) des populations au premier ordre. Les populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0)$  au premier ordre dans l'équation (2.15) peuvent être exprimées avec l'équation de Boltzmann (2.1a) et les relations (2.1b), (2.4b) avec (2.8c) et (2.4c)

$$\begin{aligned} N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t) &= N_{+\alpha}^0(\mathbf{z}_0, t-1) + \varepsilon [(1+\lambda_\psi) N_{+\alpha}^{10}(\mathbf{z}_0, t-1) + N_{+\alpha}^{1F}(\mathbf{z}_0, t-1)] + \delta N_i^F(\mathbf{z}_0, t-1) \\ &= N_{+\alpha}^0(\mathbf{z}_0, t-1) + \varepsilon [(1+\lambda_\psi) N_{+\alpha}^{10}(\mathbf{z}_0, t-1) - N_{+\alpha}^{1F}(\mathbf{z}_0, t-1)] \end{aligned} \quad (2.16)$$

si on suppose que (voir (2.4b))

$$\nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (2.17)$$

Pour la clarté des développements qui suivent, négligeons le terme  $\mathbf{N}^{1F}$  ainsi que les termes d'ordre  $O(u^2)$  dans la solution d'équilibre (2.3)

$$N_i = d + d' \left\{ \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_i + \frac{\mathbf{Q}_i : \nabla \rho \mathbf{u}}{\lambda_\psi} \right\} + O(N_i^{1F}) + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \quad (2.18)$$

On suppose que l'écoulement est tridimensionnel et qu'il est indépendant du temps

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t) = \rho \mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t - 1) \quad (2.19)$$

On substitue ensuite les populations  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$  (2.18) et  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$  exprimées en termes des valeurs macroscopiques  $\rho$  et  $\rho \mathbf{u}$  par les développements (2.16) et (2.18) dans les conditions aux limites (2.15). On obtient, donc, pour toutes les populations  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $\alpha \in I_0(\mathbf{z}_0)$ , les conditions aux limites sous la forme

$$\rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_{-\alpha_1} + \frac{\mathbf{Q}_{-\alpha_1} : \nabla \rho \mathbf{u}}{\lambda_\psi} = p \left[ \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_{+\alpha_1} + \left(1 + \frac{1}{\lambda_\psi}\right) \mathbf{Q}_{+\alpha_1} : \nabla \rho \mathbf{u} \right] + (1-p) \left[ \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_{+\alpha_2} + \left(1 + \frac{1}{\lambda_\psi}\right) \mathbf{Q}_{+\alpha_2} : \nabla \rho \mathbf{u} \right],$$

$$\alpha_1, \alpha_2 \in I_0(\mathbf{z}_0) \quad (2.20)$$

Ces équations nous permettent de déduire les relations entre la quantité de mouvement  $\rho \mathbf{u}$  et leurs premières dérivées dans le noeud  $\mathbf{z}_0$ . Pour  $u_z$  les relations (2.20) donnent trois équations différentes: deux pour les sommes des populations inclinées et l'une pour les populations droites (Figure 2-1). Quand l'équation de continuité (2.17) est utilisée pour exprimer les dérivées tangentielles en termes de la dérivée normale, ces équations donnent les conditions suivantes dans le noeud  $\mathbf{z}_0$

$$\begin{cases} \rho u_z + \frac{1}{2} \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} C_{+\alpha z} = 0 \\ \rho u_z + \frac{1}{4} \frac{\partial \rho u_z}{\partial z} C_{+\alpha z} = 0, & \alpha \in I_0(\mathbf{z}_0) \\ \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} = \frac{\partial \rho u_y}{\partial y} \end{cases} \quad (2.21a)$$

Pour satisfaire ces équations simultanément, on a (voir les relations (1.91),(1.93a) pour un réseau FHP) :

$$u_z(\mathbf{z}_0) = 0; \quad \frac{\partial u_\gamma}{\partial \gamma}(\mathbf{z}_0) = 0 \quad \forall \gamma = \{x, y, z\} \quad (2.21b)$$

La solution (2.21b) signifie que d'après l'analyse au premier ordre la vitesse normale s'annule exactement dans le noeud près d'un plan solide  $\mathbf{z}_0$  où les réflexions sont appliquées. De plus, les équations (2.20) pour les populations inclinées entraînent pour la vitesse tangentielle

$$\rho u_\gamma + 2 \left\{ \frac{1}{2} + 3v \frac{1-p}{p} \right\} D_{\gamma z} C_{+\alpha z} = 0, \quad \gamma = \{x, y\} \quad \text{si } p \neq 0, \quad \alpha \in I_0(\mathbf{z}_0) \quad (2.21c)$$

$$D_{\gamma z}(\mathbf{z}_0) = 0, \quad \gamma = \{x, y\} \quad \text{si } p = 0, \quad \lambda_\psi \neq -2 \quad (2.21d)$$

où  $\mathbf{D}$  est le tenseur des taux de déformation

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^t) \quad (2.22)$$

L'exposant  $t$  est l'opérateur de transposition.

Notons que selon la solution (2.21d), les réflexions spéculaire pures ( $p \equiv 0$ ) fournissent la condition de glissement libre

$$\frac{\partial u_\gamma}{\partial z}(\mathbf{z}_0) = 0 \quad \text{si} \quad \frac{\partial u_z}{\partial \gamma}(\mathbf{z}_0) = 0, \quad \gamma = \{x, y\} \quad (2.23a)$$

Dans le cas général  $p \neq 0$ , la distance  $\Delta$  entre le noeud  $\mathbf{z}_0$  et le point où la vitesse s'annule peut être déterminée avec un développement de Taylor au premier ordre. On voit alors que si la dérivée  $\frac{\partial u_z}{\partial \gamma}(\mathbf{z}_0)$  est négligeable comme dans un écoulement de Poiseuille établi, la distance  $\Delta$  est indépendante de l'écoulement

$$\Delta = \frac{1}{2} + 3\nu \frac{1-p}{p}; \quad (2.23b)$$

$\Delta$  n'est donc nul que si

$$p = \frac{6\nu}{6\nu - 1} \quad (2.23c)$$

c'est-à-dire d'après (1.78)

$$p = p(\lambda_\psi) \quad (2.23d)$$

Par contre pour la réflexion en arrière ( $p = 1$ ), on obtient

$$\Delta = \frac{1}{2}. \quad (2.24)$$

Selon les solutions (2.21b) et (2.24), la condition d'adhérence à la paroi est vérifiée avec une erreur d'ordre  $O(\varepsilon^2)$  pour les réflexions en arrière dans le réseau FCHC à la même distance

$\Delta = \frac{1}{2}$  pour les composantes tangentielle et normale si les dérivées  $\frac{\partial u_z}{\partial \gamma}(\mathbf{z}_0)$  sont négligeables; cela reste également vrai si on inclut les termes d'ordre  $O(u^2)$  et le terme  $\mathbf{N}^{\text{IF}}$  dans l'analyse.

Rappelons que ces résultats sont obtenus dans un noeud près d'un plan solide; on ne peut pas donc les appliquer automatiquement dans des géométries différentes comme un "coin 2D" (Figure 2-2b) ou un "coin 3D" (Figure 2-2c), par exemple.

## 2.4. Analyse des conditions aux limites au second ordre.

### 2.4.1. Développement au second ordre des solutions pour les populations.

#### Application à l'écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné.

Pour déduire les équations macroscopiques par l'expansion de Chapman-Enskog, il suffit de développer les populations au premier ordre (voir (1.44) - (1.45), (2.4)). Par conséquent, les termes des ordres supérieurs n'apparaissent pas dans la littérature. Mettons en évidence l'importance de ces termes pour l'analyse de la condition d'adhérence en considérant l'écoulement le plus simple qui est un écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné par rapport aux axes du réseau:

$$\nu \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} = -F_x, \quad -h \leq z \leq h \quad (2.25a)$$

avec les conditions aux limites

$$u_x(\pm h) = 0, \quad (2.25b)$$

$F_x$  est une force extérieure constante qui correspond au gradient de pression qui est dans ce cas constant.

Pour obtenir l'écoulement (2.25a) par le modèle de Boltzmann, il suffit de prendre un parallélépipède de dimensions  $(1, 1, 2h)$  et d'imposer les conditions aux limites (2.15) dans les noeuds  $z = \pm z_0$  (Figure 2-3); le parallélépipède est censé être spatialement périodique dans les autres directions. La largeur du canal  $H$  est

$$H = 2z_0 + 1 = 2h \quad (2.25c)$$

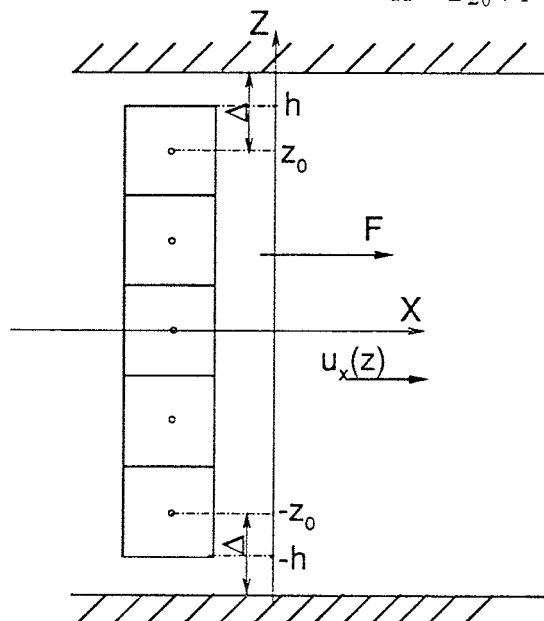
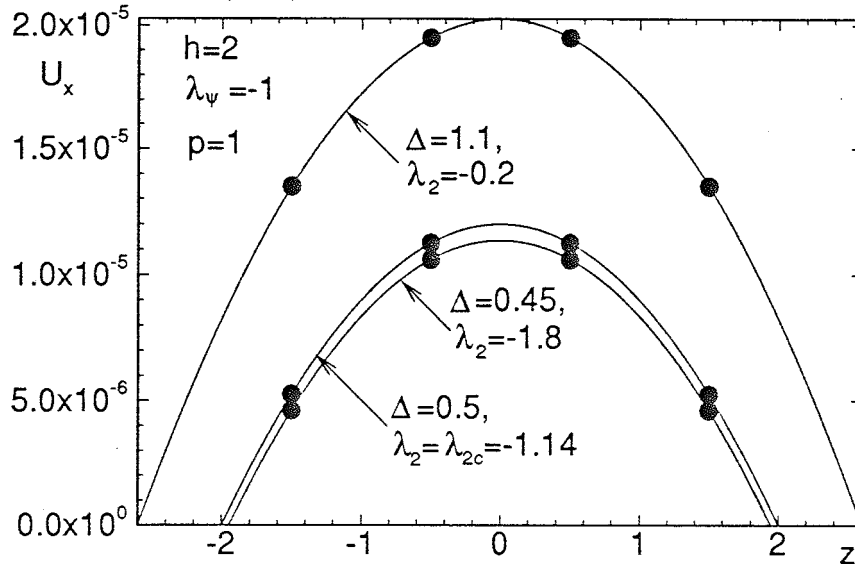


Figure 2-3: Ecoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné.

Lorsque le profil est établi, on découvre que il est bien parabolique

$$u_x = -\frac{F_x}{2\nu} [z^2 - (z_0 + \Delta)^2] \quad (2.26)$$

et donc que l'équation (2.25a) est vérifiée en accord avec la théorie, mais que la vitesse s'annule en des points qui dépendent des paramètres du modèle même pour le rebond (voir Figure 2-4) contrairement à la solution (2.24).



**Figure 2-4:** Comparaison entre les prédictions théoriques (2.31b) avec  $\Delta p = 0$  et les solutions numériques par rebond pour un écoulement de Poiseuille en fonction de valeur propre  $\lambda_2$ . Largeur du canal  $H$ : 4 unités de réseau.

Pour étudier ce problème, nous avons développé les populations en fonction de  $\varepsilon$  jusqu'au second ordre

$$N_i(\mathbf{r}, t) = N_i^0(\mathbf{r}, t) + \varepsilon N_i^1(\mathbf{r}, t) + \varepsilon^2 N_i^2(\mathbf{r}, t) \quad (2.27)$$

Ces développements nouveaux sont donnés dans l'Appendice 2.A. Nous avons supposé que  $N_i^2$  est une fonction linéaire et invariante dans le groupe des isométries du réseau FCHC des gradients du second ordre  $\nabla^1 \nabla^1(\rho \mathbf{u})$ ,  $\nabla^1 \nabla^1 \rho$ ,  $\nabla^1(\rho \mathbf{f})$ . Ces termes n'ont pas d'influence sur la densité locale et la quantité de mouvement. Nous avons alors montré que ces termes étaient nécessairement de la forme

$$N_i^2 = K_1 \mathbf{T}_i \cdot \nabla^1 \nabla^1(\rho \mathbf{u}) - C_s^2 [(K_2 \mathbf{Q}_i + K_3 \mathbf{I}) : \nabla^1 \nabla^1 \rho] + [(K_2 \mathbf{Q}_i + K_3 \mathbf{I}) : \nabla^1(\rho \mathbf{f})], \quad i = 1, \dots, 24$$

$$N_0^2 = -\frac{b_m}{L} K_3 [\mathbf{I} : \nabla^1(\rho \mathbf{f}) - C_s^2 \mathbf{I} : \nabla^1 \nabla^1 \rho], \quad \mathbf{F} = \varepsilon \mathbf{f}$$

(2.28a)

où  $\mathbf{T}_i$  est un tenseur invariant du troisième ordre donné par (2.8d).

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_i &:: \nabla^1 \nabla^1 \rho \mathbf{u} \\ &= K_1 \left( \frac{\partial^2 \rho u_x}{\partial z^2} + 2 \frac{\partial^2 \rho u_x}{\partial z \partial \rho} \right) \mathbf{T}_{ixz} \end{aligned}$$

Un développement de l'équation de Boltzmann à l'ordre  $\varepsilon^2$  nous permet de déterminer les coefficients qui interviennent dans cette équation en fonction des valeurs propres de la matrice de collision  $\mathbf{A}$ :

$$K_1 = d' \frac{v}{\lambda_2}, \quad K_2 = -3d' \frac{v}{\lambda_\psi}, \quad K_3 = -\chi \left( \frac{bb_m}{L} \chi + \frac{1}{2} \right) \quad (2.28b)$$

$\chi$  est défini dans (2.4b).

Nous avons appliqué ensuite les solutions obtenues (2.4) et (2.28) à un écoulement de Poiseuille. Pour cet écoulement les populations (2.27) sont de la forme

$$N_i = d + d'p \left[ u_x C_{ix} - \frac{1}{2} F_x C_{ix} + \frac{1}{\lambda_\psi} \frac{\partial u_x}{\partial z} C_{ix} C_{iz} + \frac{v}{\lambda_2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} (C_{ix} - 3 C_{ix} C_{iz}^2) \right] + O(u^2), \quad i = 0, \dots, 24 \quad (2.29)$$

Dans un premier temps, seule la condition de rebond (2.14) a été étudiée, ce qui est consigné dans l'Appendice 2.A. Généralisons maintenant ce calcul pour le mélange (2.15) de réflexions spéculaires et en arrière avec une probabilité  $p$ .

La méthode est la même; introduisons les développements (2.29) dans les conditions aux limites (2.15) en tenant en compte du fait que les tenseurs invariants du troisième ordre  $T_{i\alpha\alpha\beta}$  (2.8d) sont des vecteurs propres de la matrice de collision. La solution pour les populations  $N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0)$  au second ordre dans le cas de la densité constante d'après la solution (2.28a) et la relation (2.16) est

$$N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t) = N_{+\alpha}^0(\mathbf{z}_0, t-1) + \varepsilon \left[ (1 + \lambda_\psi) N_{+\alpha}^{10}(\mathbf{z}_0, t-1) - N_{+\alpha}^{1F} \right] + \varepsilon^2 (1 + \lambda_2) N_{+\alpha}^2(\mathbf{z}_0, t-1) \quad (2.30)$$

En supposant l'existence d'un profil parabolique établi, nous remplaçons la vitesse et ses dérivées dans les développements de populations (2.29) et (2.30) substitués dans l'équation aux limites (2.15) par la vitesse (2.26) et ses dérivées. On obtient donc l'équation qui relie la distance  $\Delta$  aux paramètres du modèle, à savoir la probabilité  $p$  et les valeurs propres  $\lambda_\psi$  et  $\lambda_2$ . La solution  $p$  de ces équations en fonction de la distance  $\Delta$  à laquelle on désire que la vitesse s'annule est de la forme

$$p = \frac{1}{1 + \Delta p} \quad (2.31a)$$

avec

$$\Delta p = 1 + \frac{-\Delta^2 - 2z_0 \Delta + \left(1 - \frac{4}{\lambda_2}\right)v - \frac{2z_0}{\lambda_\psi}}{-3vH} \quad (2.31b)$$

La solution pour  $\Delta = \frac{1}{2}$  est donnée par

$$\Delta p = \frac{2 + \frac{4}{\lambda_2} + \frac{1}{4\nu}}{3H} \quad (2.31c)$$

De manière équivalente, dans ce cas la valeur propre  $\lambda_2$  est donnée par

$$\lambda_2 = \lambda_{2c}^{(p)} \stackrel{def.}{=} -8 \frac{(\lambda_\psi + 2)}{(\lambda_\psi + 8) - 6\Delta p H (\lambda_\psi + 2)} \quad (2.31d)$$

Notons que la solution pour la réflexion en arrière ( $\Delta p \equiv 0$ ) de l'Appendice 2.A (voir formule (49)) est retrouvée comme un cas particulier de (2.31d) lorsque  $\lambda_2$  est donnée par l'expression

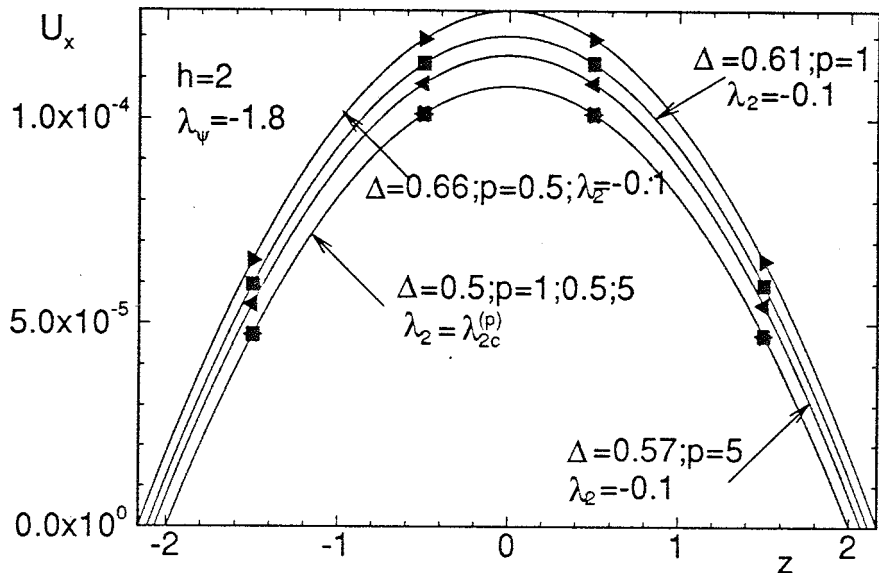
$$\lambda_{2c}^{(p=1)} = -8 \frac{(\lambda_\psi + 2)}{(\lambda_\psi + 8)} \stackrel{def.}{=} \lambda_{2c} \quad (2.32)$$

Notons que la valeur propre  $\lambda_{2c}$  se trouve dans l'intervalle de stabilité  $(-2, 0)$  indépendamment de la largeur du canal lorsque  $\lambda_\psi$  appartient à cet intervalle.

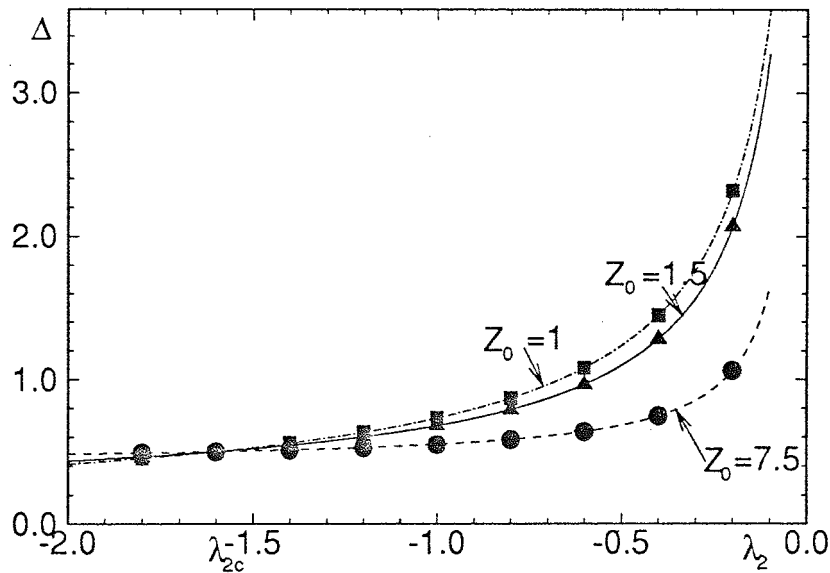
Pour l'écoulement de Poiseuille, les dérivées supérieures au second ordre sont nulles. Par conséquent, la série (2.27) fournit une solution exacte de cet écoulement. Nous devons donc retrouver numériquement la solution analytique (2.26) avec la position de la frontière  $\Delta$  déterminée par l'équation (2.31b) en fonction de la probabilité  $p$  imposée, au moins lorsque les valeurs propres satisfont le critère de stabilité. Nous avons vérifié ceci numériquement de deux façons. D'abord, nous avons retrouvé numériquement la solution théorique avec la frontière  $\Delta(p)$  donnée par (2.31b). Cela est représenté dans les Figures 4 et 5. Le canal large de quatre unités du réseau seulement est choisi pour montrer que la coïncidence est excellente. Les simulations présentées sur la Figure 4 sont faites pour la réflexion en arrière. Elles mettent en évidence la différence entre les profils obtenus par le modèle de Boltzmann avec les mêmes paramètres physiques quand les valeurs propres  $\lambda_2$  sont différentes. On voit aussi que la solution (2.31d) est bien vérifiée car les points numériques pour les probabilités  $p = 1, \frac{1}{2}$  et  $\frac{1}{5}$  coïncident avec le profil théorique pour  $\Delta = \frac{1}{2}$  (Figure 2-5) lorsque les valeurs propres  $\lambda_2$  sont égales à  $\lambda_{2c}^{(p)}$  (2.31d). D'autre part, on voit aussi la différence entre les profils obtenus par un mélange de réflexions avec des probabilités  $p$  différentes quand les valeurs propres sont les mêmes; la fonction  $\Delta(p)$  est donnée par la relation (2.31b).



Le second type de comparaison est celui de l'Appendice 2.A. Le calcul est fait pour la réflexion en arrière. La position exacte d'une frontière est interpolée avec l'aide des différences finies selon les points numériques. Les valeurs obtenues sont comparées ensuite sur la Figure 2-6 avec les prédictions (2.31b) pour  $\Delta p = 0$ . La coïncidence est complète même pour un pore large de trois unités de réseau (voir  $z_0 = 1$ ).



**Figure 2-5:** Comparaison des résultats numériques avec les prédictions théoriques (2.31) pour un écoulement de Poiseuille en fonction des valeurs propres  $\lambda_2$  et de la probabilité  $p$ . Largeur du canal  $H$ : 4 unités de réseau.



**Figure 2-6:** Comparaison entre les solutions numériques par rebond (symbols) et les prédictions théoriques (lignes continues) pour la localisation de la paroi solide  $\Delta$  dans l'écoulement de Poiseuille en fonction de la valeur propre  $\lambda_2$  et de la largeur du canal;  $\lambda_2 = \lambda_{2c} = -1.6$  correspond à la solution (2.32) avec  $\lambda_{\psi} = -0.5$  ( $\nu = 0.5$ ).

### 2.4.2. Application à l'écoulement de stagnation.

Quand nous avons obtenu la solution analytique (2.32) pour la valeur propre  $\lambda_{2c}$  qui permet d'annuler par le rebond la vitesse tangentielle exactement au milieu entre le dernier noeud liquide et le noeud voisin solide, nous avons espéré obtenir la même solution pour la vitesse normale au paroi. Nous avons testé cette idée sur l'écoulement de stagnation qui représente d'une certaine façon l'opposé de l'écoulement de Poiseuille. Le travail effectué sur le sujet se trouve dans Appendice 2.A; résumons les résultats pour ne pas reprendre intégralement son contenu.

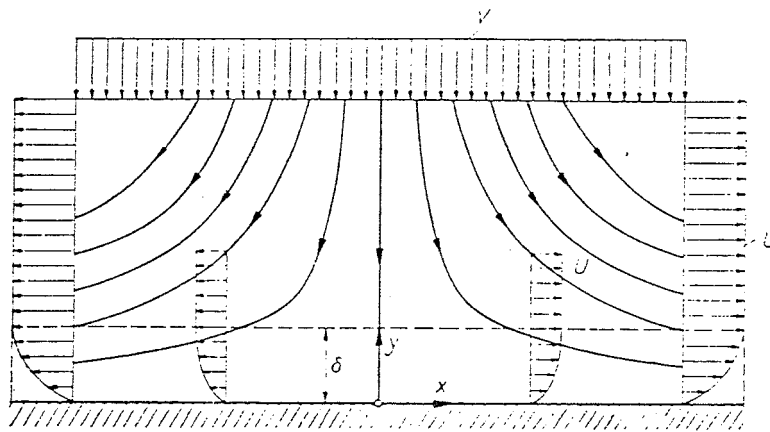


Figure 2-7: Ecoulement de stagnation (Schlichting, 1968)

L'écoulement de stagnation est schématisé dans la Figure 2-7. La solution théorique de similitude est également connue; elle est due à Hiemenz (voir par exemple Schlichting, 1968). Nous avons étudié ce cas par les mêmes méthodes que précédemment. Des particules au repos sont introduites de manière à avoir un facteur galiléen égal à 1. L'écriture des conditions aux limites est plus complexe car nous n'avons plus la symétrie de translation de l'écoulement de Poiseuille et car les termes du second ordre correspondants aux fluctuations de densité doivent être inclus dans le développement. On peut montrer que les conditions de rebond entraînent trois équations indépendantes. Nous supposons ensuite que la solution analytique est obtenue. Cela nous permet de déduire les relations nécessaires entre la vitesse et ses dérivées dans un noeud arbitraire du réseau dans le cas de l'écoulement de stagnation. La substitution de ces expressions dans les conditions aux limites impose des restrictions sur la fonction de similitude et sur ses dérivées dans un noeud proche de la paroi solide. On retrouve ensuite la position de la frontière réelle pour chaque composante de la vitesse d'après le développement de Taylor dans ce dernier noeud selon les restrictions imposées par le rebond. La condition qui porte sur la composante de la vitesse parallèle à la paroi est identique à celle obtenue pour l'écoulement de Poiseuille. Cette composante s'annule au milieu des noeuds du réseau lorsque la valeur propre  $\lambda_{2c}$  est choisie d'après (2.32). Ceci est également vrai pour la composante normale à la

paroi lorsque les fluctuations de densité sont négligeables.

Lorsque ces fluctuations ne sont pas négligeables, la composante normale de la vitesse s'annule en général en un point différent de la composante tangentielle. Cette déviation est analysée en détail dans l'Appendice 2.A. Pour terminer, nous montrons comment un choix adéquat des paramètres du modèle de Boltzmann comme les valeurs propres, le nombre de particules immobiles, ..., peut nous permettre d'annuler la composante normale de la vitesse au même point que la vitesse tangentielle.

Il est cependant évident que ces développements ne s'appliquent pas dans le cas général où nous ne pouvons pas assurer que les mêmes conditions d'adhérence sont vérifiées.

### 2.4.3. Application à l'écoulement de Poiseuille plan dans un canal incliné à $45^\circ$ .

L'écoulement de stagnation a donc permis de montrer qu'on ne pourrait espérer annuler toutes les composantes de la vitesse au même point par un choix judicieux des valeurs propres de la matrice de collision. Cependant, l'écoulement de Poiseuille plan dans un canal incliné à  $45^\circ$ , qui est beaucoup plus simple à étudier analytiquement, est aussi susceptible d'une solution exacte. Dans ce cas, la valeur propre  $\lambda_{2c, 45}$  qui annule les deux composantes de la vitesse au milieu des noeuds quand le rebond est appliqué est différente de la valeur propre  $\lambda_{2c}$  pour un canal non incliné. Ainsi, même dans le cas simple d'un écoulement établi, la surface solide où la vitesse du fluide s'annule, dépend de  $\lambda_2$  et de l'inclinaison du canal.

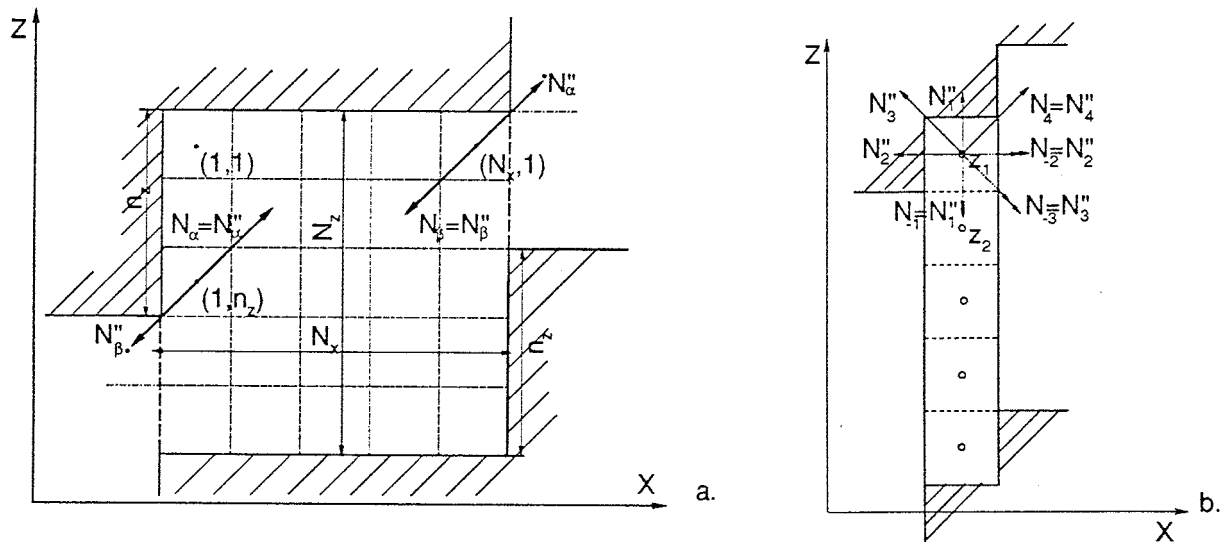
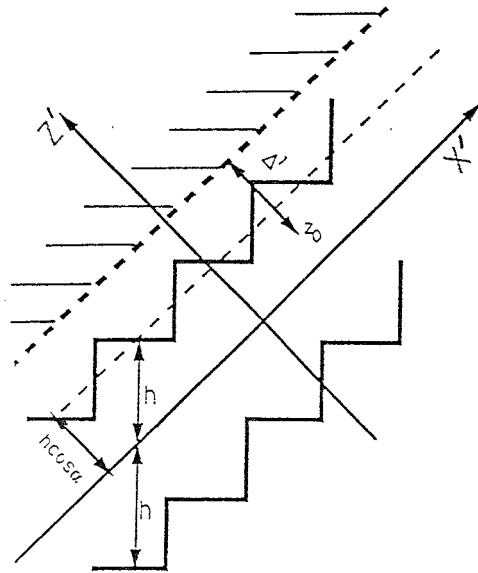


Figure 2-8: (a) Cellule de  $N_x * N_z$  unités de réseau ( $N_y = 1$ ) pour un canal 2D incliné avec  $\theta = \arctg \frac{n_z}{N_x}$ . Les conditions standards périodiques sont modifiées et illustrées par l'exemple des populations  $N_\alpha''$  et  $N_\beta''$ ; (b) Canal incliné avec  $\theta = 45^\circ$ .

Numériquement, lorsque on veut simuler une bande de liquide inclinée avec un angle  $\theta = \arctg \frac{n_z}{N_x}$ , il suffit d'avoir un parallélépipède et d'effectuer un changement des conditions périodiques selon une bande comme indiqué sur la Figure 2-8a; on obtient alors un escalier avec des marches de largeur  $N_x$  et de hauteur  $n_z$ . L'inclinaison à  $\theta = 45^\circ$  est un cas particulier qui peut être simulé par un seul parallélépipède de largeur égale à une unité de réseau (Figure 2-8b).

L'écoulement de Poiseuille plan dans un canal incliné avec  $\theta = 45^\circ$  (voir Figure 2-9) est un cas intéressant, parce que les populations perpendiculaires aux parois solides participent aux réflexions à la différence de l'écoulement non incliné et parce que la solution théorique pour la position exacte de la frontière peut être trouvée de la même façon que précédemment.



**Figure 2-9:** Ecoulement de Poiseuille plan dans un canal incliné avec  $\theta = 45^\circ$ .

Nous avons dans ce cas la configuration dite "*point dans un coin 2D*" (Figure 2-2b), où les populations  $N_{+4}$ ,  $N_{-5}$  se propagent, en accord avec les conditions de périodicité dans un canal incliné (voir Figure 2-8b), au lieu d'être réfléchies. Ainsi (voir Figure 2-2b, Figure 2-8b)

$$\begin{aligned} N_{+5}(z_0) &= N_{-5}(z_0) \\ N_{+4}(z_0) &= N_{-4}(z_0) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Seules les populations "droites"  $N_{+1}$  et  $N_{-2}$ , les populations "inclinées"  $N_{-3}$ ,  $N_{-6}$  et  $N_{-7}$ ,  $N_{+8}$  et  $N_{+9}$ , participent aux réflexions (Figure 2-2b). Le profil de vitesse supposé établi vérifie

$$v \frac{\partial^2 u_x}{\partial z'^2} = -F_{x'}, \quad -h' \leq z' \leq h', \quad x' = x \cos \alpha + z \sin \alpha, \quad z' = -x \sin \alpha + z \cos \alpha \quad (2.34)$$

Les mêmes commentaires que pour l'équation (2.25) pourraient être faits. Les populations sont données sous forme de la série (2.29) où le changement de notation suivant est fait:  $x \rightarrow x'$ ,  $z \rightarrow z'$ . La solution exacte pour la position de la frontière par la réflexion en arrière est donnée dans l'Appendice 2.A. Introduisons dans le coin de cet escalier (Fig.2-9) un mélange de réflexions avec une probabilité  $p$  par analogie avec les réflexions (2.15) pour un noeud près d'un plan solide. Généralisons ensuite les résultats pour le rebond au cas d'un mélange de réflexions spéculaire et en arrière.

Chacune des deux populations "droites"  $N_{+1}$  et  $N_{+2}$  représente la somme de deux populations "droites" égales; elles ne se distinguent que par la quatrième composante de la vitesse. D'après la forme des populations (2.29) ( $x \rightarrow x'$ ,  $z \rightarrow z'$ ) pour l'écoulement (2.34) nous avons les relations suivantes (voir Figure 2-2b)

$$\begin{aligned} N_{\pm 3} &\equiv d \\ N_{\pm 6} = N_{\pm 7} &= \frac{1}{2} N_{\pm 1} \stackrel{def.}{=} N_{\pm \alpha_1} \\ N_{\pm 8} = N_{\pm 9} &= \frac{1}{2} N_{\pm 2} \stackrel{def.}{=} N_{\pm \alpha_2} \end{aligned} \quad (2.35)$$

Par conséquent, on se trouve dans la même situation que pour le canal non incliné si les populations inconnues sont déterminées par la valeur  $p$  de la manière suivante

$$\begin{aligned} N_{-\alpha_1} &= p N_{+\alpha_1}'' + (1-p) N_{+\alpha_2}'' \\ N_{-\alpha_2} &= p N_{+\alpha_2}'' + (1-p) N_{+\alpha_1}'' \end{aligned} \quad (2.36)$$

Les populations  $N_{+\alpha_1}''$  et  $N_{+\alpha_2}''$  sont déterminées de la même façon (2.30). Par analogie avec la solution (2.32) pour un canal non incliné, la substitution du profil parabolique (2.34) avec une largeur arbitraire  $h' = z_0' + \Delta'$  dans la série pour  $N_{\pm \alpha_1}$ ,  $N_{\pm \alpha_2}$  et dans (2.30) donne la solution de l'équation (2.36) pour la probabilité  $p$

$$p = \frac{1}{1 + \Delta' p} \quad (2.37a)$$

avec

$$\Delta' p = \frac{1 - 2\sqrt{2}\Delta'}{6v} + \frac{\frac{\sqrt{2}}{4} \left[ \left( \frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\Delta'^2}{v} + \frac{1}{2v} (1 - 2\sqrt{2}\Delta') \right]}{3(z_0' + \frac{\sqrt{2}}{4})} \quad (2.37b)$$

Les frontières sont donc à la distance  $\Delta' = \frac{1}{2} \cos\theta = \frac{\sqrt{2}}{4}$  (voir Figure 2-9) si

$$\Delta' p = \frac{\frac{\sqrt{2}}{4} \left[ \left( \frac{1}{\lambda_2} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{8\nu} \right]}{3(z_0' + \frac{\sqrt{2}}{4})} \quad (2.37c)$$

Par conséquent, la probabilité  $p$  ne dépend pas de la largeur du canal pour  $\Delta' = \frac{\sqrt{2}}{4}$  si

$$\Delta' p = 0$$

et

$$\lambda_2 = \lambda_{2c45} \stackrel{def.}{=} -4 \frac{(\lambda_\psi + 2)}{(4 - \lambda_\psi)}, \quad -2 \leq \lambda_{2c45} \leq 0 \text{ si } -2 \leq \lambda_\psi \leq 0 \quad (2.37d)$$

Naturellement, nous retrouvons la solution de l'Appendice 2.A: les frontières se trouvent par rebond ( $p \equiv 1$ ) à la distance  $\Delta' = \frac{1}{2} \cos\theta = \frac{\sqrt{2}}{4}$  si la seconde valeur propre  $\lambda_2$  est donnée par (2.37d). Les solutions (2.37c) ont été vérifiées numériquement de la même manière que dans le paragraphe 2.4.1 pour l'écoulement non incliné.

## 2.5. Extensions et conclusions.

Nous voyons ainsi que la valeur propre  $\lambda_{2c45}$  est différente de  $\lambda_{2c}$  à l'exception de la limite  $\lambda_\psi = -2$ . Cela signifie que la position de la surface solide obtenue par les réflexions classiques dépend en réalité de l'écoulement près de la paroi. Les réflexions classiques assurent la position de la frontière au milieu des noeuds avec une erreur, au mieux, du second ordre par rapport à la grandeur caractéristique du système (voir formule (48) dans l'Appendice 2.A). Dans un milieu poreux, la taille d'un pore est de quelques unités du réseau. Par conséquent, l'erreur imposée est du premier ordre par rapport à la grandeur d'un pore. C'est pourquoi nous souhaiterions obtenir une condition d'adhérence avec la précision du troisième ordre par rapport à la grandeur caractéristique du système. D'après cette étude, la frontière ne peut pas être fixée en général avec une précision désirée par la matrice de collision lorsque les réflexions classiques sont appliquées.

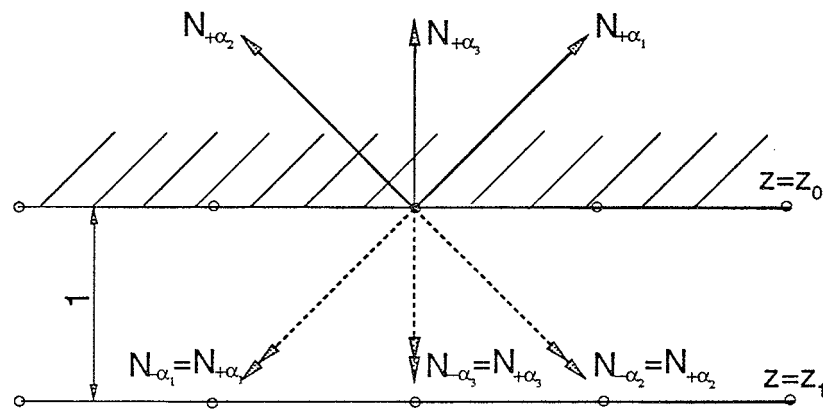
L'étape suivante la plus naturelle est d'essayer de modifier les réflexions classiques en restant dans le cadre du modèle, c'est-à-dire sans l'aide d'autres méthodes comme les différences finies, .... En fait à notre connaissance, un seul travail a été effectué sur cette question très récemment. Discutons-le dans ce chapitre afin d'illustrer une procédure de contrôle de conditions aux limites avec l'aide des développements obtenus. Une autre méthode que les réflexions classiques est définie dans Ziegler (1993) pour améliorer la précision dans le

cas de l'écoulement de Poiseuille sur une réseau FHP. Donnons une description de l'algorithme par une citation de Ziegler:

" The boundary is kept coincident with the first line of nodes, rather than being halfway between. For the boundary nodes, after the propagation step, the distribution functions of the directions complementary to those of arriving particles are set equal to the arriving distribution functions. This sets the normal velocity to zero. The remaining directions then have their distribution functions set to the average of the incoming directions, thus setting the tangential velocity to zero. During the collision phase, the collision operator is applied to the boundary nodes as well as to the fluid nodes, and the resulting distribution functions are then propagated normally in the next cycle."

Cet algorithme est basé sur l'idée que pour améliorer la précision des réflexions standards, il suffit de mettre la vitesse égale à zéro dans les points supposés solides. Malheureusement, la réalité est plus délicate. Pour avoir une vitesse en volume qui corresponde vraiment aux conditions aux limites imposées "à la main", comme dans l'algorithme considéré, le modèle doit pouvoir mettre les populations arrivant à la frontière sous une forme correcte en termes de la série en  $\varepsilon$ . Une procédure aux limites est donc "bonne" si elle ne perturbe pas les populations formées en volume. Un objectif des modifications des réflexions classiques est donc de forcer le modèle à sentir où nous souhaitons annuler la vitesse plutôt que mettre d'autorité cette vitesse égale à zéro. Pour illustrer cela, considérons cet algorithme du point de vue théorique. Proposons qu'il est appliqué dans les noeuds  $\mathbf{z}_0 = (x, y, \pm z_0)$  du réseau FCHC qui se trouvent sur les parois planes (voir Figure 2-10). Supposons que le profil parabolique (2.26) est établi par cette méthode; un écoulement quelconque peut être considéré de la même manière.

Alors les populations qui arrivent en  $\mathbf{z}_0$  et les populations qui sortent de  $\mathbf{z}_0$  pour  $\mathbf{z}_1 = (x, y, \pm(z_0-1))$  doivent être nécessairement de la forme (2.29) pour l'écoulement de Poiseuille.



**Figure 2-10:** Réflexions modifiées; les derniers noeuds du réseau  $z = \pm z_0$  sont supposés être sur les frontières solides.

Les populations qui partent des noeuds  $\mathbf{z}_1$  pour arriver en  $\mathbf{z}_0$  sont déterminées par l'équation de Boltzmann (2.1a) sous la forme

$$N_{+\alpha}(z_0) = N_{+\alpha}''(z_1) = d + S(z_1) C_{+\alpha} C_{+\alpha z}, \quad \forall \alpha \in I_0(\mathbf{z}_0) \quad (2.38a)$$

où

$$S(z_1) = d' \rho \left[ \pm u_x + \frac{1 + \lambda_\psi}{\lambda_\psi} \frac{\partial u_x}{\partial z} \pm \left( \frac{2(1 + \lambda_2)}{\lambda_2} + \frac{1}{2} \right) F_x \right], \quad z_1 = \pm(z_0 - 1) \quad (2.38b)$$

Considérons que la direction dite *complementary* (citation au-dessus) est la direction opposée; le cas spéculaire peut être étudié par analogie. Selon cette procédure, les populations  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0)$  deviennent égales aux populations arrivées  $N_{+\alpha}(\mathbf{z}_0)$ , tandis que les populations parallèles à la frontière deviennent:

$$N_i \equiv d \quad \text{si} \quad C_{iz} = 0 \quad (2.38c)$$

Ainsi, les populations dans un noeud  $\mathbf{z}_0$  peuvent s'exprimer sous la forme

$$N_i(\mathbf{z}_0) = d + S(z_1) C_{ix} C_{iz}, \quad \forall i = 0, \dots, 24. \quad (2.38d)$$

Par conséquent, la solution qui repart des noeuds  $\mathbf{z}_0$  vers le noeud  $\mathbf{z}_1$  est déterminée par l'équation de Boltzmann avec force extérieure (2.1a) comme

$$N_{-\alpha}(z_1) = d + (1 + \lambda_\psi) S(z_1) C_{-\alpha} C_{-\alpha z} + d' \rho F_x C_{-\alpha}, \quad \forall \alpha \in I_0(\mathbf{z}_0); \quad (2.39a)$$

L'application de l'équation de Boltzmann aux noeuds  $\mathbf{z}_0$  sans addition de la force extérieure peut être considérée par analogie.

Cependant les populations  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_1)$  doivent avoir la même forme (2.29) que les populations parties du noeud  $\mathbf{z}_1$  vers  $\mathbf{z}_0$ ; après substitution des expressions (2.26) dans (2.29) et (2.39a) avec (2.38b), on obtient l'équation pour la valeur de la vitesse dans les noeuds  $\mathbf{z}_1$  :

$$u_x(z_1) = -\frac{F_x}{2\nu} \left( \mp 2 z_1 - \frac{E}{3\lambda_\psi} \right), \quad E = \frac{2(2 + \lambda_\psi)}{\lambda_2} + \frac{5\lambda_\psi}{2} + \frac{1}{2}, \quad z_1 = \pm(z_0 - 1) \quad (2.39b)$$

Ensuite, par comparaison avec la solution de Poiseuille (2.26), on voit que le plan solide, imposé par algorithme, se trouve dans les noeuds  $z = \pm z_0$  ( $\Delta = 0$ ) si

$$E = 3\lambda_\psi \quad (2.40a)$$

ou

$$\lambda_2 = -4 \frac{(\lambda_\psi + 2)}{(2 - \lambda_\psi)} \quad (2.40b)$$



Ainsi l'analyse montre que pour l'écoulement de Poiseuille plan, l'algorithme est satisfaisant parce qu'il permet d'établir le profil parabolique, mais il possède le même défaut que les réflexions classiques (2.15): la position réelle de la frontière dépend de la largeur du canal et des valeurs propres à l'exception du cas particulier (2.40b). Par conséquent, la vitesse obtenue par cet algorithme peut être meilleure ou pire que celle obtenue par les réflexions standards en fonction des valeurs propres utilisées dans les deux cas.

La solution (2.40b) est vérifiée par le calcul numérique; la solution exacte (2.26) avec  $\Delta = 0$  est obtenue par l'algorithme de Ziegler quand la valeur propre  $\lambda_2$  satisfait la relation (2.40b).

En effet dans le cas de l'écoulement de Poiseuille, un moyen général d'obtenir la solution exacte pour n'importe quelles valeurs propres dans un canal de largeur arbitraire consiste en la définition numérique de la probabilité  $p$ . Nous avons trouvé plusieurs façons de faire ceci numériquement, mais toutes ces approches sont basées sur les différences finies, à un certain degré, localement dans les noeuds proches de la paroi. Cela est exposé dans le Chapitre 3 ainsi que les nombreux problèmes qui arrivent quand nous désirons généraliser ces méthodes à des écoulements arbitraires dans une géométrie quelconque. L'approche de Skordos (1993) sera aussi discutée car c'est, à notre connaissance, la première tentative déjà publiée d'imposer les conditions aux limites dans les modèles LBE avec l'aide des différences finies.

Notons enfin que l'algorithme de Ziegler ne conserve pas automatiquement la masse partant du noeud  $\mathbf{z}_0$  en l'écoulement général avec, par exemple, les dérivées tangentielles non nulles, à la différence des réflexions standards. Nous allons revenir sur ce point dans le Chapitre 3 où d'autres algorithmes que réflexions standards sont discutés.

## **Chapitre 3.**

**Conditions aux limites à la paroi solide: méthodes alternatives aux réflexions classiques.**

### 3.1. Introduction.

Tous les algorithmes proposés dans ce chapitre pour améliorer la précision des conditions aux limites sont basés sur le fait que la solution pour toutes les populations dans un noeud quelconque du réseau à un temps arbitraire  $t$  peut être développée sous forme de série en fonction de la densité  $\rho$  et de la vitesse  $\mathbf{u}$ , ainsi que de leurs dérivées spatiales, quand elles sont connues dans ce noeud. Ceci correspond à une méthodologie *inverse* de la méthodologie habituelle où on déduit les champs macroscopiques  $\rho$  et  $\mathbf{u}$  des populations obtenues par l'équation d'évolution.

On va distinguer deux groupes ou classes d'algorithmes, basés sur le développement des populations dans les noeuds "frontières"  $\mathbf{z}_0$ , où les populations ne peuvent pas être obtenues de manière standard selon l'équation de Boltzmann. Par les méthodes de classe A, décrites dans la Section 3.2, on estime d'abord la densité et la vitesse dans ces noeuds à partir des solutions obtenues dans les noeuds voisins; on développe ensuite avec l'aide des différences finies toutes les populations dans les noeuds "frontières"  $\mathbf{z}_0$  pour imposer ces solutions; on substitue alors les conditions aux limites sur  $\rho$  et  $\mathbf{u}$  dans les points solides au fur et à mesure que ces points apparaissent dans l'approximation par les différences finies des gradients des quantités macroscopiques dans les séries pour les populations. On distingue deux algorithmes, dits A.1 et A.2, dont la seule différence consiste dans les moyens utilisés pour approcher les champs inconnus dans les noeuds frontières.

Dans les algorithmes de classe B, introduits dans la Section 3.3, on développe aussi les populations inconnues sous forme d'une série, mais les quantités macroscopiques  $\rho$  et  $\mathbf{u}$ , qui interviennent dans ces développements, sont fonctions des populations connues et des populations inconnues elles mêmes; ainsi on obtient un système d'équations pour les populations inconnues dans chaque noeud  $\mathbf{z}_0$ . Dans des géométries particulières, ces équations peuvent être indépendantes pour chaque noeud "frontière". Ainsi les méthodes B n'utilisent pas d'approximations par différences finies pour  $\rho$  et  $\mathbf{u}$  dans les noeuds  $\mathbf{z}_0$  et on ne modifie pas les populations connues dans ces noeuds. Les conditions aux limites sont en général introduites dans les méthodes B de la même façon que dans les méthodes A: les valeurs limites sont substituées dans l'expansion de populations inconnues exprimée par les différences finies. Deux méthodes, appelées "*équations linéaires pour les populations*" (ou B.2) et "*réflexions généralisées*" (ou B.1), sont décrites.

La précision de ces méthodes dépend du nombre de termes pris en compte en fonction du paramètre  $\varepsilon$  dans la série ainsi que de l'ordre des différences finies utilisées. Nous nous attendons à ce que l'erreur dans les conditions aux limites soit du troisième ordre lorsque on

développe la série jusqu'au second ordre  $O(\varepsilon^2)$  et on applique les dérivées premières et secondes à l'ordre 2.

La comparaison entre certains algorithmes de chaque classe est donnée ensuite dans la Section 3.4 pour quelques écoulements particuliers. Nous considérons les écoulements de Poiseuille dans un canal non incliné et dans un canal incliné d'un angle de  $45^\circ$  par rapport aux axes du réseau. La solution exacte pour les probabilités des réflexions est retrouvée dans ces deux cas. On compare aussi pour l'écoulement en tube carré le débit théorique et les débits obtenus par rebond et par les algorithmes A.2, B.1 et B.2. L'écoulement de Couette obtenu par réflexions généralisées montre la possibilité qu'ont les algorithmes de simuler des solutions non stationnaires et des solutions avec frontières mobiles. L'influence sur la précision des termes d'ordres supérieurs qui ne sont pas inclus dans le développement de populations est démontrée sur l'écoulement de stagnation.

### 3.2. Algorithmes de classe A: une solution inverse avec estimation des champs inconnus par différences finies.

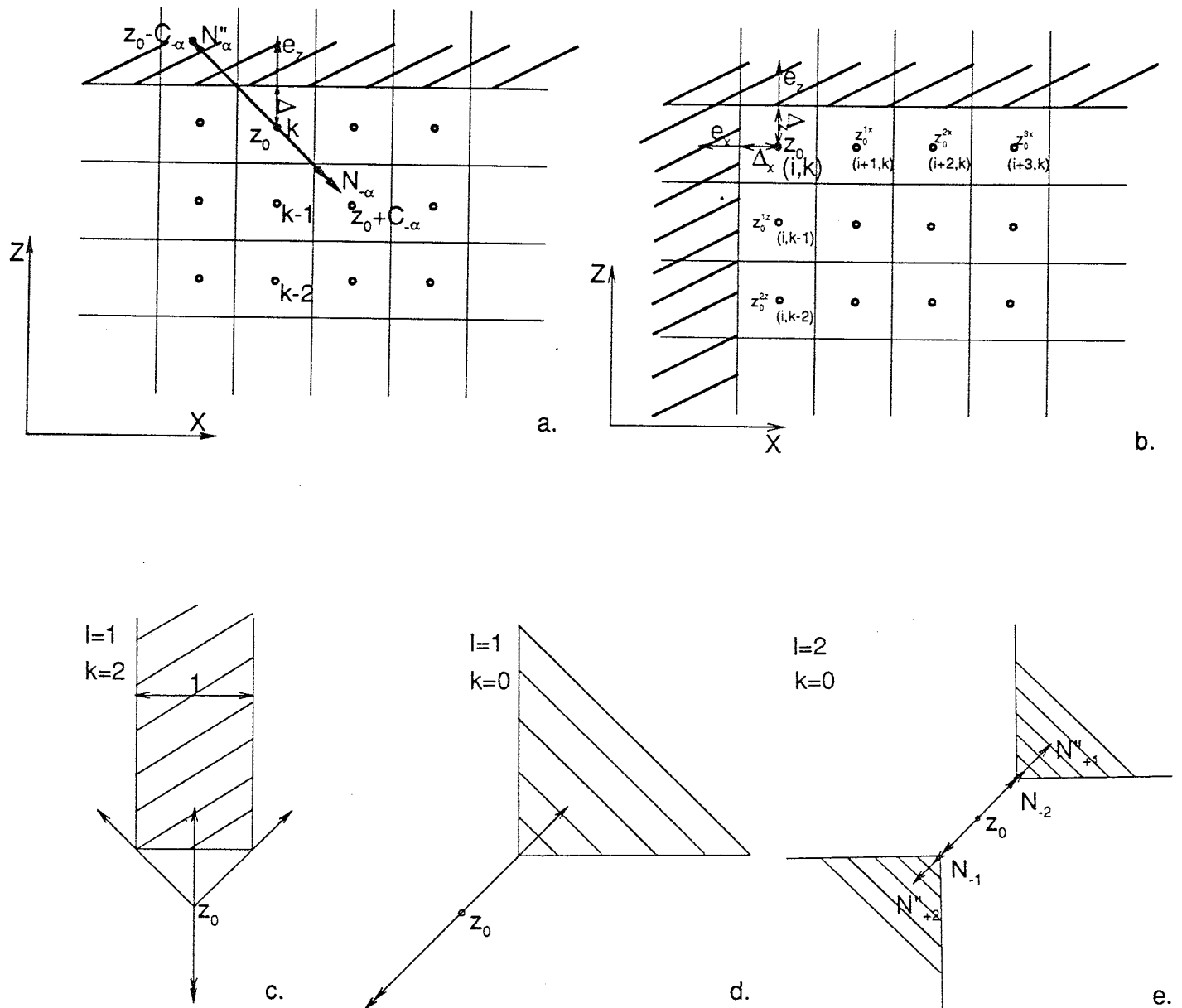
#### 3.2.1. La méthodologie inverse: généralités.

Soit l'ensemble  $Z$  des noeuds "frontières" du réseau  $\mathbf{z}_0$  où certaines populations  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$  avec la vitesse  $\mathbf{C}_{-\alpha}$  sont indéterminées par l'équation de Boltzmann car le point  $\mathbf{z}_0 - \mathbf{C}_{-\alpha} = \mathbf{z}_0 + \mathbf{C}_{+\alpha}$  appartient au solide (voir Fig.3-1a); l'indice  $\alpha$  varie dans l'intervalle  $I(\mathbf{z}_0) = \{1, \dots, l_0\}$  où  $l_0$  dépend de la géométrie locale. Les autres noeuds de la phase liquide  $\mathbf{z} \notin Z$  seront appelés "intérieurs".

Supposons la densité et la vitesse connues dans le noeud  $\mathbf{z}_0$ . Toutes les populations dans les noeuds du réseau  $\mathbf{z}_0$  peuvent s'exprimer avec l'aide des différences finies sous la forme (2.27)

$$N_i^{df}(\mathbf{z}_0, t) = N_i^0(\mathbf{z}_0, t) + \varepsilon[N_i^{10df}(\mathbf{z}_0, t) + N_i^{1F}(\mathbf{z}_0, t)] + \varepsilon^2 N_i^{2df}(\mathbf{z}_0, t) + O(\varepsilon^3), \quad i = 0, \dots, b_m \quad (3.1a)$$

où  $N_i^{kdf}$  signifie que les gradients de quantités macroscopiques qui se présentent dans le terme  $N_i^k$  d'ordre  $k$  sont estimés par les différences finies.



**Figure 3-1:** noeud "près d'un plan solide" et noeud "dans un coin 2D": notations pour l'application des différences finies (a,b); cas particuliers avec un nombre de réflexions  $l \leq 2$  et avec un nombre de réflexions "droites" égal à  $k$  (c-e).

Si le modèle est sans particules immobiles, les termes  $N_i^{10\ d.f}$  (2.4b) ont la forme explicite suivante:

$$N_i^{10\ d.f} = \frac{d'}{\lambda_{\psi}} \sum_{\delta, \beta \in \{x, y, z\}} \left[ \frac{\partial(\rho u_{\delta})}{\partial \beta} \right]^{d.f} Q_{i\delta\beta}, \quad i = 1, \dots, b_m \quad (3.1b)$$

Le terme  $N_i^2$  (2.28) peut être divisé en trois parties proportionnelles aux gradients de  $\rho \mathbf{u}$ , de  $\rho$  et de  $\rho \mathbf{F}$ ; par conséquent

$$N_i^2\ d.f = N_i^2(\rho \mathbf{u})\ d.f + N_i^2(\rho)\ d.f + N_i^2(\rho \mathbf{F})\ d.f \quad (3.1c)$$

avec

$$N_i^2(\rho \mathbf{u})\ d.f = d' \frac{v}{\lambda_2} \sum_{\delta, \beta, \gamma \in \{x, y, z\}} \left[ \frac{\partial^2(\rho u_{\delta})}{\partial \beta \partial \gamma} \right]^{d.f} T_{i\delta\beta\gamma} \quad (3.1d)$$

$$N_i^2(\rho)\ d.f = -3d' C_s^2 \frac{v}{\lambda_{\psi}} \sum_{\beta, \gamma \in \{x, y, z\}} \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial \beta \partial \gamma} \right]^{d.f} Q_{i\beta\gamma} \quad (3.1e)$$

$$N_i^2(\rho \mathbf{F})\ d.f = 3d' \frac{v}{\lambda_{\psi}} \sum_{\beta, \delta \in \{x, y, z\}} \left[ \frac{\partial(\rho f_{\delta})}{\partial \beta} \right]^{d.f} Q_{i\delta\beta}, \quad \mathbf{F} = \varepsilon \mathbf{f} \quad (3.1f)$$

Les particules immobiles peuvent être ajoutées de manière évidente aux développements (3.1b) - (3.1f) en utilisant les solutions générales (2.4) et (2.28); nous n'en tenons pas compte dans ce Chapitre afin de ne pas compliquer inutilement le problème.

Quand la densité et la vitesse sont définies par le modèle dans les points "intérieurs", les champs macroscopiques peuvent être développés dans les points liquides "frontières" par différences finies sous forme d'un développement de Taylor ou par résolution locale des équations macroscopiques.

Soit  $Z_v(\mathbf{z}_0)$  l'ensemble des noeuds  $\mathbf{z}$  voisins d'un noeud  $\mathbf{z}_0$  qui entrent dans les développements  $N^{10\ d.f}(\mathbf{z}_0)$ (3.1b) et  $N^{2\ d.f}(\mathbf{z}_0)$ (3.1d)-(3.1f). Pour la quantité macroscopique  $\psi = \{\rho(\mathbf{z}_0, t), \rho \mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t), \rho \mathbf{F}(\mathbf{z}_0, t)\}$ , les estimations des dérivées par les différences finies peuvent être données sous la forme linéaire:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial \psi}{\partial \beta}(\mathbf{z}_0) \right]^{d.f.} &= \sum_{\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0), \mathbf{z} \neq \mathbf{z}_0} \chi_{\beta}^{\mathbf{z}}(\mathbf{z}_0) \psi(\mathbf{z}) \\ \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial \beta \partial \gamma}(\mathbf{z}_0) \right]^{d.f.} &= \sum_{\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0), \mathbf{z} \neq \mathbf{z}_0} \chi_{\beta\gamma}^{\mathbf{z}}(\mathbf{z}_0) \psi(\mathbf{z}) \end{aligned} \quad (3.2a)$$

où  $\chi_{\beta}^z(\mathbf{z}_0)$  et  $\chi_{\beta\gamma}^z(\mathbf{z}_0)$  désignent les constantes avec lesquelles les quantités  $\psi(\mathbf{z})$  entrent dans les approximations par les différences finies des dérivées première et seconde dans un noeud  $\mathbf{z}_0$ .

Pour les noeuds  $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)$  ou  $\mathbf{z}_0$ , le terme  $\rho\mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_i^z(\mathbf{z}_0)$  désigne la contribution totale de la quantité de mouvement  $\rho\mathbf{u}(\mathbf{z})$  dans le développement  $N_i^{(0)df}(\mathbf{z}_0) + N_i^{(\rho\mathbf{u})df}(\mathbf{z}_0)$  de la population  $N_i(\mathbf{z}_0, t)$ . Donc d'après les relations (3.1b), (3.1d) avec (3.2a) on a pour  $\mathbf{z} = \mathbf{z}_0$  ou pour  $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)$

$$S_{i\delta}^z(\mathbf{z}_0) \stackrel{def.}{=} d' \left[ \frac{1}{\lambda_{\psi}} \sum_{\beta} \chi_{\beta}^z \mathcal{Q}_{i\delta\beta} + \frac{v}{\lambda_2} \sum_{\beta,\gamma} T_{i\delta\beta\gamma} \chi_{\beta\gamma}^z \right], \quad i = 1, \dots, b_m, \quad \delta = \{x, y, z\} \quad (3.2b)$$

Supposons pour la simplicité des explications que les termes  $N_i^{(\rho)}$  (3.1e) et  $N_i^{(\rho F)}$  (3.1f) sont négligeables par rapport à  $N_i^{(\rho u)}$  (3.1d). Par conséquent, les populations (3.1a) dans le noeud  $\mathbf{z}_0$  peuvent être données sous la forme

$$N_i^{df}(\mathbf{z}_0, t) = d + \rho\mathbf{u}(\mathbf{z}_0) \cdot \left[ d' \mathbf{C}_i + \mathbf{S}_i^{z_0}(\mathbf{z}_0) \right] - 0.5d' \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{C}_i + \sum_{\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)} \left\{ \rho\mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_i^z(\mathbf{z}_0) \right\} \\ + O(N_i^{(\rho)}) + O(N_i^{(\rho F)}) + O(|\mathbf{u}|^2), \quad i = 1, \dots, b_m \quad (3.2c)$$

Notons que l'ensemble  $\mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)$  des points voisins d'un noeud  $\mathbf{z}_0$  peut être défini avant le processus itératif selon la géométrie locale et les différences finies choisies. En plus, on peut créer la liste des coefficients  $\chi_{\beta}^z$ ,  $\chi_{\beta\gamma}^z$  et des tenseurs  $S_{i\delta}^z(\mathbf{z}_0)$  pour toutes les géométries possibles.

La précision de la méthode dépend du nombre de termes pris en compte en fonction du paramètre  $\varepsilon$  dans la série ainsi que de l'ordre des différences finies utilisées. Par exemple, pour éviter l'erreur du second ordre sur les conditions aux limites, on peut développer la série (3.1a) jusqu'au second ordre  $O(\varepsilon^2)$ ; les dérivées premières et secondes à l'ordre 2 sont données par les formules (3.A.1) - (3.A.8) de l'Appendice 3.A. Les différences finies non centrées (3.A.3), (3.A.4) et (3.A.7), (3.A.8) sont nécessaires lorsque un point solide  $\mathbf{r}_s$  entre dans les approximations des dérivées qui interviennent dans (3.1.b) - (3.1.f); on impose alors des conditions aux limites hypothétiques pour le champ  $\psi(\mathbf{r}_s)$ ,  $\psi = \{\rho, \rho\mathbf{u}\}$ :

$$f(\mathbf{r}_s) = \psi(\mathbf{r}_s). \quad (3.2d)$$

Par exemple, la condition d'adhérence à la paroi à la distance  $\Delta$  d'un noeud  $\mathbf{z}_0$  noté  $k$  (voir Fig.3-1a) se traduit par

$$f_{k\pm\Delta} \equiv 0. \quad (3.2e)$$

Cela est ensuite introduit dans les expressions (3.A.3) et (3.A.7).

Notons, que si la frontière est mobile et la pression est inconnue sur le solide, la condition aux limites pour l'impulsion est inconnue. Par conséquent, la méthode (3.2d) ne peut pas être utilisée.

Une méthode dite "*inverse mapping*" a été développée parallèlement par Skordos (1993) pour les modèles LBE avec une matrice de collision diagonalisée (voir les modèles (1.85)) et avec le paramètre de relaxation  $\tau$  sous la forme

$$\tau = \frac{1}{2} + \frac{4v\Delta t}{\Delta x^2}, \quad c = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (3.3a)$$

Le développement des populations est limité au premier ordre et seuls les termes  $\mathbf{N}^0$  et  $\mathbf{N}^{10 \text{ df}}$  sont inclus dans la série. Les noeuds  $\mathbf{z}_0$  sont situés sur la surface solide (sans décalage). Deux modèles aux limites sont ainsi décrits. Dans le premier, toutes les populations dans un noeud  $\mathbf{z}_0$ , inconnues ou connues par l'équation de Boltzmann, sont imposées "à la main" sous forme d'une série (3.1a)-(3.1b) où les champs macroscopiques sont estimés par différences finies. Dans le deuxième modèle, le terme  $\mathbf{N}^{10 \text{ df}}$  est ajouté à la solution standard en équilibre; cependant un paramètre de relaxation  $\tau$  (3.3a) égale à 1 est utilisé pour imposer les populations; par conséquent les deux modèles aux limites coïncident en réalité d'après l'équation de Boltzmann avec l'opérateur (1.85b).

La comparaison avec trois solutions analytiques, celles du tourbillon de Taylor, de l'écoulement de Hagen-Poiseuille et de la plaque oscillante est faite en fonction d'un pseudo-nombre de Mach

$$M_c = \Delta t / \Delta x. \quad (3.3b)$$

Naturellement, on conclut que la précision est meilleure quand la vitesse et ses dérivées sont imposées dans les derniers noeuds selon la solution analytique. On signale que l'application des différences finies aux frontières provoque des instabilités quand  $M_c$  est grand; les différences finies du premier ordre sont plus stables, mais les différences finies du second ordre sont plus précises pour les petites valeurs de  $M_c$ . Notons que dans tous les tests considérés par Skordos (1993), la densité dans les derniers noeuds a été obtenue selon l'équation d'état du modèle d'après les solutions analytiques pour la pression.



### 3.2.2. Algorithmes de classe A.

Les algorithmes de classe A sont analogues au modèle de Skordos (1993). On impose toutes les populations  $N_i^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $i = 1, \dots, b_m$ , sous la forme de l'approximation (3.2c) développée au second ordre. Considérons deux algorithmes de type A, dits A.1 et A.2, dont la seule différence est la façon d'estimer la vitesse et la densité dans les noeuds  $\mathbf{z}_0$  à partir des solutions établies dans les noeuds voisins.

#### •*Algorithme A.1*

Selon l'algorithme A.1 on estime  $\rho$  et  $\mathbf{u}$  dans les noeuds "frontières" avec l'aide d'un développement de Taylor. Par exemple, pour un noeud près d'un plan solide (Fig.2-2a dans Chapitre 2, Fig.3-1a), la solution peut être définie facilement par le développement de Taylor dans la direction normale à la paroi solide pour les champs  $\psi(\mathbf{z}_0) = \psi_k$ ,  $\psi = \{\rho, \rho\mathbf{u}\}$ :

$$\psi_k = \psi_{k\pm 1} \mp \partial_z^{d.f} \psi_{k\pm 1} + \frac{1}{2} \partial_{zz}^{2.d.f} \psi_{k\pm 1} + \dots \quad (3.4)$$

Ainsi la méthode A.1 ne prend pas en compte de conditions aux limites dans l'étape de l'estimation de la vitesse; ces conditions sont indiquées au modèle seulement dans le développement ultérieur (3.2c) des populations  $\mathbf{N}(\mathbf{z}_0, t)$ . Cela signifie, qu'on n'utilise pas les différences finies avec les valeurs limites pour l'approximation de champs  $\psi(\mathbf{z}_0)$  dans les relations du type (3.4). Au contraire, on utilise spécialement les différences finies avec les points qui appartiennent au solide quand on exprime les populations sous la forme (3.2c).

#### •*Algorithme A.2*

Néanmoins, on peut déterminer la densité  $\rho(\mathbf{z}_0, t)$  et la vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t)$  en prenant en compte les conditions aux limites d'après les solutions obtenues dans les noeuds voisins. Cela constitue un point spécifique de l'algorithme A.2. Par exemple, dans un noeud près d'un plan solide, le moyen le plus simple consiste à estimer les champs  $\psi(\mathbf{z}_0, t) = \psi_k$ ,  $\psi = \{\rho, \mathbf{u}\}$ , d'après les conditions aux limites développées jusqu'au second ordre (voir Figure 3-1a):

$$\psi_k \pm \Delta \partial_z^{d.f} \psi_k + \frac{1}{2} \Delta^2 \partial_{zz}^{2.d.f} \psi_k + \dots = \psi(\mathbf{z}_0 \pm \Delta \mathbf{e}_z), \quad \Delta > 0 \quad (3.5a)$$

où  $\psi(\mathbf{z}_0 \pm \Delta \mathbf{e}_z)$  désigne la valeur limite. On obtient donc d'après (3.5a) avec (3.2a) l'équation pour la valeur  $\psi_k$  sous la forme

$$\Psi_k = \frac{\Psi(\mathbf{z}_0 \pm \Delta \mathbf{e}_z) - \sum_{\mathbf{z} \in \mathcal{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)} \left\{ \pm \Delta \chi_z^z(\mathbf{z}_0) + \frac{1}{2} \Delta^2 \chi_{zz}^z(\mathbf{z}_0) \right\}}{1 \pm \Delta \chi_z^{z_0}(\mathbf{z}_0) + \frac{1}{2} \Delta^2 \chi_{zz}^{z_0}(\mathbf{z}_0)} \quad (3.5b)$$

où  $\mathcal{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)$  est l'ensemble des points voisins  $\mathbf{z}$  dont les champs sont utilisés pour les estimations (3.4) ou (3.5a). Par exemple, si  $\Delta = \frac{1}{2}$ , l'application des différences finies (3.A.2) et (3.A.9) pour les dérivées première et seconde dans la condition (3.5a) avec la condition d'adhérence  $\Psi(\mathbf{z}_0 \pm \Delta \mathbf{e}_z) = 0$ ,  $\Psi = \mathbf{u}$ , conduit à l'équation

$$\Psi_k = \frac{2}{3} \Psi_{k\pm 1} - \frac{1}{5} \Psi_{k\pm 2} \quad (3.5c)$$

L'application des différences finies du second ordre (3.A.2) et (3.A.6) donne d'après (3.5b)

$$\Psi_k = \frac{1}{16} \{13\Psi_{k\pm 1} - 6\Psi_{k\pm 2} + \Psi_{k\pm 3}\} \quad (3.5d)$$

Lorsque les champs dans un noeud  $\mathbf{z}_0$  sont estimés, on exprime les populations selon les développements (3.2c).

• *Quelques remarques sur les algorithmes A.1 et A.2*

Dans les deux cas, (3.4) et (3.5a)-(3.5b), on obtient les équations sous la forme générale pour estimer les champs inconnus:

$$\Psi_k = \sum_{\mathbf{z} \in \mathcal{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)} \gamma(\mathbf{z}) \Psi(\mathbf{z}) \quad (3.6)$$

où  $\gamma(\mathbf{z})$  sont des coefficients. Naturellement, l'ensemble  $\mathcal{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)$  et les coefficients  $\gamma(\mathbf{z})$  peuvent être aussi déterminés avant le processus itératif selon la géométrie locale et les différences finies choisies dans les approximations (3.4) ou (3.5a). Pour une approximation au second ordre des dérivées, on peut appliquer les différences finies non centrées (3.A.2) et (3.A.6) de l'Appendice 3.1 pour la dérivée première  $\partial_z^{d,f} \Psi$  et la dérivée seconde  $\partial_{zz}^{2,d,f} \Psi$ . Ainsi un pore doit contenir au moins 5 noeuds du réseau ( $k, k\pm 1, k\pm 2, k\pm 3, k\pm 4$ ) dans la direction perpendiculaire à la paroi pour l'algorithme A.1 ou 4 noeuds pour l'algorithme A.2; néanmoins, ce nombre peut être diminué si les termes d'ordre  $\varepsilon^3 \partial_{zzz}^3 \Psi_{k\pm 1}$  sont négligeables; la formule (3.A.9) peut être utilisée dans ce cas pour la dérivée seconde. Cependant dans les petits pores, les équations (3.6) pour des noeuds différents  $\mathbf{z}_0$  peuvent devenir dépendantes les unes des autres; on obtient alors un système d'équations linéaires pour déterminer les quantités macroscopiques inconnues dans les noeuds "frontières"  $\mathbf{z}_0 \in \mathcal{Z}$ .

Supposons que le noeud  $\mathbf{z}_0$  soit dans un coin (Fig.3-1b). Dans ce cas l'évaluation des champs d'après les noeuds voisins dans la direction normale est moins claire puisqu'une des deux directions (ou trois pour un coin dans 3D, voir Fig.2-2c) doit être choisie pour l'estimation des champs en  $\mathbf{z}_0$ . En principe, on peut choisir une direction quelconque pour l'estimation sous la forme (3.4) ou (3.5a) à condition que l'approximation soit faite avec la même précision que dans les points ordinaires "près d'un plan solide" (Fig.2-2a). En outre, dans ces configurations l'approximation par les différences finies pour le noeud  $\mathbf{z}_0$  dépend aussi de la solution dans certains points de l'ensemble  $\mathbf{Z}$  différents de  $\mathbf{z}_0$  (voir Fig.3-1b). Par conséquent, on peut essayer d'évaluer les champs dans les points près d'un plan avant l'évaluation des champs dans les coins ou on constitue un système d'équations linéaires pour tous les points dépendants de l'ensemble  $\mathbf{Z}$ .

Lorsqu'on s'intéresse à des solutions indépendantes du temps, on peut prendre les valeurs de la fonction  $\psi$  au temps  $t - 1$  par analogie avec les méthodes standards de différences finies. On va donc distinguer deux cas. Le cas dit *simultané* correspond à l'imposition de la solution  $\psi$  dans les points voisins  $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)$  au temps  $t$ , le cas *retardé* - au temps  $t - 1$ .

On a vu que la différence entre les méthodes A.1 et A.2 consiste seulement dans les moyens utilisés pour estimer  $\mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t)$  et  $\rho(\mathbf{z}_0, t)$ . La même ambiguïté est présente dans les deux méthodes lorsque le noeud  $\mathbf{z}_0$  est dans un coin. Signalons que, dans certaines géométries particulières schématisées sur les Figures 3-1d et 3-1e, l'estimation des champs par la méthode A.1 est plus efficace.

L'erreur dans les conditions aux limites est contrôlée facilement dans l'algorithme A.1 par la comparaison, par exemple, de la partie gauche de l'équation (3.5a) qui représente la condition aux limites, estimée au second ordre et effectuée par le modèle, avec la partie droite de cet équation qui représente la solution aux limites désirée. Cependant l'équation (3.5a) sera toujours satisfaite formellement par l'algorithme A.2 qui utilise cette relation pour déterminer les champs inconnus dans les points frontières. Néanmoins, les erreurs imposées dans les conditions aux limites peuvent être toujours contrôlées par estimation des dérivées supérieures obtenues près des parois solides.

Nous reviendrons encore aux algorithmes de cette classe dans le paragraphe 3.3.2 où les réflexions classiques sont comparées aux algorithmes de ce Chapitre. Les solutions numériques par les méthodes A et B sont discutées dans un certain nombre de cas particuliers dans la Section 3.4.

### 3.3. Algorithmes des classe B: une solution inverse sans estimation des champs inconnus par différences finies.

#### 3.3.1. Méthode des "équations linéaires pour les populations inconnues".

Chronologiquement, après avoir introduit les algorithmes de classe A, nous avons continué à chercher des méthodes plus efficaces, car dans des écoulements généraux les erreurs dues à l'approximation de la densité et de la vitesse par différences finies entraînent une mauvaise convergence des modèles LBE. Il est devenu progressivement clair que la convergence est d'autant meilleure que notre intervention dans la solution trouvée par LBE est moins importante. Par conséquent, on peut supposer que les modèles qui déterminent seulement les populations inconnues dans les noeuds  $\mathbf{z}_0$ , sans toucher aux populations obtenues par propagation, sont plus stables que les modèles qui imposent entièrement toutes les populations dans ces noeuds indépendamment des solutions pour les populations fournies par l'équation de Boltzmann.

La méthode des "*réflexions généralisées*" qui appartient à la classe B des algorithmes aux limites (voir dans la Section 3.3.3) a été développée avant la méthode des "*équations linéaires pour les populations inconnues*" décrite dans cette Section. Nous appelons algorithme B.1 la méthode des "*réflexions généralisées*"; de même B.2 correspond à la méthode des "*équations linéaires pour les populations inconnues*".

Soit  $\bar{I}(\mathbf{z}_0)$  l'ensemble des numéros de toutes les populations qui sont obtenues par propagation à partir des noeuds voisins liquides.

Ainsi on peut se demander si les populations indéterminées  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $\alpha \in \bar{I}(\mathbf{z}_0)$ , peuvent être déterminées comme si elles avaient été envoyées du noeud  $\mathbf{z}_0 - \mathbf{C}_{-\alpha}$  (voir Fig.3-1a) en respectant les conditions aux limites sur la surface solide et les populations connues  $N_{\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $\alpha \in \bar{I}(\mathbf{z}_0)$ . Cela signifie que ces populations doivent s'écrire sous la forme de la série (3.1) dans laquelle la densité  $\rho(\mathbf{z}_0, t)$  et la vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t)$  satisfont les conditions aux limites; de plus ces quantités doivent dépendre des populations inconnues de façon standard (voir (2.1d) et (2.5)):

$$\rho = \sum_{\alpha \in \bar{I}} N_{-\alpha} + \sum_{\alpha \in \bar{I}} N_{\alpha}, \quad (3.7a)$$

$$\rho \left( \mathbf{u} - \frac{\mathbf{F}}{2} \right) = \sum_{\alpha \in \bar{I}} N_{-\alpha} \mathbf{C}_{-\alpha} + \sum_{\alpha \in \bar{I}} N_{\alpha} \mathbf{C}_{\alpha}, \quad (3.7b)$$

Désignons les populations  $N_{-i}(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $i \in I(\mathbf{z}_0)$ , par les inconnues  $q_i$  dans chaque noeud  $\mathbf{z}_0$  de l'ensemble  $\mathbf{Z}$ ; de même les symboles  $\bar{q}_i$  remplacent les populations connues  $N_i(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $i \in \bar{I}(\mathbf{z}_0)$ ; la densité et la vitesse sont donc les fonctions suivantes des inconnues  $q_i$  d'après les relations (3.7)

$$\rho = \sum_{i \in I} q_i + \sum_{i \in \bar{I}} \bar{q}_i, \quad (3.8a)$$

$$\rho(\mathbf{u} - \frac{\mathbf{F}}{2}) = \sum_{i \in I} q_i \mathbf{C}_{-i} + \sum_{i \in \bar{I}} \bar{q}_i \mathbf{C}_i \quad (3.8b)$$

L'idée principale des méthodes B consiste en la présentation du problème aux limites sous forme d'un système d'équations en termes des populations inconnues  $\mathbf{q} = \{q_\alpha, \alpha \in I(\mathbf{z}_0)\}$  dans chaque noeud  $\mathbf{z}_0$ :

$$q_\alpha = N_{-\alpha}^0(\mathbf{q}) + \varepsilon[N_{-\alpha}^{10df}(\mathbf{q}) + N_{-\alpha}^{1F}(\mathbf{q})] + \varepsilon^2 N_{-\alpha}^{2df}(\mathbf{q}), \quad \alpha \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.9)$$

Lorsque les termes d'ordre  $O(|\mathbf{u}|^2)$  sont négligeables dans la solution en équilibre (2.3), la somme des termes  $N_{-\alpha}^0(\mathbf{q})$  (2.3) et  $\varepsilon N_{-\alpha}^{1F}(\mathbf{q})$  (2.4c) dépend de  $\mathbf{q}$  de la manière suivante:

$$N_{-\alpha}^0 + \varepsilon N_{-\alpha}^{1F} = \frac{1}{b} \left[ \sum_{i \in I} q_i + \sum_{i \in \bar{I}} \bar{q}_i \right] + d' \left[ \sum_{i \in I} q_i \mathbf{C}_{-i} \cdot \mathbf{C}_{-\alpha} + \sum_{i \in \bar{I}} \bar{q}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_{-\alpha} \right] + O(|\mathbf{u}|^2), \quad \alpha \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.10)$$

Les fonctions  $N_{-\alpha}^{10df}(\mathbf{q})$  et  $N_{-\alpha}^{2df}(\mathbf{q})$  peuvent être déduites des solutions classiques (2.4b) et (2.28); avec l'aide des relations (3.2a) et (3.2b) la somme des termes  $N_{-\alpha}^{10df}(\mathbf{q})$  et  $N_{-\alpha}^{2(\rho u)df}(\mathbf{q})$  est de la forme:

$$N_{-\alpha}^{10df}(\mathbf{q}) + N_{-\alpha}^{2(\rho u)df}(\mathbf{q}) = \sum_{i \in I} q_i (\mathbf{C}_{-i} + 0.5\mathbf{F}) \cdot \mathbf{S}_{-\alpha}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0) + \sum_{i \in \bar{I}} \bar{q}_i (\mathbf{C}_i + 0.5\mathbf{F}) \cdot \mathbf{S}_{-\alpha}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0) + \sum_{\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)} \{\rho \mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_{-\alpha}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0)\} \\ \alpha \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.11)$$

On substitue ensuite les expressions (3.10) et (3.11) dans la partie droite des équations (3.9); on obtient alors  $l_0$  équations dans chaque noeud  $\mathbf{z}_0$  pour  $l_0$  inconnues  $q_\alpha$ ,  $\alpha \in I(\mathbf{z}_0)$ .

Les relations suivantes sont utiles pour la présentation de ce système d'équations et pour les calculs numériques ultérieurs. Notons que pour une structure donnée de milieux poreux et en fonction de la force extérieure appliquée, les tenseurs suivants peuvent être évalués pour un noeud  $\mathbf{z}_0$  et pour les noeuds  $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)$  avant les itérations numériques:

$$E_{-\alpha i}^{1(z)}(\mathbf{z}_0) = \frac{d'}{\lambda_\psi} \sum_{\beta} \chi_{\beta}^z(\mathbf{z}_0) \sum_{\delta} Q_{-\alpha \delta \beta} (C_{i\delta} + 0.5 F_{\delta}) \quad (3.12)$$

$$E_{-\alpha i}^{2(z)}(\mathbf{z}_0) = d' \frac{V}{\lambda_2} \sum_{\beta, \gamma} \chi_{\beta \gamma}^z(\mathbf{z}_0) \sum_{\delta} T_{-\alpha \delta \beta \gamma} (C_{i\delta} + 0.5 F_{\delta}), \quad \forall \alpha \in I(\mathbf{z}_0), \quad \forall i = 1, \dots, b_m$$

Par conséquent, d'après les relations (3.11) les termes  $N_{-\alpha}^{10 df}(\mathbf{q})$  et  $N_{-\alpha}^{2(\rho u) df}(\mathbf{q})$  interviennent dans la série (3.9) sous la forme suivante:

$$N_{-\alpha}^{10 df}(\mathbf{q}) + N_{-\alpha}^{2(\rho u) df}(\mathbf{q}) = \sum_{i \in I} [q_i E_{-\alpha i}^{1,2(z_0)}](\mathbf{z}_0) + \sum_{i \in I} [\bar{q}_i E_{-\alpha i}^{1,2(z_0)}](\mathbf{z}_0) + \sum_{\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0)} \{\rho \mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_{-\alpha}^z(\mathbf{z}_0)\} \quad (3.13a)$$

où

$$E_{-\alpha i}^{1,2(z)}(\mathbf{z}_0) \stackrel{def.}{=} E_{-\alpha i}^{1(z)}(\mathbf{z}_0) + E_{-\alpha i}^{2(z)}(\mathbf{z}_0) \quad \forall i \in I(\mathbf{z}_0), i = 1, \dots, b_m \quad (3.13b)$$

Notons que si parmi les noeuds voisins  $\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0)$ , il y a des noeuds "frontières" de l'ensemble  $Z$ , la quantité de mouvement  $\rho \mathbf{u}(\mathbf{z})$  dans (3.13a) doit être remplacée par l'expression (3.8b) en fonction des inconnues  $\mathbf{q}(\mathbf{z})$  du noeud voisin  $\mathbf{z}$  et ainsi de suite. Par conséquent, dans un écoulement général, les équations (3.9) avec (3.10) et (3.13) fournissent un système d'équations linéaires pour les inconnues  $\{\mathbf{q}(\mathbf{z}_0), \mathbf{z}_0 \in Z\}$  quand les termes  $N_i^{2(\rho)}$  et  $N_i^{2(\rho F)}$  sont négligés (voir (3.1.f) et (3.1.e)); ces termes peuvent néanmoins être ajoutés exactement de la même façon que les termes  $N_{-\alpha}^{10 df}(\mathbf{q})$  et  $N_{-\alpha}^{2(\rho u) df}(\mathbf{q})$  précédemment. Par conséquent, si les champs dans les noeuds  $\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0)$  sont pris au temps  $t - 1$  (voir la méthode "retardée" dans la Section précédente), alors les équations (3.9) avec (3.10), (3.13) devient indépendantes pour chaque noeud  $\mathbf{z}_0$ .

Pour illustrer la méthode, considérons le cas "retardé". Dans ce cas, le vecteur inconnu  $\mathbf{q}$  est la solution des équations obtenues à partir de (3.9) avec (3.10) et (3.13):

$$\mathbf{L} \mathbf{q} = \mathbf{R}, \quad \mathbf{L} = \{(l_{ij}), i \in I(\mathbf{z}_0), j \in I(\mathbf{z}_0)\} \quad (3.14a)$$

où

$$l_{ij} = \delta_{ij} - s_{-i-j}; \quad (3.14b)$$

$$R_i = \sum_{k \in I} \bar{q}_k s_{-ik} + \sum_{\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0)} \{\rho \mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_{-i}^z(\mathbf{z}_0)\}; \quad (3.14c)$$

$$s_{-ik} = \frac{1}{b} + d' \mathbf{C}_{-i} \cdot \mathbf{C}_k + E_{-ik}^{1,2(z_0)}, \quad \forall k = 1, \dots, b_m, \quad \forall i \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.14d)$$

Rappelons que les populations  $N_i$ , dont la quatrième composante de la vitesse diffère, sont égales (voir Fig.1-3, Fig.2-1); par conséquent, on peut diminuer le nombre d'inconnues  $q_i$ .

Si on a  $k = 2m$  populations droites dans un noeud  $\mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z}$ , le nombre d'équations (et le nombre d'inconnues) dans le système (3.14a) devient

$$l(\mathbf{z}_0) = l_0(\mathbf{z}_0) - m(\mathbf{z}_0), \quad 0 \leq m \leq 6. \quad (3.15)$$

Par convention, on utilise les premiers numéros  $\alpha = 1, \dots, m$  pour les populations droites et les numéros  $\alpha = m+1, \dots, l$  pour les populations inclinées (voir Figure 2-2).

Notons que la matrice  $\mathbf{L}$  dépend de la géométrie de l'écoulement, des différences finies choisies et des paramètres du modèle; par conséquent, l'ensemble de toutes les matrices possibles dans une configuration quelconque peut être calculé avant les itérations du modèle LBE.

Notons aussi que les algorithmes de type B sont invariants, c'est-à-dire aucune des directions ne joue de rôle particulier à la différence des algorithmes de classe A; en outre ils peuvent être appliqués avec une précision désirée dans des pores plus petits car on n'a pas besoin d'estimer les champs dans les noeuds "frontières" par différences finies. Les algorithmes A et B sont schématisés dans le paragraphe suivant.

### **3.3.2. Modèle LBE avec les réflexions classiques ou avec les méthodes A et B aux limites: schémas numériques.**

Dans ce paragraphe nous ne proposons pas d'analyse comparative détaillée des codes numériques effectués pour chaque algorithme. Une telle analyse semble être prématurée dans l'étape actuelle de développement du problème quand on continue de tester l'efficacité numérique et la stabilité des modèles proposés aux limites. Certains exemples numériques sont décrits dans la Section 3.4 afin d'illustrer les avantages de ces algorithmes pour les écoulements simples et leurs possibilités réelles pour les écoulements généraux. Dans chaque version du modèle (algorithme A.1 ou A.2, B1 ou B.2, ...) ainsi que pour chaque type de données physiques du problème (densité constante ou non; les champs macroscopiques connus aux limites ou non; la force extérieure incluse ou non, ...) ces modèles demandent à être optimisés. Néanmoins, ils consomment tous beaucoup plus de mémoire et de temps de calculs que les réflexions classiques. La Table 3.1 rassemble les étapes séparées des modèles aux limites introduits et permet d'évaluer les efforts supplémentaires nécessaires.

**Table 3.1: Méthode LBE avec les réflexions classique et avec les algorithmes du type A et B.2 aux limites.**

	LBE	LBE+méthode A	LBE+méthode B.2
Construction et reconnaissance du milieu poreux	Reconnaissance des noeuds liquides, solides et frontières $\mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z}$ Construction des tableaux pour propagation, de l'ensemble $I(\mathbf{z}_0)$ pour les numéros des populations inconnues $N_i(\mathbf{z}_0)$		
	Tableaux pour les réflexions classiques	milieu poreux + différences finies: Définition de l'ensemble des points voisins $\mathbf{Z}_\gamma(\mathbf{z}_0)$ et des coefficients $\chi_\beta^z(\mathbf{z}_0)$ et $\chi_{\beta\gamma}^z(\mathbf{z}_0)$ pour $\beta, \gamma = \{x, y, z\}, \mathbf{z} \in \mathbf{Z}_\gamma(\mathbf{z}_0)$	
Introduction des paramètres physiques et des paramètres du modèle	Calcul de la matrice de collision		
		Calcul des tenseurs $S_{i\beta}^z(\mathbf{z}_0), \mathbf{z} \in \mathbf{Z}_\gamma(\mathbf{z}_0)$ et $\mathbf{z}=\mathbf{z}_0$ pour $i = 1, \dots, b_m$	pour $i \in I(\mathbf{z}_0)$
		Calcul des paramètres de l'équation A*: ensemble des noeuds voisins $\mathbf{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)$ et coefficients $\gamma(\mathbf{z})$ pour $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)$	Calcul des paramètres de l'équation B**: coefficients $s_{-ik}(\mathbf{z}_0), i \in I(\mathbf{z}_0), k = 1, \dots, b_m$
Itérations 1 - 4 par l'équation de Boltzmann	1. <i>Calculs des champs macroscopiques <math>\rho</math> et <math>\mathbf{u}</math></i>		
	2. <i>Addition de la force extérieure</i>		
	3. <i>Collision</i>		
	4. <i>Propagation selon conditions aux limites:</i>		
	Réflexions classiques	Résolution des équations A*; calcul $N_i(\mathbf{z}_0, t), i = 1, \dots, b_m$	Résolution des équations B** pour $N_i(\mathbf{z}_0, t), i \in I(\mathbf{z}_0)$

\*Equation A (voir éq. (3.6)):  $\psi_k = \sum_{\mathbf{z} \in \mathbf{Z}^{appr}(\mathbf{z}_0)} \gamma(\mathbf{z}) \psi(\mathbf{z})$  avec  $\psi(\mathbf{z}_0, t) = \psi_k, \psi = \{\rho, \mathbf{u}\}$

\*\*Equation B (voir éq. (3.14)):  $\mathbf{L} \mathbf{q} = \mathbf{R}, \mathbf{q} = \{N_i(\mathbf{z}_0, t)\}$   
avec  $\mathbf{L} = \{(l_{ij}), i \in I(\mathbf{z}_0), j \in I(\mathbf{z}_0)\}, l_{ij} = \delta_{ij} - s_{-i-j}; R_i = \sum_{k \in I} N_k s_{-ik} + \sum_{\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_i(\mathbf{z}_0)} \{\rho \mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}^z_i(\mathbf{z}_0)\}$



### 3.3.3. Généralisation des réflexions standards.

• *Restriction supplémentaire par la conservation locale de la masse partie*

Les méthodes introduites dans les sections précédentes pour déterminer les populations inconnues  $N_{-\alpha}$  ne prennent pas en compte les populations  $N_{\alpha}''$  (2.11), parties d'un noeud  $\mathbf{z}_0$ . Par conséquent, la masse  $M^+$  partie d'un noeud  $\mathbf{z}_0$

$$M^+ = \sum_{i \in I} N_i'' \quad (3.16)$$

n'est pas obligatoirement égale à la masse  $M^-$  des populations inconnues, imposées par les méthodes aux limites A ou B:

$$M^- = \sum_{i \in I} N_{-i} \quad (3.17)$$

Notons que les réflexions classiques (2.15) satisfont automatiquement la relation dans chaque noeud  $\mathbf{z}_0$

$$M^+ = M^- \quad (3.18)$$

ce qui signifie que la masse partie d'un noeud revient dans le même noeud.

Supposons que  $\mathbf{z}_0$  est un point frontière qui se trouve près d'un plan solide (Fig.2-2a, Fig.3-1a); la normale à la paroi est dans la direction  $z$ . Substituons les populations développées jusqu'au second ordre sous la forme standard (2.27) avec (2.3), (2.4), (2.28) et les populations  $N_{\alpha}''$ ,  $\alpha \in I(\mathbf{z}_0)$ , sous la forme (2.30) dans l'équation (3.18). On obtient alors une condition supplémentaire dans les noeuds  $\mathbf{z}_0$  pour un écoulement arbitraire en 3D. Lorsque l'équation de continuité est utilisée, cette restriction pour un noeud près d'un plan solide sur le réseau FCHC est de la forme

$$u_z(\mathbf{z}_0) + \frac{1}{3} \frac{\partial u_z}{\partial z}(\mathbf{z}_0) C_{+z} + O(\varepsilon^3) = 0, \quad p \approx \text{const} \quad (3.19)$$

où  $C_{+z} = \pm 1$  est la composante en  $z$  des vitesses des populations  $N_{\alpha}''$ ,  $\alpha \in I(\mathbf{z}_0)$ .

Ainsi une relation supplémentaire est fixée par la condition (3.18) sur la dérivée première de la vitesse normale indépendamment du type des réflexions et des dérivées secondes d'après l'analyse du second ordre. Si on développe cette analyse à des ordres supérieurs, on obtient les termes complémentaires avec les dérivées suivantes avec la restriction (3.19); par conséquent, la conservation locale de masse impose certaine restriction sur l'écoulement près des parois qui peut être reportée sur les dérivées d'ordres supérieurs. On néglige cette restriction quand les conditions aux limites qui conservent localement la masse partie sont appliquées.

•*Description préliminaire des réflexions généralisées (méthode B.1)*

Avant d'avoir introduit la méthode des "équations linéaires pour les populations inconnues" dans le paragraphe 3.3.1, nous avons développé une méthode dite des *réflexions généralisées*, qui est une extension des réflexions classiques (2.15). Selon cette méthode, nous proposons de chercher les populations inconnues  $N_{-\alpha}$  dans chaque noeud frontière sous la forme d'une combinaison linéaire de toutes les populations parties de ce noeud et arrivées sur la paroi par l'équation de Boltzmann. Par conséquent, nous pouvons déterminer à chaque itération les coefficients de ces combinaisons linéaires pour satisfaire au mieux les conditions aux limites en fonction de l'écoulement. Pour cela, nous allons agir de la même manière que dans la méthode de la section précédente pour les populations inconnues. On exprime avec l'aide des différences finies la solution pour les populations inconnues sous forme d'une série en fonction du paramètre  $\varepsilon$ . Cette solution dépend de la vitesse réelle dans le noeud et donc des coefficients (*probabilités*) des réflexions généralisées que nous cherchons. Ainsi on obtient un système d'équations linéaires pour les probabilités dans tous les noeuds où ces réflexions sont appliquées. Dans des géométrie particulières, ces équations peuvent être indépendantes pour chaque noeud.

Ainsi la méthode B.1 n'a pas d'avantages par comparaison avec l'algorithme B.2 sauf que cette première méthode est très démonstrative lorsque la condition de conservation locale de la masse est ajoutée. Dans ce cas, on voit comment les probabilités dans un mélange classique (2.15) peuvent être choisies à chaque itération pour assurer les conditions aux limites désirées. C'est pourquoi nous allons donner une description assez détaillée des réflexions généralisées; les solutions dans des cas particuliers sont utiles pour tester les codes numériques basés sur les méthodes de ce chapitre.

•*Réflexions généralisées*

Nous proposons d'étendre les conditions standards classiques de rebond ou de réflexion spéculaire et de chercher les populations  $N_{-\beta}$  sous la forme générale :

$$N_{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) = \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t), \quad \forall \beta \in I(\mathbf{z}_0), \quad \forall \mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z} \quad (3.20a)$$

avec les coefficients (ou probabilités) inconnus  $P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$ .

Notons que la réflexion classique en arrière donnée par l'équation (2.14) est un cas particulier de (3.20a) avec les coefficients

$$P_{\alpha}^{-\alpha} = 1, \quad P_{\alpha}^{-\beta} = 0, \quad \forall \beta \neq \alpha \quad (3.20b)$$

De plus un mélange de réflexions en arrière et de réflexions spéculaires pour les populations  $N_{\alpha_1}$  et  $N_{\alpha_2}$  (voir Figure 2-1) avec la probabilité  $p$  correspond à

$$p = P_{\alpha_1}^{-\alpha_1} = P_{\alpha_2}^{-\alpha_2}, \quad 1 - p = P_{\alpha_1}^{-\alpha_2} = P_{\alpha_2}^{-\alpha_1}, \quad (3.20c)$$

La masse totale est conservée par (3.20a) dans chaque noeud si une condition supplémentaire est imposée (voir la condition (3.18)):

$$\sum_{\beta \in I} \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t) = \sum_{\alpha \in I} N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t) \quad \forall \mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z} \quad (3.21)$$

Les  $l_0^2$  coefficients inconnus  $P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$  dans (3.20a) sont déterminés ensuite de manière à ce que les populations  $N_{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$  aient une forme correcte (3.1) lorsqu'elles sont développées en fonction du petit paramètre  $\varepsilon$ . On impose alors les conditions aux limites de la même manière que précédemment dans les développements des populations  $N_{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$ ,  $\beta \in I(\mathbf{z}_0)$ , exprimées avec l'aide des différences finies.

De plus la densité  $\rho(\mathbf{z}_0, t)$  et la vitesse macroscopique  $\mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t)$  dans les noeuds  $\mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z}$  sont reliées aux probabilités  $P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$  par les formules suivantes (voir (3.7)-(3.8) pour la comparaison avec B.2):

$$\rho(\mathbf{z}_0, t) = \sum_{i \in I} N_i + \sum_{\beta \in I} \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta} N_{+\alpha}'' \quad (3.22a)$$

$$\rho(\mathbf{u} - \frac{1}{2} \mathbf{F})(\mathbf{z}_0, t) = \sum_{i \in I} N_i \mathbf{C}_i + \sum_{\beta \in I} (\sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta} N_{+\alpha}'' ) \mathbf{C}_{-\beta}, \quad (3.22b)$$

On remplace ensuite par les expressions (3.22) toutes les valeurs macroscopiques dans les noeuds  $\mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z}$  et dans les noeuds voisins  $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}_v(\mathbf{z}_0)$  lorsque la densité  $\rho$  et la quantité de mouvement  $\rho \mathbf{u}$  dans ces points entrent dans l'approximation des termes  $N_i^0$ ,  $N_i^{10 \text{ df}}$ ,  $N_i^{2 \text{ df}}$  dans la série (3.1) pour les populations inconnues.

Ainsi les populations  $N_{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$  sont présentées sous les deux formes différentes (3.1) et (3.20a), qui doivent être égales, ce qui permet d'introduire les équations linéaires pour déterminer toutes les probabilités  $\mathbf{P} = \{ (P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t), \alpha \in I(\mathbf{z}_0), \beta \in I(\mathbf{z}_0)), \mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z} \}$ :

$$\sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t) = [N_{-\beta}^0(\mathbf{z}_0, t) + \varepsilon [N_{-\beta}^{10df}(\mathbf{z}_0, t) + N_{-\beta}^{1F}(\mathbf{z}_0, t)] + \varepsilon^2 N_{-\beta}^{2df}(\mathbf{z}_0, t)](\mathbf{P})$$

$$\forall \beta \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.23a)$$

Dans l'équation (3.23a) on substitue les valeurs des populations connues  $N_{+\alpha}''$  obtenues par l'équation de Boltzmann (2.11). On peut donner aussi les équations (3.23a) sous une forme un peu différente en remplaçant les populations  $N_{+\alpha}''$  par la série  $[N_{+\alpha}'' ]^{df}$  sous la forme (2.30) exprimée par différences finies

$$\sum_{\alpha \in I_0} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) \{ N_{+\alpha}^0(\mathbf{z}_0, t-1) - \varepsilon N_{+\alpha}^{1F} + [(1+\lambda_{\psi})\varepsilon N_{+\alpha}^{10}(\mathbf{z}_0, t-1) + \varepsilon^2(1+\lambda_2)N_{+\alpha}^{2(pw)}(\mathbf{z}_0, t-1) + \dots]^{df} \}$$

$$= [N_{-\beta}^0(\mathbf{z}_0, t) + \varepsilon [N_{-\beta}^{10df}(\mathbf{z}_0, t) + N_{-\beta}^{1F}(\mathbf{z}_0, t)] + \varepsilon^2 N_{-\beta}^{2df}(\mathbf{z}_0, t)](\mathbf{P}), \quad \forall \beta \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.23b)$$

Les populations  $[N_{+\alpha}'' ]^{df}$  sont déterminées à partir des champs au temps  $t-1$  qui ne dépendent donc pas des probabilités  $P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$ . Ainsi les équations (3.23a) et (3.23b) sont linéaires lorsque les termes d'ordre  $O(|\mathbf{u}|^2)$  sont négligeables.

Dans le cas (3.23b) les probabilités, déterminées à partir de cette équation, sont ensuite substituées dans la formule (3.20a) pour calculer les solutions définitives pour les populations inconnues. Dans le cas (3.23a) les populations inconnues coïncident avec l'approximation d'ordre  $O(\varepsilon^k)$  par les différences finies dans la partie droite de l'équation (3.23a) d'après la condition (3.20a). En effet, la différence entre les solutions par (3.23a) et (3.23b) est d'ordre  $O(\varepsilon^{k+1})$  si les populations  $[N_{+\alpha}'' ]^{df}$  sont développées jusqu'à l'ordre  $O(\varepsilon^k)$  de façon cohérente avec les différences finies et les termes  $N_{+\alpha}''^{k+1}$  négligés dans la série

$$N_{+\alpha}'' = [N_{+\alpha}'' ]^{df} + N_{+\alpha}''^{k+1} + O(\varepsilon^{k+1}) \quad (3.23c)$$

où l'erreur  $O(\varepsilon^{k+1})$  est due aux différences finies. Par conséquent, la méthode (3.23b) fournit les termes d'ordre  $O(\varepsilon^{k+1})$  dans la solution pour  $N_{-\alpha}(\mathbf{z}_0, t)$  sous la forme suivante

$$N_{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) = \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) [N_{+\alpha}'' ]^{df}(\mathbf{z}_0, t) + \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) N_{+\alpha}''^{k+1}(\mathbf{z}_0, t) + O(\varepsilon^{k+1}) \quad (3.23d)$$

où les probabilités sont trouvées par (3.23b). Par conséquent, ces solutions peuvent être plus exactes que par l'équation (3.23a) si les termes d'ordre  $O(\varepsilon^{k+1})$  sous la forme  $\sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) N_{+\alpha}''^{k+1}(\mathbf{z}_0, t)$  sont obtenus correctement dans (3.23d).

Evidemment, les méthodes B.1 et B.2 donnent les mêmes solutions pour les populations inconnues lorsque l'équation (3.23a) est utilisée dans les réflexions généralisées; pour le montrer, il suffit de remplacer les sommes  $\sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) N_{+\alpha}''(\mathbf{z}_0, t)$  par les inconnues  $q_{\beta}$  dans les expressions (3.22), (3.23a).

Au cours de ce chapitre, nous supposons que les équations pour les probabilités dans la méthode B.1 sont données par les formules (3.23b). Ces équations sont donc de la forme (voir (3.14) pour comparaison avec (B.2))

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) [N_{+\alpha}'' ]^{\text{d.f}} \\ &= \sum_{i \in I} \left( \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-i} N_{+\alpha}'' \right) \left[ b^{-1} + d' \mathbf{C}_{-i} \cdot \mathbf{C}_{-\beta} + (\mathbf{C}_{-i} + 0.5\mathbf{F}) \cdot \mathbf{S}_{-\beta}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0) \right] + \sum_{i \in I} \bar{q}_i \left[ b^{-1} + d' \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_{-\beta} + (\mathbf{C}_i + 0.5\mathbf{F}) \cdot \mathbf{S}_{-\beta}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0) \right] \\ & \quad + \sum_{\mathbf{z} \in \mathcal{Z}_v(\mathbf{z}_0)} \left\{ \rho \mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_{-\beta}^{\mathbf{z}}(\mathbf{z}_0) \right\}, \forall \beta \in I(\mathbf{z}_0) \end{aligned} \quad (3.24a)$$

ou sous la forme équivalente avec l'aide des relations (3.14d)

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t) [N_{+\alpha}'' ]^{\text{d.f}} \\ &= \sum_{i \in I} \left( \sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-i} N_{+\alpha}'' \right) s_{-\beta-i} + \sum_{i \in I} \bar{q}_i s_{-\beta i} + \sum_{\mathbf{z} \in \mathcal{Z}_v(\mathbf{z}_0)} \left\{ \rho \mathbf{u}(\mathbf{z}) \cdot \mathbf{S}_{-\beta}^{\mathbf{z}}(\mathbf{z}_0) \right\}, \forall \beta \in I(\mathbf{z}_0) \end{aligned} \quad (3.24b)$$

lorsque les conventions précédentes sont utilisées pour  $\mathbf{S}_{-\beta}^{\mathbf{z}}(\mathbf{z}_0)$  et  $\bar{q}_i$ .

#### • Analyse des équations imposées par les réflexions généralisées

Lorsque les populations "droites" sont remplacées par leur somme, nous avons selon la notation (3.15)  $l(\mathbf{z}_0)$  équations linéaires (3.23b) pour déterminer  $l^2(\mathbf{z}_0)$  inconnues dans chaque noeud. A l'exception des cas particuliers  $l = 1$  (voir Figures 3-1c et 3-1d), le nombre d'inconnues est toujours supérieur au nombre d'équations. Rappelons que par la méthode B.2, le nombre des variables est toujours égal au nombre d'équations; par conséquent, la méthode B.2 semble être plus efficace numériquement; néanmoins nous allons décrire la méthode des réflexions généralisées dans un but didactique et pour analyser les équations (3.23b) qui sont différentes des équations (3.14) utilisées dans la méthode B.2. Notons que pour  $l = 1$  la solution unique est la réflexion en arrière seulement si la condition (3.18) est exigée. Cependant, dans ce dernier cas, on a la même situation dans un écoulement quelconque: si la condition (3.18) est imposée sur les populations, les équations (3.14) ou (3.24) n'ont pas obligatoirement de solution.

Nous avons très souvent la latitude d'imposer des restrictions supplémentaires sur les probabilités pour étudier analytiquement les solutions et vérifier automatiquement la condition de la conservation de la masse partie. Ces restrictions, par exemple, peuvent consister à "normer" la matrice  $\mathbf{P}$  de manière à en faire une matrice de transition

$$\sum_{\beta \in I} P_{\alpha}^{-\beta} = 1, \quad \forall \alpha \in I \quad (3.25)$$

$$\sum_{\alpha \in I} P_{\alpha}^{-\beta} = 1, \quad \forall \beta \in I \quad (3.26)$$

Notons que les restrictions (3.25) appliquées aux équations (3.23b) entraînent l'égalité suivante qui est toujours valable

$$\sum_{\beta \in I} N_{-\beta}^{d.f.}(\mathbf{z}_0, t) = \sum_{\alpha \in I} N_{+\alpha}^{nd.f.}(\mathbf{z}_0, t) \quad (3.27)$$

En outre, on voit que la condition (3.18) est toujours vérifiée si les réflexions (3.20) avec (3.25) sont appliquées. On obtient a priori d'après les équations (3.23b) et (3.25)-(3.26)  $(3l-2)$  équations indépendantes avec  $l^2$  inconnues. Nous allons montrer que la solution de ces équations peut exister pour un écoulement quelconque dans le cas limite  $l = 2$  (Fig.3-1e) et pour les principales configurations géométriques qui sont "un point près d'un plan" (Fig.2-2a), "un point dans un coin 2D" (Fig. 2-2b) et enfin "un point dans un coin 3D" (Fig. 2-2c).

Par solution nous entendons une solution simplifiée lorsque certaines probabilités sont choisies égales à zéro a priori ou sont prises égales entre elles par raison de symétrie, par exemple. On verra donc que la solution choisie pour les probabilités dans ces trois configurations peut exister. Cela signifie qu'après substitution des probabilités sous une forme choisie qui satisfait les restrictions introduites (3.25)-(3.26) dans les équations générales (3.23), le nombre des variables est encore égal ou supérieur au nombre d'équations. Certainement, cela ne signifie pas qu'une solution existe toujours: pour certains écoulements, dits "dégénérés", ce système d'équations peut ne pas avoir de solution. Par exemple, on considère dans la Section 3.4 un écoulement de Poiseuille dans un canal incliné d'un angle de  $45^\circ$  qui peut ne pas satisfaire l'équation (3.23b) lorsque la même forme de solution que pour un point dans un coin 2D est choisie. Pour cet écoulement, cependant, la solution exacte pour les probabilités des équations (3.23b) avec conservation de la masse (3.18) est déterminée sans restrictions supplémentaires sur la forme de solution.

Les détails sur ces solutions dans les géométries principales se trouvent dans l'Appendice 3.B.

On ne peut pas donc conclure dans l'état actuel de nos travaux qu'une solution peut être obtenue pour les probabilités dans toutes les configurations géométriques possibles. Par conséquent, on ne propose pas d'utiliser systématiquement les solutions de l'Appendice 3.B; ces solutions ne peuvent être appliquées qu'après une analyse supplémentaire de l'écoulement. Pour cela, en principe, on peut toujours déterminer théoriquement, par les critères de résolution de système linéaire avec un nombre d'inconnues supérieur au nombre d'équations,

les cas dégénérés en fonction de l'écoulement et des paramètres du modèle. En pratique, cette analyse semble être trop exigeante d'autant plus qu'en général la solution pour les probabilités  $P_\alpha^{-\beta}(\mathbf{z}_0, t)$  dépend des solutions dans les noeuds voisins.

•*Exemple: un noeud avec deux populations inclinées*

Illustrons les restrictions (3.25)-(3.26) sur le cas très particulier d'un point avec deux réflexions inclinées où  $l = 2$ . Dans ce cas (voir Fig.3-1e), d'après les restrictions (3.25)-(3.26) la solution est

$$P_1^{-2} = 1 - P_1^{-1} = 1 - P_2^{-2} \quad , \quad P_2^{-1} = 1 - P_2^{-2} = 1 - P_1^{-1} \quad (3.28a)$$

La solution

$$p = P_1^{-1} = P_2^{-2} \quad (3.28b)$$

doit donc être déterminée par l'équation (3.23b). Alors la différence des équations (3.23b) pour  $N_{-1}^{\text{d.f}}$  et  $N_{-2}^{\text{d.f}}$  donne l'équation pour déterminer  $p$ :

$$[N_{-1}^{\text{d.f}}(\mathbf{z}_0, t) - N_{-2}^{\text{d.f}}(\mathbf{z}_0, t)](p) = (2p - 1)[N_{+1}^{\text{d.f}}(\mathbf{z}_0, t) - N_{+2}^{\text{d.f}}(\mathbf{z}_0, t)] \quad (3.29)$$

tandis que la somme est donnée par (3.27). Rappelons que dans la partie droite le terme  $[N_{+1}^{\text{d.f}}(\mathbf{z}_0, t) - N_{+2}^{\text{d.f}}(\mathbf{z}_0, t)]$  ne dépend pas des  $p$ , mais la vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{z}_0, t)$  dans la partie gauche de l'équation (3.29) est déterminée par la relation (3.22b) sous la forme

$$u_w = \frac{\sum_{i=1,2} N_i C_{iw} + (2p - 1)(N_1'' - N_2'') C_{-1w}}{\rho} + \frac{1}{2} F_w, \quad w = \{x, y, z\} \quad (3.30a)$$

où la densité est connue par la condition (3.18) de conservation de la masse

$$\rho = \frac{1}{b} \left\{ M^+ + \sum_{i \in I} N_i \right\} \quad (3.30b)$$

### 3.4. Cas particuliers.

#### 3.4.1. Comparaison avec une solution exacte pour les probabilités pour un écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné et dans un canal incliné à 45°.

##### •*Écoulement de Poiseuille plan dans un canal non incliné*

L'écoulement de Poiseuille plan est donné par l'équation (2.25). Pour cet écoulement, la solution exacte pour la position des frontières solides par les réflexions classiques (2.15) dépend des valeurs propres  $\lambda_\psi$  et  $\lambda_2$  ainsi que de la probabilité  $p$  d'un mélange de réflexion en arrière et de réflexion spéculaire (voir les solutions (2.31) - (2.32)). La condition d'adhérence est vérifiée à une distance 0.5 des derniers noeuds  $\pm z_0$  (voir Fig.2-3) lorsque ces valeurs propres et la probabilité  $p$  satisfont la relation (2.31c).

Quand le profil parabolique est établi, les populations sont données par (2.29); par conséquent, les populations  $N_{+\alpha}''$ , parties des noeuds  $\pm z_0$  sont de la forme:

$$N_{+\alpha}'' = d + d'\rho[u_x C_{+\alpha x} + \frac{(1+\lambda_\psi)}{\lambda_\psi} \frac{\partial u_x}{\partial z} C_{+\alpha x} C_{+\alpha z} + v \frac{(1+\lambda_2)}{\lambda_2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} (C_{+\alpha x} - 3 C_{+\alpha x} C_{+\alpha z}^2) + \frac{1}{2} F_x C_{+\alpha x}],$$

$$\alpha \in I(z_0) \quad (3.31a)$$

Car les développements (2.29) et (3.31a) fournissent les solutions exactes pour les populations si les termes d'ordre  $O(|u|^2)$  sont négligeables; la solution exacte peut être obtenue par les méthodes de ce chapitre lorsque la série (3.1) inclue les termes du second ordre  $N_i^2(\rho u)^{df}$  et lorsque les différences finies (3.A.4) et (3.A.8) sont utilisées pour imposer les conditions d'adhérence dans l'approximation de la dérivée première  $\partial_z u_x$  et de la dérivée seconde  $\partial_{zz}^2 u_x$ .

En principe, les méthodes de ce Chapitre permettent d'avoir une distance arbitraire  $\Delta$  entre les frontières solides et les noeuds  $z_0 \in Z$  en prenant les approximations appropriées (3.A.3) et (3.A.7) par différences finies pour les dérivées; le choix des conditions à la distance  $\Delta = \frac{1}{2}$  dans les tests numériques de ce travail ne sont qu'un exemple.

Nous avons vérifié que toutes les méthodes A.1-A.2 et B.1-B.2 assurent les solutions *exactes* (2.26) avec  $\Delta = \frac{1}{2}$  quand ils convergent.



### Algorithmes A.1 et A.2

Les tests numériques montrent que d'habitude la convergence par l'algorithme A.2 est meilleure que par l'algorithme A.1. On a comparé dans la Table 3.2 les deux méthodes dans un canal non incliné de  $1*1*5$  unités de réseau ( $h = 2.5$ ) quand les différences finies (3.A.2) et (3.A.9) sont utilisées dans les conditions (3.4) ou (3.5a) pour A.1 ou bien pour A.2. Notons que quand le profil parabolique est établi, l'approximation par la formule (3.A.9) pour la dérivée seconde est exacte parce que la dérivée troisième est nulle; cependant la formule (3.A.9) est du premier ordre quand la solution n'est pas encore établie.

Les relations (3.A.4) et (3.A.8) sont ensuite appliquées dans les développements (3.1) pour imposer les conditions aux limites à une distance  $\Delta = \frac{1}{2}$  des derniers noeuds  $\mathbf{z}_0$  du canal. La comparaison est faite pour l'algorithme A.1 ("simultané") et A.2 ("simultané"); les vitesses dans les points voisins pour l'approximation de vitesse dans les noeuds  $\mathbf{z}_0 = \pm z_0$  (voir Fig.2-3) sont donc prises au temps  $t$ ; la densité, constante dans ce cas pour tous les points de l'écoulement, est imposée dans les noeuds  $\mathbf{z}_0$ .

**Table 3.2.**

Intervalle de convergence pour la valeur propre  $\lambda_2$  en fonction de la méthode et de la valeur propre  $\lambda_\psi$  pour l'écoulement de Poiseuille dans un canal de largeur égale à 5 unités du réseau. Les valeurs propres examinées  $\lambda_\psi$  et  $\lambda_2$  parcourent l'intervalle  $\{-1.9; -1.7; \dots; -0.1\}$ .

$\lambda_\psi$	-1.9	-1.7	-1.5	-1.3	-1.1
A.1	$\emptyset$	$\{-0.1\}$	$\{-0.3\}$	$[-0.5, -0.3]$	$[-0.7, -0.5]$
A.2	$[-1.9, -0.1]$	$[-1.9, -0.1]$	$[-1.9, -0.1]$	$[-1.9, -0.1]$	$[-1.9, -0.3]$

$\lambda_\psi$	-0.9	-0.7	-0.5	-0.3	-0.1
A.1	$[-1.1, -0.5]$	$[-1.5, -0.7]$	$[-1.5, -0.9]$	$[-1.3, -1.1]$	$\emptyset$
A.2	$[-1.9, -0.3]$	$[-1.9, -0.3]$	$[-1.9, -0.5]$	$[-1.9, -0.7]$	$[-1.9, -1.1]$

Ainsi on peut constater que la convergence de l'algorithme A.1 n'est pas bonne même dans le cas où il existe une vitesse tangentielle dans l'écoulement; on voit aussi que la convergence est d'autant plus mauvaise pour l'algorithme A.2 que  $\frac{\lambda_\psi}{\lambda_2}$  est petit ( $\left| \frac{v}{\lambda_2} \right|$  est grand);

ceci est dû probablement à l'accroissement du terme du second ordre  $N_{-\alpha}^{(2)d.f} \propto \frac{v}{\lambda_2}$ . Notons que la convergence est encore pire si des instabilités numériques supplémentaires surgissent à cause de l'approximation de la densité par différences finies .

Notons pour rappel, que l'algorithme du rebond converge vers le profil parabolique pour toutes ces valeurs propres mais que la largeur réelle du canal  $h$  dans ce cas est  $h = z_0 + \Delta$  (voir Fig.2-3), où  $\Delta$  est définie par la formule (2.31b) avec  $\Delta p \equiv 0$ .

### *Algorithmes B.1 et B.2*

Considérons en détail la méthode B.1 des réflexions généralisées qui permet d'obtenir la solution exacte (2.26) pour n'importe quelle valeur propre grâce à la définition des probabilités en fonction de l'écoulement.

Notons tout d'abord que dans le cas d'un écoulement de Poiseuille non incliné, les derniers noeuds du réseau  $\pm z_0$  sont de type "point près d'un plan" (Fig.2-2a), mais parmi les 5 populations  $N_1 - N_5$  inconnues dans ce cas, seulement deux populations  $N_2$  et  $N_3$  sont différentes de la solution triviale

$$N_i \equiv d \quad (3.32a)$$

Il est clair que la solution (3.23b) pour les populations triviales  $N_1$ ,  $N_4$  et  $N_5$  est satisfaite par les réflexions en arrière

$$N_{-\alpha} = N_{+\alpha}'' \quad \text{pour } \alpha \in \{1,4,5\} \in I(\pm z_0) \quad (3.32b)$$

D'après la forme des populations (2.29) sur les solutions établies ou selon la géométrie d'écoulement, la masse  $M^+$  est évidemment égale à la masse  $M^-$  dans l'écoulement de Poiseuille. Il nous reste donc seulement à définir les populations inconnues  $N_2$  et  $N_3$  qui sont de la forme suivante d'après les relations (3.20a) et (3.32b):

$$\begin{aligned} N_2 &= P_2^{-2} N_{+2}'' + P_3^{-2} N_{+3}'' \\ N_3 &= P_2^{-3} N_{+2}'' + P_3^{-3} N_{+3}'' \end{aligned} \quad (3.33)$$

Les probabilités dans la relation (3.33) doivent satisfaire la condition de conservation locale de masse (3.21). Par conséquent, la solution des équations (3.23b) pour les probabilités a la même forme qu'un mélange des probabilités (2.15) si nous déterminons la solution de la manière suivante:

$$P_3^{-3} = P_2^{-2} = 1 - P_2^{-3} = 1 - P_3^{-2} \stackrel{def.}{=} p \quad (3.34)$$

Notons que les probabilités (3.34) satisfont automatiquement les restrictions complémentaires (3.25)-(3.26). Donc les équations générales (3.23b) s'écrivent

$$[N_2^{df} - N_3^{df}](p) = (2p - 1)(N_{+2}^{''df} - N_{+3}^{''df}) \quad (3.35a)$$

ou, selon (3.24a), sous la forme:

$$(2p - 1)\{(N_{+2}^{''df} - N_{+3}^{''df}) - 2(N_{+2}^{''} - N_{+3}^{''})C_{-2x}(d'C_{-2x} + S_{-2x}^{z_0}(\mathbf{z}_0))\} \\ = 2 \left[ \left\{ \sum_{i \in I} \bar{q}_i C_{ix}(d'C_{-2x} + S_{-2x}^{z_0}(\mathbf{z}_0)) + 0.5\rho F_x S_{-2x}^{z_0}(\mathbf{z}_0) \right\} + \sum_{\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0)} \left\{ \rho u_x(\mathbf{z}) \cdot S_{-2x}^z(\mathbf{z}_0) \right\} \right] \quad (3.35b)$$

où  $S_{-\beta x}^{z_0}(\mathbf{z}_0)$  désigne la composante  $x$  du vecteur  $S_{-\beta}^{z_0}(\mathbf{z}_0)$ . Par exemple, lorsque les différences finies (3.A.4) et (3.A.8) sont utilisées, nous avons pour l'écoulement de Poiseuille

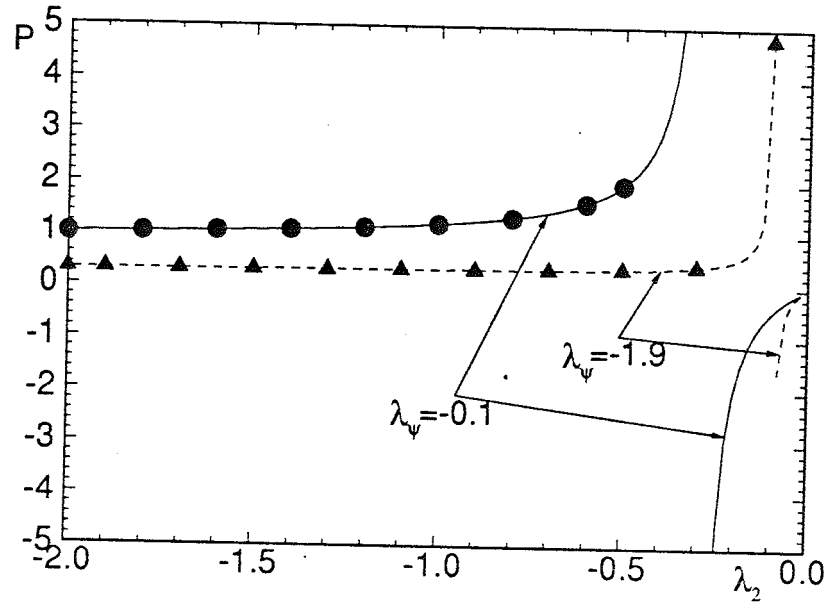
$$S_{-\beta x}^{z_0}(\mathbf{z}_0) = d' \left( \frac{1}{\lambda_\psi} + \frac{8\nu}{\lambda_2} \right) C_{-\beta x}, \quad \beta = \{2, 3\} \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.35c)$$

et pour les points voisins  $\mathbf{z} \in Z_v(\mathbf{z}_0)$  avec coordonnée  $z = \pm(z_0 - 1)$

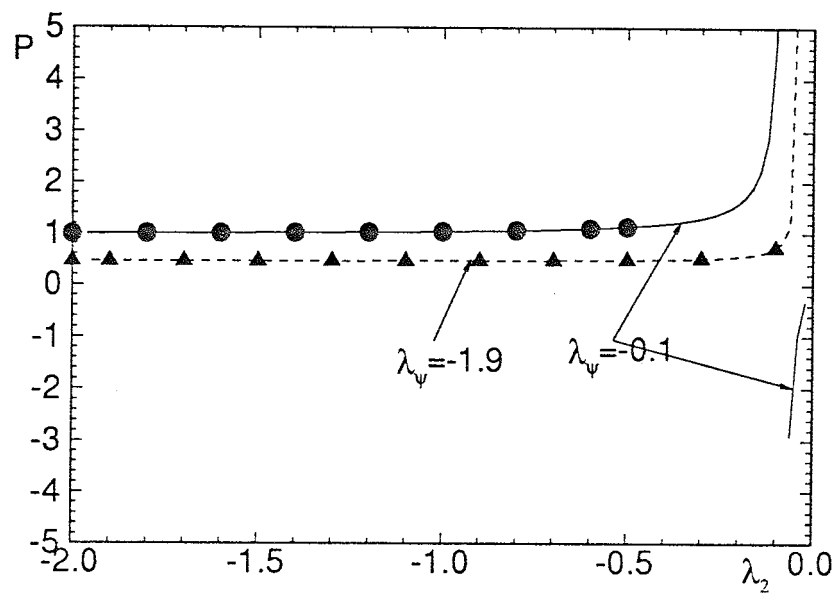
$$S_{-\beta x}^z(\mathbf{z}_0) = d' \left( \frac{1}{3\lambda_\psi} - \frac{8\nu}{3\lambda_2} \right) C_{-\beta x}, \quad \beta = \{2, 3\} \in I(\mathbf{z}_0) \quad (3.35d)$$

Nous avons vérifié ce point numériquement. La solution exacte pour la probabilité  $p$  (2.31a)-(2.31c) est obtenue par l'équation (3.23b) sous la forme (3.35b) lorsque la procédure converge. Un exemple sur la Fig.3-2a présente les résultats dans un canal de  $1*1*4$  unités de réseau, c'est-à-dire avec  $z_0 = 1.5$ ,  $h = 2$ . Dans ce cas les équations (3.35b) avec (3.35c)-(3.35d) sont indépendantes pour les deux noeuds frontières. Le calcul numérique a été fait dans l'intervalle  $-1.9 \leq \lambda_2 \leq -0.1$  et donc l'absence de points numériques pour certaines réflexions signifie que l'algorithme n'a pas convergé. Comme précédemment pour les algorithmes A.2, on peut constater que la convergence est d'autant plus mauvaise que  $\left| \frac{\nu}{\lambda_2} \right|$  est grand.

Pour comparer la convergence, nous avons fait varier les valeurs propres dans le même intervalle pour la méthode B.2. L'équation (3.14a) sous la forme générale a été résolue pour déterminer les populations inconnues; donc les deux quantités macroscopiques, la densité et la vitesse, sont définies dans les noeuds  $\mathbf{z}_0$  avec  $z = \pm z_0$  selon les solutions des équations (3.14). Les solutions exactes sont obtenues pour toutes les valeurs propres examinées.



(a)



(b)

**Figure 3-2:** Comparaison de la solution théorique pour les probabilités des réflexions avec les solutions numériques par les réflexions généralisées (méthode B.1 "simultané") pour l'écoulement de Poiseuille dans un canal non incliné (a) et dans un canal incliné (b). La dimension du canal en  $z$  est de 4 unités de réseau.

Néanmoins l'algorithme B.2 coïncide avec les réflexions généralisées sous la forme (3.23a). Donc les solutions pour les grandes viscosités avec les probabilités négatives (voir Fig. 3-2a) peuvent aussi être obtenues par les réflexions généralisées si l'équation (3.23a) est exploitée au lieu de l'équation (3.23b). Cette différence est probablement due au fait que l'équation (3.23a) utilise les populations parties  $N_{+\alpha}$  sans approximation, tandis que l'équation (3.23b) utilise l'approximation selon l'équation de Boltzmann pour ces populations; cela peut introduire des instabilités quand l'écoulement est encore loin du profil parabolique.

On voit ainsi que la convergence est bien meilleure par les méthodes qui ne changent pas les populations arrivées dans les derniers noeuds par la propagation selon l'équation de Boltzmann, c'est-à-dire par les méthodes B. Cette conclusion est vraie pour tous les écoulements considérés dans ce travail.

**•Ecoulement de Poiseuille plan dans un canal incliné à 45°**

Rappelons que nous avons étudié dans le Chapitre 2 (Section 2.4.3) un écoulement de Poiseuille dans un canal incliné à 45°(voir Fig.2-9); la cellule avec changement de conditions aux limites le long de l'écoulement est schématisée sur la Fig.2-8b. La distance  $\Delta'$  entre le dernier noeud du réseau  $\mathbf{z}_0'$  et la position réelle où la vitesse tangentielle  $u_x$  s'annule est déterminée par la formule (2.37b) en fonction de la probabilité  $p$  du mélange de réflexions, des valeurs propres  $\lambda_2$  et  $\lambda_\psi$  et de la largeur caractéristique du canal  $z_0'$ ; en particulier, la distance

$$\Delta' = \frac{1}{2} \cos\alpha = \frac{\sqrt{2}}{4} \stackrel{def.}{=} \Delta_0' \quad (3.36)$$

peut être obtenue quand ces paramètres sont liés entre eux selon (2.37c); dans ce cas, la valeur propre critique  $\lambda_{2c}$  dépend de la largeur du canal  $H'$ , de la valeur propre  $\lambda_\psi$  et de la probabilité  $p$ . La solution pour  $\lambda_{2c}$  ne dépend plus de  $H'$  seulement pour la réflexion en arrière (voir (2.37d)).

Par conséquent, cet écoulement donne encore une possibilité de comparer les solutions pour la vitesse par les algorithmes A et B avec la solution exacte ainsi que de vérifier les probabilités déterminées par les réflexions généralisées avec les solutions analytiques (2.37). Rappelons que dans ce cas nous avons des populations réfléchies de trois types différents: d'abord, les populations  $N_{\pm 3}$  de la vitesse perpendiculaire à la vitesse de l'écoulement (voir Fig.2-8b); ensuite les populations "droites"  $N_{\pm 1}$  et "inclinées"  $N_{\pm 6}$ ,  $N_{\pm 7}$  avec une composante  $z$  non nulle de la vitesse  $C_i$  (voir configuration "coin 2D" sur la Fig.2-2b où  $N_{\pm 1}$  représente la

somme de deux populations "droites" égales) et par analogie les populations  $N_{\pm 2}$  et  $N_{\pm 8}$ ,  $N_{\pm 9}$  avec une composante  $x$  non nulle de la vitesse.

Les solutions pour les populations dans le cas d'un profil parabolique dans un canal incliné sont données par les mêmes formules (2.29) que pour un canal non incliné si on remplace formellement  $x \rightarrow x'$ ,  $z \rightarrow z'$ . Pour être proche de la procédure numérique, on peut donner cette solution sous la forme standard dans les coordonnées cartésiennes avec  $u_x \equiv u_z$ ,  $\partial_x u_z = -\partial_z u_x$ ,  $F_x \equiv F_z$ :

$$N_{\pm 3} \equiv d; \quad (3.37a)$$

$$N_{\pm \alpha_1} = d + d' \rho \left\{ \left( u_z - \frac{1}{2} F_z \right) C_{\pm \alpha_1, z} + \frac{1}{2 \lambda_\psi} \left( \frac{\partial u_z}{\partial z} - \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) + \left[ \frac{v}{\lambda_2} \left( \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} \right) \right] C_{\pm \alpha_1, z} \right\} \quad (3.37b)$$

pour

$$N_{\pm 6} = N_{\pm 7} = \frac{1}{2} N_{\pm 1} \stackrel{def.}{=} N_{\pm \alpha_1} \quad (3.37c)$$

et par analogie avec un changement simultané de notation  $\alpha_{\pm 1} \rightarrow \alpha_{\pm 2}$ ,  $x \rightarrow z$ ,  $z \rightarrow x$  dans la solution (3.37b) pour les populations  $N_{\pm \alpha_2}$

$$N_{\pm 8} = N_{\pm 9} = \frac{1}{2} N_{\pm 2} \stackrel{def.}{=} N_{\pm \alpha_2} \quad (3.37d)$$

Par conséquent, la solution pour la population inconnue  $N_3$  est le rebond, défini en terme de réflexions généralisées par la relation (3.20b); tandis que la solution (3.20a) pour les populations  $N_{\pm \alpha_1}$  et  $N_{\pm \alpha_2}$  peut être donnée sous un forme d'un mélange (2.15) si la probabilité  $p$  est introduite de la manière suivante:

$$\begin{aligned} P_{\alpha_1}^{-\alpha_1} &= P_{\alpha_2}^{-\alpha_2} \stackrel{def.}{=} \frac{1}{4} p \\ P_{\alpha_1}^{-\alpha_2} &= P_{\alpha_2}^{-\alpha_1} \stackrel{def.}{=} \frac{1}{4} (1-p) \end{aligned} \quad (3.38a)$$

On note que la solution (3.38a) satisfait les restrictions (3.25)-(3.26); mais la différence principale entre les solutions (3.38a) avec celles-ci pour un coin 2D est que pour les populations droites  $N_{+1}$  et  $N_{+2}$  "on a en général

$$P_1^{-2} = P_2^{-1} = \frac{1}{2} (1-p) \neq 0 \quad (3.38b)$$

Ceci contraste avec la forme des solutions considérées dans l'Appendice 3.B (voir (3.B.11)). Il est clair que la solution (3.B.11) dans ce cas particulière est le rebond qui localise la frontière à une distance déterminée par (2.37b).

La probabilité  $p$  peut ensuite être déterminée d'après la différence des équations (3.23b) pour les populations  $N_{-\alpha_1}^{d.f.}$  et  $N_{-\alpha_2}^{d.f.}$  par analogie avec l'équation (3.35b) pour un canal non incliné. Les différences finies (3.A.4) et (3.A.8) ont été utilisées pour imposer les conditions d'adhérence pour les dérivées première et seconde le long des directions  $x$  et  $z$ , normales aux parois solides; une combinaison des approximations (3.A.1) et (3.A.2) a été exploitée pour estimer les dérivées secondes mixtes dans (3.37b); pour cela en effet on utilise la vitesse dans les noeuds  $\pm z_0$ ,  $\pm(z_0 - 1)$ ,  $\pm(z_0 - 2)$ ,  $\pm(z_0 - 3)$ . Du fait de la présence de ces dérivées dans la solution, les équations dans les points  $\pm z_0$  sont indépendantes si  $h \geq 2.5$ .

La méthode des réflexions généralisées pour cet écoulement est vérifiée numériquement. La comparaison de la solution théorique avec la solution par l'algorithme B.1 "simultané" pour les probabilités des réflexions est faite sur la Fig.3-2b dans un canal de largeur  $2h=2\sqrt{2}$  ( $h=2$ ); dans ce cas les équations pour les probabilités sont dépendantes comme et dans le cas de l'écoulement non incliné. Les intervalles de convergence sont identiques à ceux (Fig.3-2a) du canal non incliné dans les cas considérés  $\lambda_\psi = -0.1$  et  $\lambda_\psi = -1.9$ .

Les solutions exactes dans cette configuration sont aussi trouvées par les méthodes A.1, A.2 et B.2. La convergence par la méthode B.2 est meilleure par la méthode B.1 dans ce cas comme dans le cas du canal non incliné.

### 3.4.2. Ecoulement de Couette accéléré.

On considère un écoulement de Couette accéléré où la paroi inférieure est brutalement mise en vitesse aux temps  $t$  positifs. Ceci correspond au système suivant:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3.39a)$$

avec la condition initiale

$$t \leq 0: u(z) \equiv 0, \quad 0 \leq z \leq h \quad (3.39b)$$

et les conditions aux limites

$$t > 0: u(0) = u_0, \quad u(h) = 0 \quad (3.39c)$$

La solution théorique pour l'équation (3.39a) avec les conditions (3.39b)-(3.39c) est donnée dans Schlichting (1968) sous la forme d'une série de fonction "erreur complémentaire"

$$\frac{u}{u_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{erfc}(2n\eta_1 + \eta) - \sum_{n=0}^{\infty} \operatorname{erfc}(2(n+1)\eta_1 - \eta), \quad \eta = \frac{z}{2\sqrt{vt}} \quad (3.39d)$$

où  $\eta_1 = \frac{h}{2\sqrt{vt}}$  est la distance adimensionnelle entre les deux frontières solides.

Calculons ce mouvement le long de l'axe  $x$  par les réflexions généralisées (3.20a) et (3.23b). Le canal plan non incliné est le même que pour l'écoulement de Poiseuille. Par conséquent, on n'a que deux différences essentielles avec l'écoulement de Poiseuille dans un canal non incliné du paragraphe 3.4.1. Tout d'abord, la vitesse de l'une des frontières solides doit être prise égale à  $u_0$  dans les expressions (3.A.4) et (3.A.8) par les différences finies

$$f_{k-0.5} \equiv u_0, \quad k=1 \quad (3.40)$$

Comme d'habitude on impose la condition d'adhérence sur la seconde frontière sous la forme:

$$f_{k+0.5} \equiv 0, \quad k=h \quad (3.41)$$

Ensuite pour commencer le mouvement dans le cas des réflexions généralisées (3.20a), on doit imposer dans le premier noeud  $z_0 = 0.5$  une condition initiale, différente de la solution triviale (3.32a), sous la forme (2.29) avec  $F_x = 0$  (dans l'écoulement de Poiseuille le mouvement commence à partir de solution initiale (3.32a) grâce à l'imposition d'une force extérieure). Donc on impose la solution  $N_i(\mathbf{z}_0, t=1)$ ,  $i = 0, \dots, 24$ , sous la forme (2.29). Pour cela, il faut prendre une certaine valeur de la vitesse  $u_x(\mathbf{z}_0, t=1)$  dans l'approximation de la série (2.29) par les différences finies. Par exemple, on peut évaluer cette vitesse par un développement de Taylor de type (3.5a):

$$u_x(\mathbf{z}_0) - \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial u_x}{\partial z}(\mathbf{z}_0) \right]^{d.f.} + \frac{1}{8} \left[ \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2}(\mathbf{z}_0) \right]^{d.f.} = u_0 \quad (3.42a)$$

avec  $f_{k+n} = 0$ ,  $k = 1$ ,  $n=1, 2, 3$ , dans les expressions (3.A.2) et (3.A.6) par les différences finies pour les dérivées premières et secondes. On impose donc les conditions initiales avec une erreur du troisième ordre en  $\varepsilon$ . Notons que dans la méthode B.2 il n'est pas nécessaire imposer la condition initiale différente de triviale lorsque les équations (3.14) sont appliquées pour  $t > 0$ .



La relation (3.42a) avec (3.A.2) et (3.A.6) entraîne par analogie avec les solutions (3.5b) la solution

$$u_x(\mathbf{z}_0, t = 1) = \frac{u_0}{2} \quad (3.42b)$$

Ensuite la procédure standard (3.23b) sous la même forme (3.35b) est appliquée pour  $t \geq 1$  comme pour l'écoulement de Poiseuille. Les valeurs de la vitesse pour l'estimation par les différences finies sont prises au temps  $t$  dans tous les points pour obtenir les solutions non stationnaires.

On note que l'erreur d'ordre  $O(\varepsilon^3)$  est non nulle pour l'écoulement de Couette tant que la solution linéaire ( $t \rightarrow \infty$ ) n'est pas atteinte. Par conséquent, (3.35b) et les différences finies (3.A.4), (3.A.8) impliquent que l'erreur de la solution dans la zone non stationnaire est du troisième ordre en  $\varepsilon$ .

Les réflexions généralisées par le schéma B.1 "simultané" sont effectuées pour un canal de largeur  $h = 16$ . On voit sur la Fig.3-3 que la convergence vers la solution théorique (3.39d) est bonne.

On peut conclure que le mouvement de Couette montre que les modèles LBE avec des conditions aux limites imposées par les moyens de cette section peuvent simuler des solutions non stationnaires et des solutions avec les frontières mobiles avec la précision désirée.

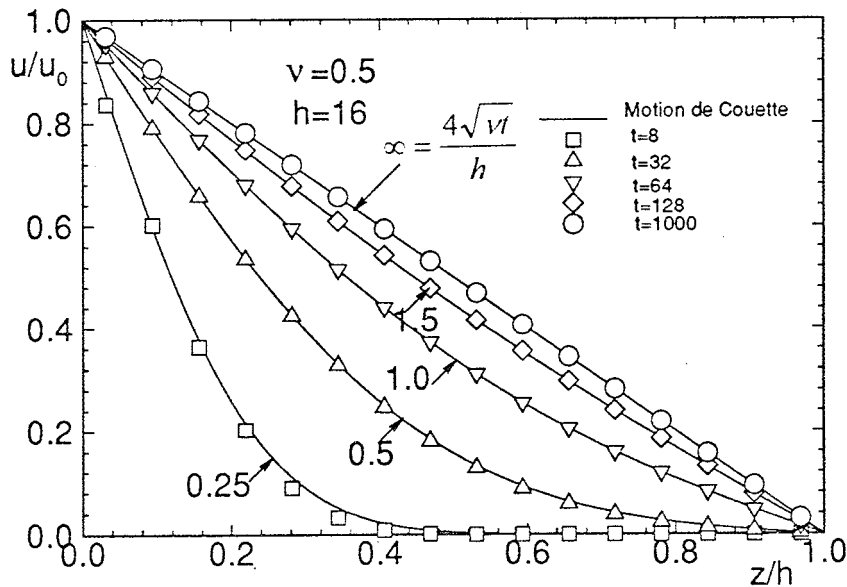


Figure 3-3: Comparaison de la solution LBE avec réflexions généralisées pour un mouvement de Couette.

### 3.4.3 Ecoulement en tube carré.

Les écoulements en section rectangulaire sont parmi les rares écoulements à pouvoir être calculés analytiquement (voir Berker, 1959; Happel et Brenner, 1965): ils vérifient l'équation de Stokes qui prend la forme d'une équation de Poisson

$$v\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}\right) = -F_y, \quad -a \leq x \leq a, \quad -b \leq z \leq b. \quad (3.43a)$$

La solution  $u_y$  peut être exprimée par le développement en série (Berker, 1959)

$$u_y = \frac{-F_y}{2v} \left[ b^2 - z^2 - \frac{4}{b} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \cos mz \cosh mx}{m^3 \cosh ma} \right], \quad m = \frac{(2n+1)\pi}{2b} \quad (3.43b)$$

La forme des populations est au troisième ordre près

$$N_i = d + d'\rho \left\{ \left( u_y - \frac{1}{2} F_y \right) C_{iy} + \frac{1}{\lambda_\psi} \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} Q_{iyx} + \frac{\partial u_y}{\partial z} Q_{iyz} \right) + \frac{v}{\lambda_2} \left( \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} T_{iyxx} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} T_{iyzz} \right) \right\} + O(\varepsilon^3), \quad i = 0, \dots, b_m \quad (3.43c)$$

Considérons l'écoulement dans un tube carré avec  $n^2$  noeuds de réseau dans la section  $-a \leq x \leq a, -a \leq z \leq a$ . La comparaison est faite sur les débits (Fig.3-4)

$$Q = \sum_{\substack{j=1,\dots,n \\ k=1,\dots,n}} u_y(x_j, z_k) \quad (3.44)$$

Ils peuvent être obtenus d'après la solution théorique (3.43b), par LBE avec rebond et par les méthodes de ce chapitre. Le calcul est fait pour les valeurs propres  $-1.9 \leq \lambda_\psi \leq -0.1$  (ici encore l'absence de points numériques signifie que l'algorithme n'a pas convergé) et pour deux valeurs propres  $\lambda_2$ :  $\lambda_2 = -1.99$  et  $\lambda_2 = \lambda_{2c}$  où  $\lambda_{2c}(\lambda_\psi)$  est une valeur propre critique qui vérifie les conditions d'adhérence par rebond dans l'écoulement de Poiseuille (voir (2.32)). Notons que les valeurs propres  $\lambda_{2c}$  n'assurent pas formellement les conditions d'adhérence avec une erreur d'ordre  $O(\varepsilon^3)$  dans le cas de l'écoulement (3.43b), parce qu'une dérivée seconde de la vitesse le long des parois est présente dans la solution et par conséquent dans les conditions imposées par le rebond, à la différence de l'écoulement de Poiseuille. Cependant, on peut voir sur la Fig.3-4 que l'erreur dans l'imposition des conditions aux limites diminue dans ce cas pour tous les algorithmes qui ne changent pas les populations incidentes (voir rebond, B.1 et B.2).

•**Algorithme A.2**

La méthode A.2 est choisie comme étant plus stable en général qu'une méthode A.1. L'approximation de la vitesse dans les points "frontières" le long du périmètre du tube est effectuée selon l'équation (3.5c) d'abord pour les points près d'un plan et ensuite pour les noeuds dans les coins selon les solutions estimées dans les points voisins. Il n'y a aucune ambiguïté dans la définition de la vitesse dans les coins pour un tube carré grâce à la symétrie. Donc, les erreurs imposées dans ce cas sont dues, premièrement, aux erreurs dans l'approximation par les différences finies, et deuxièmement aux termes d'ordre supérieurs qui ont été négligés dans les solutions pour les populations. Les populations arrivées par propagation ne sont pas prises en considération et toutes les populations dans les noeuds "frontières" sont estimées. On voit ensuite que la méthode A.2 est moins stable quand les viscosités deviennent grandes ( $\lambda_v \rightarrow 0$ , voir (1.78)) comme et pour l'écoulement de Poiseuille; la précision est plus mauvaise alors pour les petites viscosités.

•**Algorithmes B.1 et B.2**

Le calcul par la méthode B.2 "retardée" est effectué en résolvant les équations (3.14) dans tous les points "frontières" indépendamment l'un de l'autre; la vitesse dans les points voisins est donc prise au temps  $t - 1$  lorsqu'ils viennent dans la partie droite des équations (3.14) (voir (3.14.c)). La précision de la méthode est donc meilleure pour la valeur propre  $\lambda_{2c}$ ; elle est cependant moins bonne en général que par la méthode B.1 des réflexions généralisées. Rappelons que la différence principale entre ces méthodes consiste dans la façon de déterminer les populations inconnues: par l'équation (3.14) (ou (3.23a)) ou bien (3.23b) respectivement pour les modèles B.2 ou B.1. Cela est expliqué aussi par (3.23d): formellement la méthode B.2 n'impose pas les termes d'ordres supérieurs dans le développement (3.1) pour les populations inconnues tandis que la méthode B.1 inclut certaines combinaisons de ces termes mais de façon non contrôlée; par conséquent ils peuvent être écrits plus ou moins correctement (comparons les données sur la Fig.3-4 pour B.1 et B.2).

Dans tous les cas on voit que la forme fonctionnelle de la vitesse est mieux obtenue lorsque les algorithmes avec réflexions sont utilisés: la précision dans ces cas (rebond, B.1) ne dépend pratiquement pas de la viscosité.

Décrivons les conditions aux limites dans un tube carré du point de vue des réflexions généralisées. Les noeuds dans un tube carré sont de deux types: "point près d'un plan" (Fig.2-2a) et "point dans un coin 2D" (Fig.2-2b). Par conséquent, dans les "points près d'un plan", on a les réflexions généralisées sous forme d'un mélange de réflexions (2.15) par

analogie complète avec l'écoulement de Poiseuille. L'équation (3.23b) permet de déterminer les probabilités  $p$  dans les "noeuds ordinaires"

$$N_{-\alpha_1}^{d.f.} - N_{-\alpha_2}^{d.f.} = (2p-1)(N_{+\alpha_1}^{d.f.} - N_{+\alpha_2}^{d.f.}) \quad (3.45)$$

où  $N_{\alpha_1}$  et  $N_{\alpha_2}$  sont les populations inclinées avec les composantes  $y$  de vitesse non nulles ( $C_{\alpha_1 y} \neq 0$ ,  $C_{\alpha_2 y} \neq 0$ ); ils ont une population "droite" entre eux (par exemple  $N_{\alpha_1} = N_4$ ,  $N_{\alpha_2} = N_5$  pour le noeud  $\mathbf{z}_0$  de la Fig.2-2a). Dans les coins du tube carré, on a 4 populations réfléchies différentes de la solution triviale (3.32a) (voir les populations  $N_6$  et  $N_7$ ,  $N_8$  et  $N_9$  données dans la Fig.2-2b). Grâce aux symétries, on a la solution

$$\begin{aligned} N_{\pm 7} &= N_{\pm 8} \stackrel{def.}{=} N_{\pm \alpha_1} \\ N_{\pm 6} &= N_{\pm 9} \stackrel{def.}{=} N_{\pm \alpha_2} \end{aligned} \quad (3.46a)$$

La solution dans un coin est donnée par la même équation (3.45) si les probabilités sont de la forme:

$$\begin{aligned} P_{\alpha_1}^{-\alpha_1} &= P_{\alpha_2}^{-\alpha_2} \stackrel{def.}{=} p, \\ P_{\alpha_1}^{-\alpha_2} &= P_{\alpha_2}^{-\alpha_1} \stackrel{def.}{=} (1-p), \quad (\alpha_1, \alpha_2) \in \{(6,7); (8,9)\} \\ P_7^{-8} &= P_8^{-7} = 0; \quad P_6^{-8} = P_8^{-6} = 0; \quad P_7^{-9} = P_9^{-7} = 0; \quad P_6^{-9} = P_9^{-6} = 0 \end{aligned} \quad (3.46b)$$

Notons que la solution (3.46b) satisfait la forme (3.B.11) - (3.B.16) des probabilités dans l'Appendice 3.B pour un coin 2D; les restrictions (3.25) et (3.26) donc sont vérifiées par (3.46b).

Les relations pour les termes  $S_{-\beta y}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0)$  (voir (3.2b)) peuvent être obtenues de la même manière que pour l'écoulement de Poiseuille selon la forme des populations (3.43c) et les différences finies appliquées. Par exemple, si les différences finies (3.A.4) et (3.A.8) sont utilisées comme toujours pour les dérivées dans les directions normales aux parois et la formule (3.A.5) pour une dérivée seconde le long de la direction tangentielle dans les noeuds "près d'un plan solide", la fonction  $S_{-\beta y}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0)$  est:

$$S_{-\beta y}^{\mathbf{z}_0}(\mathbf{z}_0) = d' \left( \frac{1}{\lambda_\psi} + v \frac{\vartheta}{\lambda_2} \right) C_{-\beta y}, \vartheta = \begin{cases} 6, & \text{si } \mathbf{z}_0 \text{ est un "noeud près d'un plan"} \\ 4, & \text{si } \mathbf{z}_0 \text{ est un "noeud dans un coin 2D"} \end{cases}, \beta = \{ \alpha_1, \alpha_2 \}. \quad (3.47)$$

Les termes  $S_{-\beta_j}^z(\mathbf{z}_0)$ ,  $\mathbf{z} \neq \mathbf{z}_0$ , s'écrivent par analogie en fonction de l'orientation tangentielle ou normale du vecteur  $\mathbf{z}-\mathbf{z}_0$  (voir Figures.3-1a et 3-1b) d'une paroi dans les noeuds ordinaires ou de façon homogène dans les coins.

Notons que pour l'écoulement en tube carré, l'approximation "simultanée" est moins triviale que pour l'écoulement de Poiseuille parce qu'elle s'étend sur tous les noeuds  $\mathbf{z}_0 \in \mathbf{Z}$  situés le long du périmètre de la section du tube. Nous avons vérifié en résolvant le système des équations (3.45) simultanément dans tous les noeuds  $\mathbf{z}_0$  (approximation au temps  $t$ ) que les solutions stationnaires obtenues par l'approximation "simultanée" et "retardée" sont les mêmes lorsque les deux procédures convergent.

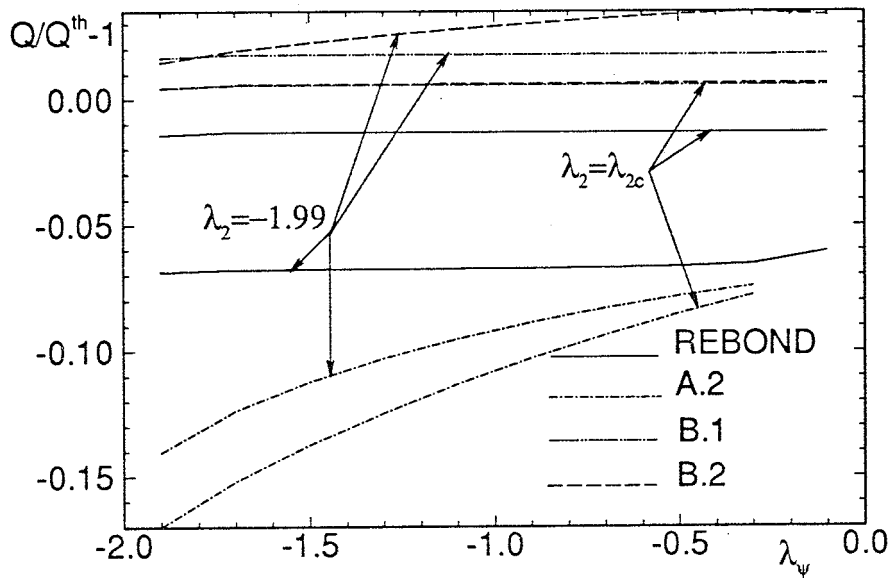


Figure 3-4: Comparaison des débits avec un débit théorique  $Q^{th}$  pour l'écoulement en tube carré 5x5 noeuds de réseau avec  $F_v=10^{-6}$ .

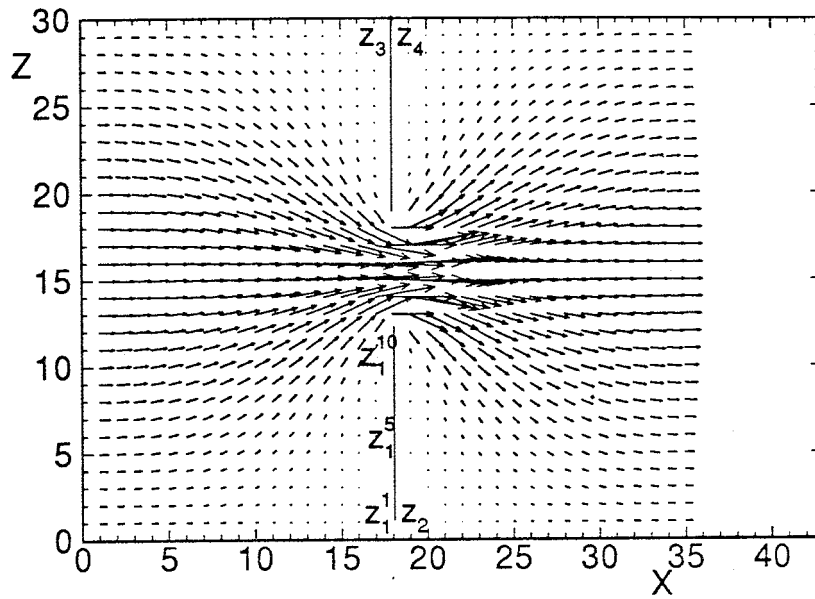
### 3.4.4. Écoulement près d'un point de stagnation.

Cet écoulement est un cas difficile parce que la composante normale de la vitesse joue un rôle important lorsque le fluide tourne (voir Fig.2-7). En effet dans tous les cas précédents, il fallait seulement annuler la vitesse parallèle aux frontières, même pour l'écoulement de Poiseuille dans un canal incliné où une composante normale de la vitesse est formellement présente dans les coins.

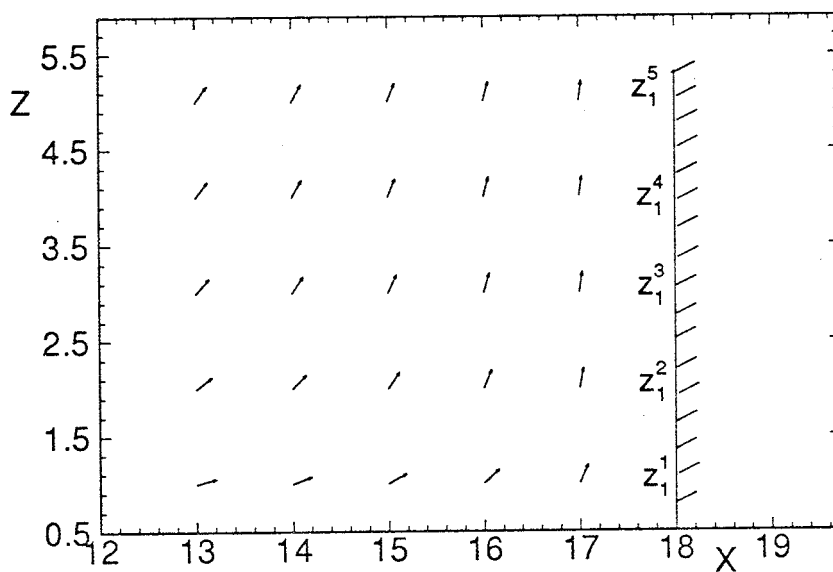
Pour avoir un point de stagnation, nous imposons des conditions aux limites périodiques aux bords de l'échantillon donné sur la Figure 3-5a et une force extérieure dans la direction  $x$ . Ainsi dans les points critiques  $\mathbf{z}_1^1, \mathbf{z}_2 - \mathbf{z}_4$  (Figures 3-5a), nous obtenons un écoulement de stagnation; le champ de vitesse près des points  $\mathbf{z}_1^1$  est détaillé sur la Figure 3-5b.

Pour l'écoulement au travers d'un diaphragme en mince paroi, la solution théorique est donnée par Happel et Brenner (1969) pour un échantillon illimité; on ne peut donc pas comparer raisonnablement les solutions numériques avec cette solution dans les points critiques où l'écoulement de stagnation apparaît grâce à la périodicité. Nous allons comparer la position réelle d'un plan solide, obtenue par l'algorithme de rebond et par les algorithmes de ce chapitre pour chaque composante de la vitesse.

Notons que la condition de conservation locale de la masse partie n'est pas exigée automatiquement dans les points frontières (voir par exemple les noeuds  $\mathbf{z}_1^1, \mathbf{z}_1^2, \dots, \mathbf{z}_1^{l^2}$  sur la Fig.3-5a) parce que la vitesse normale est différente de zéro. Par conséquent, la densité dans les noeuds frontières est inconnue en général à moins qu'une restriction de type (3.19) à cause de la conservation de la masse partie soit négligée; dans ce dernier cas la densité peut être définie à partir de la condition (3.30b). Rappelons que la pression est proportionnelle à la densité dans les modèles de gaz sur réseau (voir (2.6c) par exemple); par conséquent, le fluide dans l'écoulement de diaphragme est en réalité compressible. Néanmoins, dans les premières tentatives d'imposer les conditions aux limites explicitement dans cette géométrie, nous allons négliger les termes du second ordre  $O(\varepsilon^2)$  avec les fluctuations de densité  $N_i^2(\rho)$  et  $N_i^2(\rho^F)$  dans le développement (3.1) par les différences finies. Nous allons voir cependant, d'après l'étude préliminaire de ce paragraphe, que les modèles aux limites doivent inclure probablement ces termes ainsi que les termes d'ordre supérieur  $O(\varepsilon^3)$  avec les gradients de vitesse dans le développement afin d'imposer correctement les conditions aux limites dans la configuration.



(a)



(b)

**Figure 3-5:** (a) Ecoulement au travers d'un diaphragme en mince paroi dans un échantillon de  $35 \times 30$  unités du réseau; le diamètre du diaphragme est de 6 unités de réseau. Les conditions aux limites sont périodiques dans toutes les directions. La force est dans la direction  $x$ ;

(b) Partie du champ de vitesse près du point de stagnation  $z_1^1$ . La vitesse est normée à 1 pour faciliter la visualisation.

Deux types d'analyse des champs obtenus sont proposés. Pour le rebond et pour la méthode B.2, qui consiste en la résolution du système des équations (3.14) dans chaque noeud près de la paroi solide, nous avons essayé de déterminer la distance réelle  $\Delta(\mathbf{z}) = \{\Delta_x(\mathbf{z}), \Delta_z(\mathbf{z})\}$  entre les derniers noeuds  $\mathbf{z} = \{z_1^1, z_1^2, \dots, z_1^l\}$  (voir Fig.3-5a) le long d'un plan solide et les points où une composante de la vitesse normale  $u_x$  ou tangentielle  $u_z$  s'annule. On peut donc essayer de déterminer  $\Delta$  à partir de l'équation

$$\psi_k + \Delta \partial_x^{d.f} \psi_k + \frac{1}{2} \Delta^2 \partial_{xx}^{2.d.f} \psi_k = 0, \quad \psi_k = \{u_x(\mathbf{z}), u_z(\mathbf{z})\}, \quad \Delta = \{\Delta_x(\mathbf{z}), \Delta_z(\mathbf{z})\} \quad (3.48)$$

Rappelons que cette équation est vérifiée formellement par la solution selon la méthode A.2, parce que la vitesse inconnue est déterminée d'après l'équation (3.5a) dans ce cas.

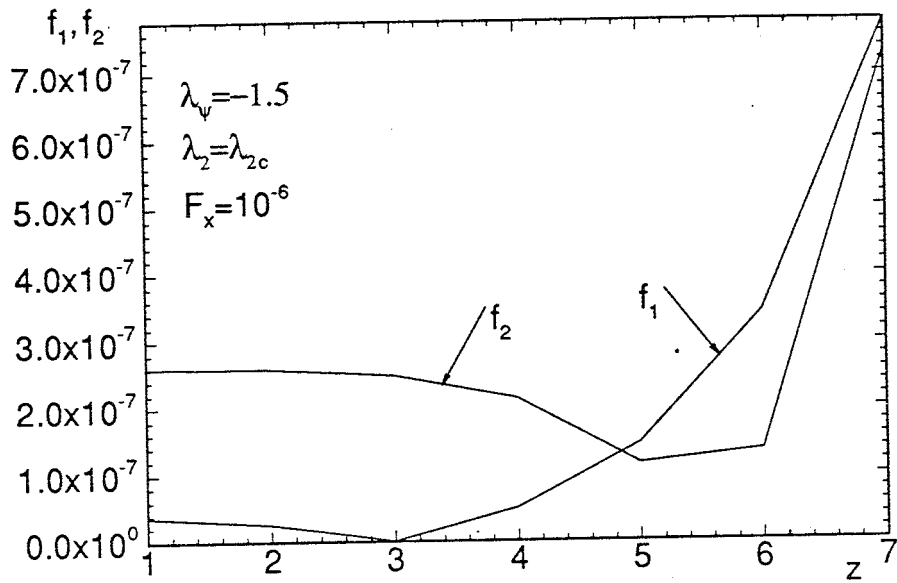
Nous avons remarqué cependant que la solution  $\Delta_x$  pour la vitesse normale ne peut pas être définie correctement d'après cette équation selon les solutions par rebond ou bien par l'algorithme B.2 parce que la dérivée troisième de la vitesse  $\partial_{xxx}^3 u_x$  dans la direction normale devient particulièrement importante près du point de stagnation. Cela est donné sur la Fig.3-6a: la dérivée première  $\partial_x u_x$  et la dérivée troisième  $\partial_{xxx}^3 u_x$ , calculées selon la solution, ont le même ordre de grandeur. Ceci entraîne des erreurs non négligeables dans l'approximation des dérivées par les différences finies dans l'équation (3.48) et des erreurs significatives dans l'imposition réelle des frontières solides lorsque les termes avec ces dérivées sont négligés dans la série (3.1).

Considérons aussi la vitesse tangentielle  $u_z$ . Près des points critiques, la dérivée troisième  $\partial_{xxx}^3 u_z$  a aussi des valeurs importantes (voir Fig.3-6b), mais la solution pour  $\Delta = \Delta_z(\mathbf{z})$  peut être déduite de l'équation (3.48). On voit sur la Figure 3-7 que la solution ne dépend pas pratiquement de la distance  $z$  le long de la paroi comme cela doit être pour la solution de similitude

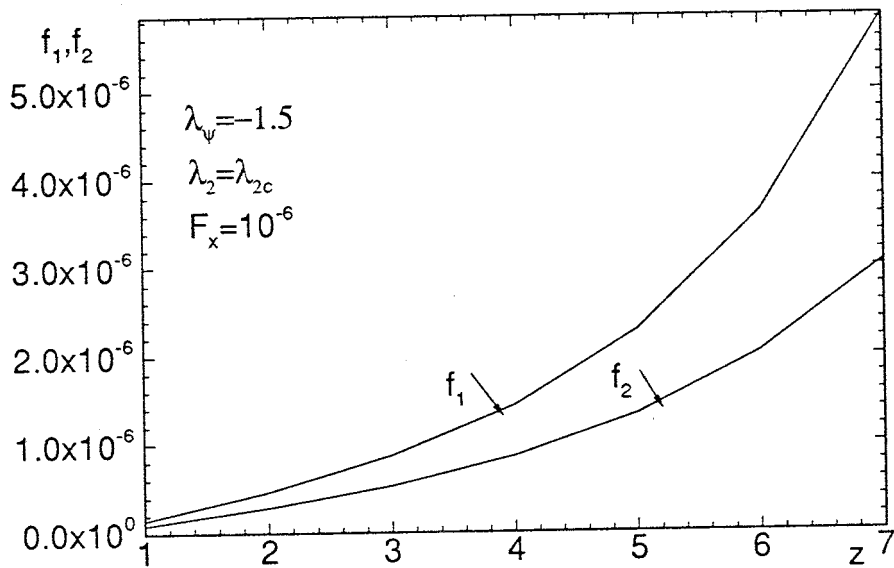
$$u_z = g_1(z) * g_2(x) \quad (3.49)$$

Les résultats sont présentés sur la Fig.3-7 pour la valeur propre  $\lambda_2 = \lambda_{2c}$ . Rappelons que d'après l'analyse théorique du second ordre dans l'écoulement de stagnation (voir Chapitre 2), la frontière est obtenue pour la composante tangentielle à la distance  $\Delta_z = 0.5$  pour la même valeur propre  $\lambda_2 = \lambda_{2c}$  que pour l'écoulement de Poiseuille (voir (2.32)). Il n'est donc pas très surprenant d'obtenir pratiquement les mêmes résultats pour les valeurs propres  $\lambda_2 = \lambda_{2c}$  par le rebond et par l'algorithme B.2, car ce dernier impose des conditions aux limites avec la même précision d'après la procédure (3.14).





(a)



(b)

**Figure 3-6.** Estimation numérique de la dérivée première  $|\partial_x u_x|$  (voir  $f_1$ ) et de la dérivée troisième  $|\partial_{xxx}^3 u_x|$  (voir  $f_2$ ) de la vitesse normale  $u_x$  près du point de stagnation  $z = 1$  (a); Estimation numérique de la dérivée première  $|\partial_x u_z|$  (voir  $f_1$ ) et la dérivée troisième  $|\partial_{xxx}^3 u_z|$  (voir  $f_2$ ) de la vitesse tangentielle  $u_z$  près du point de stagnation  $z = 1$  (b).

Cependant, on voit sur la Figure 3-7 que dans la zone de stagnation les points d'adhérence de la vitesse tangentielle forment un plan mais ce plan ne se trouve pas à  $\Delta_z = 0.5$  des noeuds frontières. On peut néanmoins expliquer ce fait en considérant les termes d'ordres supérieurs dans le développement (2.27) des populations. Le développement des populations jusqu'à l'ordre 3 montre que le terme supplémentaire  $\Delta N_i^{3(\rho u)}$  dû à la présence de la dérivée  $\partial_{xxx}^3 u_z$  entre avec le tenseur du second ordre  $Q_{ixz}$

$$\Delta N_i^{3(\rho u)} = \frac{d'}{\lambda_\psi} \gamma \partial_{xxx}^3 u_z Q_{ixz} \quad (3.50)$$

où  $\gamma$  est fonction des valeurs propres et des paramètres du modèle; en principe  $\gamma$  peut être déterminé analytiquement selon l'expansion des populations dans l'équation de Boltzmann par analogie avec les développements pour les termes du second ordre, mais cette analyse des termes d'ordre  $O(\varepsilon^3)$  est assez longue.

Nous avons obtenu dans le Chapitre 2 d'après l'analyse au second ordre la condition sur la vitesse tangentielle  $u_z$  sous la forme (dans le cas du rebond quand les fluctuations de la densité sont négligées (voir formule (61) dans l'Appendice 2.A))

$$2u_z + \partial_x u_z C_{+x} - k \partial_{xx}^2 u_z = 0, \quad k = 2\nu \left(1 + \frac{2}{\lambda_2}\right), \quad \rho \approx \text{const} \quad (3.51a)$$

Donc (voir (2.32))

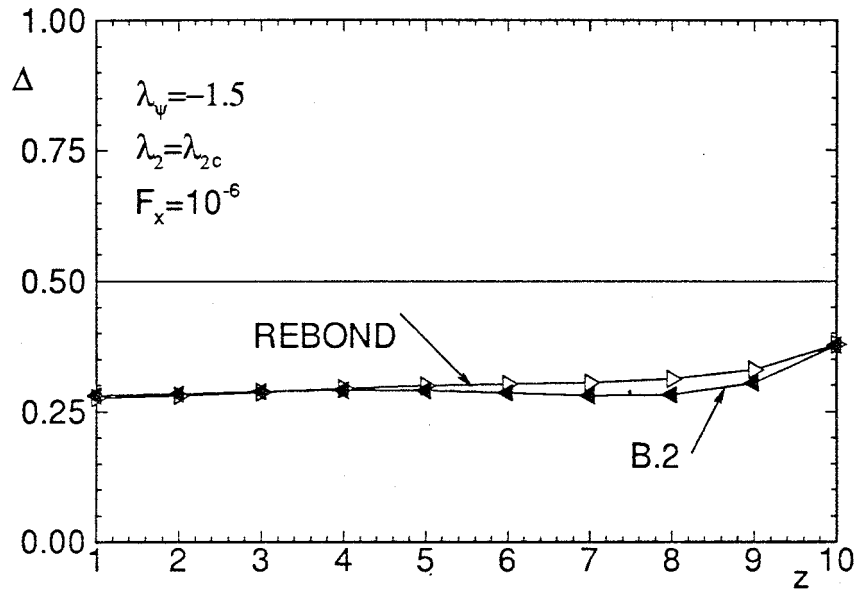
$$\Delta_z = 0.5 \quad \text{si } k = -\frac{1}{4} \quad \text{ou } \lambda_2 = \lambda_{2c} \quad (3.51b)$$

où  $C_{+x} = \pm 1$  est la vitesse normale des populations arrivées sur le plan solide. Par conséquent, la solution  $\Delta_z = 0.5$  est vérifiée par (3.48) avec  $\lambda_2 = \lambda_{2c}$  si la condition (3.51a) est satisfaite. Lorsque les dérivées de vitesse normale le long de paroi sont négligées, seulement la dérivée troisième  $\partial_{xxx}^3 u_z$  entre dans le développement (2.27) au troisième ordre avec le même tenseur  $Q_{ixz}$  que la dérivée du première ordre  $\partial_x u_z$ . Cependant, si le terme (3.50) est inclus dans l'analyse, la relation (3.51a) est remplacée par la condition

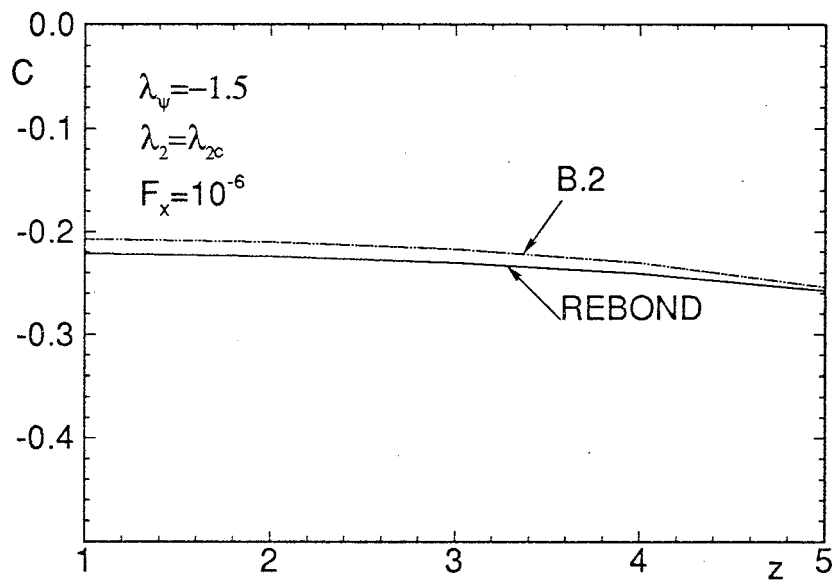
$$u_z + \frac{1}{2} (\partial_x u_z + \gamma \partial_{xxx}^3 u_z) C_{+x} - \frac{k}{2} \partial_{xx}^2 u_z = 0, \quad \rho \approx \text{const} \quad (3.52)$$

Par conséquent, la solution de l'équation (3.48) devient différente de la solution  $\Delta_z = 0.5$ . Ainsi, si l'équation (3.52) décrit la condition obtenue par le modèle dans les noeuds frontières, la fonction  $C(z)$  doit être proche d'une constante

$$C(z) = -\left(u_z + \frac{1}{2} \partial_x u_z C_{+x} - \frac{k}{2} \partial_{xx}^2 u_z\right) \left[\partial_{xxx}^3 u_z\right]^{-1} \approx \frac{1}{2} \gamma \quad (3.53)$$



**Figure 3-7:** La distance réelle  $\Delta = \Delta_z$  entre les derniers noeuds du réseau dans l'écoulement de stagnation et les points où la vitesse tangentielle  $u_z$  s'annule d'après l'équation (3.48).



**Figure 3-8:** Calcul de la fonction  $C(z)$  (3.53) dans les derniers noeuds  $z = z_1^1, z_1^2, \dots$  selon les champs numériques.

Nous avons pu vérifier ce point numériquement par comparaison de la fonction  $C(z)$ , déterminée à partir de l'équation (3.53) avec l'aide des différences finies, avec une constante. Cela est donné sur la Figure 3-8 pour les noeuds près de point de stagnation.

Ainsi on explique l'écart de la distance  $\Delta_z$  obtenue à la distance  $\Delta_z = 0.5$ , introduite explicitement dans les algorithmes A.2 et B.2 ou bien estimée analytiquement par le rebond avec  $\lambda_2 = \lambda_{2c}$ , par l'influence des termes avec les gradients de vitesse d'ordres supérieurs dans le développement (2.27) des populations.

Une seconde analyse des conditions aux limites imposées consiste en la vérification de l'équation de continuité au travers de toutes les sections de l'échantillon. On calcule donc les débits

$$Q(x_0) = \sum_z u_x(x_0, z) \quad (3.54a)$$

dans chaque section  $x = x_0$ . Chaque écoulement simulé peut donc être caractérisé par la norme

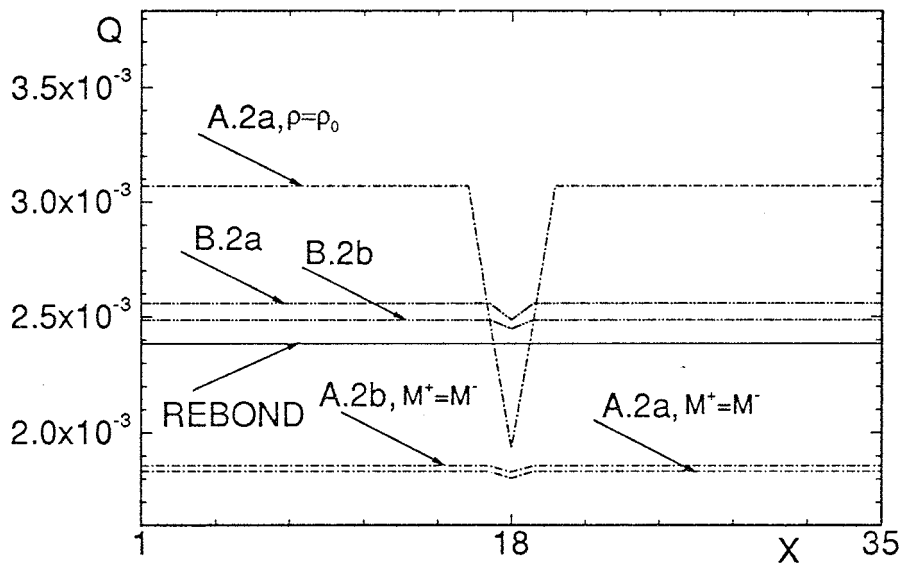
$$\|Q\| = \frac{Q^{\max} - Q^{\min}}{Q^{\max}} \quad (3.54b)$$

Les résultats de cette norme pour le rebond, la méthode A.2 et la méthode B.2 sont donnés sur la Figure 3-9. Deux types différents de conditions aux limites pour la densité sont considérés.

Pour l'algorithme A.2, tout d'abord on a fixé dans les points frontières  $\mathbf{z}_0 \in \mathcal{Z}$  la densité égale à la densité moyenne de l'échantillon. On voit cependant que l'erreur introduite dans ce cas sur la vitesse est importante (voir Fig.3.9 pour  $\rho = \rho_0$ ); donc les fluctuations de la densité ne peuvent pas être négligées complètement dans cet écoulement. L'approche la plus naturelle qui consiste en l'estimation par les différences finies de la densité à partir des points intérieurs cause des instabilités numériques significatives même dans des tests beaucoup plus simples comme celui de Poiseuille; par conséquent la méthode A.2 avec ce type d'approximation de la densité ne converge pas dans ce cas. Une autre approche consiste à déterminer la densité par la relation (3.30b) si nous supposons que la masse partie d'un noeud  $\mathbf{z}_0$  pour aller sur le solide avec les populations  $N_{+\alpha}$ ,  $\alpha \in I(\mathbf{z}_0)$ , doit revenir dans le même noeud. Deux versions de l'algorithme A.2 avec la condition (3.18) de la conservation locale de la masse sont ensuite considérées: avec l'équation (3.5c) du premier ordre et avec l'équation (3.5d) du second ordre (Algorithmes A.2a <sub>$M^+ = M^-$</sub>  et A.2b <sub>$M^+ = M^-$</sub>  sur la Figure 3-9). On voit que les résultats sont bien meilleurs quand la masse est conservée ( $M^+ = M^-$ ) et pour l'équation du second ordre (3.5d).

Pour l'algorithme B.2, nous avons aussi essayé deux moyens différents pour déterminer la densité  $\rho(\mathbf{z}_0)$ . D'abord, le système des équations (3.14) a été résolu sous la forme générale; dans ce cas la densité  $\rho(\mathbf{z}_0)$  et la vitesse  $\mathbf{u}(\mathbf{z}_0)$  sont déterminées par la solution. Ensuite, par analogie avec le second test pour le modèle A.2, nous avons imposé la densité (3.30b) explicitement dans les populations inconnues dans les équations (3.14). Notons que dans les algorithmes B.2 cela ne produit pas automatiquement la condition de conservation locale de la masse (3.18) parce que nous n'imposons que les populations  $N_{-\alpha}$ ,  $\alpha \in I(\mathbf{z}_0)$  contrairement aux méthodes A.2. Ainsi, la condition (3.18) est satisfaite seulement au second ordre par les modèles B.2 avec (3.30b).

Néanmoins, on voit que la précision estimée par la norme (3.45b) est meilleure dans le cas du rebond pour cet écoulement. On explique ce fait par l'influence des termes  $N_i^{2(\rho)}$  avec les gradients de densité ainsi que des termes  $N_i^{3(\rho u)}$  qui ont été négligés dans l'analyse présentée mais qui sont importants pour la continuation correcte des champs près du point de stagnation.



**Figure 3-9:** Débits au travers d'un diaphragme:  $\|Q\|_{\text{REBOND}} = 4.7 \cdot 10^{-5}$ ;  $\|Q\|_{A.2\rho=\rho_0} = 0.37$ ,  $\|Q\|_{A.2a_{M^+=M^-}} = 1.65 \cdot 10^{-2}$ ,  $\|Q\|_{A.2b_{M^+=M^-}} = 1.56 \cdot 10^{-2}$ ;  $\|Q\|_{B.2a} = 2.7 \cdot 10^{-2}$ ,  $\|Q\|_{B.2b} = 1.53 \cdot 10^{-2}$ . La densité moyenne est imposée dans les points frontières par la méthode  $A.2_{\rho=\rho_0}$ . L'algorithme A.2a correspond à l'équation (3.5c), A.2b à l'équation (3.5d) pour déterminer la vitesse inconnue; la masse est conservée localement d'après le choix de la densité par la relation (3.30b). L'algorithme B.2a correspond à l'équation (3.14), B.2b à l'équation (3.14) avec la densité fixée par la relation (3.30b).

### 3.5. Extensions et conclusions.

Deux types de méthodes ont été proposées dans ce chapitre pour satisfaire au mieux les conditions aux limites sur la paroi solide. La méthode B.2 de résolution du système des équations linéaires pour déterminer les populations inconnues semble être la plus prometteuse d'après les résultats numériques parce que la convergence des modèles avec les conditions aux limites imposées par ces méthodes est considérablement meilleure que celle des algorithmes A.1 et A.2; en outre les méthodes de classe B sont beaucoup plus proches que les méthodes A des idées de base des modèles du gaz sur réseau et modèles de Boltzmann. Pour être juste, notons cependant que les algorithmes de type A sont plus faciles à réaliser numériquement; ils peuvent inclure de la même manière des termes d'ordre  $O(|\mathbf{u}|^2)$  qui peuvent devenir importants même près des parois solides quand la vitesse augmente. L'addition de ces termes dans le développement de populations rend les méthodes B non linéaires et donc non efficaces pour les applications numériques. En outre, la condition de conservation locale de la masse (3.18) peut être aussi aisée à incorporer dans les modèles A. Tandis que tous ces méthodes peuvent améliorer considérablement les solutions avec les réflexions classiques dans les géométries simples, des tests numériques supplémentaires doivent vérifier leurs possibilités pour des écoulements généraux. Le problème de la convergence des modèles de Boltzmann avec les conditions aux limites imposées avec l'aide des différences finies doit être étudié avant l'application régulière de ces méthodes.

D'autres modifications de ces algorithmes peuvent être également développées. Par exemple, les méthodes de classe A peuvent être appliquées de la même façon dans les noeuds du réseau situés exactement sur les parois solides sans décalage (voir Figure 2-10). Ceci supprime le problème de l'ambiguïté dans la définition de la vitesse dans les points limites par les modèles A, ainsi que le problème de l'estimation de la densité quand les valeurs limites de celle-ci sont connues par ailleurs.

De plus, les modèles avec les noeuds "frontières" du réseau qui coïncident avec les premiers noeuds *solides* peuvent être introduits formellement de la même façon. Dans ce cas, il faut imposer les conditions aux limites entre les derniers noeuds liquides et les premiers noeuds solides du *réseau*. Tous les développements de ce chapitre peuvent être appliqués par analogie dans ces noeuds solides. Cependant, on peut s'attendre à ce que la convergence des modèles de Boltzmann soit moins bonne dans ce cas; les premiers tests numériques avec les noeuds "réfléchis" confirment cette supposition.

En effet, les modèles convergent mieux quand les conditions aux limites imposées ne sont pas très différentes des réflexions en arrière (voir Fig.3-2 pour les réflexions généralisées) en accord avec la physique du problème et par analogie avec le rebond des particules de gaz. Par exemple, l'imposition des frontières au milieu des noeuds intérieurs et extérieurs pour l'écoulement de Poiseuille exige, dans le cas du rebond dans les derniers noeuds liquides, que les valeurs propres de la matrice de collision satisfassent la condition (3.51b). Par contre pour le rebond dans les premiers noeuds *solides*, cette condition devient (voir l'équation (77) dans l'Appendice A.2 avec  $\Delta=-0.5, z_0 > 0$ )

$$k = -\frac{1}{4} + 2z_0 \quad \Rightarrow \quad k > 0 \quad (3.55)$$

où  $z_0$  est la coordonnée en  $z$  d'un noeud limite. Par conséquent, aucune valeur propre  $\lambda_2$  de l'intervalle  $(-2, 0)$  de stabilité ne peut satisfaire la condition (3.55) à la différence du cas (3.51b).

### Appendice 3.A.

#### Formulaire des relations pour des dérivées par différences finies.

Les formules suivantes sont basées sur Peyret et Taylor (1983).

Les approximations par différences finies pour les dérivées premières sont

$$\frac{df(x_i)}{dh} \cong \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta h} + O(\Delta h^2) \quad \text{- centré} \quad (3.A.1)$$

ou

$$\frac{df(x_i)}{dh} \cong \frac{4f_{i+1} - 3f_i - f_{i+2}}{2\Delta h} + O(\Delta h^2) \quad \text{-non centré} \quad (3.A.2)$$

ou

$$\frac{df(x_i)}{dh} \cong \pm \frac{1}{\Delta h} \left\{ \frac{1}{\Delta(1+\Delta)} f_{i\pm\Delta} + \frac{\Delta-1}{\Delta} f_i - \frac{\Delta}{1+\Delta} f_{i\mp 1} \right\} + O(\Delta h^2) \quad (3.A.3)$$

En particulier, pour  $\Delta = 1$  on obtient une formule (3.A.1) d'après (3.A.3); pour  $\Delta = \frac{1}{2}$  on a

$$\frac{df(x_i)}{dh} \cong \pm \frac{4f_{i\pm\frac{1}{2}} - 3f_i - f_{i\mp 1}}{3\Delta h} + O(\Delta h^2) \quad (3.A.4)$$

Les dérivées secondes sont données par

$$\frac{d^2 f(x_i)}{dh^2} \cong \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta h^2} + O(\Delta h^2) \quad \text{- centré} \quad (3.A.5)$$

ou

$$\frac{d^2 f(x_i)}{dh^2} \cong \frac{-5f_{i+1} + 2f_i + 4f_{i+2} - f_{i+3}}{\Delta h^2} + O(\Delta h^2) \quad \text{-non centré} \quad (3.A.6)$$

ou

$$\frac{d^2 f(x_i)}{dh^2} \cong \frac{2}{\Delta h^2} \left\{ \frac{1}{\Delta(1+\Delta)} f_{i\pm\Delta} - \frac{1}{\Delta} f_i + \frac{1}{1+\Delta} f_{i\mp 1} \right\} + O(\Delta h^2) \quad (3.A.7)$$

En particulier pour  $\Delta = 1$ , on obtient la formule (3.A.5) d'après (3.A.7), pour  $\Delta = \frac{1}{2}$  on a



$$\frac{d^2 f(x_i)}{d h^2} \cong \frac{8 f_{i \pm \frac{1}{2}} - 12 f_i + 4 f_{i \mp 1}}{3 \Delta h^2} + O(\Delta h^2) \quad (3.A.8)$$

ou l'approximation du premier ordre

$$\frac{d^2 f(x_i)}{d h^2} \cong \frac{f_i - 2 f_{i \pm 1} + f_{i \pm 2}}{\Delta h^2} + O(\Delta h) \quad (3.A.9)$$

Les dérivées secondes mixtes (c'est-à-dire le long de deux axes distincts) peuvent être exprimées avec l'aide des formules (3.A.1) - (3.A.4).

La dérivée troisième est donnée par

$$\frac{d^3 f(x_i)}{d h^3} \cong \pm \frac{[-f_i + 3 f_{i \pm 1} - 3 f_{i \pm 2} + f_{i \pm 3}]}{\Delta h^3} + O(\Delta h) \text{ -non centré} \quad (3.A.10)$$

## Appendice 3.B.

### Solutions pour les probabilités dans les géométries particulières.

#### 3.B.1. Point près d'un plan

Nous considérons dans cet exemple un noeud arbitraire  $\mathbf{z}_0$  près d'un plan (Fig.2-2a). Dans ce cas 4 populations "inclinées" et 2 populations "droites" arrivent sur la paroi solide; donc  $l = 5$  et la solution pour 25 variables  $P_{\alpha}^{-\beta}$  doit être déterminée par les 4 équations (3.23b) avec les 9 conditions (3.25)-(3.26); la cinquième population inconnue est définie ensuite par la condition de conservation de la masse (3.18). Montrons qu'une solution naturelle symétrique dans cette géométrie, ayant des probabilités différentes de zéro seulement entre les populations d'un même plan (ici (xz) ou (yz)) peut satisfaire les équations (3.23b) et (3.25)-(3.26). Nous proposons que les populations "inclinées" des plans (xz) et (yz) ne s'influencent pas mutuellement (tout au moins directement):

$$\begin{aligned} P_2^{-4} &= P_3^{-4} = P_2^{-5} = P_3^{-5} = 0 \\ P_4^{-2} &= P_4^{-3} = P_5^{-2} = P_5^{-3} = 0. \end{aligned} \quad (3.B.1)$$

Ensuite par symétrie, on propose que l'influence de chacune des deux populations "inclinées" sur la population "droite" placée entre elles soient égales (Fig.2-2a) et vice versa

$$\begin{aligned} P_1^{-2} &= P_1^{-3} \stackrel{def.}{=} P_1^{-(xz)}, \quad P_2^{-1} = P_3^{-1} \stackrel{def.}{=} P_{(xz)}^{-1}, \\ P_1^{-4} &= P_1^{-5} \stackrel{def.}{=} P_1^{-(yz)}, \quad P_4^{-1} = P_5^{-1} \stackrel{def.}{=} P_{(yz)}^{-1}; \end{aligned} \quad (3.B.2)$$

Par symétrie, on propose pour les probabilités entre populations "inclinées" d'un même plan:

$$\begin{aligned} P_2^{-2} &= P_3^{-3}, \quad P_2^{-3} = P_3^{-2}, \\ P_4^{-4} &= P_5^{-5}, \quad P_4^{-5} = P_5^{-4}. \end{aligned} \quad (3.B.3)$$

Alors les variables  $P_1^{-1}$ ,  $P_{(xz)}^{-1}$ ,  $P_{(yz)}^{-1}$ ,  $P_1^{-(xz)}$ ,  $P_1^{-(yz)}$  peuvent être exprimées en termes des variables (voir (3.B.3))

$$\begin{aligned} P_+^{-(xz)} &\stackrel{def.}{=} P_3^{-3} + P_3^{-2} = P_2^{-2} + P_2^{-3}, \\ P_+^{-(yz)} &\stackrel{def.}{=} P_5^{-5} + P_5^{-4} = P_4^{-4} + P_4^{-5} \end{aligned} \quad (3.B.4)$$

par les relations suivantes qui satisfont (3.25)-(3.26)

$$P_{(xz)}^{-1} = P_1^{-(xz)} = 1 - P_+^{-(xz)}, \quad P_{(yz)}^{-1} = P_1^{-(yz)} = 1 - P_+^{-(yz)}, \quad P_1^{-1} = 1 - 2(P_1^{-(xz)} + P_1^{-(yz)}). \quad (3.B.5)$$

Il nous reste donc les 4 variables:

$$P_+^{-(xz)}, \quad P_+^{-(yz)}, \quad P_-^{-(xz)} \stackrel{def.}{=} P_2^{-2} - P_2^{-3}, \quad P_-^{-(yz)} \stackrel{def.}{=} P_4^{-4} - P_4^{-5} \quad (3.B.6)$$

Ceci s'effectue à partir des 4 équations (3.23b); notons qu'il est plus commode de considérer la somme et la différence des populations inclinées:

pour le plan (xz)

$$[N_{-2}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) - N_{-3}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)](\mathbf{P}) = P_-^{-(xz)} [N_{+2}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) - N_{+3}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)] \quad (3.B.7)$$

$$[N_{-2}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) + N_{-3}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)](\mathbf{P}) = P_+^{-(xz)} [N_{+2}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) + N_{+3}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)] + 2(1 - P_+^{-(xz)}) N_{+1}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) \quad (3.B.8)$$

et par analogie pour le plan (yz)

$$[N_{-4}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) - N_{-5}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)](\mathbf{P}) = P_-^{-(yz)} [N_{+4}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) - N_{+5}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)] \quad (3.B.9)$$

$$[N_{-4}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) + N_{-5}^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)](\mathbf{P}) = P_+^{-(yz)} [N_{+4}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) + N_{+5}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t)] + 2(1 - P_+^{-(yz)}) N_{+1}''^{d.f}(\mathbf{z}_0, t) \quad (3.B.10)$$

La partie gauche des équations (3.B.7)-(3.B.10) dépend aussi des inconnues  $\mathbf{P}(\mathbf{z}, t) = \{P_\alpha^{-\beta}, \alpha \in I(\mathbf{z}), \beta \in I(\mathbf{z})\}$ ,  $\mathbf{z} \in \mathbf{Z}$ , d'après les développements (3.1) avec (3.22). Alors, la solution de (3.B.7) - (3.B.10) pour  $\mathbf{P}(\mathbf{z}, t)$  dépend des différences finies utilisées pour exprimer les populations  $N_{-\alpha}^{d.f}$ ,  $N_\alpha''^{d.f}$ . A l'exception de cas dégénérés, la solution sous la forme (3.B.1) -(3.B.3) est donc obtenue en principe. Des équations de ce type sont résolues numériquement pour l'écoulement de Poiseuille et de Couette dans la Section 3.4.

### 3.B.2. Point dans un coin 2D

Cette configuration est donnée dans la Fig.2-2b:  $l = 9$ ,  $k = 4$ . L'apparition de la population  $N_3$  commune aux populations "inclinaées"  $N_4$  et  $N_5$  distingue cette configuration de la configuration précédente. Néanmoins nous cherchons la solution du même type; on impose des probabilités nulles pour toutes les paires de populations "inclinaées"  $N_\alpha$  et  $N_\beta$  situées dans des plans différents et pour les populations "droites" si  $\alpha \neq \beta$ :

$$P_\alpha^{-\beta} = 0. \quad (3.B.11)$$

On impose les égalités suivantes pour toutes les paires de populations "inclinaées"  $N_{-\alpha}$  et  $N_{-\beta}$  situées dans un même plan ( $xy$ ) ou ( $yz$ ) (voir (3.B.3) pour comparaison)

$$P_\alpha^{-\alpha} = P_\beta^{-\beta} ; \quad (3.B.12)$$

pour toutes les paires de populations "inclinaées"  $N_{-\alpha}$  et  $N_{-\beta}$  situées dans un même plan (voir (3.B.3))

$$P_\alpha^{-\beta} = P_\beta^{-\alpha} \quad (3.B.13)$$

Les équations (3.25)-(3.26) entraînent les relations suivantes pour toute paire de populations "inclinaées" dans les plans ( $\alpha\beta$ ) et ( $\gamma\delta$ ) ayant des populations droites  $N_{-1}$  ou  $N_{-2}$  entre elles

$$P_3^{-3} = P_4^{-4} + P_5^{-5} - 1$$

$$P_{(\alpha\beta)}^{-1} = P_1^{-(\alpha\beta)} = 1 - P_+^{-(\alpha\beta)}, \quad P_{(\alpha\beta)}^{-2} = P_2^{-(\alpha\beta)} = 1 - P_+^{-(\alpha\beta)},$$

$$P_1^{-1} = 1 - 2(P_1^{-(\alpha\beta)} + P_1^{-(\gamma\delta)}), \quad P_2^{-2} = 1 - 2(P_2^{-(\alpha\beta)} + P_2^{-(\gamma\delta)}), \quad (3.B.14)$$

Les conditions (3.25)-(3.26) sont alors respectées et les équations (3.23b) fournissent 8 équations pour les 8 inconnues suivantes

$$P_+^{-(xy)}, P_+^{-(yz)}, P_-^{-(xy)}, P_-^{-(yz)} \text{ et } P_{\pm x}^{-(xz)} = P_4^{-4} \pm P_4^{-3}, \quad P_{\pm z}^{-(xz)} = P_5^{-5} \pm P_5^{-3} \quad (3.B.15)$$

L'application numérique de cette solution à un écoulement en tube carré est présentée dans la Section 3.4.

### 3.B.3. Point dans un coin 3D

Cette configuration avec  $l = 12$  est donnée sur la Fig.2-2c. La solution est analogue à la configuration précédente mais  $k$  est égal à 6 et il existe trois populations "droites" différentes qui participent aux réflexions. La solution avec les mêmes propriétés de symétrie que pour les deux cas précédents est également valable ici pour toutes les paires de populations "inclinaées"  $N_\alpha$  et  $N_\beta$  situées dans des plans différents ou pour les populations droites si  $\alpha \neq \beta$

$$P_\alpha^{-\beta} = 0; \quad (3.B.16)$$

pour toutes les paires de populations "inclinaées"  $N_{-\alpha}$  et  $N_{-\beta}$  situées dans le même plan

$$P_\alpha^{-\beta} = P_\beta^{-\alpha} \quad (3.B.17)$$

Alors les conditions (3.25)-(3.26) entraînent que (voir (3.B.14) pour comparaison)

$$\begin{aligned} P_4^{-4} &= P_5^{-5} + P_6^{-6} - 1, \quad P_8^{-8} = P_7^{-7} + P_9^{-9} - 1, \quad P_{10}^{-10} = P_{11}^{-11} + P_{12}^{-12} - 1; \\ P_{(\alpha\beta)}^{-1} &= P_1^{-(\alpha\beta)} = 1 - P_+^{-(\alpha\beta)}, \quad P_{(\alpha\beta)}^{-2} = P_2^{-(\alpha\beta)} = 1 - P_+^{-(\alpha\beta)}, \quad P_{(\alpha\beta)}^{-3} = P_3^{-(\alpha\beta)} = 1 - P_+^{-(\alpha\beta)}; \\ P_1^{-1} &= 1 - 2(P_1^{-(\alpha\beta)} + P_1^{-(\gamma\delta)}), \quad P_2^{-2} = 1 - 2(P_2^{-(\alpha\beta)} + P_2^{-(\gamma\delta)}), \quad P_3^{-3} = 1 - 2(P_3^{-(\alpha\beta)} + P_3^{-(\gamma\delta)}) \\ &\text{avec } \{(\alpha\beta), (\gamma\delta)\} \in \{(xy); (yz); (xz)\} \end{aligned} \quad (3.B.18)$$

où chaque fois les paires appropriées de populations "inclinaées" sont prises pour chaque population "droite" qu'elles encadrent. Par conséquent, les équations (3.23b) correspondent à 11 équations à résoudre pour les 12 inconnues (voir définition (3.B.15) )

$$P_{\pm x}^{-(xz)}, P_{\pm z}^{-(xz)}, P_{\pm y}^{-(yz)}, P_{\pm z}^{-(yz)}, P_{\pm x}^{-(xy)}, P_{\pm y}^{-(xy)} .$$

Il nous reste donc dans ce cas une inconnue supplémentaire pour satisfaire (3.23b) à la différence des cas précédents.

## **Chapitre 4.**

**Ecoulement en double phase: conditions à l'interface.**

## 4.1. Introduction.

Dans ce chapitre une partie du travail consacrée aux simulations à deux phases est réunie. Nous allons dans un premier temps décrire deux modèles principaux, appelés Modèle 1 et Modèle 2, qui sont une généralisation du modèle ILB sur réseau FCHC, proposé par Gunstensen et Rothman (1991a) au cas de deux phases avec des viscosités différentes et des nombres de particules immobiles différents. Nous examinons ensuite les possibilités de ces modèles à satisfaire les conditions standards macroscopiques à l'interface qui sont brièvement formulées dans le chapitre.

Deux cas sont étudiés: le cas d'une interface plane pour laquelle la tension superficielle n'intervient pas et le cas d'une interface plane, inclinée avec un angle arbitraire par rapport aux axes du réseau, pour laquelle les populations sont perturbées afin de créer la tension de surface. Dans le premier cas, il se pose le problème du choix des valeurs propres des matrices de collision en volume et à l'interface de manière à ce que les conditions sur les vitesses et les tenseurs des contraintes soient vérifiées au moins au premier ordre en termes du petit paramètre  $\varepsilon$ . Les équations interfaciales pour les populations sont traitées dans le même esprit que les conditions aux limites dans le Chapitre 2. Les résultats généraux sont décrits dans le corps du chapitre (voir aussi Ginzbourg et Adler, 1994a); le lecteur est renvoyé de temps à autre aux Appendices 4.A et 4.B pour des précisions sur des points particuliers.

La deuxième étape de l'analyse consiste à évaluer la tension de surface dans les modèles avec viscosités différentes à partir de la définition mécanique pour le coefficient de tension superficielle. Une approche différente de celle proposée par Gunstensen et al (1991a) et utilisée ensuite par Appert (1993) pour les modèles *liquide-gaz* et par Grunau (1993) pour PCLBE à deux phases est introduite. Cette approche consiste en effet à résoudre analytiquement les équations de Boltzmann avec perturbation dans le test mécanique, qui est décrit brièvement dans le Chapitre 1, afin d'exprimer les solutions pour les populations en termes des paramètres de perturbation et des valeurs propres des opérateurs de collision. Par ailleurs, ces solutions expliquent l'apparition des courants parasites au niveau des interfaces lorsque celles-ci sont inclinées par rapport aux axes du réseau. Ce problème a été signalé par Gunstensen (1992) et par Appert (1993), cependant aucun remède n'a été trouvé pour faire disparaître les courants anormaux. Comme toujours, on obtient par un choix particulier des valeurs propres des formules pour les coefficients de tension superficielle qui sont exactes pour les tests mécaniques dans les canaux limités par des parois solides; de plus, ce choix de valeurs propres supprime les courants non physiques dans les configurations de ce type. Les étapes principales pour le calcul de la tension de surface à partir des solutions locales obtenues pour les populations sont décrites dans le corps du chapitre; les détails techniques sur les calculs se trouvent dans les Appendices 4.C - 4.E. Cette partie du travail est discutée aussi dans Ginzbourg et Adler (1994b).

## 4.2. Généralités: conditions standards à l'interface.

Selon une approche macroscopique, classique depuis Truesdell et Toupin (1960), l'interface est traitée comme une surface matérielle. Si on suppose qu'il n'y pas de transfert de masse entre les deux phases (notées  $R$  et  $B$  au cours du chapitre), la vitesse normale doit être continue au travers de l'interface. En général on suppose qu'il y a adhérence entre les phases; par conséquent on obtient la condition de continuité des vitesses à l'interface

$$\mathbf{u}^R = \mathbf{u}^B \quad (4.1)$$

L'équation de conservation de quantité de mouvement au travers d'une interface donne deux conditions supplémentaires; lorsque les viscosités de surface sont négligeables, elles sont de la forme

$$2H\sigma + \mathbf{F}^S \cdot \mathbf{n} = \llbracket p \rrbracket - \mathbf{n} \cdot \llbracket \boldsymbol{\tau} \rrbracket \cdot \mathbf{n} \quad (4.2)$$

$$\nabla_S \sigma + \nabla_S \cdot \boldsymbol{\tau}^S + \mathbf{n} \cdot \llbracket \boldsymbol{\tau} \rrbracket \cdot \mathbf{I}_S + \mathbf{F}^S \cdot \mathbf{I}_S = 0 \quad (4.3)$$

où

$p$  est la pression;

$\sigma$  est un coefficient de tension superficielle;

$H = -\frac{1}{2} \nabla_S \mathbf{n}$  est une courbure moyenne,  $\mathbf{n}$  est la normale à la surface,  $|\mathbf{n}| = 1$ ;

$\mathbf{I}_S = \mathbf{I} - \mathbf{n}\mathbf{n}$ ;  $\nabla_S = \mathbf{I}_S \cdot \nabla$ ;

$\llbracket \boldsymbol{\tau} \rrbracket$  est le saut de  $\boldsymbol{\tau}$  à l'interface:  $\llbracket \boldsymbol{\tau} \rrbracket = \boldsymbol{\tau}^B - \boldsymbol{\tau}^R$

$\mathbf{F}^S$  est l'excès de densité de la force extérieure;

$\boldsymbol{\tau}^S$  est l'excès du tenseur visqueux des contraintes  $\boldsymbol{\tau}$ .

Le terme *excès* est emprunté de Edwards et al (1991);  $\psi^S$ , définie dans les points de l'interface continue  $2D$ , désigne la densité de la quantité  $\psi$  par unité de surface.

La première condition (4.2) est connue sous le nom de l'équation de Laplace, la deuxième (4.3) sous celui de l'équation de Levich. Une approche microscopique, dite "Surface-Excess Theory" due à Edwards et al (1991) permet de déduire les relations constitutives pour l'excès des champs macroscopiques à l'interface. Pour cela, un modèle micromécanique explicite de l'interface est introduit. Les conditions aux limites (4.1)-(4.3) sont ensuite reconsidérées avec l'hypothèse que l'interface est une surface Newtonienne immatérielle. Pour une surface newtonienne la relation entre l'excès du tenseur visqueux des contraintes  $\boldsymbol{\tau}^S$  et l'excès du tenseur des taux de déformations  $\mathbf{D}_S$  est linéaire selon la loi constitutive de Boussinesq-Scriven:

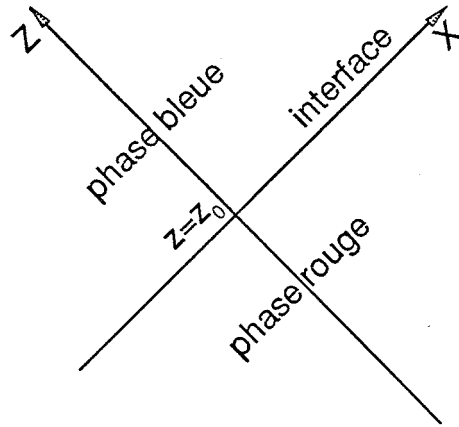


$$\tau^S = (\kappa^S - \mu^S)(\mathbf{I}_S : \mathbf{D}_S) \mathbf{I}_S + 2 \mu^S \mathbf{D}_S, \quad \mathbf{D}_S = \frac{1}{2} [(\nabla_S \mathbf{U}) \cdot \mathbf{I}_S + \mathbf{I}_S \cdot (\nabla_S \mathbf{U})^t]$$

En particulier, dans cette hypothèse la condition de continuité de la vitesse normale s'écrit sous la forme plus générale

$$\mathbf{n} \cdot \|(\mathbf{u} - \mathbf{U}) \rho\| = 0 \quad (4.4)$$

où  $\mathbf{U}$  est une vitesse matérielle d'interface;  $\rho$  est la densité en volume. La condition (4.4) est équivalente à (4.1) pour la composante normale lorsque l'interface est matérielle.



**Figure 4-1:** Interface plane  $z = z_0$  entre les phases rouge et bleue.

Nous allons suivre dans l'analyse des conditions interfaciales imposées par les modèles ILB une approche macroscopique. Nous proposons d'abord que l'interface plane est définie par l'équation  $z = z_0$  (voir Figure 4-1). Nous supposons de plus que la vitesse normale à l'interface satisfait la condition

$$\frac{\partial u_z^R}{\partial z}(\mathbf{z}_0) = \frac{\partial u_z^B}{\partial z}(\mathbf{z}_0) = 0 \quad (4.5)$$

où  $\mathbf{z}_0$  désigne un point quelconque de l'interface. Par conséquent, on obtient d'après l'équation de Laplace (4.2) la condition de continuité des pressions à l'interface:

$$p^R(\mathbf{z}_0) = p^B(\mathbf{z}_0) \quad (4.6)$$

Nous considérons ensuite la condition de Levich (4.3) sur les contraintes tangentielles sous la forme

$$\mathbf{n} \cdot \|\tau\| \cdot \mathbf{I}_S = 0, \quad (4.7)$$

et par conséquent, pour les fluides incompressibles on obtient la condition de continuité pour les tenseurs des taux de déformations  $D_{\alpha\alpha}$ :

$$\mu^R D_{\alpha z}^R(\mathbf{z}_0) = \mu^B D_{\alpha z}^B(\mathbf{z}_0) \quad (4.8)$$

où les tenseurs des taux de déformations  $\mathbf{D}$  sont donnés par la formule (2.22);  $\alpha$  désigne les directions tangentielles,  $x$  et  $y$ .

### 4.3. Modèles 1 et 2 à deux phases.

Les Modèles 1 et 2 à deux phases pour la simulation de fluides non miscibles en 3D par l'équation de Boltzmann sont basés sur l'algorithme proposé par Gunstensen et al (1991) pour le réseau FHP et développé ensuite par Gunstensen et Rothman (1991a), Gunstensen (1992) sur un réseau FCHC. Nous généralisons ce dernier algorithme, dit ILB, formellement au cas de viscosités différentes, de nombres de particules immobiles différents dans chaque phase. Dans le Modèle 1, les paramètres qui apparaissent dans l'équation de Boltzmann correspondent à ceux de la phase majoritaire dans le noeud; par contre le Modèle 2 est le même à l'intérieur de chaque phase, mais une matrice spéciale de collision est introduite à l'interface; un choix adéquat des valeurs propres de cette matrice permet de satisfaire les conditions interfaciales jusqu'au premier ordre en  $\varepsilon$  et dans certains cas jusqu'au second ordre. L'analyse théorique des conditions interfaciales imposées par ces modèles sur l'interface plane est donnée dans la Section 4.4; elle est détaillée dans l'Appendice 4.A. Le coefficient de tension de surface est déduit pour chaque modèle dans la Section 4.5.

Nous avons donc les populations  $R_i$  et  $B_i$  des deux phases, dites rouge et bleue. Les phases peuvent avoir des viscosités différentes, déterminées par des valeurs propres différentes  $\lambda_{\psi}^R$  et  $\lambda_{\psi}^B$  (voir (1.78)), ainsi que des nombres différents de particules immobiles  $L^R$  et  $L^B$ . Par conséquent, nous avons deux opérateurs de collision différents  $\mathbf{A}^R$  et  $\mathbf{A}^B$ . Des forces extérieures différentes  $\mathbf{F}^R$  et  $\mathbf{F}^B$  peuvent être imposées dans chaque phase. L'idée principale du modèle ILB consiste en l'exécution de l'algorithme de Boltzmann de gaz sur réseau en simple phase pour la population totale

$$N_i = R_i + B_i, \quad i = 0, \dots, 24 \quad (4.9)$$

Deux opérations supplémentaires sont incluses: pour introduire la tension superficielle dans le modèle et pour séparer les fluides. On peut donc diviser l'algorithme selon les étapes suivantes.

### 1. Définition des champs en temps $t$ :

Soient les populations  $R_i(\mathbf{r}, t)$  et  $B_i(\mathbf{r}, t)$ ,  $i = 0, \dots, 24$ , obtenues après propagation à l'itération  $t$ .

a) Les densités macroscopiques  $\rho_R, \rho_B$  dans chaque phase sont

$$\rho_K(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=0}^{24} K_i(\mathbf{r}, t) W_i^K, \quad \text{for } K = R, B \quad (4.10a)$$

$$W_0^K = L^K, \quad W_i^K = 1, \quad i = 1, \dots, 24, \quad K = R, B \quad (4.10b)$$

b) La population totale  $N_i$  et la densité totale  $\rho$  sont:

$$N_i(\mathbf{r}, t) = R_i(\mathbf{r}, t) + B_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, 24 \quad (4.11)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_R(\mathbf{r}, t) + \rho_B(\mathbf{r}, t)$$

c) L'addition de la force extérieure  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  est effectuée de la manière suivante:

$$\begin{aligned} N_i'(\mathbf{r}, t) &= N_i(\mathbf{r}, t) + \delta N_i^F(\mathbf{r}, t), \quad i = 1, \dots, 24 \\ \delta N_i^F(\mathbf{r}, t) &= d' \{ \rho \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \} \cdot \mathbf{C}_i, \\ \rho \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) &= w^R \mathbf{F}^R \rho_R(\mathbf{r}, t) + w^B \mathbf{F}^B \rho_B(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (4.12a)$$

où  $\mathbf{F}^B$  et  $\mathbf{F}^R$  sont les forces extérieures imposées en volume dans chaque phase;  $d'$  est donnée dans (2.3g);  $w^R$  et  $w^B$  sont des constantes définies selon le modèle:

-pour le Modèle 1, la force totale est celle de la phase majoritaire  $K$

$$w^K = 1, \quad w^{\bar{K}} = 0 \quad \text{si } \rho_K(\mathbf{r}, t) = \max\{\rho_K(\mathbf{r}, t), \rho_{\bar{K}}(\mathbf{r}, t)\}; \quad K \neq \bar{K}, \quad \{K, \bar{K}\} \in \{R, B\};$$

-pour le Modèle 2, la force totale est proportionnelle à la contribution de chaque phase à l'interface:

$$w^B = w^R = 1.$$

d) La vitesse totale est définie de la même façon qu'en simple phase (voir (2.5) où les  $N_i$  sont remplacées par  $N_i'$  et, par conséquent,  $0.5\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  est remplacé par  $\{-0.5\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)\}$ ).

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_{i=1}^{24} N_i'(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i}{\rho(\mathbf{r}, t)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \quad (4.12b)$$

**2. Collisions de la population totale:** cela s'écrit par analogie avec la simple phase

$$N_i^*(\mathbf{r}, t) = N_i'(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=0}^{24} A_{ij} N_j^{neq.}(\mathbf{r}, t) W_j, \quad i = 0, \dots, 24 \quad (4.13a)$$

$$N_i^{neq.}(\mathbf{r}, t) = N_i'(\mathbf{r}, t) - N_i^{eq.}(\mathbf{r}, t); \quad W_0 = L; \quad W_i = 1, \quad i = 1, \dots, 24$$

où le nombre des particules immobiles  $L(\mathbf{r}, t)$  pour la phase totale, et par conséquent, la solution à l'équilibre  $N^{eq.}(L)$  (voir (2.3)), est définie par le choix de la matrice de collision  $A(\mathbf{r}, t)$ . Les paramètres de l'opérateur de collision interfaciale sont déterminés dans le Modèle 1 par la couleur majoritaire dans le noeud; le choix de la matrice de collision dans le Modèle 2 pour les noeuds où deux phases coexistent est discuté dans la section suivante. Dans le cas avec des nombres différents de particules immobiles, afin de conserver la masse, la population  $N_0'(\mathbf{r}, t)$  est définie comme suit:

$$N_0'(\mathbf{r}, t) = \frac{N_0(\mathbf{r}, t)L(\mathbf{r}, t-1)}{L(\mathbf{r}, t)} \quad (4.13b)$$

**3. La tension de surface:** Les populations sont perturbées pour créer la tension superficielle dans les modèles selon la procédure proposée par Gunstensen et Rothman (1991a) pour le modèle FCHC. La perturbation  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  de la population  $N_i^*(\mathbf{r}, t)$  est définie par (voir (1.106c) pour la forme standard de la perturbation)

$$N_i''(\mathbf{r}, t) = N_i^*(\mathbf{r}, t) + \delta N_i(\mathbf{r}, t), \quad (4.14a)$$

$$\delta N_i(\mathbf{r}, t) = C^{per.} \left\{ \frac{(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f})^2}{(\mathbf{f} \cdot \mathbf{f})^2} - \frac{1}{2} \right\}, \quad i = 1, \dots, 24$$

où le gradient de couleur  $\mathbf{f}$  est défini de la même façon (1.95a)

$$\mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{24} \mathbf{C}_i [\rho_R(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t) - \rho_B(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t)]; \quad (4.14b)$$

$C^{per.}$  est une fonction de  $|\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)|$  qui décroît avec la distance à l'interface. Notons que la perturbation (4.14a) ne crée ni masse, ni quantité de mouvement; néanmoins, nous allons voir dans la Section 4.5 qu'elle introduit des termes anisotropes dans les solutions pour les populations.

#### 4. Coloriage de la population totale:

Ceci est une deuxième modification de l'algorithme en simple phase selon Rothman et Gunstensen (1991a) pour séparer les populations  $R_i''$  et  $B_i''$  avant propagation. Le coloriage de la population totale  $N_i''$  (4.14a)

$$N_i''(\mathbf{r}, t)W_i = R_i''(\mathbf{r}, t)W_i^R + B_i''(\mathbf{r}, t)W_i^B, \quad i = 0, \dots, 24 \quad (4.15a)$$

peut être effectué par la solution du problème de maximisation linéaire à 25 variables pour définir la contribution de chaque phase à la population totale; par exemple, on peut déterminer  $R_i''(\mathbf{r}, t)$  comme l'ensemble des populations qui maximise la fonction

$$\mathcal{G}(R_i) = \sum_{i=1}^{24} R_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) \quad (4.15b)$$

avec conservation de la masse de la phase rouge:

$$\sum_{i=0}^{24} R_i W_i^R = \rho_R(\mathbf{r}, t), \quad (4.15c)$$

et

$$0 \leq R_i W_i^R \leq N_i''(\mathbf{r}, t)W_i(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, 24 \quad (4.15d)$$

On détermine ensuite la contribution de la deuxième phase par la relation (4.15a) en conservant la masse de la phase bleue et la quantité de mouvement totale.

Essentiellement, cette opération tend à envoyer les populations d'une couleur vers les sites de même couleur. En effet, la couleur de populations  $N_i''$  parallèles à l'interface, c'est-à-dire avec  $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f})=0$ , n'est pas déterminée par l'algorithme. En outre, les vitesses de chaque phase  $\mathbf{u}^R$  et  $\mathbf{u}^B$  dans les noeuds où deux phases coexistent ne peuvent pas être déduites des solutions pour les populations  $R_i$  et  $B_i$  dans ces noeuds; on suppose en général que  $\mathbf{u}^R$  et  $\mathbf{u}^B$  dans de tels points coïncident avec la vitesse totale (4.12b). Cela pose le problème de l'interprétation des résultats obtenus en termes des conditions classiques à l'interface.

#### 5. Propagation dans chaque phase par l'algorithme de simple phase:

$$\begin{aligned} R_i W_i^R(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) &= R_i'' W_i^R(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, 24 \\ B_i W_i^B(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) &= B_i'' W_i^B(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, 24 \end{aligned} \quad (4.16)$$

#### 6. Retour en 1 .

La mouillabilité est imposée dans les modèles par le coloriage de points solides au début de l'algorithme ou en chaque itération selon la variation temporelle des densités volumiques près des parois solides. Par exemple, les tests avec un ménisque situé entre deux phases dans un champ de gravitation donnent la possibilité d'étudier la dépendance de l'angle de contact en fonction de la densité du solide; les résultats de Grunau (1993) pour la mouillabilité sont mentionnés dans la Section 1.4.2.

Donnons quelque exemples qualitatifs pour illustrer les possibilités des modèles.

Dans le premier exemple, le milieu poreux est périodique dans toutes les directions. Une fraction liquide consiste d'un fluide mouillant et d'une sphère d'un fluide non mouillant. La force extérieure dans la direction  $x$  est appliquée aux deux fluides afin de simuler le gradient de pression macroscopique. Le calcul est fait par le Modèle 2. La perturbation (4.14a) est prise sous la forme classique (1.106c)

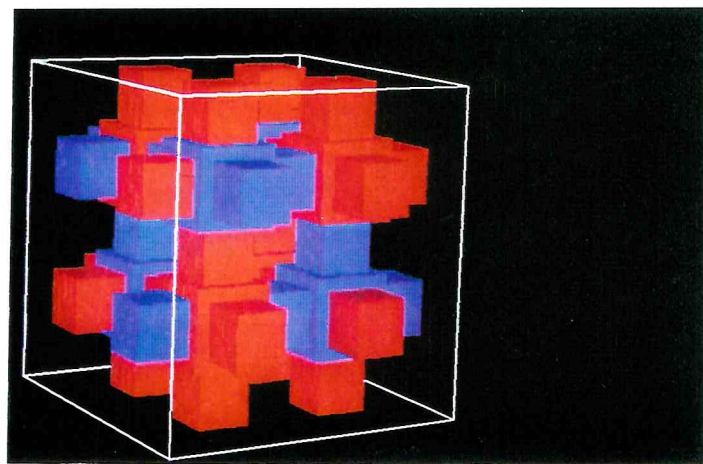
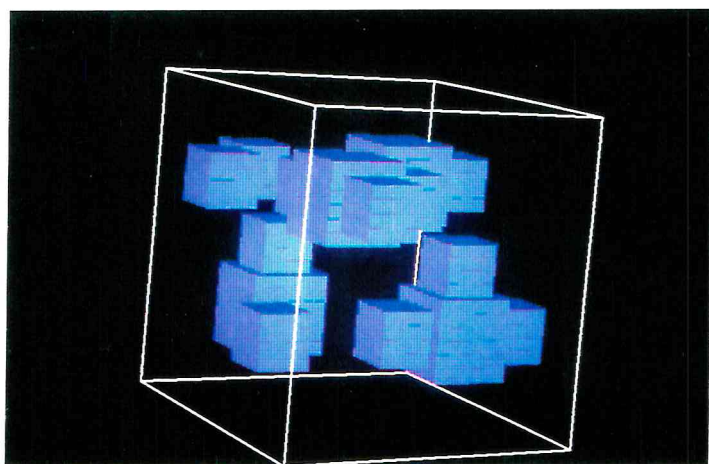
$$C^{per.}(\mathbf{r}, t) = A^{per.} |\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)| \quad (4.17)$$

Le coefficient de tension superficielle peut alors être évalué par la formule (4.64b). L'évolution d'une sphère au travers de ce milieu est montrée dans la Figure 4-2; ainsi les résultats satisfont qualitativement à la physique du problème.

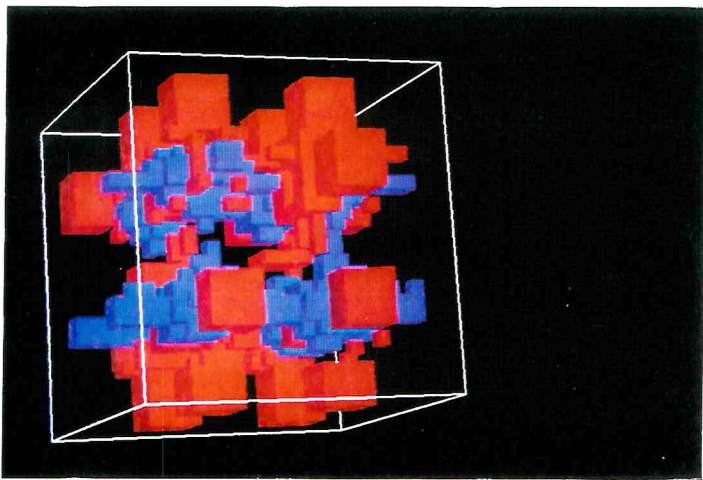
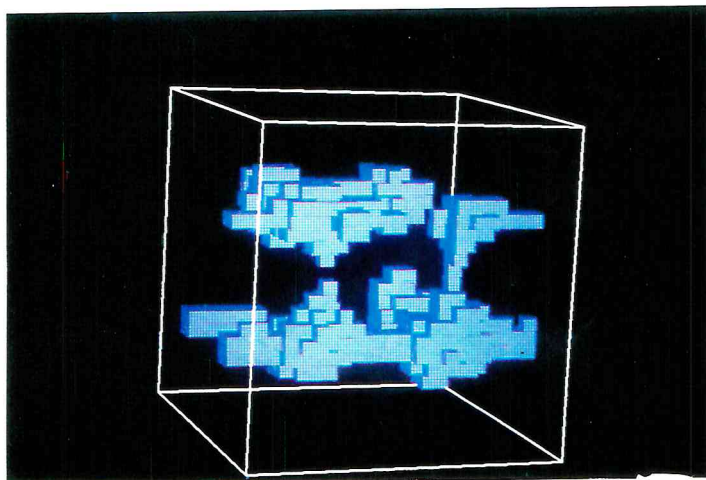
Dans le deuxième exemple, illustré par la Figure 4-3, le milieu poreux est aussi périodique dans toutes les directions. Initialement, une moitié des cubes est remplie par le fluide mouillant et visqueux, l'autre moitié par le fluide non mouillant et non visqueux; la distribution initiale des phases dans les canaux est aléatoire; la saturation de fluide non mouillant est  $\phi = 0.3888$ . Le calcul est effectué par le Modèle 1. La force principale est dans la direction  $x$ . Seul le fluide mouillant est forcé dans la direction  $z$  pour introduire un effet de gravité dans le modèle, car des fluides avec des densités différentes ne peuvent pas être simulés correctement par ILB (voir dans la Section 4.4). Le calcul du coefficient de la tension superficielle est fait avec l'aide de la formule (4.63b). Le déplacement du fluide non mouillant du milieu poreux est caractérisé par la formation d'une phase continue quand le fluide mouillant est attiré par les parois solides.

**Figure 4-2:** Mouvement d'un fluide non mouillant dans un milieu poreux périodique rempli par un fluide mouillant. Les codes des couleurs sont: fluide non mouillant (blanc), fluide mouillant (noir), milieu poreux (bleu), interface (bleue clair). Les données sont:  $v^{(non\ mouillant)} = 1.5$ ,  $v^{(mouillant)} = 0.5$ ,  $F_x^{(non\ mouillant)} = F_x^{(mouillant)} = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $A^{per.} = 2 \cdot 10^{-4}$ ,  $d = 0.2$ ,  $\sigma \approx 0.1152$ ,  $L^{(non\ mouillant)} = L^{(mouillant)} = L^{int} = 24$ . La direction générale du mouvement est de gauche à droite. Le temps  $t$  est donné en nombre d'itérations. (a):  $t = 0$ , le rayon initial de la sphère est égal à 7 unités de réseau; (b, c):  $t = 2000$ , l'interface où deux phases coexistent est visualisée comme une grille; (d):  $t = 4000$ , la bulle traverse la frontière à droite, mais entre à nouveau par la gauche à cause de la périodicité spatiale; (e, f):  $t = 8000, 10000$ , la phase non mouillante est devenue continue.

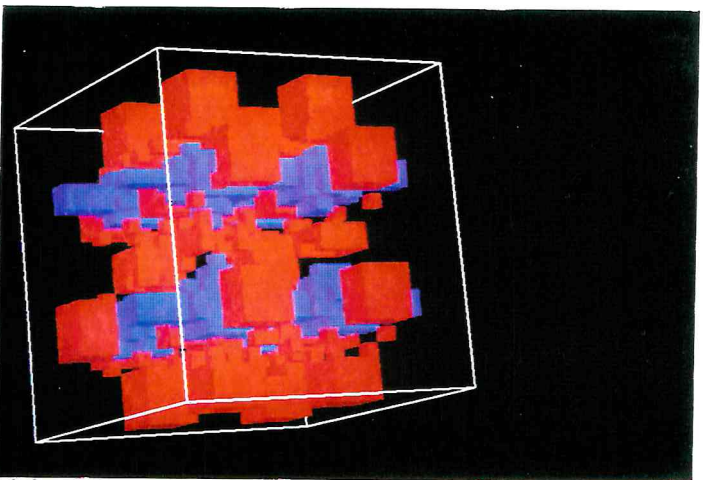
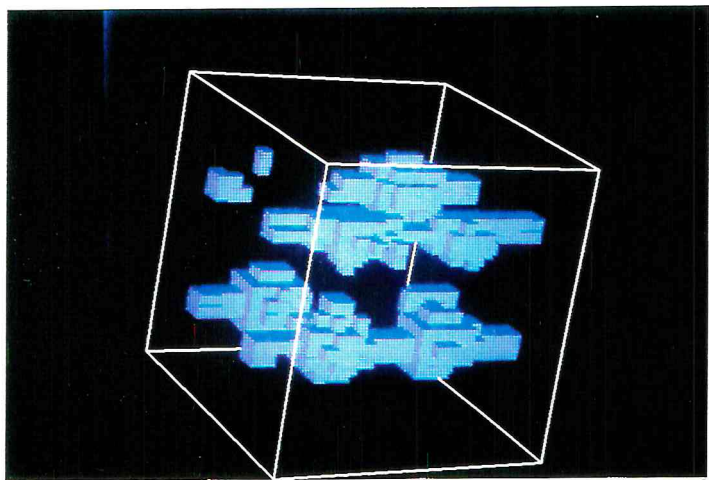
**Figure 4-3:** Mouvement de fluide non mouillant et de fluide mouillant dans un milieu poreux périodique. La fraction liquide se compose de 8 cubes égaux de dimensions  $6*6*6$  (unités de réseau) interconnectés par les canaux liquides qui sont aussi des cubes de dimension  $4*4*4$ . Les codes de couleurs sont: fluide non mouillant (bleu), fluide mouillant (rouge), milieu poreux (noir). (a): fluide bleu; (b): fluide bleu et fluide rouge. Les données sont:  $v^{(non\ mouillant)} = 0.05(5)$ ,  $v^{(mouillant)} = 0.5$ ;  $A_{per.} = 1*10^{-5}$ ;  $\sigma \approx 0.025$ ;  $d = 0.2$ ;  $F_x^{(non\ mouillant)} = F_x^{(mouillant)} = 8*10^{-3}$ ,  $F_z^{(non\ mouillant)} = 0$ ,  $F_z^{(mouillant)} = -1*10^{-4}$ ,  $L^{(mouillant)} = L^{(non\ mouillant)} = L^{int} = 24$ . La direction générale du mouvement est de gauche à droite. Le temps  $t$  est donné en nombre d'itérations.



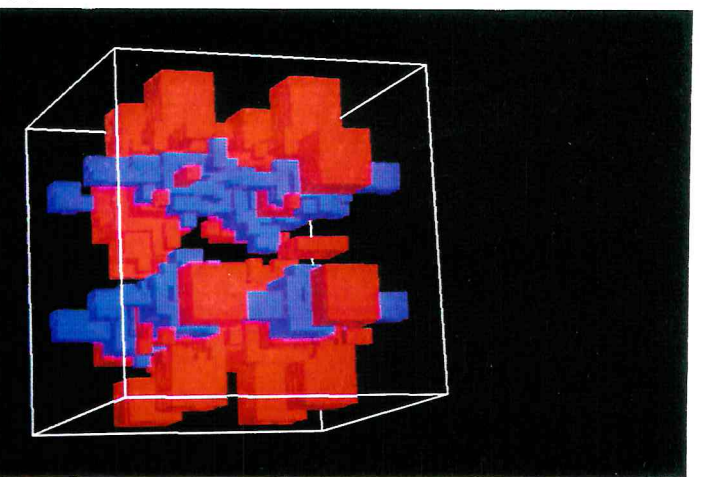
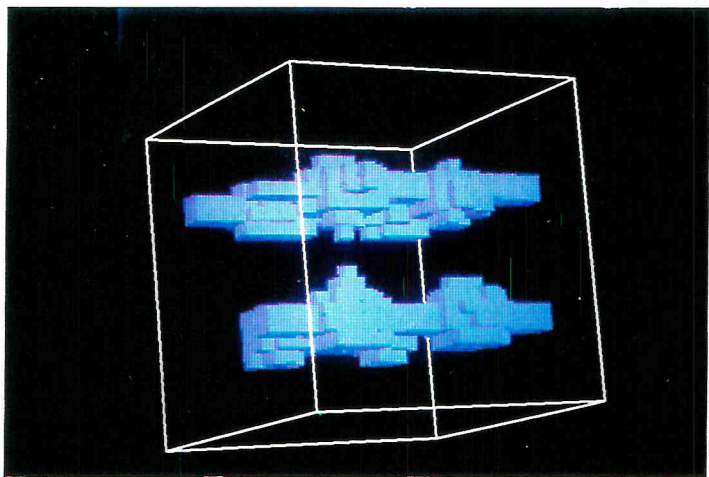
$t = 0$



$t = 1500$



$t = 2500$

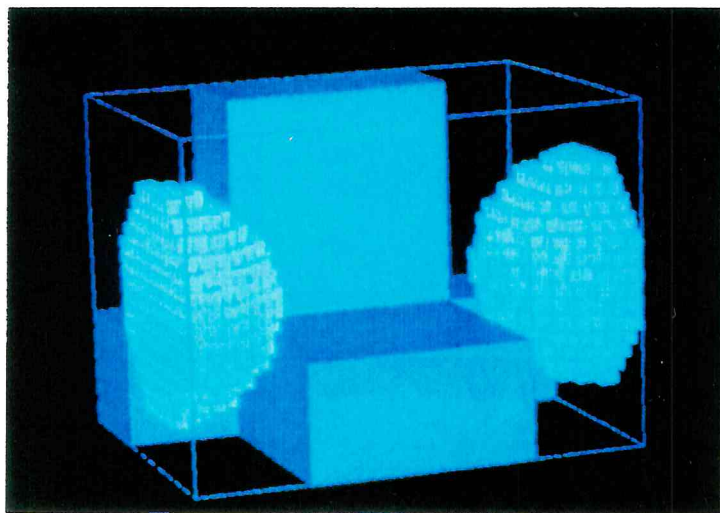


**a**

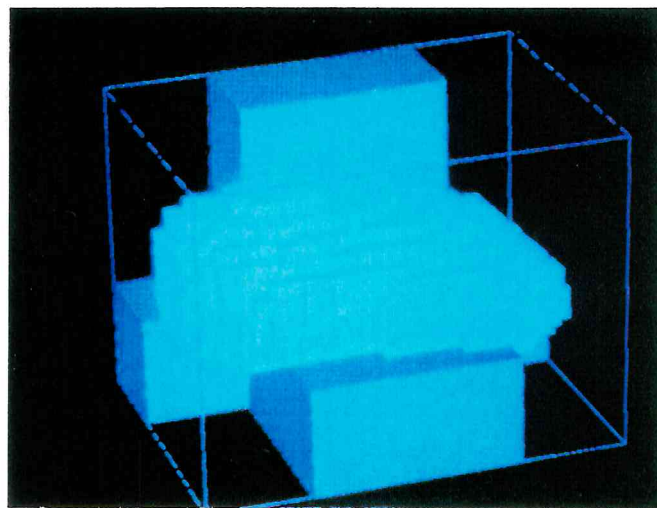
$t = 3500$

**b**

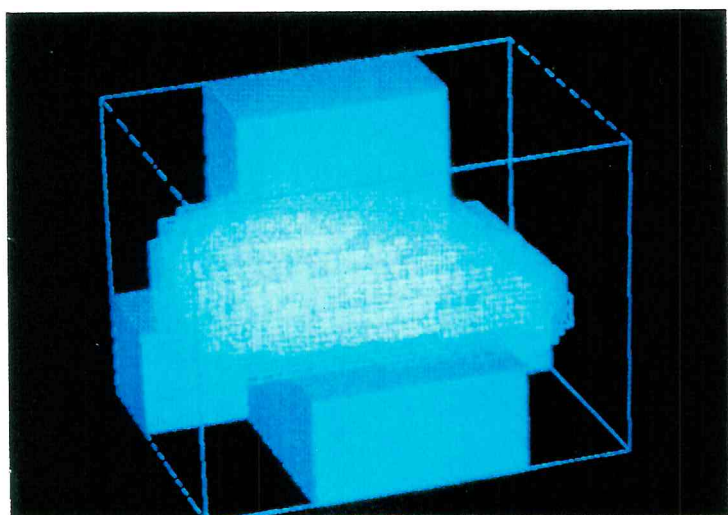




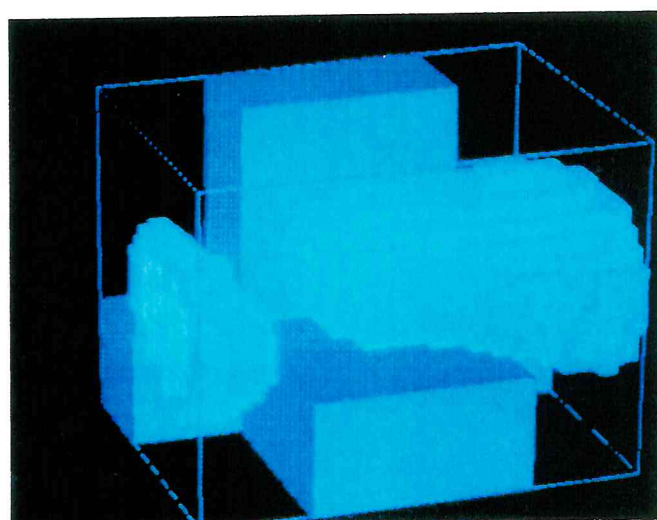
**a**



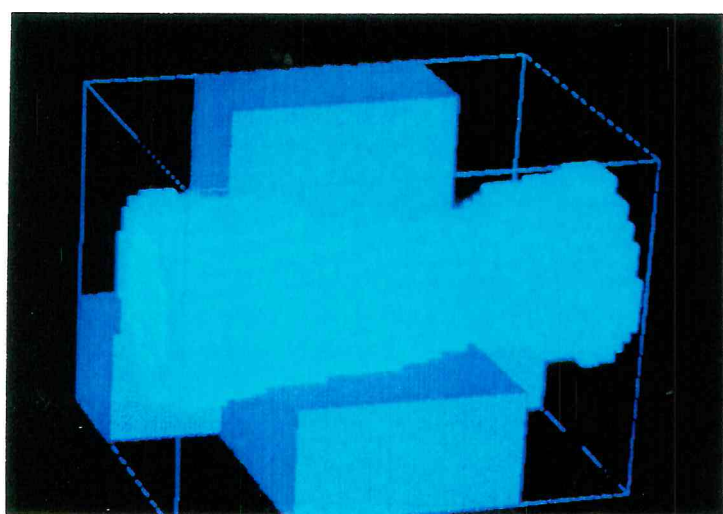
**b**



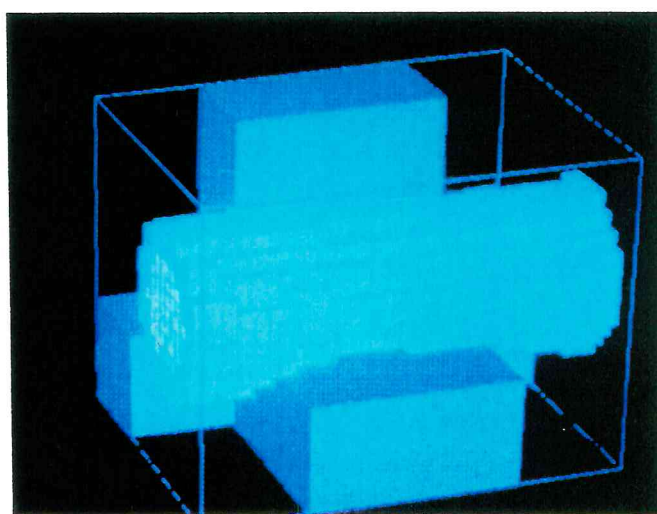
**c**



**d**



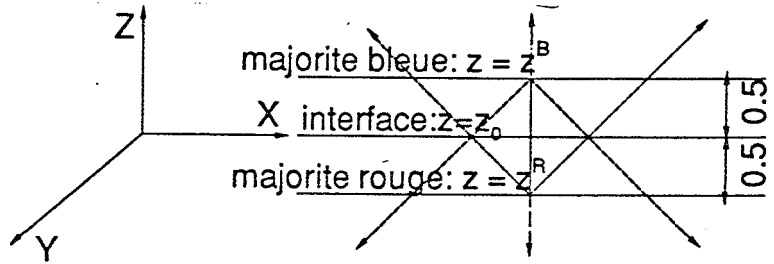
**e**



**f**

• *Analyse pour le Modèle 1.*

Pour le Modèle 1 on suppose que pendant deux itérations successives  $t$  et  $t+1$ , dans le plan  $z = z^K$ ,  $K = \{R, B\}$ , la phase  $K$  est majoritaire (voir Figure 4-4a); donc la matrice de collision  $\mathbf{A}^K$  est appliquée aux noeuds  $\mathbf{z}^K$  situés dans ce plan.



**Figure 4-4a:** Interface plane entre les fluides bleu et rouge dans le Modèle 1.

Soit une population totale  $N_i(\mathbf{z}^K)$  qui se déplace par l'équation de Boltzmann d'un noeud  $\mathbf{z}^K$  vers l'un des noeuds sur la frontière de la deuxième phase  $\mathbf{z}^{\bar{K}}$

$$\mathbf{z}^{\bar{K}} = \mathbf{z}^K + \mathbf{C}_i, \quad K \neq \bar{K}, \quad \{K, \bar{K}\} \in \{R, B\} \quad (4.21)$$

Pour satisfaire les équations de Boltzmann, les coefficients dans le développement des populations dans un noeud quelconque correspondent à la matrice de collision et à la force extérieure appliquées dans ce noeud. Alors la population totale  $N_i(\mathbf{z}^{\bar{K}})$  peut être exprimée sous forme d'une série (2.27) en termes de la densité  $\rho_{\bar{K}}(\mathbf{z}^{\bar{K}})$  et de la vitesse  $\mathbf{u}^{\bar{K}}(\mathbf{z}^{\bar{K}})$ . D'autre part, la population  $N_i(\mathbf{z}^{\bar{K}})$  peut être exprimée en termes des valeurs macroscopiques  $\rho_K(\mathbf{z}^K)$  et  $\mathbf{u}^K(\mathbf{z}^K)$  du noeud de départ par *continuité* de la population  $N_i(\mathbf{z}^K)$ .

Si les populations totales exprimées dans les variables macroscopiques de la phase  $K$  sont notées  $\mathbf{N}^{(K)}$ , les conditions interfaciales pour le Modèle 1 ont la forme (voir Figure 4-4a)

$$\begin{aligned} N_i^{(R)}(\mathbf{z}^B, t) &= N_i^{(B)}(\mathbf{z}^B, t), \quad \mathbf{z}^B = \mathbf{z}^R + \mathbf{C}_i, \quad C_{iz} > 0 \\ N_i^{(B)}(\mathbf{z}^R, t) &= N_i^{(R)}(\mathbf{z}^R, t), \quad \mathbf{z}^R = \mathbf{z}^B + \mathbf{C}_i, \quad C_{iz} < 0, \quad \forall \mathbf{z}^R, \mathbf{z}^B \end{aligned} \quad (4.22a)$$

On substitue le développement des populations sous la forme (2.3)-(2.4) pour l'analyse au premier ordre en négligeant les termes  $\mathbf{N}^{(1F)}$

$$\left\{ d^B + d' \left[ (\rho \mathbf{u})^B \cdot \mathbf{C}_i + \frac{\mathbf{Q}_i \cdot \nabla (\rho \mathbf{u})^B}{\lambda_\psi^B} \right] + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \right\} (\mathbf{z}, t) = \left\{ d^R + d' \left[ (\rho \mathbf{u})^R \cdot \mathbf{C}_i + \frac{\mathbf{Q}_i \cdot \nabla (\rho \mathbf{u})^R}{\lambda_\psi^R} \right] + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \right\} (\mathbf{z}, t)$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{z} &= \mathbf{z}^R + \mathbf{C}_i, \quad C_{iz} > 0 \\ \mathbf{z} &= \mathbf{z}^B + \mathbf{C}_i, \quad C_{iz} < 0, \quad \forall \mathbf{z}^R, \mathbf{z}^B \end{aligned} \quad (4.22b)$$

En supposant que l'interface ne dépend pas du temps, on peut avec l'aide d'un développement de Taylor déduire les relations entre  $\rho \mathbf{u}^R$  et  $\rho \mathbf{u}^B$  et entre leurs gradients dans le plan  $z = z_0 = \frac{(z^R + z^B)}{2}$  au milieu des noeuds  $\mathbf{z}^R$  et  $\mathbf{z}^B$  à partir des équations interfaciales (4.22b).

Une analyse de ce type est faite dans l'Appendice 4.A; il est résumé ensuite dans la Table 4.1. D'après cette analyse pour des phases avec des viscosités différentes, lorsque les forces extérieures et les densités volumiques sont les mêmes pour les deux phases, les conditions interfaciales (4.1) et (4.8) sont vérifiées au milieu des noeuds seulement pour un écoulement dans lequel les variations de la vitesse normale le long de l'interface sont négligeables

$$\left( \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial \alpha} \right)^R = \left( \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial \alpha} \right)^B = 0, \quad \alpha = \{x, y\} \quad (4.22c)$$

Notons que cela est analogue au résultat (2.24) pour la réflexion en arrière; rappelons que cela a été obtenu lorsque la dérivée de la vitesse normale le long de la paroi était négligée.

Cependant, la condition de la continuité de la vitesse (4.1) sur l'interface plane redonne la continuité de la quantité de mouvement lorsque les densités dans les phases sont différentes d'après le choix (4.20). Par conséquent, le modèle ne peut pas introduire des densités différentes sans qu'il manque la continuité des vitesses. On constate que l'introduction de forces différentes conduit à une erreur du premier ordre dans la position de l'interface.

Nous considérons ensuite les termes  $\mathbf{N}^{1F}$  (voir (2.4c)) du premier ordre et les termes  $\mathbf{N}^2$  (voir (2.27)-(2.28)) du second ordre dans l'équation (4.22a) pour évaluer l'erreur sur la position de l'interface si les forces extérieures et les viscosités sont différentes. Pour déduire les solutions analytiques pour les valeurs propres indépendamment de l'écoulement, nous nous restreignons aux équations simplifiées de type écoulement de Poiseuille à deux phases

$$\begin{aligned} -F_x^B &= \nu^B \frac{\partial^2 u_x^B}{\partial z^2}, \quad z_0 \leq z \\ -F_x^R &= \nu^R \frac{\partial^2 u_x^R}{\partial z^2}, \quad z \leq z_0 \end{aligned} \quad (4.23a)$$

Dans ce cas, les conditions interfaciales sont vérifiées *exactement* au milieu des noeuds  $z^R$  et  $z^B$  si les forces extérieures et les densités en volume sont égales ou, quand  $F_x^R \neq F_x^B$ , si les secondes valeurs propres des matrices de collision sont telles que

$$\begin{aligned}\lambda_2^R &= \lambda_{2c}(\lambda_\psi^R) \\ \lambda_2^B &= \lambda_{2c}(\lambda_\psi^B)\end{aligned}\tag{4.23b}$$

où  $\lambda_{2c}$  est la solution (2.32) qui a été obtenue pour annuler la vitesse tangentielle au milieu des noeuds pour la réflexion en arrière. Cela complète l'analogie entre le Modèle 1 et le rebond lorsque l'interface (ou la paroi solide) est plane.

La solution théorique du problème (4.23a) avec les conditions d'adhérence aux parois  $z = \pm h$  et les conditions de continuité (4.1) et (4.8) sur l'interface  $z = z_0$  est donnée par les formules suivantes

$$u_x^K(z) = A^K z^2 + B^K z + C^K; \quad K = R \text{ pour } -h \leq z \leq z_0 \text{ et } K = B \text{ pour } z_0 \leq z \leq h$$

où

$$A^K = -\frac{F_x^K}{2\nu^K}, \quad K = \{R, B\}; \quad C^R = -(A^R h^2 - B^R h), \quad C^B = -(A^B h^2 + B^B h),$$

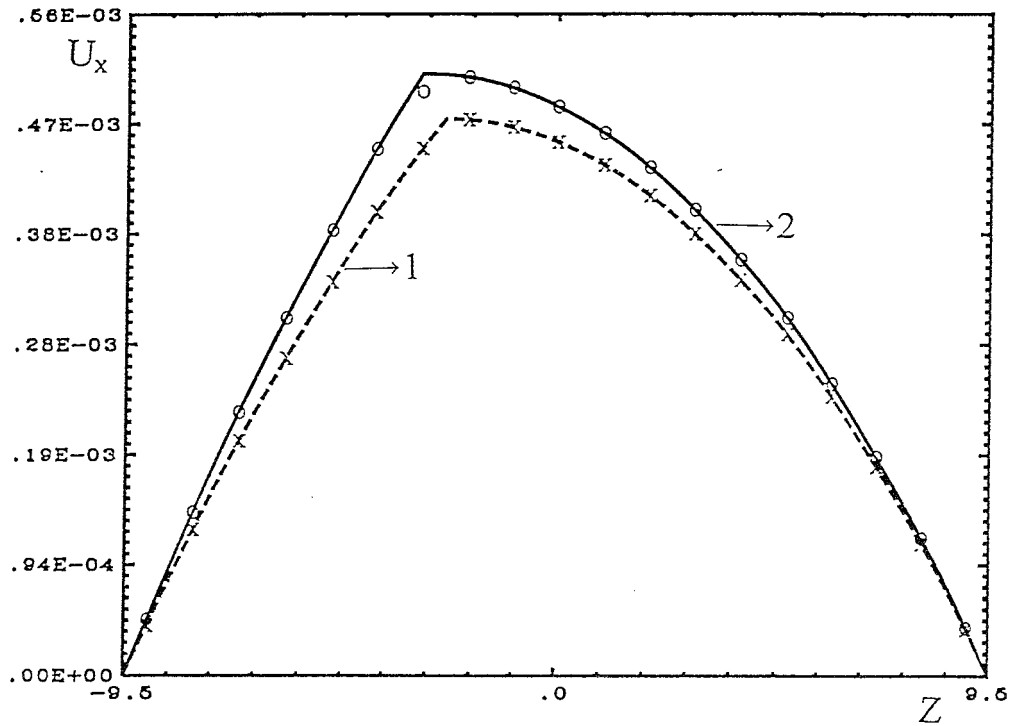
$$B^B = \frac{1}{z_0(1-\eta) - h(1+\eta)} \{(A^B - A^R)(h^2 - z_0^2) + 2z_0(A^B\eta - A^R)(h + z_0)\},$$

$$B^R = B^B\eta + 2z_0(A^B\eta - A^R), \quad \eta = \frac{\nu^B}{\nu^R}$$

(4.24)

Les résultats numériques pour le Modèle 1 (voir Figure 4-5) confirment que cette solution est obtenue pour un rapport arbitraire entre les viscosités et les forces extérieures dans les phases si les valeurs propres (4.23b) sont imposées dans chaque phase; notons que les frontières solides sont automatiquement vérifiées dans ce cas du fait du choix (4.23b).

Néanmoins, les points où une des conditions interfaciales (4.1) et (4.8) est satisfaite dépendent, en général, de l'écoulement; par analogie avec la condition d'adhérence pour une composante normale et pour une composante tangentielle de la vitesse, l'interface ne peut pas être fixée entre les noeuds où les deux phases coexistent simultanément seulement par le choix des valeurs propres des matrices de collision même dans une géométrie simple.



**Figure 4-5:** Comparaison entre les résultats numériques par le Modèle 1(x) avec les valeurs propres  $\lambda_2$  données par (4.23b) et par le Modèle 2 (o) avec  $\lambda_\psi^{int.} = \lambda_\psi^{(0)}$  (4.30a), les valeurs propres  $\lambda_2$  données par (4.31a), et les prédictions théoriques pour l'écoulement de Poiseuille plan à deux phases avec des viscosités cinématiques différentes et des forces extérieures différentes:

$F_x^R = 10^{-7}$ ,  $F_x^B = 10^{-5}$ ,  $h = 9.5$ ,  $A^{per.} = 0$ ,  $L^R = L^B = L^{int.} = 24$ ,  $\nu^R = 0.01852$ ,  $\nu^B = 1.5$  avec  
 $z_0^R = -3$ ,  $z_0^B = -2$ ,  $z_0 = -2.5$  pour le Modèle 1 (-----),  
 $z_0 = -3$ ,  $\nu^{int.} = 0.03569$  pour le Modèle 2 (—).

**Table 4.1.**  
**Résultats de l'algorithme de recoloriage: interface plane.**

		<b>Modèle 1 (Fig.4-4a)</b>	<b>Modèle 2 (Fig.4-4b)</b>		
		Définition de la matrice de collision par majorité de couleur:  $A_{ij} = \begin{cases} A_{ij}^R(\lambda_\psi^R, \lambda_2^R, L^R), \rho_R > \rho_B \\ A_{ij}^B(\lambda_\psi^B, \lambda_2^B, L^B), \rho_B > \rho_R \end{cases}$ Sans conditions sur $\lambda_\psi^{\text{int.}}$ :  $\lambda_\psi^{\text{int.}}(\mathbf{z}^B) = \lambda_\psi^B$ $\lambda_\psi^{\text{int.}}(\mathbf{z}^R) = \lambda_\psi^R$	Introduction de la matrice de collision supplémentaire $A^{\text{int.}}$ à l'interface $\mathbf{z} = \mathbf{z}^{\text{int.}}$ :  $A_{ij}^{\text{int.}}(\lambda_\psi^{\text{int.}}, \lambda_2^{\text{int.}}, L^{\text{int.}})$ avec $\lambda_\psi^{\text{int.}} = 2 \frac{\lambda_\psi^R + \lambda_\psi^B + \lambda_\psi^R \lambda_\psi^B}{(\lambda_\psi^R + \lambda_\psi^B + 4)}$ donc $v^{\text{int.}} = 2 \frac{v^R v^B}{v^R + v^B}$		
<b>Ordre</b>	<b>Conditions sur l'écoulement</b>	<b>Conditions interfaciales obtenues</b>			
<b><math>\mathcal{E}</math></b>	Viscosités différentes: $v^R \neq v^B$ ;	$L^R = L^B$	$L^R \neq L^B$	$L^R = L^B$	$L^R \neq L^B$
		$\mathbf{u}^R = \mathbf{u}^B$	$\rho_R \mathbf{u}^R = \rho_B \mathbf{u}^B$	$\mathbf{u}^R = \mathbf{u}^B$	$\rho_R \mathbf{u}^R = \rho_B \mathbf{u}^B$
	Forces extérieures identiques: $(\rho \mathbf{F})^R = (\rho \mathbf{F})^B$	$\mu^R \frac{\partial u_a^R}{\partial z} = \mu^B \frac{\partial u_a^B}{\partial z}$ si	$\mu^R \left( \frac{\partial u_\alpha^R}{\partial z} + \frac{\partial u_z^R}{\partial \alpha} \right) = \mu^B \left( \frac{\partial u_\alpha^B}{\partial z} + \frac{\partial u_z^B}{\partial \alpha} \right)$ si		
		$\frac{\partial u_z^{\text{int.}}}{\partial \alpha}(\mathbf{z}^{\text{int.}}) = 0, \alpha \in \{x, y\}$	$\frac{\partial u_\alpha(\mathbf{z}^{\text{int.}})}{\partial \alpha} = 0, \alpha \in \{x, y\}$		
Conditions à l'interface*	$\mathbf{z}^{\text{int.}} = \frac{\mathbf{z}^R + \mathbf{z}^B}{2}$	$\mathbf{z}^{\text{int.}} = \mathbf{z}_0$			
Forces extérieures différentes: $(\rho \mathbf{F})^R \neq (\rho \mathbf{F})^B$	$\mathbf{z}^{\text{int.}} \neq \frac{\mathbf{z}^R + \mathbf{z}^B}{2}$	$\mathbf{z}^{\text{int.}} \neq \mathbf{z}_0$			
<b><math>\mathcal{E}2</math></b>	Écoulement de Poiseuille à deux phases avec $\mathbf{F}^R \neq \mathbf{F}^B$ $v^R \neq v^B$ $L^B = L^R$	Solution exacte si  $\lambda_2^R = \lambda_{2c}(\lambda_\psi^R)$ $\lambda_2^B = \lambda_{2c}(\lambda_\psi^B)$ $\lambda_{2c} = -8 \frac{(\lambda_\psi + 2)}{(\lambda_\psi + 8)}$	Solution exacte si  $\lambda_2^R = \lambda_2^B = \lambda_2^{\text{int.}} = \lambda_2^{(0)}$ $\lambda_2^{(0)} = -4 \frac{(\lambda_\psi + 2)}{(4 - \lambda_\psi)}$ et $\rho_R(\mathbf{z}_0) = \rho_B(\mathbf{z}_0)$		

\*  $C_s^{2R} \rho_R = C_s^{2B} \rho_B$ ;  $\frac{\partial u_z(\mathbf{z}^{\text{int.}})}{\partial z} = 0$ .

• *Construction de l'interface.*

Dans le Modèle 2, nous avons à notre disposition des paramètres supplémentaires qui sont les valeurs propres de la matrice de collision à l'interface. De la même façon que pour le Modèle 1, nous allons formuler dans cette section les équations interfaciales du Modèle 2 et discuter ensuite les résultats; les détails sur l'analyse au première ordre se trouvent dans l'Appendice 4.B. Une approche un peu différente pour déduire la valeur propre  $\lambda_{\psi}^{\text{int}}$  est décrite par Ginzbourg et Adler (1994a) tandis que le schéma exposé dans ce chapitre est plus proche de l'analyse du Modèle 1 dans la section précédente.

Une autre approche possible au problème du choix de l'opérateur de collision à l'interface est exposée dans le travail récent de Grunau (1993) où le modèle ILB de Gunstensen (1992) est combiné avec un modèle PCLBE en simple phase (voir dans la Section 1.3.3 les modèles avec opérateur de collision diagonalisé). Des densités différentes sont obtenues de la même manière que dans ce travail, c'est-à-dire par le choix des particules immobiles dans chaque phase. Le seul paramètre libre, qui détermine la convergence du modèle à l'équilibre, est le paramètre de relaxation relié à la viscosité cinématique du modèle par la formule (1.86); donc pour introduire des viscosités différentes, il suffit d'imposer des paramètres de relaxation différents.

Soit  $\tau^R$  et  $\tau^B$  les paramètres de relaxions imposés dans les phases rouge et bleue. Dans les points où les deux phases coexistent, Grunau propose la formule suivante pour le paramètre  $\tau(\mathbf{r}, t)$ :

$$\tau = \begin{cases} \tau^R, \psi > \delta \\ g^R(\psi), & 0 \leq \psi \leq \delta \\ g^B(\psi), & -\delta < \psi \leq 0 \\ \tau^B, \psi < -\delta \end{cases} \quad (4.25a)$$

où  $\psi$  est relié à la contribution de chaque phase à l'interface par :

$$\psi = \frac{\rho_R - \rho_B}{\rho_R + \rho_B}. \quad (4.25b)$$

Les fonctions  $g^R(\psi)$  et  $g^B(\psi)$  du second ordre en puissance du paramètre  $\psi$  sont déterminées par les conditions standards de continuité:

$$g^R(\delta) = \tau^R, g^B(-\delta) = \tau^B, \frac{\partial \tau}{\partial \psi}(\pm\delta) = 0 \quad (4.26a)$$

avec une valeur moyenne du paramètre  $\tau$  à l'interface:

$$g^R(0) = g^B(0) = \langle \tau \rangle = \frac{2\tau^R \tau^B}{\tau^R + \tau^B} \quad (4.26b)$$

Notons, que d'après la relation (1.86a) entre le paramètre de relaxation et la viscosité cinématique, la valeur moyenne  $\langle \tau \rangle$  (4.26b) correspond formellement à la moyenne arithmétique des valeurs propres  $\lambda_\psi^R$  et  $\lambda_\psi^B$  définies selon (1.86b).

Ainsi, les valeurs discontinues à l'interface sont reliées par les fonctions continues  $g^R(\psi)$  et  $g^B(\psi)$ ; cependant, il est semble inefficace de procéder de la même façon pour les modèles ILB classiques où l'opérateur de collision est déterminé par la matrice. En outre, les modèles ILB sont discrets; cela peut faire apparaître des solutions différentes pour les paramètres effectifs du modèle de celles obtenues par un traitement de l'interface comme une zone continue. En particulier, nous allons voir dans ce paragraphe comment la combinaison (4.30a) des valeurs propres  $\lambda_\psi^R$  et  $\lambda_\psi^B$ , différente d'une moyenne arithmétique, permet de satisfaire les conditions interfaciales par le Modèle 2 au premier ordre lorsque l'interface appartient à un certain plan du réseau; dans le cas particulier de l'écoulement de Poiseuille à deux phases (4.23) avec des forces identiques  $F_x^B = F_x^R$ , cette solution permet d'obtenir les solutions exactes du problème à deux phases. En général, d'après l'analyse des conditions interfaciales dans le paragraphe suivant, une erreur du premier ordre est due au choix (4.26b) dans la position de l'interface; néanmoins le choix des paramètres interfaciaux par une approche continue est probablement plus justifié que celui de notre travail lorsque la géométrie interfaciale est plus complexe ou lorsque les interfaces sont larges (de quelques unités de réseau).

• *Analyse pour le Modèle 2.*

Passons maintenant à l'exposé du Modèle 2. Nous supposons donc qu'un plan du réseau  $z = z_0 = z^{\text{int}}$  divise les frontières  $z = z^R$  et  $z = z^B$  des phases rouge et bleue (voir Figure 4-4b).

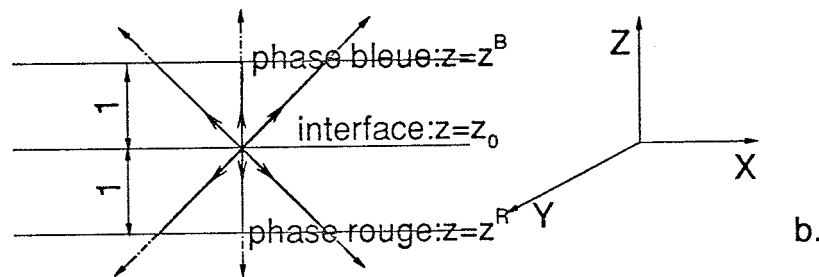


Figure 4-4b: Interface plane entre fluide bleu et rouge dans le Modèle 2.



Les équations interfaciales pour les populations viennent des équations de Boltzmann entre les noeuds  $\mathbf{z}^K$  et  $\mathbf{z}_0$ ,  $K=\{R, B\}$ :

$$\begin{aligned} N_i^{(int.)}(\mathbf{z}_0, t) &= N_i^{(R)}(\mathbf{z}_0, t), \quad C_{iz} > 0 \\ N_i^{(int.)}(\mathbf{z}_0, t) &= N_i^{(B)}(\mathbf{z}_0, t), \quad C_{iz} < 0 \end{aligned} \quad (4.27a)$$

et, dans l'autre sens, entre le noeud  $\mathbf{z}_0$  et les noeuds extrêmes  $\mathbf{z}^K$ :

$$\begin{aligned} N_i^{''(R)}(\mathbf{z}_0, t) &= N_i^{''(int.)}(\mathbf{z}_0, t), \quad C_{iz} < 0 \\ N_i^{''(B)}(\mathbf{z}_0, t) &= N_i^{''(int.)}(\mathbf{z}_0, t), \quad C_{iz} > 0, \end{aligned} \quad (4.27b)$$

où les populations  $N_i^{''}(\mathbf{z}_0, t)$  (voir (4.14a)) sont définies sous la forme (2.16) par l'équation de Boltzmann. Notons, que pour l'analyse du Modèle 2 on n'a pas besoin du développement de Taylor parce que nous supposons que les noeuds  $\mathbf{z}_0$  appartiennent au réseau; par conséquent, les équations de Boltzmann sont utilisées pour exprimer la continuation de populations en termes de développements (2.4) et (2.28) dans le même esprit que pour les relations (2.16). Les équations (4.27a) peuvent être données sous la même forme que les équations (4.22b) pour le Modèle 1

$$\left\{ d^{int.} + d' \left[ (\rho \mathbf{u})^{int.} \cdot C_i + \frac{\mathbf{Q}_i \cdot \nabla (\rho \mathbf{u})^{int.}}{\lambda_\psi^{int.}} \right] + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \right\} (\mathbf{z}_0) = \left\{ d^K + d' \left[ (\rho \mathbf{u})^K \cdot C_i + \frac{\mathbf{Q}_i \cdot \nabla (\rho \mathbf{u})^K}{\lambda_\psi^K} \right] + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \right\} (\mathbf{z}_0)$$

où

$$\begin{aligned} K &= R, \quad C_{iz} > 0 \\ K &= B, \quad C_{iz} < 0 \end{aligned} \quad (4.28a)$$

En utilisant les relations (2.16) développées jusqu'à premier ordre pour les populations  $N_i^{''}(\mathbf{z}_0, t)$  on obtient, quand les termes  $\mathbf{N}^{1F}$ (2.4c) sont négligés, les équations (4.27b) sous la forme suivante

$$\left\{ d^K + d' \left[ (\rho \mathbf{u})^K \cdot C_i + \left(1 + \frac{-1}{\lambda_\psi^K}\right) \mathbf{Q}_i \cdot \nabla (\rho \mathbf{u})^K \right] + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \right\} (\mathbf{z}_0) = \left\{ d^{int.} + d' \left[ (\rho \mathbf{u})^{int.} \cdot C_i + \left(1 + \frac{-1}{\lambda_\psi^{int.}}\right) \mathbf{Q}_i \cdot \nabla (\rho \mathbf{u})^{int.} \right] + O(u^2) + O(\varepsilon^2) \right\} (\mathbf{z}_0)$$

où

$$\begin{aligned} K &= R, \quad C_{iz} < 0 \\ K &= B, \quad C_{iz} > 0 \end{aligned} \quad (4.28b)$$

L'analyse des équations interfaciales (4.28) pour déduire les relations entre les valeurs  $(\rho \mathbf{u})^R$  and  $(\rho \mathbf{u})^B$  dans le noeud  $\mathbf{z}_0$  de l'interface, ainsi qu'entre leurs dérivées, est détaillée

dans l'Appendice 4.B. D'après cette analyse, lorsque la restriction (4.5) sur la vitesse normale est imposée aux populations parties des frontières des phases vers l'interface, la vitesse normale est continue au travers de l'interface indépendamment des viscosités en volume quand les densités sont égales, mais les variations de vitesse tangentielle le long de l'interface doivent être négligeables pour satisfaire les équations interfaciales (4.27) au premier ordre (voir (4.22c) pour la comparaison avec le Modèle 1) si les viscosités sont différentes. Par conséquent, la condition (4.8) sur la contrainte tangentielle est satisfaite au premier ordre par le modèle indépendamment de la valeur propre  $\lambda_\psi^{\text{int.}}$ . D'après les équations (4.27), dans ces conditions sur les dérivées des vitesses tangentielles, la quantité de mouvement dans le développement formel des populations totales est définie par

$$[\rho u_\alpha]_{z_0}^{\text{int.}} = \frac{1}{2} [(\rho u_\alpha)^R + (\rho u_\alpha)^B]_{z_0} + \left[ \left( \frac{\rho D_{\alpha z}}{\lambda_\psi} \right)^R - \left( \frac{\rho D_{\alpha z}}{\lambda_\psi} \right)^B \right]_{z_0} + O(\varepsilon^2), \quad \alpha = \{x, y\} \quad (4.29a)$$

Donc si la condition (4.8) est satisfaite, l'équation (4.29a) devient

$$[\rho u_\alpha]_{z_0}^{\text{int.}} = \frac{1}{2} [(\rho u_\alpha)^R + (\rho u_\alpha)^B]_{z_0} + \left( \frac{v^B}{\lambda_\psi^R} - \frac{v^R}{\lambda_\psi^B} \right) \left[ \frac{(\rho D_{\alpha z})^B + (\rho D_{\alpha z})^R}{v^B + v^R} \right]_{z_0} + O(\varepsilon^2), \quad \alpha = \{x, y\}; \quad (4.29b)$$

Par conséquent, la valeur de  $[\rho u_\alpha]_{z_0}^{\text{int.}}$ , définie par (4.29b), est en général différente de la valeur limite des paramètres en volume si les viscosités sont différentes (voir, par exemple, le cas le plus simple quand  $u_\alpha^R = u_\alpha^B$  en accord avec (4.1), la condition (4.8) est satisfaite et les phases ont les mêmes densités); en fait, cela signifie que la vitesse de chaque phase dans les points biphasiques n'est pas définie par la vitesse totale et par conséquent, il faut utiliser des méthodes différentes des méthodes du gaz sur réseau pour déterminer correctement la continuité de la vitesse à partir des solutions en volume. En outre, au contraire de la condition sur les contraintes, la continuité des vitesses à l'interface  $z = z_0$  n'est pas satisfaite automatiquement par les conditions interfaciales (4.28). En effet, la condition imposée par les équations (4.28) est

$$(2 + \lambda_\psi^{\text{int.}}) [(\rho u_\alpha)^R - (\rho u_\alpha)^B]_{z_0} = 2 \left[ (\rho D_{\alpha z})^R + (\rho D_{\alpha z})^B - \lambda_\psi^{\text{int.}} \left\{ \left( \frac{\rho D_{\alpha z}}{\lambda_\psi} \right)^R + \left( \frac{\rho D_{\alpha z}}{\lambda_\psi} \right)^B \right\} \right]_{z_0} \quad (4.29c)$$

Par conséquent, lorsque la condition (4.8) est imposée sur les tenseurs des taux de déformations, on peut déduire à partir de la condition (4.29c) la valeur propre  $\lambda_\psi^{\text{int.}}$  qui permet d'avoir la quantité de mouvement continue au travers de l'interface; cette valeur propre est

$$\lambda_{\psi}^{\text{int.}} = 2 \frac{(\lambda_{\psi}^B + \lambda_{\psi}^R + \lambda_{\psi}^B \lambda_{\psi}^R)^{\text{def.}}}{(\lambda_{\psi}^B + \lambda_{\psi}^R + 4)} = \lambda_{\psi}^{(0)} \quad (4.30a)$$

Par conséquent, la viscosité cinématique à l'interface qui correspond à cette valeur propre est

$$\nu^{\text{int.}} = \frac{2 \nu^R \nu^B}{\nu^R + \nu^B} ; \quad (4.30b)$$

elle correspond à la moyenne arithmétique des valeurs  $[\nu^R]^{-1}$  et  $[\nu^B]^{-1}$  pour la valeur  $[\nu^{\text{int.}}]^{-1}$  (voir (4.26b) pour comparaison avec le modèle de Grunau (1993)).

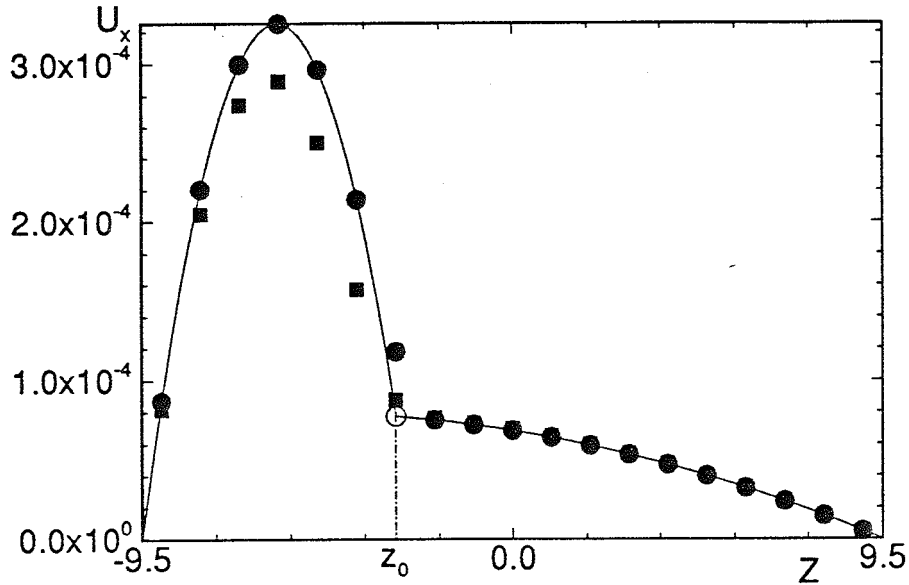
Notons que la même solution (4.30a) peut être obtenue en considérant une interface inclinée avec un angle  $\alpha = 45^\circ$  par rapport aux axes du réseau.

Notons aussi que dans le cas (4.30a) on a formellement (voir (4.B.3))

$$(\rho D_{\alpha z})^{\text{int.}} = \frac{1}{2} [(\rho D_{\alpha z})^R + (\rho D_{\alpha z})^B] \quad (4.30c)$$

La relation (4.29c) montre ainsi que le Modèle 2 avec une valeur propre  $\lambda_{\psi}^{\text{int.}}$  différente de  $\lambda_{\psi}^{(0)}$ , définie par (4.30a), ne peut pas respecter la condition de continuité des vitesses aux noeuds  $\mathbf{z}_0$ . Par contre, lorsque les forces extérieures sont égales dans les deux phases, les erreurs du second ordre dans le Modèle 2 sont nulles pour l'écoulement de Poiseuille à deux phases (4.23a) si les valeurs propres  $\lambda_2^K$ ,  $K = \{R, B, \text{int.}\}$ , sont égales. Donc dans ce cas, la solution par le Modèle 2 avec (4.30a) doit *coïncider* avec le profil théorique dans tous les points à l'exception de l'interface, car la vitesse totale à l'interface n'est pas continue du fait de (4.29b), tandis que la solution avec  $\lambda_{\psi}^{\text{int.}} \neq \lambda_{\psi}^{(0)}$  ne peut pas être exacte en volume même pour cet écoulement. Cela est illustré par la Figure 4-6 où les solutions avec  $\lambda_{\psi}^{\text{int.}} = \lambda_{\psi}^{(0)}$  et  $\lambda_{\psi}^{\text{int.}} = \lambda_{\psi}^{(\alpha)} = \frac{\lambda_{\psi}^R + \lambda_{\psi}^B}{2}$  (correspondant à la solution (4.25)-(4.26) de Grunau (1993)) sont comparées. On voit que la solution avec  $\lambda_{\psi}^{(0)}$  est exacte dans tous les noeuds si la continuation de vitesse d'après les solutions en volume est prise à l'interface au lieu de la vitesse totale pendant que la solution avec  $\lambda_{\psi}^{(\alpha)}$  est différente du profil théorique. Rappelons que la solution par le Modèle 1 est exacte dans tous les noeuds pour cet écoulement quand les forces extérieures sont égales.

Notons qu'un mélange de réflexions (2.15) avec les probabilités définies numériquement pour chaque phase de style (3.35) est imposé dans les derniers noeuds pour vérifier les conditions d'adhérence à la surface solide au milieu des noeuds car l'utilisation des valeurs propres différentes  $\lambda_{2c}^R$  ( $\lambda_\psi^R$ ) et  $\lambda_{2c}^B$  ( $\lambda_\psi^B$ ) (voir (2.32)) conduit à une erreur supplémentaire du second ordre dans le Modèle 2 à cause du terme  $N^2$  (voir (2.28)).



**Figure 4-6:** Comparaison entre les résultats numériques par le Modèle 2 avec  $\lambda_\psi^{int.} = \lambda_\psi^{(0)}$  (•),  $\lambda_\psi^{int.} = \frac{\lambda_\psi^R + \lambda_\psi^B}{2}$  (■) et les prédictions théoriques pour l'écoulement de Poiseuille plan à deux phases (ligne continue) avec des viscosités cinématiques différentes:  $\nu^R = 0.01852$  ( $\lambda_\psi^R = -1.8$ ) et  $\nu^B = 1.5$  ( $\lambda_\psi^B = -0.2$ ) pour  $F_x^R = F_x^B = 10^{-6}$ ,  $h = 9.5$ ,  $A^{per.} = 0$ ,  $L^R = L^B = L^{int.} = 24$ ,  $z_0 = -3$ . Le point (o) représente la continuation des vitesses volumiques quand  $\lambda_\psi^{int.} = \lambda_\psi^{(0)}$ .

On trouve aussi d'après l'analyse des équations (4.27) développées jusqu'au second ordre que lorsque les valeurs propres  $\lambda_2^K$ ,  $K = \{R, B, int.\}$ , satisfont la condition

$$\lambda_2^K = \lambda_2^{(0)} = -4 \frac{(2 + \lambda_\psi^{int.})}{(4 - \lambda_\psi^{int.})}, \quad -2 < \lambda_2^{(0)} < 0 \quad \text{si} \quad -2 < \lambda_\psi^{int.} < 0 \quad (4.31a)$$

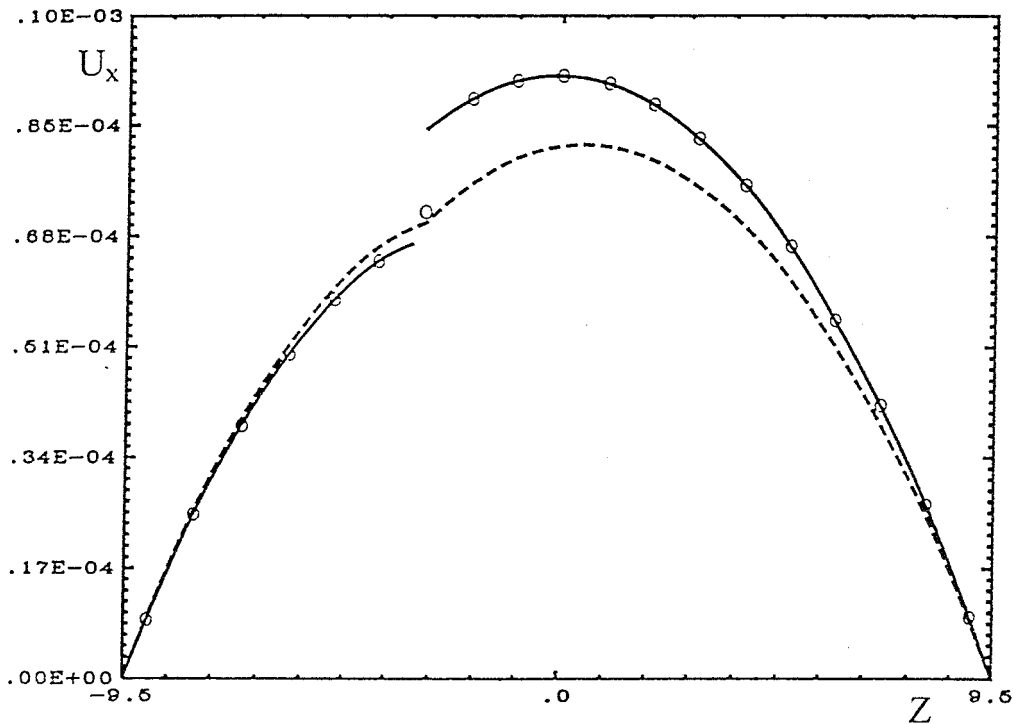
l'erreur du second ordre dans les simulations de l'écoulement (4.23) avec des forces différentes s'annule dans le Modèle 2 quand la masse de la phase rouge à l'interface est égale à la masse de la phase bleue et que les nombres de particules immobiles sont égaux en volume (voir la solution (4.23b) pour la comparaison avec le Modèle 1). Par conséquent, la solution numérique avec (4.30a) et (4.31a) se trouve exactement sur la courbe théorique quand les viscosités et les forces sont différentes à l'exception du point interfacial comme prédit par (4.29b) si on inclue la même correction de rebond que précédemment; cela est illustré par la Figure 4 - 5.

D'après la relation (4.29c), lorsque la valeur propre (4.30a) est utilisée dans le modèle avec des nombres différents de particules immobiles, la continuité de la vitesse entraîne la continuité de la quantité de mouvement par analogie avec le Modèle 1

$$(\rho \mathbf{u})^R(z_0) = (\rho \mathbf{u})^B(z_0) \quad (4.31a)$$

Cela est illustré dans la Figure 4-7 où le profil théorique (4.24) correspondant à la continuité de vitesse (4.1) est comparé avec les points numériques obtenus par le Modèle 2 avec  $\lambda_\psi^{\text{int.}} = \lambda_\psi^{(0)}$  (voir (4.30a)). Ces points se trouvent exactement sur la courbe théorique qui correspond aux équations (4.23a) mais avec la condition (4.31a) à l'interface si les forces extérieures et les nombres de particules immobiles en volume sont égales ou, quand  $F_x^R \neq F_x^B$  et  $L^R \neq L^B$ , si les secondes valeurs propres des matrices de collision satisfont la condition (4.31a) et si  $L^{\text{int.}}$  est défini de la manière suivante

$$L^{\text{int.}} = \frac{F_x^R L^R + F_x^B L^B}{F_x^R + F_x^B}. \quad (4.31b)$$



**Figure 4-7:** Comparaison entre les résultats numériques par le Modèle 2 (o) avec  $\lambda_\psi^{\text{int.}} = \lambda_\psi^{(0)}$ , les valeurs propres  $\lambda_2$  données par (4.31a) et  $L^{\text{int.}}$  défini par (4.31b), et les solutions théoriques de l'équation (4.23a) qui correspond à la conservation de la quantité de mouvement à l'interface (—) et à la continuité de la vitesse à l'interface (-----).

Les données sont:  $h = 9.5$ ,  $z_0 = -3$ ,  $F_x^B = 10^{-6}$ ,  $F_x^R = 3 \cdot 10^{-6}$ ,  $v^R = 1.167$ ,  $v^B = 0.5$ ,  $v^{\text{int.}} = 0.7$ ,  $\rho_B/\rho_R = 4/5$ ,  $L^R = 36$ ,  $L^B = 24$ ,  $L^{\text{int.}} = 33$

•**Conclusion.**

Ainsi l'analyse des deux modèles montre que leurs précisions dans les conditions interfaciales sont comparables (voir Table 4.1). Les deux modèles induisent à l'interface, c'est-à-dire à l'ensemble des points où les conditions standards sont satisfaites

- une erreur d'ordre zéro si les densités sont différentes;
- une erreur du premier ordre si les densités sont égales mais les forces sont différentes;
- une erreur du second ordre si les densités et les forces sont égales, si des restrictions supplémentaires sont imposées sur les dérivées des vitesses le long de l'interface; pour le Modèle 2 seul un choix particulier (4.30a) pour  $\lambda_{\psi}^{\text{int.}}$  assure cette précision;
- une erreur du troisième ordre pour des écoulements particuliers à condition d'un choix spécial des valeurs propres des matrices de collision.

L'analyse effectuée nécessite un approfondissement pour le cas où les densités sont différentes et les vitesses normales non nulles. Dans notre analyse, le système est considéré seulement pour deux itérations successives. Cependant, pour comprendre comment les populations immobiles se déplacent entre les noeuds du réseau avec le fluide de leur couleur, la dynamique plus complexe de l'interface doit, probablement, être considérée.

## 4.5. Tension de surface dans les modèles ILB avec viscosités différentes.

### 4.5.1. Principales méthodes pour déduire la tension de surface.

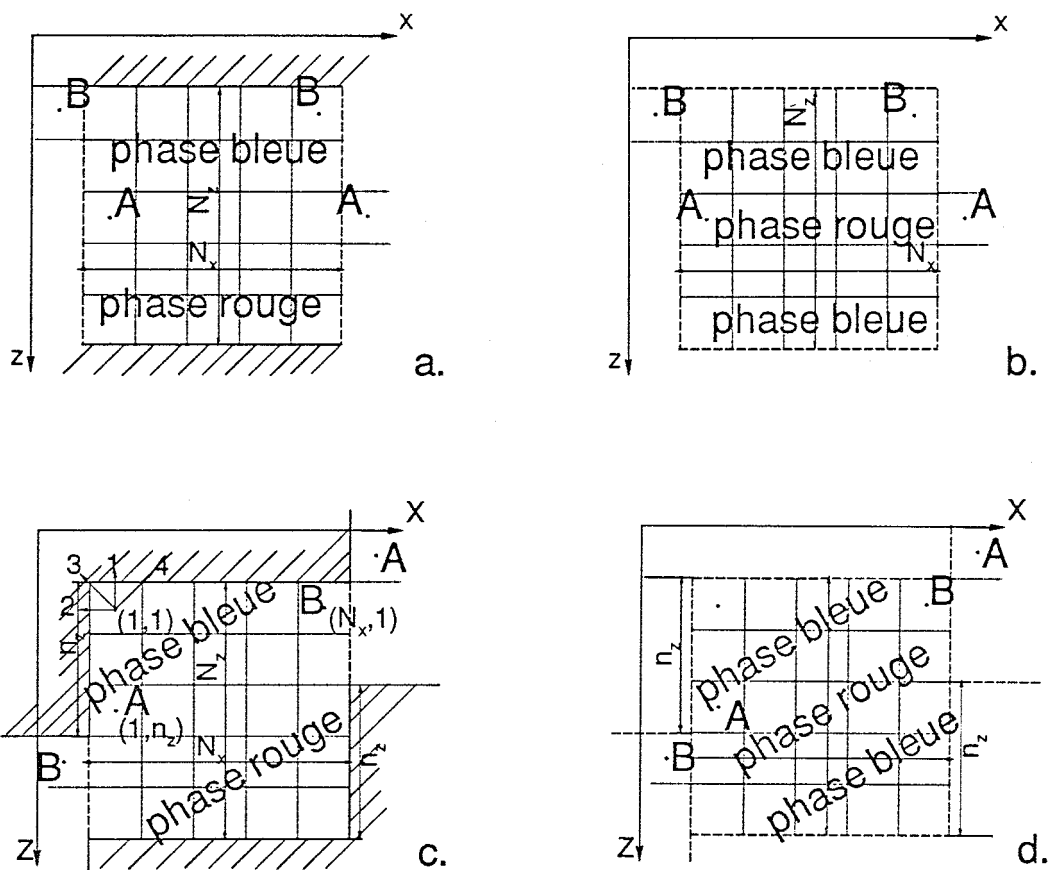
Grâce à l'anisotropie de pression qui apparaît dans les modèles non miscibles au niveau de l'interface, ces modèles possèdent une tension de surface. Le coefficient de tension superficielle  $\sigma$  peut être déduit analytiquement des équations d'évolution avec des interactions au moins par deux approches différentes, à savoir d'après la définition mécanique (1.97) ou d'après la loi de Laplace (1.99). Par conséquent, les deux méthodes numériques les plus simples pour mesurer la tension de surface sont le *test mécanique* et le *test de la bulle* qui sont brièvement décrites dans la Section 1.4.1 (Chapitre 1). Dans tous les cas, pour pouvoir utiliser les relations constitutives (1.97) ou (1.99), il faut exprimer la pression en termes des variables microscopiques, en général en fonction des populations moyennes  $N_i$ . Pour définir la forme des populations  $N_i$ , on peut utiliser les propriétés du réseau et une géométrie de la configuration ainsi que les conditions imposées aux limites. Pour le choix des conditions aux limites on peut aussi procéder de différentes manières. Par exemple, on peut essayer de déterminer les solutions pour les populations  $N_i$  dans la cellule "expérimentale" entière en utilisant les conditions aux limites de la cellule ou en imposant des conditions supplémentaires sur les populations pour simplifier la résolution des équations de l'évolution; néanmoins, on peut aussi suivre la méthodologie classique et déterminer les solutions pour les populations seulement dans une zone interfaciale qui est définie d'après les conditions imposées aux frontières de cette zone.

Le comportement des modèles dans la direction normale à l'interface a été étudié beaucoup plus attentivement pour tous les types des modèles que leurs possibilités à satisfaire les conditions tangentielles. Dans la plupart des cas, la définition mécanique est utilisée pour déduire  $\sigma$  analytiquement en suivant la méthode proposée par Gunstensen et al (1991). Le point principal de cette technique consiste en l'introduction d'une relation supplémentaire sur les populations, à savoir

$$\sum_{\mathbf{r} \in B_s} N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = \sum_{\mathbf{r} \in B_s} N_i(\mathbf{r}, t), \quad \forall i = 1, \dots, b_m \quad (4.32)$$

où  $B_s$  désigne l'ensemble des noeuds du réseau dans la cellule. On suppose donc que la condition (4.32) est satisfaite par les populations totales dans le test mécanique. En général, le test mécanique consiste en deux fluides séparés par une interface plane; les parois solides limitent la configuration dans la direction perpendiculaire à l'interface; la cellule est périodique dans toutes les autres directions.

Soit la normale à l'interface inclinée d'un angle  $0 \leq \theta \leq 45^\circ$  par rapport à l'axe  $z$ . On suppose que la cellule est périodique le long de l'axe  $y$ ; numériquement, on peut modéliser la cellule inclinée de type escalier par la modification des conditions périodiques le long de l'axe  $x$  de la même façon que dans le Chapitre 2 (voir Figures 2-8). Des exemples d'une cellule non inclinée et inclinée, limitées par des parois solides, sont aussi donnés sur les Figures 4-8. Bien sûr le coefficient de tension superficielle  $\sigma$ , déduit des modèles, ne doit pas dépendre de l'inclinaison de l'interface par rapport aux axes du réseau.



**Figure 4-8:** Cellule de  $N_x N_z$  ( $N_y = 1$ ) unités de réseau pour un canal 2D.

(a, c) La cellule, appelée  $B_s$ , est limitée par des parois solides parallèles à l'interface.

(b, d) La cellule, appelée  $B_p$ , est périodique dans toutes les directions. Les conditions périodiques sont données par les lignes discontinues.

Les cellules (a) et (b) ne sont pas inclinées; (c) et (d) sont inclinées avec un angle

$\theta = \arctg \frac{n_z}{N_x}$  par rapport à l'axe  $x$ . Pour introduire cette inclinaison, les conditions périodiques

sont modifiées dans les cellules (c) et (d); les noeuds équivalents sont indiqués par les mêmes lettres A, B, ... .



L'hypothèse (4.32) est utilisée explicitement dans tous les calculs de  $\sigma$  pour les modèles ILB à deux et trois phases (voir Gunstensen et al, 1991; Gunstensen, 1992); dans le premier calcul de X.Chen (1991) pour ILG, par Appert (1993) pour la version de Boltzmann du modèle *liquide-gaz* (voir Section 1.4.3) et enfin par Grunau (1993) pour le modèle PCLBE à deux phases.

Donnons quelques détails pour expliquer comment la condition (4.32) peut être utilisée pour déduire  $\sigma$  d'après la définition mécanique (1.97). Considérons le modèle de Boltzmann avec la perturbation  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=0}^{b_m} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{r}, t) W_j + \delta N_i(\mathbf{r}, t) \quad \forall i = 0, \dots, b_m \quad (4.33)$$

où le terme  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  est donné par (1.106b)-(1.106c) pour les modèles ILB ou par (1.108) pour le modèle *liquide-gaz*. Lors de l'expansion de Chapman-Enskog pour déduire les équations macrodynamiques, on démontre que le tenseur de flux de quantité de mouvement est de la forme

$$P_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^{b_m} (N_i + \frac{1}{2} I_i) C_{i\alpha} C_{i\beta} \quad (4.34)$$

où  $I_i$  est égale à zéro pour les modèles ILB parce que  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  sous la forme (1.106b)-(1.106c) conserve la quantité de mouvement locale; par conséquent la relation (4.34) est la même pour ILB que pour les modèles classiques (voir (1.50b)); pour les modèles *liquide-gaz*,  $I_i$  est égale à l'impulsion échangée lors d'une itération dans la direction  $\mathbf{C}_i$ ; ce terme peut être calculé en fonction de l'opérateur des interactions (1.108b) (voir Appert, 1993).

En supposant que le fluide est au repos, on substitue la composante normale  $p_m$  et tangentielle  $p_n$  de tenseur (4.34) dans la définition mécanique (1.97)

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \sum_i (N_i + \frac{1}{2} I_i) (C_{in}^2 - C_{it}^2) \right] dn \quad (4.35)$$

où  $n$  est la direction perpendiculaire à l'interface.

Soit une cellule  $B_s$  qui contient  $N_x N_y N_z$  noeuds du réseau;  $S = N_x N_y$  est la section perpendiculaire à l'axe  $z$  (voir Figure 4-8). Donc, pour l'interface inclinée d'un angle  $\theta$  par rapport à l'axe  $x$ ,  $0 \leq \theta \leq 45^\circ$ , l'intégrale (4.35) peut être approchée par la somme qui porte sur tous les noeuds du réseau

$$\sigma \cong \frac{\cos\theta}{S} \Omega, \quad \Omega \stackrel{def.}{=} \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} (N_i + \frac{1}{2} I_i) \Phi_i, \quad (4.36a)$$

$$\Phi_i \stackrel{def.}{=} (C_{in}^2 - C_{it}^2) \quad (4.36b)$$

L'application de la condition (4.32) joue un rôle décisif quand on essaie de déduire

$\sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} N_i \Phi_i(\mathbf{r}, t)$  de l'équation d'évolution (4.33). D'après (4.32) et (4.33), on a

$$\sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{j=0}^{b_m} A_{ij} N_j^{neq} W_j = - \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \delta N_i \quad \forall i = 0, \dots, b_m \quad (4.37)$$

Soit des vecteurs unités  $\mathbf{f}_e$  normal à l'interface et  $\mathbf{f}_e^\perp$  parallèle à l'interface

$$\mathbf{f}_e \stackrel{def.}{=} (f_x, f_y, f_z, 0), \quad |\mathbf{f}_e| = 1, \quad (\mathbf{f}_e \cdot \mathbf{f}_e^\perp) = 0, \quad |\mathbf{f}_e^\perp| = 1 \quad (4.38a)$$

Le vecteur  $\Phi_i$  (4.36b) peut être donné sous la forme

$$\Phi_i = Q_{im} - Q_{ii}, \quad i = 1, \dots, b_m, \quad \Phi_0 = 0, \quad (4.38b)$$

où les tenseurs  $Q_{im}$  et  $Q_{ii}$  de second ordre sont décomposés comme

$$Q_{im} = C_{im}^2 - \frac{1}{2} = \sum_{\alpha \in \{x,y,z\}} f_\alpha^2 Q_{i\alpha\alpha} + \sum_{\alpha, \beta \in \{x,y,z\}} f_\alpha f_\beta Q_{i\alpha\beta}, \quad (4.38c)$$

$$Q_{ii} = C_{ii}^2 - \frac{1}{2} = \sum_{\alpha \in \{x,y,z\}} f_\alpha^{\perp 2} Q_{i\alpha\alpha} + \sum_{\alpha, \beta \in \{x,y,z\}} f_\alpha^\perp f_\beta^\perp Q_{i\alpha\beta} \quad (4.38d)$$

Par conséquent,  $\Phi_i$  est un vecteur propre de la matrice de collision associé à la valeur propre  $\lambda_\psi$  (voir (2.8c)). On multiplie ensuite (4.37) par le vecteur  $\Phi_i$  et on obtient d'après (4.37) - (4.38)

$$\sum_{\mathbf{r} \in B_s} \lambda_\psi \sum_{i=1}^{b_m} N_i \Phi_i = - \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} \delta N_i \Phi_i + O(u^2) \quad (4.39)$$

où le terme d'ordre  $O(u^2)$  est apparu à cause du remplacement de la solution  $N_i^{neq}$  par  $N_i$  (voir (4.37) et (4.39)).

Lorsque les termes d'ordre  $O(u^2)$  sont négligés et que les viscosités sont les mêmes dans les deux phases ( $\lambda_\psi = \text{const}$ ), on obtient  $\Omega$  qui est défini par (4.36a) en fonction des paramètres de perturbation

$$\Omega = - \frac{1}{\lambda_\psi} \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} \delta N_i \Phi_i + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} I_i \Phi_i \quad (4.40)$$

Ainsi on peut utiliser ce schéma pour déduire  $\sigma$  sans hypothèse supplémentaire sur la structure de l'interface seulement quand les viscosités sont égales; dans le cas contraire il faut décrire l'interface de façon à pouvoir extraire la valeur moyenne de  $\lambda_\psi$  dans la partie gauche de la relation (4.39). Cette dernière approche est utilisée par Grunau (1993) pour le modèle PCLBE à deux phases avec la matrice diagonalisée (voir (1.85a)). Il donne (4.38) sous la forme

$$\sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} N_i \Phi_i(\mathbf{r}, t) = \langle \tau \rangle \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \sum_{i=1}^{b_m} \delta N_i \Phi_i(\mathbf{r}, t), \quad (4.41)$$

cependant, il ne précise pas comment la valeur moyenne  $\langle \tau \rangle$  est reliée à la structure de l'interface.

Le deuxième point délicat de cette approche est la relation constitutive (4.32). Evidemment, cette relation est satisfaite quand toutes les conditions aux limites de la cellule sont périodiques ou bien quand la solution pour les populations est triviale

$$N_i(\mathbf{r}) = d = \text{const}, \quad \forall i = 0, \dots, b_m, \quad \forall \mathbf{r} \quad (4.42)$$

Cependant la solution (4.42) satisfait l'équation de Boltzmann (4.33) seulement si la perturbation  $\delta N_i(\mathbf{r}, t)$  est égale à zéro. Dans le cas contraire, la densité n'est plus constante et l'apparition des courants parasites a été signalée par Gunstensen (1992) et par Appert (1993). Par conséquent, a priori, il n'y pas de raisons d'appliquer la relation (4.32) pour une inclinaison arbitraire de l'interface; on verra néanmoins dans la Section 4.5.3, que d'après l'analyse des solutions de l'équation de Boltzmann dans ces configurations, cette restriction est satisfaite par les solutions stationnaires (indépendantes du temps) dans les canaux non inclinés, quelles que soient les viscosités et indépendamment de la position de l'interface dans la cellule. Mentionnons que cette analyse est faite pour le modèle ILB sur le réseau FCHC et qu'elle ne s'applique donc pas automatiquement aux solutions du modèle *liquide-gaz* par exemple; nous supposons néanmoins qu'elle peut être aisément généralisée pour les versions différentes de l'équation de Boltzmann sur réseau.

Citons aussi une approche différente de Adler et al (1994) pour déduire  $\sigma$  du modèle ILG sur le réseau FHP. Rappelons que nous avons déjà mentionné ces résultats lors de la discussion sur la décomposition spinodale dans la Section 1.4.1 (Chapitre 1). La définition mécanique est utilisée uniquement dans la couche interfaciale où la solution est déterminée par l'équation d'évolution de ILG avec l'approximation de Boltzmann. Cette solution respecte les conditions imposées aux frontières de la couche qui, en gros, supposent que l'anisotropie due aux interactions est localisée dans la couche interfaciale tandis que la solution à

l'extérieure est non perturbée. Par conséquent, la solution pour  $\sigma$  s'exprime en fonction d'un certain nombre de populations localisées dans cette couche; cependant des efforts numériques supplémentaires sont nécessaires pour définir ces populations.

Néanmoins, ils existent dans la littérature des développements pour déduire  $\sigma$  directement de la loi de Laplace. Cela est fait, par exemple, par Burgess et al (1988) (voir aussi Hayot, 1991) et par Somers et Rem (1991); cependant, les calculs de Burgess et al (1988) sont attachés aux détails de leur modèle (voir dans la Section 1.4.1); l'approche de Somers et Rem est assez générale. Ils introduisent la forme des populations pour la solution à l'équilibre dans le test de la bulle en utilisant les propriétés du réseau FHP et la symétrie de la configuration; d'après ces solutions ils déterminent ensuite les composantes du tenseur de flux de quantité de mouvement. Avec l'aide de l'équation d'évolution, cela permet de définir la distribution de la densité en fonction de la distance au centre de la bulle et d'exprimer ensuite la tension de surface en termes de certaines constantes qui déterminent les solutions à l'équilibre. Ces constantes dépendent des détails des collisions; elles ne peuvent pas encore être prédites analytiquement; cependant les valeurs théoriques pour  $\sigma$  s'accordent bien aux mesures numériques quand ces paramètres sont déduits des calculs.

#### 4.5.2. Calcul de tension de surface d'après la définition mécanique.

Considérons maintenant les modèles ILB (4.10) - (4.16) sur le réseau FCHC. Ils sont pilotés par l'équation de Boltzmann (4.33) avec la perturbation (4.14a); donc lorsque les déviations de gradient de couleur  $\mathbf{f}$  (4.14b) d'une normale à l'interface sont négligées, ces équations sont de la forme

$$N_i(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t+1) = N_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=0}^{b_m} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{r}, t) W_j + C^{pcr}(\mathbf{r}, t) Q_{im}, \quad i = 0, \dots, b_m \quad (4.43)$$

Les solutions pour les populations  $N_i$ ,  $i = 0, \dots, 24$ , peuvent être décomposées sur la base de 25 vecteurs indépendants choisis parmi des vecteurs propres de la matrice de collision  $\mathbf{A}$ . Rappelons que l'ensemble des vecteurs propres est donné dans la Chapitre 2 par les relations (2.8) et (2.9).

Supposons que la solution stationnaire (indépendante du temps) pour les populations totales est obtenue; les difficultés numériques pour obtenir ces solutions dans le test mécanique sont discutées dans le paragraphe 4.5.5. En plus, nous considérons les solutions dans les cellules 2D (voir Figure 4-8). Par conséquent, les populations totales sont constantes le long des axes  $y$  et  $w$  ( $w$  est la quatrième direction de la vitesse sur le réseau FCHC); il n'y pas de vitesse anormale le long de ces directions. Nous pouvons complètement décrire les populations totales dans ces configurations par la décomposition suivante

$$N_i(\mathbf{r}) = d(\mathbf{r}) + \sum_{\alpha=\{x,z\}} \Delta_\alpha(\mathbf{r}) C_{i\alpha} + \sum_{\alpha,\beta=\{x,z\}} \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) Q_{i\alpha\beta} + \sum_{\substack{\alpha=\beta, \\ \alpha,\beta=\{x,z\}}} \Delta_{\alpha\beta\beta}(\mathbf{r}) T_{i\alpha\beta\beta} + \Delta_{xxxz}(\mathbf{r}) T_{ixxxz} + \Delta^{im}(\mathbf{r}) e_i^{im} \quad (4.44)$$

$$i = 0, \dots, b_m$$

Notons que tous les coefficients  $\Delta(\mathbf{r})$  peuvent être déterminés par l'ensemble des solutions  $N_i(\mathbf{r})$  dans le test mécanique; le coefficient  $d(\mathbf{r})$  correspond à la densité cellulaire (2.3c) et les coefficients  $\Delta_\alpha(\mathbf{r})$  correspondent à la vitesse puisque les vecteurs propres  $Q_{i\alpha\beta}$ ,  $T_{i\alpha\beta\beta}$ ,  $T_{ixxxz}$  et  $e_i^{im}$  conservent la masse et la quantité de mouvement localement (voir (2.8)-(2.9)). Donc les valeurs  $\Delta_\alpha(\mathbf{r})$  déterminent les courants parasites de façon standard (4.12b)

$$u_\alpha(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_i N_i C_{i\alpha}}{\sum_i N_i} = \frac{c^2 b_m}{D} \frac{\Delta_\alpha}{\rho(\mathbf{r}, t)}, \quad \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i N_i, \quad \alpha = \{x, z\}. \quad (4.45)$$

Puisque les populations totales ne dépendent pas de  $\{y, w\}$ , les populations immobiles sont constantes d'après la condition de stationnarité des solutions et, en outre, les populations mobiles sont constantes le long de l'interface quand celle-ci est parallèle à un axe du réseau; on obtient les conditions supplémentaires d'invariance d'après l'équation de Boltzmann (4.43)

$$\sum_{j=0}^{24} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{r}, t) W_j = - C^{per} Q_{im} \quad \text{pour}$$

$$\begin{cases} i \in I_{0^\circ < \theta < 45^\circ} = \{i: C_{iy} C_{iw} = \pm 1\} & \text{pour } 0^\circ < \theta < 45^\circ \\ i \in I_{\theta=45^\circ} = \{i: C_{iy} C_{iw} = \pm 1 \text{ or } C_{ix} C_{iz} = 1\} & \text{pour } \theta = 45^\circ \\ i \in I_{\theta=0^\circ} = \{i: C_{iz} = 0\} & \text{pour } \theta = 0^\circ \end{cases} \quad (4.46a)$$

et (voir (2.9))

$$\Delta^{im}(\mathbf{r}) = 0 \quad \forall \mathbf{r} \text{ if } \lambda_c \neq 0. \quad (4.46b)$$

En outre, d'après l'analyse dans l'Appendice 4.C, on démontre que parmi tous les vecteurs propres (2.8) seulement ceux du second ordre  $Q_{i\alpha\beta}$  peuvent influencer sur la tension de surface. Plus précisément, nous avons obtenu que

$$\sum_{i=1}^{24} \mathbf{T}_i^{(k)} \Phi_i = \begin{cases} 0, & k = 0, 1, 3, 4 \\ 8 \sum_{\gamma \in \{x, y, z\}} \Delta^{(\gamma)} \delta_{\alpha\gamma} & \text{if } T_i^{(k)} = Q_{i\alpha\alpha}, k = 2 \\ 4 \sum_{\gamma \neq \delta} \Delta^{(\gamma\delta)} (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}), \forall \alpha \neq \beta & \text{if } T_i^{(k)} = Q_{i\alpha\beta}, k = 2 \end{cases} \quad \text{et } \sum_{i=0}^{24} e_i^{im} \Phi_i = 0 \quad (4.47a)$$

où  $\mathbf{T}_i^{(k)}$  désigne le vecteur propre d'ordre  $k$ ,  $k = 0, \dots, 4$ , de la matrice de collision et

$$\Delta^{(\alpha)} = f_\alpha^2 - f_\alpha^{\perp 2}, \quad \Delta^{(\alpha\beta)} = f_\alpha f_\beta - f_\alpha^\perp f_\beta^\perp, \quad \forall \alpha, \beta. \quad (4.47b)$$

Par exemple, en 2D on a

$$\sum_{i=1}^{24} Q_{ixx} \Phi_i = -8 \cos 2\theta, \quad \sum_{i=1}^{24} Q_{izz} \Phi_i = 8 \cos 2\theta, \quad \sum_{i=1}^{24} Q_{ixz} \Phi_i = -8 \sin 2\theta, \quad (4.48)$$

et dans tous les cas

$$\sum_{i=1}^{24} Q_{im} \Phi_i = 8 \quad (4.49)$$

Ainsi notre objectif est de déterminer les coefficients  $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ , reliés aux vecteurs propres du second ordre dans la décomposition (4.44), en termes des paramètres du modèle; nous pourrions ensuite substituer ces solutions dans l'expression (4.36a) pour  $\sigma$ . Pour cela, nous calculons analytiquement les solutions dans la cellule  $B_s$ , limitée par des parois solides, qui

satisfont l'équation de Boltzmann (4.43), les conditions aux limites et les conditions d'invariance (4.46a). Plus précisément, nous déduisons d'abord en utilisant seulement les conditions de rebond (2.14) dans les coins (voir un noeud (1,1) sur la Figure 4-8c, par exemple) la solution sous la forme suivante

$$i=0, \dots, 24 \quad N_i(\mathbf{r}) = \begin{cases} d(\mathbf{r}) - \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} Q_{im}, & \theta = 0^\circ, & \forall \lambda_1, \forall \lambda_2 \\ d(\mathbf{r}) - \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} Q_{im} + \Delta_{xxx}(\mathbf{r}) T_{ixxx}, & \theta = 45^\circ, & \lambda_1 \equiv 0, \forall \lambda_2 \\ d(\mathbf{r}) - \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} Q_{im} + \Delta_{xxx}(\mathbf{r}) T_{ixxx} + \Delta_{zzz}(\mathbf{r}) T_{izxx} + \Delta_{zzz}(\mathbf{r}) T_{izxx}; & & \\ & 0^\circ < \theta < 45^\circ, & \lambda_1 \equiv 0, \lambda_2 \equiv -2 \end{cases} \quad (4.50)$$

Notons que le terme  $\Delta^{im}(\mathbf{r}) e_i^{im}$  est omis dans la solution (4.50) parce que, dans tous les cas ( $\lambda_c = 0$  ou  $\lambda_c \neq 0$ , voir (4.46b)), il n'influence pas le calcul de  $\sigma$  du fait de (4.47a).

En utilisant ensuite les équations de Boltzmann (4.43) entre ce premier noeud et les noeuds voisins, nous développons la solution (4.50) dans tous les noeuds du réseau quand les valeurs propres satisfont les conditions suivantes

$$\lambda_1 = 0 \quad \text{pour} \quad \theta = 45^\circ \quad (4.51a)$$

$$\lambda_1 = 0, \lambda_2 = -2 \quad \text{pour} \quad 0^\circ < \theta < 45^\circ \quad (4.51b)$$

où les valeurs propres  $\lambda_2$  et  $\lambda_1$  sont associées aux vecteurs propres  $T_{i\alpha\beta\beta}$  et  $T_{i\alpha\alpha\beta\beta}$ , respectivement (voir (2.8)). Les détails de calcul sont donnés séparément pour les cas (4.51a) et (4.51b) dans les Appendices 4.D et 4.E.

Notons que par le choix des valeurs propres (4.51) nous avons fait "d'une pierre deux coups". Premièrement, on voit que les termes  $\Delta_\alpha(\mathbf{r}) C_{i\alpha}$  de la décomposition (4.44) disparaissent dans la solution (4.50); donc dans les cellules  $B_s$ , limitées par des parois solides, les courants parasites peuvent être supprimés dans les solutions indépendantes du temps par le choix des valeurs propres (4.51). Deuxièmement, la forme des termes du second ordre dans la solution (4.50) est remarquable

$$\sum_{\alpha, \beta = \{x, z\}} \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) Q_{i\alpha\beta} = - \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} Q_{im}, \quad 0 \leq \theta \leq 45^\circ \quad (4.52)$$

parce que, du fait du résultat (4.49), on obtient que l'anisotropie de pression dans chaque noeud du réseau est définie comme (voir (4.34), (4.36b))

$$(p_n - p_t)(\mathbf{r}) = \sum_i N_i(\mathbf{r}) \Phi_i = -\frac{8C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})}, \quad \forall \mathbf{r}. \quad (4.53)$$

Ainsi une anisotropie forte se manifeste seulement au niveau de l'interface où la perturbation est considérable; cependant, lorsque l'équation (4.43) est appliquée dans tous les noeuds du réseau, la pression peut être anisotrope même dans les points en volume du fait des fluctuations de densité; pour éviter cela, on peut utiliser l'équation (4.43) seulement au niveau de l'interface en une combinaison avec l'équation de Boltzmann standard (2.1a) dans les volumes.

Pour calculer la tension superficielle, il nous reste seulement à substituer l'expression (4.53) dans la formule (4.36a) pour  $\sigma$ . On obtient alors

$$\Omega \equiv -8 \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} \Rightarrow \sigma \equiv -8 \frac{\cos\theta}{S} \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} \quad (4.54)$$

Notons que pour les viscosités égales ( $\lambda_\psi(\mathbf{r}) = \text{const}$ ) nous revenons à la solution (4.36a) avec (4.40) de Gunstensen (1992) obtenue avec la condition (4.32). Pour calculer la somme (4.54), nous allons faire encore quelques remarques sur les solutions (4.50).

### 4.5.3. Tenseurs anisotropes dus à la perturbation.

Considérons la solution (4.50) pour l'interface non inclinée. Dans ce cas le vecteur de perturbation  $\mathbf{Q}_{in}$  est de la forme (voir (4.46a))

$$Q_{in}(\theta = 0^\circ) = \begin{cases} -\frac{1}{2}, & i \in I_{\theta=0^\circ} \\ \frac{1}{2}, & i \notin I_{\theta=0^\circ} \end{cases} \quad (4.55a)$$

Puisque la solution a la même forme (4.50) pour  $\theta = 0^\circ$  dans tous les noeuds du réseau, en utilisant l'équation de Boltzmann (4.43) entre deux noeuds voisins  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{r} + \mathbf{C}_i$ , on obtient

$$\left[ d(\mathbf{r}) - \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} Q_{in} \right]^{collis.} + \left\{ -C^{per.}(\mathbf{r}) Q_{in} \right\}^{perturb.} + C^{per.}(\mathbf{r}) Q_{in} = \left[ d(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i) - \frac{C^{per.}(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i)}{\lambda_\psi(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i)} Q_{in} \right]. \quad (4.55b)$$



Donc par comparaison des expressions dans les crochets pour les sites  $i \notin I_{\theta=0^\circ}$  (voir (4.46a)) et avec l'aide de (4.55a), on obtient que la densité constante  $d^{real}$  se déplace avec les populations entre les noeuds le long de la normale  $z$

$$d^{real} = d(z) - \frac{C^{per.}(z)}{2\lambda_\psi(z)} = N_i(z) = const \quad \text{pour } i \notin I_{\theta=0^\circ} \quad (4.56)$$

La solution dans les sites  $i \in I_{\theta=0^\circ}$  est égale alors à une certaine valeur  $d^g(z)$  qui se déplace le long de l'interface

$$d^g(z) = d^{real} + \frac{C^{per.}(z)}{\lambda_\psi(z)} = N_i(z) \quad \text{pour } i \in I_{\theta=0^\circ}, i \neq 0 \quad (4.57)$$

Ainsi la solution (4.50) pour  $\theta = 0^\circ$  s'exprime sous la forme

$$N_i(z) = d^{real} + \frac{C^{per.}(z)}{\lambda_\psi(z)} T_i^{anisot.}, \quad \forall i = 0, \dots, b_m \quad (4.58a)$$

où le tenseur anisotrope  $T_i^{anisot.}$  diffère de zéro seulement pour les populations tangentielles et pour les populations immobiles; d'après la comparaison (4.50) et (4.56) et (4.58a)  $T_i^{anisot.}$  peut être donné sous la forme suivante pour le réseau FCHC

$$T_i^{anisot.} = \begin{cases} C_{ix}^2 C_{iw}^2 + C_{ix}^2 C_{iy}^2 + C_{iy}^2 C_{iw}^2, & i = 1, \dots, 24 \\ \frac{1}{2}, & i = 0 \end{cases} \quad (4.58b)$$

En fait, la densité cellulaire  $d^{real}$  correspond à la densité *réelle* macroscopique dans la zone non perturbée (voir (4.58a))

$$\rho^{real} = (24 + L) d^{real} \quad (4.59)$$

Notons que puisque la densité  $d^{real}$  est constante, la composante normale  $p_{nn}$  du tenseur de la pression est aussi constante comme dans le fluide réel. De plus, les conditions constitutives (4.32) sont satisfaites dans la cellule non inclinée quand les réflexions classiques (2.15) sont appliquées aux parois solides. Cependant dans les canaux inclinés les termes supplémentaires dans la solution (4.44), reliés avec les tenseurs d'ordres 3 et 4 (voir (4.50) pour  $\theta \neq 0^\circ$ ), sont différents de zéro; on démontre (voir Ginzbourg et Adler, 1994b) que ces termes ne peuvent pas en général être annulés même pour  $\theta = 45^\circ$ . Les coefficients  $\Delta_{xxx}$ ,  $\Delta_{zzx}$  et  $\Delta_{xxz}$  associés avec ces tenseurs dépendent des paramètres du modèle dans chaque phase ainsi que de la position de l'interface; par conséquent, ils ne sont pas obligés de satisfaire les conditions (4.32).

#### 4.5.4. Tension superficielle dans les Modèles 1 et 2.

La formule (4.54) pour  $\sigma$  nécessite l'introduction d'une certaine fonction de perturbation  $C^{per.}(\mathbf{r})$ . Pour obtenir les solutions indépendantes du temps dans les géométries simples, schématisées sur les Figures 4-4a et 4-4b, nous prenons en général

$$C^{per.}(\mathbf{r}, t) = A^{per.} \langle |\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)| \rangle \quad (4.60a)$$

avec

$$\text{- Modèle 1:} \quad \langle |\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)| \rangle = \frac{\{|\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)| + |\mathbf{f}(\mathbf{r}, t-1)|\}}{2} \quad (4.60b)$$

$$\text{- Modèle 2:} \quad \langle |\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)| \rangle = |\mathbf{f}(\mathbf{r}, t)| \quad (4.60c)$$

où  $A^{per.}$  est une constante arbitraire; l'expression (4.60a) avec (4.60c) est la même que (1.106c) pour les modèles ILB classiques.

Néanmoins, pour calculer des gradients de couleur, il faut introduire des hypothèses sur la distribution des couleurs au niveau de l'interface. Pour cela on peut procéder de manière très détaillée en considérant les probabilités de chaque orientation de l'interface par rapport aux axes du réseau. Pour le réseau FHP, par exemple, Gunstensen et al (1991) et Appert (1993) considèrent comment l'interface coupe le maillage. On prend ensuite la somme des valeurs  $\sigma$  obtenues pour chaque inclinaison multipliées par la probabilité de cette inclinaison. On peut aussi considérer les solutions en fonction de la largeur de l'interface; par exemple, Adler et al (1994) considèrent pour ILG sur réseau FHP des interfaces de largeur 2, 4 ou 6 unités.

Nous allons procéder de manière plus formelle en supposant que l'interface est mince, de 1- 2 unités du réseau (voir Figures 4-4b et 4-4a, respectivement). Par conséquent, si on néglige les effets de discrétisation sur la distribution de phases, on obtient de la même façon que précédemment pour réduire l'intégral (4.35) à la somme (4.36)

$$\frac{\cos\alpha}{S} \sum_{\mathbf{r} \in B_s} \frac{\langle |\mathbf{f}(\mathbf{r})| \rangle}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} \approx \sum_z \frac{\langle |\mathbf{f}(z)| \rangle}{\lambda_\psi(z)} (\theta = 0^\circ) \stackrel{def.}{=} \Omega_{\theta=0^\circ}; \quad (4.61)$$

Notons qu'une approximation analogue a déjà été faite par Gunstensen et Rothman (1991a).

Ainsi pour la perturbation (4.60), la formule (4.54) pour  $\sigma$  est réduite au problème de l'estimation de la valeur  $\Omega_{\theta=0^\circ}$  (4.61) selon la distribution de couleurs dans la cellule non inclinée

$$\sigma \cong -8 A^{per} \cdot \Omega_{\theta=0^\circ} \quad (4.62)$$

Pour cela, nous considérons deux types de distribution de couleurs illustrés par les Figures 4-4a et 4-4b pour les Modèles 1 et 2, respectivement. Rappelons, que dans le premier cas nous supposons que l'interface est localisée entre les plans  $z = z^R$  et  $z = z^B$  ayant des phases majoritaires différentes; pour simplifier le calcul, on suppose en plus qu'il n'y pas de masse résidante de couleur opposée dans les noeuds  $\mathbf{z}^R$  ou  $\mathbf{z}^B$ ; c'est-à-dire que la masse totale rouge (bleue) part des noeuds  $\mathbf{z}^B$  ( $\mathbf{z}^R$ ) lors d'un pas de propagation. On obtient alors d'après (4.62) et (4.60b) pour le Modèle 1

$$\sigma^{(1)} = \sigma_0^{(1)} + \delta^{(1)}, \quad (4.63a)$$

où le terme  $\sigma_0^{(1)}$  est la prédiction théorique pour  $\sigma$

$$\sigma_0^{(1)} = -96 A^{per} d \left\{ \left( \frac{24 + L^R}{\lambda_\psi^R} + \frac{24 + L^B}{\lambda_\psi^B} \right) + \left( \frac{L^R - L^B}{2} \right) \left( \frac{1}{\lambda_\psi^B} - \frac{1}{\lambda_\psi^R} \right) \right\}, \quad d = d^{real} \quad (4.63b)$$

avec un écart à la valeur  $\sigma_0^{(1)}$  estimé pour la solution (4.58)

$$\delta^{(1)} = c A^{per.2} \left( \frac{1}{\lambda_\psi^B} - \frac{1}{\lambda_\psi^R} \right) \quad (4.63c)$$

où  $c$  est une constante qui dépende de la distribution réelle des couleurs à l'interface; par exemple, dans les hypothèses faites pour l'interface sur la Figure 4-4a et par la sommation des termes  $\frac{\langle |\mathbf{f}(z)| \rangle}{\lambda_\psi(z)}$  dans les points  $z = \{z^R - 1, z^R, z^B, z^B + 1\}$  (ou également dans tous les noeuds)

on obtient

$$c = -48 \left( (24 + L^R) \frac{\langle |\mathbf{f}(\mathbf{z}^R)| \rangle}{2\lambda_\psi^R} - (24 + L^B) \frac{\langle |\mathbf{f}(\mathbf{z}^B)| \rangle}{2\lambda_\psi^B} \right). \quad (4.63d)$$

De la même façon, en prenant la somme des perturbations dans les cinq noeuds les plus proches de l'interface  $z = z_0$  (Figure 4-4b) qui sont  $z = \{z^R - 1, z^R, z_0, z^B, z^B + 1\}$ , on obtient pour l'interface explicite et pour le Modèle 2:

$$\sigma^{(2)} = \sigma_0^{(2)} + \delta^{(2)}, \quad (4.64a)$$

$$\sigma_0^{(2)} = -48A^{per}d \left( \frac{24 + L^R}{\lambda_\psi^R} + \frac{24 + L^B}{\lambda_\psi^B} + \frac{48 + L^R + L^B}{\lambda_\psi^{int}} \right), \quad d = d^{real} \quad (4.64b)$$

avec

$$\delta^{(2)} = \delta_1^{(2)} + \delta_2^{(2)},$$

$$\delta_1^{(2)} \cong -48A^{per}(\rho_j^R - \rho_j^B) \left( \frac{1}{\lambda_\psi^B} - \frac{1}{\lambda_\psi^R} \right), \quad \delta_2^{(2)} = -48A^{per,2} \left\{ c^R \left( \frac{1}{\lambda_\psi^{int.}} - \frac{1}{\lambda_\psi^R} \right) + c^B \left( \frac{1}{\lambda_\psi^{int.}} - \frac{1}{\lambda_\psi^B} \right) \right\} \quad (4.64c)$$

où  $\rho_j^B$  et  $\rho_j^R$  sont les masses de chaque phase à l'interface;  $c^R$  et  $c^B$  sont des constantes

$$c^R = (24 + L^R) \frac{|f(\mathbf{z}^R)|}{2\lambda_\psi^R}, \quad c^B = (24 + L^B) \frac{|f(\mathbf{z}^B)|}{2\lambda_\psi^B}. \quad (4.64d)$$

Notons que dans le cas particulier

$$L^R = L^B = L^{int.}, \quad \lambda_\psi^R = \lambda_\psi^B = \lambda_\psi^{int.} \quad (4.65)$$

les résultats (4.63b) et (4.64b) coïncident. Puisque les fluctuations de la densité ont été incluses dans l'analyse pour déduire (4.63)-(4.64), on obtient que  $\sigma$  est proportionnelle à la densité réelle  $d^{real}$  tandis que dans les calculs précédents pour les phases symétriques (4.65) (Gunstensen et Rothman, 1991a), la densité est prise égale à la densité moyenne  $d_0$  dans la configuration.

#### 4.5.5. Résultats numériques et conclusions.

Certaines confirmations numériques pour les calculs de tension de surface ont été obtenues; résumons les résultats principaux.

##### • *Test mécanique avec le Modèle 1.*

Dans cette première série de tests, on utilise le Modèle 1 avec une interface non inclinée (Figure 4-4a). La perturbation sous la forme (4.60b) permet d'atteindre les solutions stationnaires pour les populations totales. On mesure ensuite les valeurs  $\sigma_{\text{def.}}$  et  $\sigma_{\text{calcul}}$  selon la définition mécanique (4.36) et par la formule (4.62), respectivement. On peut comparer ces valeurs sur la Figure 4-9; on voit que  $\sigma_{\text{def.}}$  et  $\sigma_{\text{calcul}}$  coïncident pour des rapports arbitraires de viscosités; en outre, cela est également vrai quelles que soient les valeurs propres  $\lambda_2$  et  $\lambda_1$  en accord avec les résultats (4.50) pour  $\theta = 0^\circ$ . Nous comparons ensuite les valeurs mesurées avec l'estimation théorique  $\sigma_\theta^{(1)}(d)$  (4.63b) faite pour  $d = d_0$  et pour  $d = d^{\text{real}}$ . Le calcul confirme, en particulier, que dans le cas (4.65) de deux phases identiques quand l'écart  $\delta^{(1)}$  (4.63c) est égal à zéro, les valeurs mesurées coïncident avec les valeurs (4.63b) pour la densité  $d = d^{\text{real}}$ . Quand les viscosités sont différentes, on confirme que le terme de correction  $\delta^{(1)}$  est proportionnel  $A^{\text{per.2}} \left( \frac{1}{\lambda_\Psi^B} - \frac{1}{\lambda_\Psi^R} \right)$ .

##### • *Test mécanique et test de la bulle avec le Modèle 2; remarques finales.*

Pour observer l'écart supplémentaire  $\delta_1^{(2)}$  (voir (4.64c)) d'après des mesures numériques, faites pour l'interface non inclinée par le Modèle 2, des fluides de densités cellulaires différentes sont données à l'instant  $t = 0$ . Dans ce cas, la position de l'interface ainsi que la distribution des couleurs à l'interface sont établies par l'algorithme de façon à satisfaire les équations de Boltzmann (4.43) avec la perturbation (4.14), (4.60c). Néanmoins on voit sur la Figure 4-10 que les valeurs  $\sigma_{\text{def.}}$  (4.36) et  $\sigma_{\text{calcul}}$  (4.62) coïncident indépendamment du coloriage et de la position de l'interface. En outre, la différence entre les masses de chaque couleur à l'interface a été mesurée afin de vérifier les prédictions (4.64c).

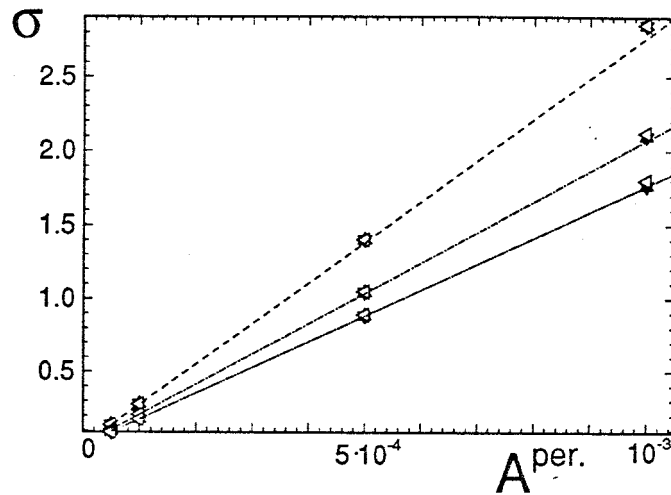
Nous avons essayé aussi de modifier le gradient de couleur  $\mathbf{f}$  (4.14b) pour éviter une dépendance de  $\sigma$  de la distribution actuelle des phases (voir le terme  $\delta_1^{(2)}$  (4.64c)). Par exemple, si le gradient de couleur (4.14b) est modifié de façon à être indépendant du coloriage de l'interface

$$\mathbf{f}^{\text{mod.}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{24} \tilde{f}_i \mathbf{C}_i, \quad \tilde{f}_i = \begin{cases} \rho_R(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t) - \rho_B(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t), & \text{if } \mathbf{r} + \mathbf{C}_i \notin \text{interface} \\ 0, & \text{if } \mathbf{r} + \mathbf{C}_i \in \text{interface} \end{cases}, \quad (4.66)$$

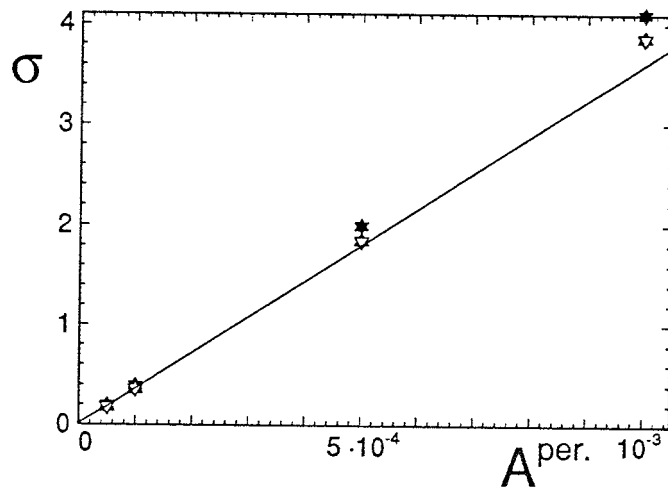
le calcul formel pour  $\Omega_{\theta=0^\circ}$  (4.61) montre que  $\sigma$  ne dépend plus de la différence entre les masses  $\rho_I^R$  et  $\rho_I^B$  à l'interface; les calculs numériques confirment (voir Figure 4-10) que lorsque le gradient de couleur modifié (4.66) est utilisé, les mesures numériques s'accordent mieux avec l'estimation (4.64a). Néanmoins, on pouvait s'attendre à ce que les modèles avec le gradient de couleur modifié (4.66) soient plus mauvais pour les interfaces plus larges quand le coloriage de l'interface devient important.

Cette appréhension a été confirmée par les mesures de  $\sigma$  dans le test de la bulle. La cellule expérimentale, remplie par un des deux fluides, est périodique dans toutes les directions; la bulle de rayon  $R_0$  de la seconde phase se trouve au centre de la cellule; des viscosités différentes sont imposées. Si la perturbation de populations  $\delta N_i$  n'est pas très grande et si les densités cellulaires initiales sont égales en volume, l'écart de rayon de la bulle  $R$  établi au rayon initial est négligeable; dans tous les cas, le rayon final  $R$  peut être mesuré numériquement. Lorsque l'équilibre est atteint, on estime la pression établie dans chaque phase par l'équation d'état (4.18). Pour éviter les fluctuations de la densité qui apparaissent au niveau de l'interface dus à la perturbation, les densités  $\rho_R(\mathbf{r})$  et  $\rho_B(\mathbf{r})$  sont moyennées sur les noeuds occupés par une seule phase. Certains résultats obtenus par les tests de la bulle avec le gradient de couleur  $\mathbf{f}$  (4.14b) et avec celui modifié (4.66) sont donnés sur la Figure 4-11. On voit que les mesures numériques faites pour le gradient de couleur standard  $\mathbf{f}$  (4.14b) s'accordent mieux avec les résultats théoriques bien que les estimations formels et les résultats numériques par le test mécanique soient meilleurs pour  $\mathbf{f}^{\text{mod.}}$  (4.66).

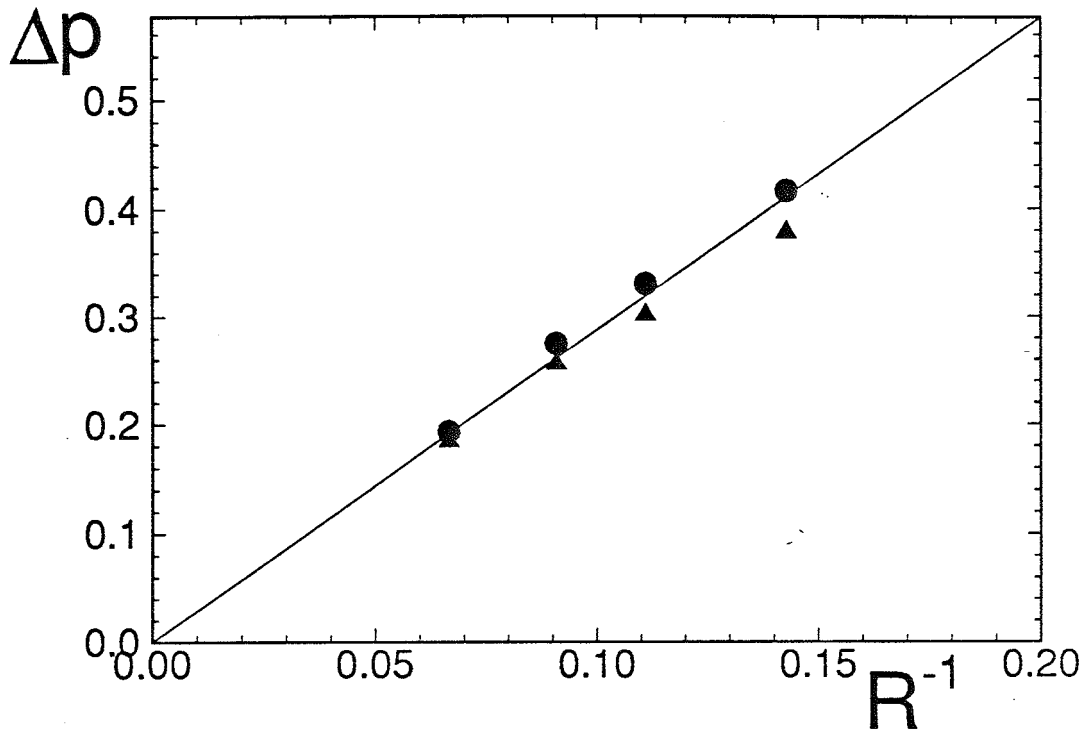
Il semble cependant que les tests mécaniques et les tests de la bulle soient insuffisants pour vérifier les prédictions théoriques. En effet, les tests mécaniques sont assez artificiels et, comme nous l'avons vu sur l'exemple de  $\mathbf{f}^{\text{mod.}}$ , les solutions qui conviennent pour l'interface plane, peuvent être insuffisantes pour les interfaces courbes. De plus, le test de la bulle est "trop symétrique" pour aider à comprendre s'il existe une anisotropie de la tension de surface comme le rapportent Appert (1993) d'après les calculs numériques avec le modèle booléen *liquide - gaz* et Adler et al (1994) pour ILG d'après les prédictions théoriques et les calculs numériques. En effet l'anisotropie observée consiste en la dépendance des valeurs  $\sigma$ , obtenues dans les tests mécaniques sur le réseau FHP, de l'inclinaison de l'interface.



**Figure 4-9:** Test mécanique pour la tension de surface dans le Modèle 1. Le calcul est fait dans un canal non incliné  $B_s$ . Les valeurs calculées  $\sigma_{\text{def.}}$  ( $\blacktriangledown$ ) et  $\sigma_{\text{calcul}}$  ( $\blacktriangle$ ) correspondent aux formules (4.36) et (4.62) pour la tension de surface. Les prédictions théoriques  $\sigma_0^{(1)}$  (4.63b) sont calculées pour  $d = d^{\text{real}}$  ( $\triangleleft$ ) et pour  $d = d_0$  (lignes continues). La taille du canal est  $1 \times 1 \times 19$  (unités de réseau); la densité réelle  $d^{\text{real}}$  est différente pour chaque mesure; les densités cellulaires initiales sont égales:  $d^R = d^B = d_0$ . Les données sont:  $d_0 = 0.2$ ,  $L^R = L^B = L^{\text{int}} = 24$ ,  $\lambda_{\psi}^R = -0.5$ ,  $\lambda_{\psi}^B = -0.5$  (-----);  $\lambda_{\psi}^R = -0.5$ ,  $\lambda_{\psi}^B = -1$  (-.-.-.);  $\lambda_{\psi}^R = -0.5$ ,  $\lambda_{\psi}^B = -1.8$  (-...-...).



**Figure 4-10:** Test mécanique pour la tension de surface dans le Modèle 2. Le calcul est fait dans un canal non incliné  $B_s$ . Les valeurs calculées  $\sigma_{\text{def.}}$  et  $\sigma_{\text{calcul}}$  correspondent aux formules (4.36) et (4.62) pour la tension de surface;  $\sigma_{\text{def.}}$  ( $\blacktriangledown$ ) et  $\sigma_{\text{calcul}}$  ( $\blacktriangle$ ) sont obtenues avec le gradient de couleur standard (4.14b); les points  $\sigma_{\text{def.}}$  ( $\nabla$ ) et  $\sigma_{\text{calcul}}$  ( $\triangleleft$ ) sont obtenus avec le gradient de couleur modifié (4.66). Les prédictions théoriques  $\sigma_0^{(2)}$  sont calculées pour  $d = d_0$  (ligne continue); les densités cellulaires initiales sont différentes  $d^R \neq d^B$ . Les données sont:  $L^R = 24$ ,  $L^B = 36$ ,  $L^{\text{int}} = 30$ ,  $d_0 = 0.2476$ ,  $\lambda_{\psi}^R = -1$ ,  $\lambda_{\psi}^B = -0.5$ . La taille du canal est  $1 \times 1 \times 19$  (unités de réseau).



**Figure 4-11:** Comparaison entre deux solutions numériques calculées par le Modèle 2 dans le test de la bulle et loi de Laplace. La ligne continue représente la loi de Laplace avec les prédictions théoriques (4.64b) avec  $d = d_0$  pour la tension de surface;  $\Delta p$  est calculé selon les résultats du Modèle 2 avec le gradient de couleur standard (4.14b) (●) et celui modifié (4.66) (▲). La boîte périodique  $B_p$  (voir Figure 4-8b) a la taille  $49 \times 1 \times 49$  (unités du réseau) pour la bulle de rayon  $R=15$  ou, respectivement,  $35 \times 1 \times 35$  pour  $R=7, 9, 11$ . Les données sont:  $A^{per.} = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $L^R = L^B = L^{int.} = 24$ ,  $\nu^R = 0.5$ ,  $\nu^B = 1.5$ ,  $\nu^{int.} = 0.75$ ,  $d_0 = 0.2$ .

Pour les interfaces inclinées sur le réseau FCHC, nous avons d'abord vérifié que les solutions indépendantes de temps ont la forme (4.50) quand les valeurs propres satisfont aux conditions (4.51); dans ce cas les expressions (4.36) et (4.54) coïncident terme à terme. Cependant, une différence entre les mesures  $\sigma$ , faites selon les relations (4.36) pour des angles  $\theta$  différents, a été observée. Nous supposons néanmoins que cette anisotropie existe uniquement due à la déviation de gradient de couleur de la normale à l'interface à cause de la discretisation de la distribution des phases dans les noeuds interfaciaux. Nous espérons néanmoins trouver les tests qui puissent aider à examiner les solutions (4.63) et (4.64) ainsi que d'évaluer plus soigneusement l'erreur imposée par ces formules pour les interfaces inclinées; en particulier, le test avec la relaxation des ondes capillaires à l'équilibre, effectué par Gunstensen et al (1991) semble être intéressant aux premiers temps. En outre, il serait sûrement intéressant d'introduire les solutions générales pour le test de la bulle sur le réseau FCHC et d'essayer de suivre le schéma proposé par Somers et Rem (1991) pour déduire la forme analytique de la tension de surface.

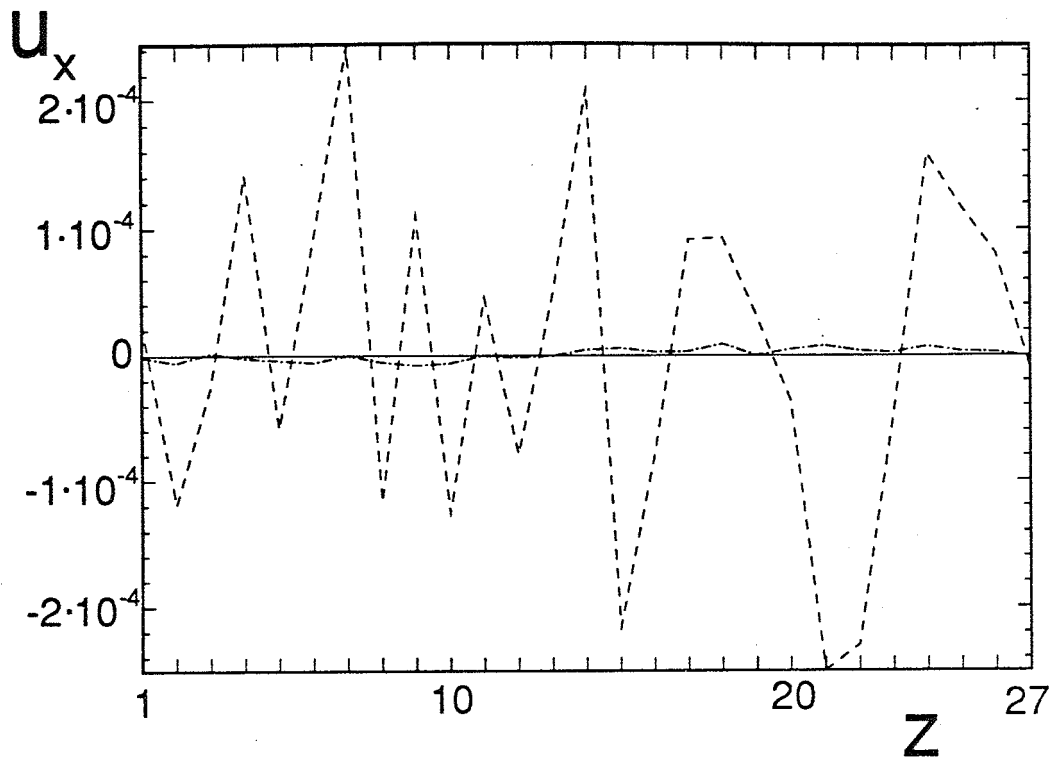


•*Courants parasites.*

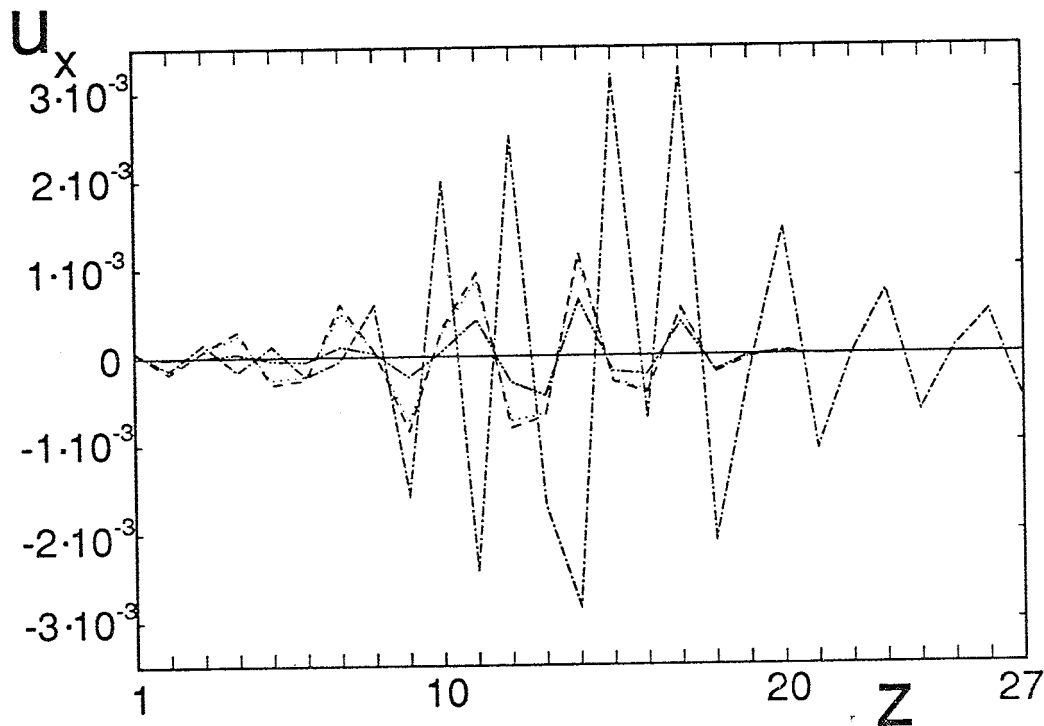
Lorsque les valeurs propres satisfont aux conditions (4.51) et que la solution stationnaire est atteinte dans les tests mécaniques avec des canaux inclinés, les courants parasites disparaissent. Cela est illustré par les Figures 4-12 et 4-13 pour les interfaces inclinées avec l'angle  $\theta = 45^\circ$  et  $\theta \approx \arctg 1/2$ , respectivement. Dans le premier cas, la vitesse est perpendiculaire à l'interface ( $\Delta_x = -\Delta_z$  dans (4.44)); elle converge de façon monotone vers zéro quand  $\lambda_1 \rightarrow 0$  et les solutions sont stationnaires ( $\lambda_1 \neq -1$ , la solution avec  $\lambda_1 = -1$  sur la Figure 4-12b est non stationnaire). Signalons que l'apparition des solutions dépendantes du temps (périodiques) pour les populations totales avec une période de quelques itérations est possible même si les valeurs propres satisfont aux conditions (4.51); dans ce cas les solutions (4.50) ne sont plus valides. La périodicité est reliée à la discrétisation de l'interface; en effet, pilotées par la procédure de coloriage, certaines masses de chaque couleur se promènent entre les noeuds interfaciaux; par conséquent le même coloriage se répète avec une certaine période. Le gradient de couleur, qui suit le coloriage, introduit la périodicité dans les solutions; par exemple, pour la distribution des couleurs sur la Figure 4-4a, la période est égale à 2 itérations en général; c'est pourquoi le gradient de couleur (4.60b) a été choisi dans ce cas pour obtenir des populations indépendantes du temps.

Pour les canaux inclinés d'un angle arbitraire  $\theta$ , il devient de plus en plus difficile d'obtenir les populations totales stationnaires; cependant les résultats donnés sur la Figure 4-13 montrent que les courants disparaissent dans la limite  $\lambda_1 \rightarrow 0$ ,  $\lambda_2 \rightarrow -2$  dans cette configuration même si les solutions intermédiaires avec  $\lambda_1 \neq 0$  (Figure 4-13a) ou  $\lambda_2 \neq -2$  (Figure 4-13b) dépendent du temps.

Mentionnons aussi que nous avons essayé d'étendre les solutions (4.50) pour les cellules périodiques dans toutes les directions (voir Figures 4-8b et 4-8d). Dans ce cas, on ne peut pas résoudre les équations de Boltzmann (4.33) successivement, noeud par noeud, à la différence de la cellule limitée par des parois solides; c'est pourquoi l'analyse analytique a été faite seulement pour les cellules de taille minimale. Il a été obtenu que la solution (4.50) pour  $\theta = 45^\circ$  est l'une des solutions possibles dans la cellule périodique (voir dans l'Appendice 4.D); néanmoins, dans le cas général  $0^\circ < \theta < 45^\circ$ , il n'y pas de raisons d'affirmer que les solutions (4.50) sans courants parasites seront établies uniquement par le choix (4.51b) des valeurs propres. Ces prédictions sont confirmées numériquement par les calculs dans les cellules périodiques: les courants disparaissent quand  $\theta = 45^\circ$  et  $\lambda_1 = 0$  mais ils restent pour les interfaces non parallèles aux axes du réseau quand on prend les valeurs propres (4.51b) même si les solutions établies ne dépendent plus du temps.



a.



b.

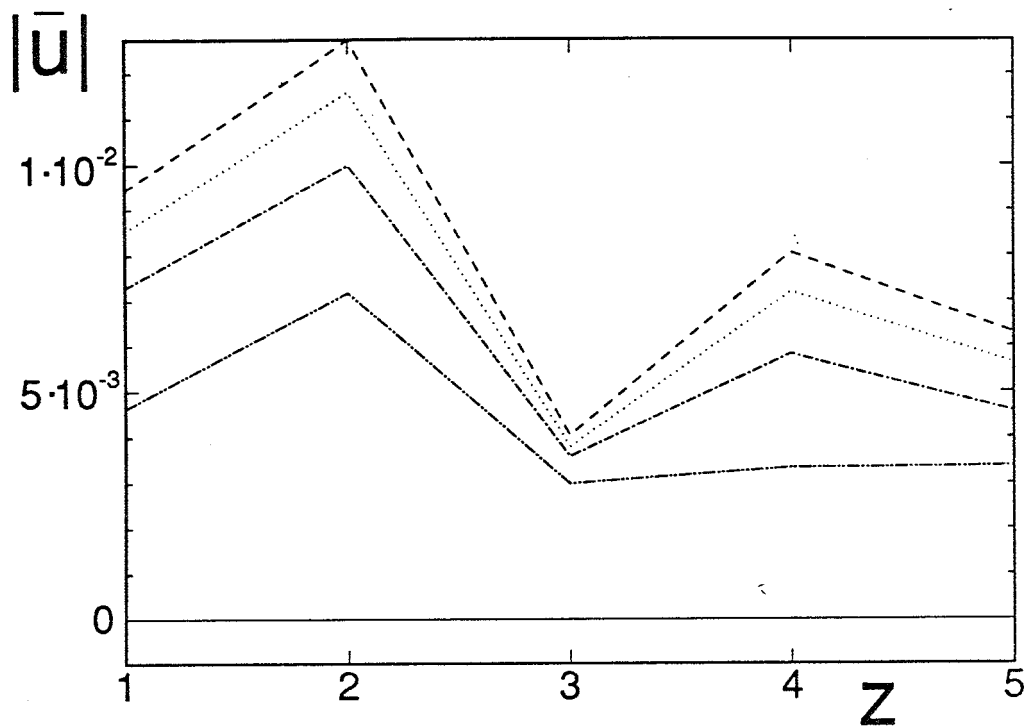
**Figure 4-12:** Courants parasites  $\mathbf{u} = (u_x, 0, -u_x)$  obtenus par le Modèle 2 avec la perturbation (4.17) dans un canal incliné  $B_s$  avec un angle  $\theta = 45^\circ$ . La taille du canal est  $1 \times 1 \times 27$  (unités de réseau); le fluide rouge est au dessous. Les données sont:  $A^{per} = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $L^R = L^B = L^{int} = 0$ ,  $\nu^R = 0.01852$ ,  $\nu^B = 1.5$ ,  $\nu_c^{int} = 0.03659$ ,  $d_0 = 0.3$ . Le temps  $T$  est donné en nombre d'itérations.

(a)  $\lambda_1 = 0$ :  $T = 1000$ (-----);  $T = 2000$ (-.-.-.);  $T = 4000$ (—).

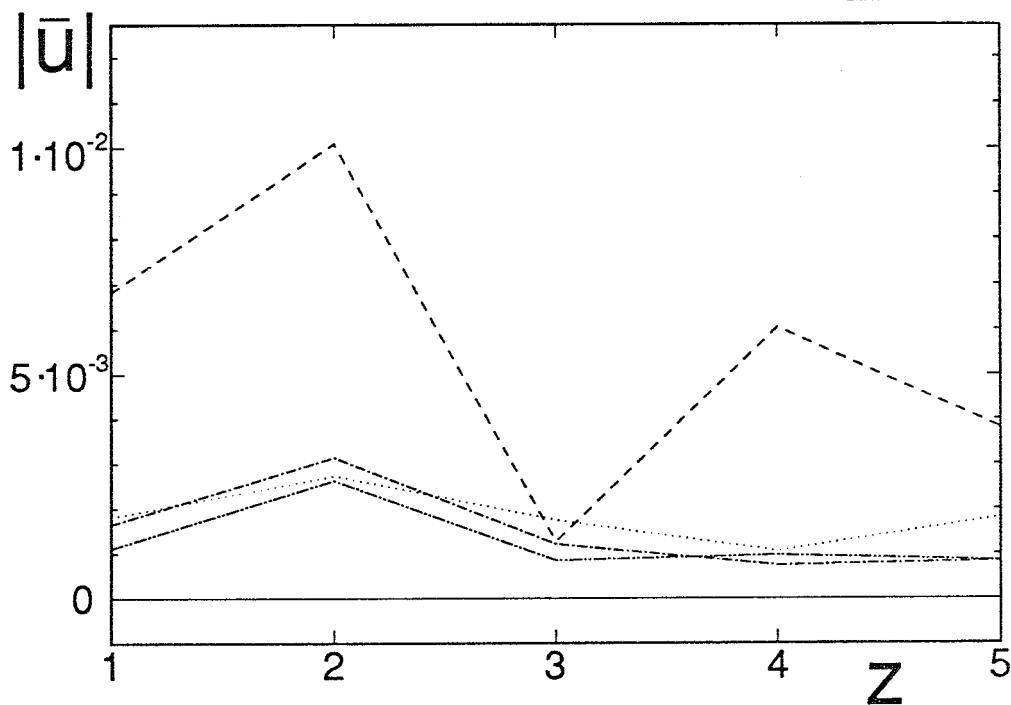
(b) Les courants au temps  $T = 4000$  sont exposés pour les valeurs propres  $\lambda_1$  différentes:

$\lambda_1 = 0$ (—);  $\lambda_1 = -0.5$ (-.-.-.);  $\lambda_1 = -1$ (-.-.);  $\lambda_1 = -1.5$ (.....);  $\lambda_1 = -1.75$ (-----);

les solutions sont indépendantes du temps à l'exception de  $\lambda_1 = -1$ .



a.



b.

**Figure 4-13:** Courants parasites obtenus par le Modèle 2 avec la perturbation (4.17) dans un canal incliné  $B_s$  avec un angle  $\theta \approx \arctg \frac{1}{2}$  par rapport à l'axe  $x$ . La cellule a seulement 5 unités de réseau dans la direction  $z$ ; le fluide rouge est au dessous. On donne le module de vitesse  $\bar{u}$  qui est calculée comme la moyenne arithmétique des courants dans deux colonnes de la cellule. Les données sont:  $A^{per}=5 \cdot 10^{-4}$ ,  $L^R=L^B=L^{int}=0$ ,  $v^R=0.0185$ ,  $v^B=1.5$ ,  $v^{int}=0.0366$ ,  $d_0=0.3$ ,

(a)  $\lambda_1 \rightarrow 0$ ,  $\lambda_2 = -2$ :  $\lambda_1 = 0$  (—);  $\lambda_1 = -0.5$  (-.-.);  $\lambda_1 = -1$  (-.);  $\lambda_1 = -1.5$  (.....);  $\lambda_1 = -1.75$  (---);

(b)  $\lambda_2 \rightarrow -2$ ,  $\lambda_1 = 0$ :  $\lambda_2 = -2$  (—);  $\lambda_2 = -1.5$  (-.-.);  $\lambda_2 = -1$  (-.);  $\lambda_2 = -0.5$  (.....);  $\lambda_2 = 0$  (---).

Ainsi les courants parasites sont inhérents aux modèles ILB à cause de la perturbation (4.14a) introduite dans l'équation de Boltzmann (2.1a) en simple phase. Par conséquent, la vitesse déduite des solutions microscopiques de manière standard (4.12b) est déterminée, en gros, avec une erreur d'ordre  $O(\frac{C^{per.}}{\lambda_\psi}(\mathbf{r}))$  grâce à la présence des courants parasites dans les solutions.

• **Fluctuations anormales de densité.**

Il été démontré dans la Section 4.5.3 que la densité entre les noeuds situés le long de la normale à l'interface n'est pas constante due à l'anisotropie au niveau de l'interface entre les populations tangentielle et les populations normales. L'influence de cette "compressibilité" sur les champs macroscopiques est illustrée par la Figure 4-14. Une comparaison est faite pour les solutions établies par le Modèle 2 avec la solution analytique de l'écoulement de Poiseuille à deux phases (4.23). Deux algorithmes sont considérés: le Modèle 2 "classique" (4.10) - (4.16) et le Modèle 2 modifié de façon à éviter l'influence de la perturbation de densité au champ de vitesse obtenu. Dans le modèle modifié, lorsque la densité vient dans le calcul (voir (4.12a) pour  $\delta N_i^F$ , (4.12b) pour  $\mathbf{u}$ ), on remplace la densité standard  $\rho$  par la densité  $\rho^{real}$ , définie par les solutions dans les noeuds non perturbés. Par conséquent, le modèle modifié donne des solutions sous la forme

$$N_i(\mathbf{r}) = \rho^{real} \left\{ b^{-1} + d'(u_x C_{ix} - \frac{1}{2} F_x C_{ix} + \frac{1}{\lambda_\psi} \frac{\partial u_x}{\partial z} C_{ix} C_{iz} + \frac{v}{\lambda_2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} T_{ixzz}) \right\}(\mathbf{r}) + \frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} T_i^{anisot.} + O(u^2) \quad (4.67)$$

qui représente la somme de la solution (2.29) pour l'équation non perturbée et du terme anisotrope  $\frac{C^{per.}(\mathbf{r})}{\lambda_\psi(\mathbf{r})} T_i^{anisot.}$  dû à la perturbation; cette solution se réduit à la solution (4.58a) pour le test mécanique dans le canal non incliné si la force extérieure  $F_x$  est égale à zéro. Ainsi la solution (4.67) satisfait l'équation de Boltzmann (4.43) de la même façon que la solution (2.29) satisfait l'équation de Boltzmann (2.1) sans perturbation. Par conséquent, la vitesse déterminée par le Modèle 2 modifié est la même que par le Modèle 2 sans perturbation; cela peut être illustré par une comparaison des solutions données sur la Figure 4-14 pour le modèle modifié et sur la Figure 4-6 pour le Modèle 2 sans perturbation; la valeur propre  $\lambda_\psi^{(0)}$  (4.30a) est prise dans les deux cas à l'interface.

Néanmoins, il est difficile de déduire la densité réelle non perturbée des simulations parce que des gradients "physiques" de pression sont aussi modélisés par les fluctuations de la densité dans les modèles de gaz sur réseau.

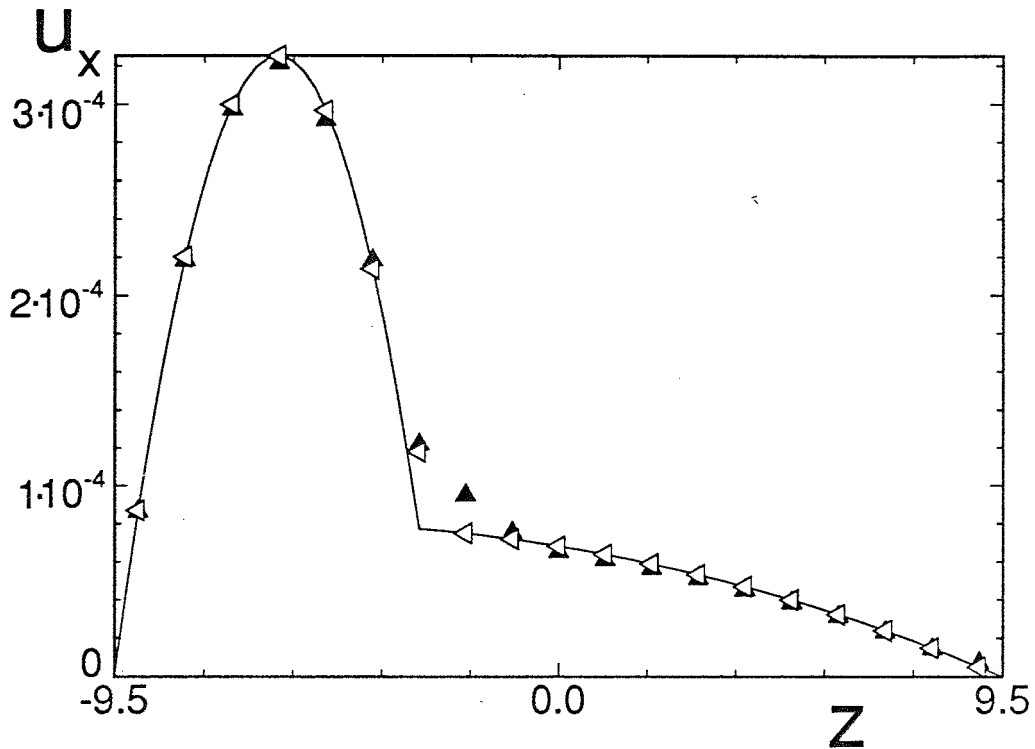


Figure 4-14. Comparaison entre deux solutions numériques obtenus par le Modèle 2 avec la perturbation (4.17) et la solution théorique (4.24) pour l'écoulement de Poiseuille à deux phases. La ligne continue correspond à la solution analytique; ( $\blacktriangle$ ) est la solution standard par le Modèle 2 avec perturbation; ( $\triangle$ ) correspond à la solution par le Modèle 2 avec perturbation et avec la correction de la densité ( $\rho = \rho^{real}$ ). Les données sont:  $F_x^R = F_x^B = 10^{-6}$ ,  $z_0 = -3$ ,  $h = 9.5$ ,  $A^{per.} = 5 \cdot 10^{-4}$ ,  $L^R = L^B = L^{int} = 24$ ,  $\nu^R = 0.01852$ ,  $\nu^B = 1.5$ ,  $\nu^{int} = 0.03569$ .

## Appendice 4.A.

### Analyse du Modèle 1 au premier ordre.

Les conditions interfaciales au premier ordre sont données pour le Modèle 1 par les relations (4.22b). On suppose que l'écoulement satisfait les conditions (4.5) et (4.19) à l'interface. Soit

$$\mathbf{q} = \rho \mathbf{u} \quad (4.A.1)$$

$$\begin{aligned} T_{\alpha\beta} &= \frac{1}{\lambda_\psi} \left( \frac{\partial q_\alpha}{\partial \beta} + \frac{\partial q_\beta}{\partial \alpha} \right) \quad \text{pour } \alpha \neq \beta, \{\alpha, \beta\} = \{x, y, z\} \\ T_{\alpha\alpha} &= \frac{1}{\lambda_\psi} \frac{\partial q_\alpha}{\partial \alpha}, \quad \alpha = \{x, y, z\} \end{aligned} \quad (4.A.2)$$

où des tenseurs des taux de déformations  $\mathbf{D}$  sont donnés par la formule (2.22).

Ainsi, on suppose que la condition interfaciale (4.5) est satisfaite dans le plan  $z = z_0 = \frac{z^R + z^B}{2}$  (voir Figure 4-4a). Donc

$$T_{zz}^R(\mathbf{z}_0) = T_{zz}^B(\mathbf{z}_0) = 0. \quad (4.A.3)$$

On utilise ensuite l'équation de continuité pour les termes  $T_{\alpha\alpha}$  dans les solutions pour les populations (voir (4.22b)). Avec l'aide d'un développement de Taylor au premier ordre pour les populations non inclinées (c'est-à-dire avec  $C_{iz} = \pm 1$ ,  $C_{i\alpha} = 0$ ,  $\alpha = \{x, y\}$ ), on obtient d'après l'équation (4.22b) et la condition (4.A.3)

$$q_z^R(\mathbf{z}_0) = q_z^B(\mathbf{z}_0) \quad (4.A.4)$$

Quand la condition de continuité est utilisée aussi pour les populations inclinées (c'est-à-dire avec  $C_{iz} = \pm 1$ ,  $C_{i\alpha} \neq 0$ ,  $\alpha = \{x, y\}$ ), les équations (4.22b) deviennent

$$\begin{aligned} \{q_z^R + q_\alpha^R C_{i\alpha} + T_{\alpha z}^R C_{i\alpha} + T_{\alpha\alpha}^R + T_{zz}^R\}(\mathbf{z}_{\pm\alpha}^B) \\ = \{q_z^B + q_\alpha^B C_{i\alpha} + T_{\alpha z}^B C_{i\alpha} + T_{\alpha\alpha}^B + T_{zz}^B\}(\mathbf{z}_{\pm\alpha}^B) \end{aligned} \quad (4.A.5)$$

$$\begin{aligned} \{-q_z^R + q_\alpha^R C_{i\alpha} - T_{\alpha z}^R C_{i\alpha} + T_{\alpha\alpha}^R + T_{zz}^R\}(\mathbf{z}_{\pm\alpha}^R) \\ = \{-q_z^B + q_\alpha^B C_{i\alpha} - T_{\alpha z}^B C_{i\alpha} + T_{\alpha\alpha}^B + T_{zz}^B\}(\mathbf{z}_{\pm\alpha}^R) \end{aligned} \quad (4.A.6)$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_{\pm\alpha}^R &= \mathbf{z}^B + \mathbf{C}_p, C_{iz} = -1, C_{i\alpha} \neq 0, \alpha = \{x, y\} \\ \mathbf{z}_{\pm\alpha}^B &= \mathbf{z}^R + \mathbf{C}_p, C_{iz} = 1, C_{i\alpha} \neq 0, \alpha = \{x, y\} \end{aligned} \quad (4.A.7)$$

Le développement de Taylor au premier ordre le long des directions  $\alpha = \{x, y\}$  donne les relations suivantes pour les équations (4.A.5) et (4.A.6)

$$\{q_z^R + \rho_R \partial_\alpha u_\alpha^R + T_{\alpha\alpha}^R + T_{zz}^R\}(\mathbf{z}^B) = \{q_z^B + \rho_B \partial_\alpha u_\alpha^B + T_{\alpha\alpha}^B + T_{zz}^B\}(\mathbf{z}^B) \quad (4.A.8a)$$

$$\{-q_z^R + \rho_R \partial_\alpha u_\alpha^R + T_{\alpha\alpha}^R + T_{zz}^R\}(\mathbf{z}^R) = \{-q_z^B + \rho_B \partial_\alpha u_\alpha^B + T_{\alpha\alpha}^B + T_{zz}^B\}(\mathbf{z}^R) \quad (4.A.8b)$$

et

$$\{q_\alpha^R + \rho_R \partial_\alpha u_z^R + T_{\alpha z}^R\}(\mathbf{z}^B) = \{q_\alpha^B + \rho_B \partial_\alpha u_z^B + T_{\alpha z}^B\}(\mathbf{z}^B) \quad (4.A.9a)$$

$$\{q_\alpha^R - \rho_R \partial_\alpha u_z^R - T_{\alpha z}^R\}(\mathbf{z}^R) = \{q_\alpha^B - \rho_B \partial_\alpha u_z^B - T_{\alpha z}^B\}(\mathbf{z}^R) \quad (4.A.9b)$$

Ensuite d'après le développement de Taylor au premier ordre le long de la direction  $z$  pour la somme des équations (4.A.8a) et (4.A.8b), (4.A.9a) et (4.A.9b), on obtient respectivement

$$\rho_R \partial_\alpha u_\alpha^R \left(1 + \frac{1}{\lambda_\psi^R}\right)(\mathbf{z}_0) = \rho_B \partial_\alpha u_\alpha^B \left(1 + \frac{1}{\lambda_\psi^B}\right)(\mathbf{z}_0) \quad (4.A.10)$$

$$q_\alpha^R(\mathbf{z}_0) = q_\alpha^B(\mathbf{z}_0) \quad (4.A.11)$$

Si on suppose en plus que

$$\partial_\alpha u_z(\mathbf{z}_0) = 0 \quad (4.A.12)$$

on obtient en utilisant la définition de viscosité cinématique (1.78) que la condition de continuité (4.8) pour les tenseurs des taux de déformations  $D_{\alpha z}$  est satisfaite par la différence des équations (4.A.9a) et (4.A.9b).

## Appendice 4.B.

### Analyse du Modèle 2 au premier ordre.

On suppose que les équations (4.28) décrivent le Modèle 2 à l'interface. On va utiliser la notation (4.A.1) et (4.A.2). La condition interfaciale (4.5) avec l'aide de l'équation de continuité et d'après (4.28a) pour les populations non inclinées implique

$$q_z^{int}(\mathbf{z}_0) = q_z^R(\mathbf{z}_0) = q_z^B(\mathbf{z}_0) \quad (4.B.1)$$

La somme et la différence des populations bleues et rouges, arrivées dans le noeud  $\mathbf{z}_0$  à l'interface, peuvent être déduites de la condition (4.28a) sous la forme suivante

$$[q_\alpha^{int} C_{i\alpha} + T_{\alpha\alpha}^{int}] (\mathbf{z}_0) = \left[ \frac{1}{2} \{ (q_\alpha^R + q_\alpha^B) + (T_{\alpha z}^R - T_{\alpha z}^B) \} C_{i\alpha} + \frac{1}{2} (T_{\alpha\alpha}^R + T_{\alpha\alpha}^B) \right] (\mathbf{z}_0),$$

$$\alpha = \{x, y\} \quad (4.B.2)$$

$$[T_{\alpha z}^{int} C_{i\alpha}] (\mathbf{z}_0) = \left[ \frac{1}{2} \{ (q_\alpha^R - q_\alpha^B) + (T_{\alpha z}^R + T_{\alpha z}^B) \} C_{i\alpha} + \frac{1}{2} (T_{\alpha\alpha}^R - T_{\alpha\alpha}^B) \right] (\mathbf{z}_0),$$

$$\alpha = \{x, y\} \quad (4.B.3)$$

Ainsi d'après (4.B.2) et (4.B.3) on a

$$T_{\alpha\alpha}^{int} = \frac{1}{2} (T_{\alpha\alpha}^R + T_{\alpha\alpha}^B) \quad (4.B.4)$$

$$T_{\alpha\alpha}^R = T_{\alpha\alpha}^B \quad (4.B.5)$$

L'équation (4.28b) en utilisant (4.5), (4.19) et la condition de continuité peut se mettre sous la forme

$$q_\alpha^{int} C_{i\alpha} + (1 + \lambda_\psi^{int}) T_{\alpha z}^{int} C_{i\alpha} C_{iz} + (1 + \lambda_\psi^{int}) T_{\alpha\alpha}^{int}$$

$$q_\alpha^B C_{i\alpha} + (1 + \lambda_\psi^B) T_{\alpha z}^B C_{i\alpha} C_{iz} + (1 + \lambda_\psi^B) T_{\alpha\alpha}^B, C_{iz} > 0 \quad (4.B.6)$$

= {

$$q_\alpha^R C_{i\alpha} + (1 + \lambda_\psi^R) T_{\alpha z}^R C_{i\alpha} C_{iz} + (1 + \lambda_\psi^R) T_{\alpha\alpha}^R, C_{iz} < 0 \quad (4.B.7)$$

Donc la somme et la différence des équations (4.B.6) et (4.B.7) pour les sites avec des composantes égales de la vitesse  $C_{i\alpha}$ ,  $\alpha = \{x, y\}$ , impliquent



$$q_{\alpha}^{int} C_{i\alpha} + (1 + \lambda_{\psi}^{int}) T_{\alpha\alpha}^{int} = \frac{1}{2} \{q_{\alpha}^R + q_{\alpha}^B + (1 + \lambda_{\psi}^B) T_{\alpha\alpha}^B - (1 + \lambda_{\psi}^R) T_{\alpha\alpha}^R\} C_{i\alpha} + \frac{1}{2} \{(1 + \lambda_{\psi}^R) T_{\alpha\alpha}^R + (1 + \lambda_{\psi}^B) T_{\alpha\alpha}^B\}, \quad \alpha = \{x, y\} \quad (4.B.8)$$

$$(1 + \lambda_{\psi}^{int}) T_{\alpha\alpha}^{int} C_{i\alpha} = \frac{1}{2} \{q_{\alpha}^B - q_{\alpha}^R + (1 + \lambda_{\psi}^R) T_{\alpha\alpha}^R + (1 + \lambda_{\psi}^B) T_{\alpha\alpha}^B\} C_{i\alpha} + \frac{1}{2} \{(1 + \lambda_{\psi}^B) T_{\alpha\alpha}^B - (1 + \lambda_{\psi}^R) T_{\alpha\alpha}^R\}, \quad \alpha = \{x, y\} \quad (4.B.9)$$

Par conséquent, si les trois valeurs propres  $\lambda_{\psi}$  sont différentes ( $\lambda_{\psi}^{int} \neq \lambda_{\psi}^R \neq \lambda_{\psi}^B$ ), les relations (4.B.2), (4.B.4), (4.B.5), (4.B.8) et (4.B.9) conduisent à la condition

$$T_{\alpha\alpha}^{int} = T_{\alpha\alpha}^R = T_{\alpha\alpha}^B = 0 \quad (4.B.10)$$

Par conséquent, les équations (4.28) peuvent être satisfaites au premier ordre si seulement les dérivées  $\partial_{\alpha} u_{\alpha}$ ,  $\alpha = \{x, y\}$ , sont égales à zéro.

Par analogie quand la condition (4.B.10) est utilisée, la différence entre (4.B.2) et (4.B.8) entraîne

$$T_{\alpha\alpha}^R - T_{\alpha\alpha}^B = (1 + \lambda_{\psi}^B) T_{\alpha\alpha}^B - (1 + \lambda_{\psi}^R) T_{\alpha\alpha}^R \quad (4.B.11)$$

La substitution des relations (4.B.3) et (4.B.10) dans l'équation (4.B.9) conduit à l'expression pour le saut de la quantité de mouvement

$$(2 + \lambda_{\psi}^{int})(q_{\alpha}^R - q_{\alpha}^B) = \{\lambda_{\psi}^B T_{\alpha\alpha}^B + \lambda_{\psi}^R T_{\alpha\alpha}^R\} - \lambda_{\psi}^{int} \{T_{\alpha\alpha}^B + T_{\alpha\alpha}^R\} \quad (4.B.12)$$

La relation (4.B.11) montre que la condition interfaciale (4.8) pour les tenseurs des taux de déformations  $D_{\alpha\alpha}$  est satisfaite indépendamment de la valeur propre  $\lambda_{\psi}^{int}$  et sans la restriction supplémentaire (4.A.12) obtenue pour le Modèle 1. De plus, quand la valeur propre  $\lambda_{\psi}^{int}$  est donnée sous la forme (4.30a) et quand la condition (4.B.11) est utilisée dans (4.B.12) pour les tenseurs  $T_{\alpha\alpha}$ , la partie droite dans la relation (4.B.12) s'annule. Ainsi la solution (4.30a) assure la continuité de la quantité de mouvement avec une erreur du second ordre quand la condition (4.B.10) est satisfaite par l'écoulement.

## Appendice 4.C.

### Contributions des vecteurs propres de la matrice de collision sur le réseau FCHC dans le calcul de la tension de surface par le test mécanique.

**4.C.1.** Pour calculer la somme (4.36a) avec (4.36b) et sans les interactions ( $I_i = 0$ ) nous introduisons les tenseurs  $\mathbf{A}^{(k)}$

$$\mathbf{A}^{(k)} = \sum_{i=1}^{24} \mathbf{T}_i^{(k)} \Phi_i. \quad (4.C.1)$$

Nous allons évaluer ces tenseurs pour tous les vecteurs propres de la matrice de collision  $\mathbf{T}_i^{(k)}$  d'ordre  $k$  ( $k = 0, \dots, 4$ ) et pour un vecteur arbitraire  $\Phi$  introduit par la formule (4.36b)

$$\Phi_i = Q_{imm} - Q_{iit} = \sum_{\alpha \in \{x, y, z\}} \Delta^{(\alpha)} Q_{i\alpha\alpha} + \sum_{\alpha=\beta} \Delta^{(\alpha\beta)} Q_{i\alpha\beta} \quad (4.C.2a)$$

Les coefficients  $\Delta^{(\alpha)}$  et  $\Delta^{(\alpha\beta)}$  ( $\alpha, \beta = \{x, y, z\}$ ) sont (voir (4.38b) - (4.38d))

$$\Delta^{(\alpha)} = f_\alpha^2 - f_\alpha^{\perp 2}, \quad \Delta^{(\alpha\beta)} = f_\alpha f_\beta - f_\alpha^\perp f_\beta^\perp, \quad (4.C.2b)$$

$$\sum_{\gamma \in \{x, y, z\}} \Delta^{(\gamma)} = 0 \quad (4.C.2c)$$

où les vecteurs unités  $f_e$  normal à l'interface et  $f_e^\perp$  parallèle à l'interface sont donnés par les formules (4.38a).

#### 4.C.1.1.

Un vecteur propre d'ordre zéro  $e^0$  est une constante pour les populations mobiles (voir (2.8a)). Donc d'après la conservation de la masse par les tenseurs du second ordre  $Q_{i\alpha\beta}$  (voir (2.8c)), on a

$$\mathbf{A}^{(0)} = \sum_{i=1}^{24} \Phi_i e_i^0 = 0 \quad (4.C.3a)$$

Pour la même raison, pour le vecteur propre  $e_i^{im}$  (voir (2.9))

$$\sum_{i=1}^{24} \Phi_i e_i^{im} = 0 \quad (4.C.3b)$$

#### 4.C.1.2.

Les vecteurs propres du premier ordre sont les vitesses  $C_i$  sur le réseau FCHC. Par analogie avec (4.C.3a), la conservation de la quantité de mouvement par  $Q_{iab}$  implique

$$A_\gamma^{(1)} = \sum_{i=1}^{24} \Phi_i C_{i\gamma} = 0 \quad \forall \gamma \quad (4.C.4)$$

#### 4.C.1.3.

Pour les vecteurs propres  $Q_{i\alpha\beta}$  du second ordre, on a

$$A_{\alpha\alpha}^{(2)} = \sum_{i=1}^{24} Q_{i\alpha\alpha} \Phi_i = \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} \Delta^{(\gamma)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha}^2 c_{i\gamma}^2 + \sum_{\gamma \neq \delta} \Delta^{(\gamma\delta)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha}^2 c_{i\gamma} c_{i\delta} = \sum_{\gamma} \Delta^{(\gamma)} (8\delta_{\alpha\gamma} + 4) = 8 \sum_{\gamma} \Delta^{(\gamma)} \delta_{\alpha\gamma}, \quad (4.C.5a)$$

$$\begin{aligned} A_{\alpha\beta}^{(2)} &= \sum_{i=1}^{24} Q_{i\alpha\beta} \Phi_i = \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} \Delta^{(\gamma)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma}^2 + \sum_{\gamma \neq \delta} \Delta^{(\gamma\delta)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha} c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} = 4 \sum_{\gamma \neq \delta} \Delta^{(\gamma\delta)} (\delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}) \\ &= 4 \sum_{\gamma \neq \delta} \Delta^{(\gamma\delta)} (\delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}), \quad \forall \alpha \neq \beta \end{aligned} \quad (4.C.5b)$$

#### 4.C.1.4.

Pour les vecteurs propres  $T_{i\alpha\alpha\beta}$  du troisième ordre (voir (2.8d)), on obtient

$$A_{\alpha\alpha\beta}^{(3)} = \sum_{i=1}^{24} T_{i\alpha\alpha\beta} \Phi_i = -3 \left( \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} \Delta^{(\gamma)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha}^2 c_{i\beta} c_{i\gamma}^2 + \sum_{\gamma \neq \delta} \Delta^{(\gamma\delta)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha}^2 c_{i\beta} c_{i\gamma} c_{i\delta} \right) = 0 \quad \forall \alpha \neq \beta \quad (4.C.6)$$

#### 4.C.1.5.

Les vecteurs propres du quatrième ordre  $T_{i\alpha\alpha\beta\beta}$  (2.8d) sont donnés sous la forme des tenseurs invariants du quatrième ordre qui conservent la masse et la quantité de mouvement (ces tenseurs sont discutés dans le paragraphe suivant de cet Appendice). Pour ces vecteurs propres on déduit avec l'aide des relations (4.C.2c) et (4.C.5a)

$$\begin{aligned} A_{\alpha\alpha\beta\beta}^{(4)} &= \sum_{i=1}^{24} T_{i\alpha\alpha\beta\beta} \Phi_i = S_1 + S_2, \\ S_1 &= \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} \Delta^{(\gamma)} \sum_{i=1}^{24} c_{i\alpha}^2 c_{i\beta}^2 Q_{i\gamma\gamma} = 4(\Delta^{(\alpha)} + \Delta^{(\beta)}), \quad \forall \alpha \neq \beta \\ S_2 &= -\frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^{24} Q_{i\alpha\alpha} \Phi_i + \sum_{i=1}^{24} Q_{i\beta\beta} \Phi_i \right) = -4(\Delta^{(\alpha)} + \Delta^{(\beta)}); \end{aligned}$$

donc

$$A_{\alpha\alpha\beta\beta}^{(4)} = 0 \quad \forall \alpha \neq \beta. \quad (4.C.7)$$

## 4.C.1.6.

Ainsi seulement les vecteurs propres du second ordre contribuent au coefficient de tension superficielle (4.36a). La relation (4.49) peut être facilement déduite de la solution (4.C.5) si on décompose  $Q_{imm}$  en deux parties

$$Q_{imm} = \sum_{\alpha \in \{x,y,z\}} f_{\alpha}^2 Q_{i\alpha\alpha} + \sum_{\alpha \neq \beta} f_{\alpha} f_{\beta} C_{i\alpha} C_{i\beta} \quad (4.C.8)$$

Donc, avec l'aide des relations (4.C.2) et (4.C.5), on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{24} Q_{imm} \Phi_i &= S_1 + S_2, \\ S_1 &= \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} f_{\gamma}^2 \sum_{i=1}^{24} Q_{i\gamma\gamma} \Phi_i = 12 \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} f_{\gamma}^4 - 12 \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} f_{\gamma}^2 f_{\gamma}^{\perp 2} + 4 \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} (f_{\gamma}^2 \sum_{\delta \neq \gamma} (f_{\delta}^2 - f_{\delta}^{\perp 2})) \\ &= 8 \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} f_{\gamma}^4 - 8 \sum_{\gamma \in \{x,y,z\}} f_{\gamma}^2 f_{\gamma}^{\perp 2}, \\ S_2 &= \sum_{\gamma \neq \delta} f_{\gamma} f_{\delta} \sum_{i=1}^{24} Q_{i\gamma\delta} \Phi_i = 8 \sum_{\gamma \neq \delta} f_{\gamma} f_{\delta} (f_{\gamma} f_{\delta} - f_{\gamma}^{\perp} f_{\delta}^{\perp}) = 8 - S_1. \end{aligned} \quad (4.C.9)$$

Ainsi le résultat (4.49) est prouvé.

## 4.C.2. Tenseurs invariants du quatrième ordre sur le réseau FCHC.

D'après les propriétés d'invariance (voir Frisch et al, 1987) pour le réseau FCHC, les tenseurs invariants du quatrième ordre doivent être de la forme générale:

$$\begin{aligned} T_{i\alpha\beta\gamma\delta} &= A^{(4)} C_{i\alpha} C_{i\beta} C_{i\gamma} C_{i\delta} + A^{(2)} \sum_{(\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}\bar{\delta}) \in (\alpha,\beta,\gamma,\delta)} C_{i\bar{\alpha}} C_{i\bar{\beta}} \delta_{\bar{\gamma}\bar{\delta}} \\ &+ A^{(0)} \sum_{(\bar{\alpha}\bar{\beta}\bar{\gamma}\bar{\delta}) \in (\alpha,\beta,\gamma,\delta)} \delta_{\bar{\alpha}\bar{\beta}} \delta_{\bar{\gamma}\bar{\delta}} + A_{\Sigma}^{(0)} \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} \end{aligned} \quad (4.C.10)$$

où  $A^{(4)}$ ,  $A^{(2)}$ ,  $A^{(0)}$  et  $A_{\Sigma}^{(0)}$  sont des constantes.

La conservation de la masse implique

$$\sum_{i=1}^{h_m} T_{i\alpha\beta\gamma\delta} = 0 \quad \forall \alpha, \beta, \gamma, \delta \quad (4.C.11)$$

Deux équations peuvent être déduites d'après (4.C.11) pour les coefficients dans (4.C.10)

$$\sum_{i=1}^{b_m} T_{i\alpha\alpha\beta\beta} = 0 \quad \forall \alpha \neq \beta \quad (4.C.12)$$

$$\sum_{i=1}^{b_m} T_{i\alpha\alpha\alpha\alpha} = 0 \quad \forall \alpha \quad (4.C.13)$$

Par conséquent, d'après les relations (4.C.12) et (4.C.13) pour le réseau FCHC ( $D = 4$ ,  $c^2 = 2$ ), on a

$$\begin{aligned} A^{(4)} \frac{c^4 b_m}{D(D+2)} + 2A^{(2)} \frac{c^2 b_m}{D} + A^{(0)} b_m &= 0 \\ A^{(4)} \frac{c^2 b_m}{D} + 6A^{(2)} \frac{c^2 b_m}{D} + 3A^{(0)} b_m + A_{\Sigma}^{(0)} &= 0 \end{aligned} \quad (4.C.14)$$

Donc, les coefficients  $A^{(0)}$  et  $A_{\Sigma}^{(0)}$  sont

$$A^{(0)} = -\frac{A^{(4)}}{6} - A^{(2)}, \quad A_{\Sigma}^{(0)} = 0 \quad (4.C.15)$$

Puisque  $T_{i\alpha\beta\gamma\delta}$  est le tenseur du quatrième ordre, la conservation de la quantité de mouvement est vérifiée automatiquement. Par substitution de (4.C.15) dans (4.C.10) on obtient

$$T_{i\alpha\alpha\beta\beta} = A^{(4)} \left\{ C_{i\alpha}^2 C_{i\beta}^2 + \gamma (C_{i\alpha}^2 - \frac{1}{2}) + \gamma (C_{i\beta}^2 - \frac{1}{2}) - \frac{1}{6} \right\}, \quad \gamma = \frac{A^{(2)}}{A^{(4)}} \quad \text{si } A^{(4)} \neq 0 \quad (4.C.16)$$

En particulier, on peut montrer que la solution (4.C.16) avec  $\gamma = -\frac{1}{2}$  correspond aux vecteurs propres de la matrice de collision associés avec la valeur propre  $\lambda_1$ .

### Appendice 4.D.

#### Test mécanique dans un canal incliné avec un angle $\theta = 45^\circ$

Les cellules montrées sur la Figure 4 - 8 avec  $N_x = n_z$  permettent de simuler un canal incliné avec un angle  $\theta = 45^\circ$  par rapport à l'axe  $x$  (voir aussi Figure 4-15 dans cet Appendice pour un canal limité par les parois solides). Due à la symétrie entre l'axe  $x$  et l'axe  $z$  dans ces canaux, on a

$$\Delta_x = -\Delta_z = \overset{def.}{\Delta^{(1)}}, \quad \Delta_{xz} = -\Delta_{zx} = \overset{def.}{\Delta^{(3)}} \quad (4.D.1)$$

Donc la solution indépendante du temps (4.44) pour ce canal s'écrit comme

$$\begin{aligned} N_i(\mathbf{r}) &= d(\mathbf{r}) e_i^0 + \Delta^{(1)}(\mathbf{r})(C_{ix} - C_{iz}) + \sum_{\{\alpha, \beta\} \in \{x, z\}} \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) Q_{i\alpha\beta} + \Delta^{(3)}(\mathbf{r})(T_{ixxz} - T_{izzx}) + \Delta_{xxxx}(\mathbf{r}) T_{ixxz} + \Delta^{im}(\mathbf{r}) e_i^{im} \\ & \quad i = 0, \dots, b_m \end{aligned} \quad (4.D.2)$$

Ensuite la condition d'invariance (4.46a) pour les populations  $N_i$  avec  $\{i: C_{ix} C_{iz} = 1\}$  ou  $\{i: C_{ix} = 0 \text{ et } C_{iz} = 0\}$  impliquent avec l'aide de la condition (4.46b) les deux conditions suivantes

$$\left\{ \begin{aligned} \lambda_\psi \left( \frac{1}{2} (\Delta_{xx} + \Delta_{zz}) + \Delta_{xz} \right) + \frac{\lambda_1}{3} \Delta_{xxxx} &= \frac{C^{per.}}{2} & (4.D.3a) \\ \lambda_\psi \left( -\frac{1}{2} (\Delta_{xx} + \Delta_{zz}) \right) + \frac{\lambda_1}{3} \Delta_{xxxx} &= \frac{C^{per.}}{2} & (4.D.3b) \end{aligned} \right.$$

Considérons le noeud  $z_1$  sur la Figure 4-15. Dans ce noeud, on a trois réflexions en arrière pour les populations différentes de la solution triviale (4.42); d'après la condition de rebond (2.14) appliquée aux populations dans les cellules  $k = 1, \dots, 3$  (voir Fig.4-15) et en utilisant l'équation de Boltzmann (4.43), on obtient

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta^{(1)} &= \frac{\lambda_\psi}{4} (-1)^k (\Delta_{xx} - \Delta_{zz}) - \frac{\Delta^{(3)}}{2} (2 + \lambda_2) - \frac{\lambda_1}{12} \Delta_{xxxx} & \text{pour } k = 1, 2 & (4.D.4a) \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Delta^{(1)} &= \frac{3C^{per.}}{8} + \frac{\lambda_\psi}{4} \left( \frac{\Delta_{zz} + \Delta_{xx}}{2} - \Delta_{xz} \right) + \Delta^{(3)} (2 + \lambda_2) + \frac{\lambda_1}{12} \Delta_{xxxx} & \text{pour } k = 3 & (4.D.4b) \end{aligned} \right.$$

Par conséquent, selon (4.D.4a)

$$\Delta_{xx} = \Delta_{zz} \quad (4.D.5a)$$

et ensuite, d'après la différence entre (4.D.3a) et (4.D.3b), on déduit avec l'aide de (4.D.5a)

$$\Delta_{xx} = \Delta_{zz} = -\frac{1}{2}\Delta_{xz} \quad (4.D.5b)$$

Donc les tenseurs du second ordre dans les solutions (4.D.2) forment un tenseur de perturbation  $Q_{im}$  pour  $\theta = 45^\circ$

$$Q_{im}(\theta = 45^\circ) = \begin{cases} -\frac{1}{2}, & i \in I_{\theta=45^\circ} \\ \frac{3}{2}, & i : C_{ix} C_{iz} = -1 \\ 0, & \text{autres valeurs} \end{cases} \quad (4.D.5c)$$

En plus on voit que pour

$$\lambda_l = 0 \quad (4.D.6)$$

les équations (4.D.5a)-(4.D.5b) et (4.D.3) entraînent

$$\Delta_{xz} = \frac{C^{per.}}{\lambda_\psi} \quad (4.D.7a)$$

Donc, d'après (4.D.4) avec (4.D.5b), (4.D.6) et (4.D.7a)

$$\begin{cases} \Delta^{(3)} = 0, & (4.D.7b) \\ \Delta^{(1)} = 0. & (4.D.7c) \end{cases}$$

Ainsi les courants parasites sont annihilés dans le dernier noeud  $\mathbf{z}_1$  par le choix de la valeur propre  $\lambda_l$ .

Le noeud  $\mathbf{z}_2$  sur la Fig.4-15 peut être traité de la même façon. La seule différence avec le noeud  $\mathbf{z}_1$  est que deux équations de Boltzmann (4.43) entre les noeuds  $\mathbf{z}_1$  et  $\mathbf{z}_2$  doivent être considérées au lieu de la condition de rebond dans la direction  $z$  (voir les populations  $N_{,j}$  et  $N_1''$  pour le noeud  $\mathbf{z}_1$  sur la Figure 4-15). La substitution de la solution (4.D.2) avec (4.D.7) pour le noeud  $\mathbf{z}_1$  dans ces équations conduit à la même solution (4.D.7) dans le noeud  $\mathbf{z}_2$  quand la valeur propre (4.D.6) est utilisée. Par conséquent, les solutions (4.D.6) et (4.D.7) peuvent être développées pour tous les noeuds. Ainsi on obtient la solution (4.50) dans tous les noeuds de la cellule inclinée avec angle  $\theta = 45^\circ$  et limitée par les parois solides.





## Appendice 4.E.

### Test mécanique dans un canal incliné avec un angle $0^\circ < \theta < 45^\circ$ .

L'objectif de cet Appendice est de démontrer que la solution suivante élimine les courants parasites dans une cellule limitée par les parois solides et inclinée avec un angle arbitraire  $0^\circ < \theta < 45^\circ$

$$\lambda_1 = 0 \quad (4.E.1)$$

$$\lambda_2 = -2 \quad (4.E.2)$$

La forme des solutions pour les populations est donnée ensuite par les formules (4.50) pour un noeud quelconque.

Pour la solution arbitraire 2D, les populations sont données par les relations (4.44) (voir (4.D.2) pour  $\theta = 45^\circ$ ). Les conditions d'invariance (4.46a) pour la direction  $y$  impliquent avec l'aide de la relation (4.46b) (voir (4.D.3) pour  $\theta = 45^\circ$ )

$$\left(-\frac{\lambda_\psi}{2}(\Delta_{xx} + \Delta_{zz})\right) + \frac{\lambda_1}{3} \Delta_{xxxx} = \frac{C^{per.}}{2} \quad (4.E.3)$$

Premièrement, le noeud (1,1) est considéré (voir Fig.4-8c). Dans ce noeud, on a au moins quatre réflexions en arrière pour les populations différentes de la solution triviale (4.42); par analogie avec les relations (4.D.4), la condition de rebond (2.14), appliquée aux populations dans les cellules  $k = 1, 2$ , donne (voir Fig.4-8c)

$$\left\{ \Delta_\alpha = (-1)^k \left\{ \frac{C^{per.}}{2} q(\theta) - \frac{\lambda_1}{12} \Delta_{xxxx} \right\} - \frac{\lambda_\psi}{4} (\Delta_{zz} - \Delta_{xx}) - \frac{\Delta_{\alpha\beta\beta}}{2} (2 + \lambda_2) \right\} \text{ où } \begin{cases} \alpha = z, \quad \beta = x \\ q(\theta) = (\cos^2\theta - \frac{1}{2}) \text{ pour } k = 1; \\ \alpha = x, \quad \beta = z, \\ q(\theta) = (\sin^2\theta - \frac{1}{2}) \text{ pour } k = 2; \end{cases} \quad (4.E.4a)$$

Ensuite la somme et la différence des équations (2.14) pour les directions  $k = 3$  et  $k = 4$  entraîne

$$\begin{aligned}\Delta_x &= \frac{-\lambda_\psi}{2} \Delta_{xz} + \frac{C^{per.}}{2} \sin 2\theta + \Delta_{zz} (2 + \lambda_2) \\ \Delta_z &= \frac{-\lambda_\psi}{4} (\Delta_{zz} + \Delta_{xx}) - \frac{\lambda_1}{6} \Delta_{xxx} - \frac{C^{per.}}{4} + \Delta_{zx} (2 + \lambda_2)\end{aligned}\quad (4.E.4b)$$

On peut voir que la solution des équations (4.E.3) et (4.E.4) avec les conditions (4.E.1)-(4.E.2) est

$$\Delta_x = \Delta_z \equiv 0; \quad \Delta_{xx} = -\frac{C^{per.}}{\lambda_\psi} \sin^2 \theta; \quad \Delta_{zz} = -\frac{C^{per.}}{\lambda_\psi} \cos^2 \theta; \quad \Delta_{xz} = \frac{C^{per.}}{\lambda_\psi} \sin 2\theta \quad (4.E.5)$$

Ainsi la solution (4.50) est déduite pour le noeud (1,1) de l'équation de Boltzmann (4.43) et des conditions de rebond. Quand la solution (4.50) est obtenue dans un noeud, on peut déduire la solution sous la même forme (4.50) pour un noeud voisin à partir d'une paire d'équations de Boltzmann concernant ces noeuds. Par exemple, pour atteindre la solution (4.50) dans tous les noeuds  $(x, z)$  de la cellule, ils peuvent être considérés dans l'ordre suivant:

$$\begin{array}{llll} (1,1), (2,1), (3,1), & & \dots & (N_x-1,1), \\ (1,2), (2,2), & \dots & & (N_x-2,2), \\ \dots & & & \\ (1,n_z), (2,n_z), & \dots & & (N_x-n_z, n_z) \end{array}$$

Le processus peut être continué en arrière en utilisant les conditions périodiques dans les noeuds  $(N_x, 1)$  et  $(1, n_z)$  (voir les noeuds B et A sur la Figure 8-2c):

$$\begin{array}{llll} (N_x, 1) & & & \\ (1, n_z+1), (2, n_z+1), & \dots & & (N_x-n_z-1, n_z+1) \\ (N_x-1, 2), (N_x, 2) & & & \\ (1, n_z+2), (2, n_z+2), & \dots & & (N_x-n_z-2, n_z+2). \end{array}$$

# **Chapitre 5.**

## **Ecoulements à trois phases.**

## 5.1. Introduction.

Nous avons abordé le problème de la simulation à trois phases dans le même esprit que pour les écoulements à deux phases: on combine l'algorithme de Gunstensen (1992) ILB à trois phases avec les modèles 1 et 2 à deux phases pour avoir des viscosités différentes. La possibilité d'avoir des nombres différents de particules immobiles pour chaque phase est aussi introduite dans ces modèles. On traite les interfaces à deux phases dans les modèles à trois phases de la même façon et donc deux modèles sont possibles dans la procédure à trois phases lorsque seulement deux phases coexistent à l'interface pour satisfaire au mieux les conditions interfaciales. Par conséquent, les coefficients de tension superficielle dus à la perturbation à trois phases sont déduits dans les deux modèles pour les phases prises deux à deux. La matrice de collision dans les points triples est celle de la phase majoritaire par analogie avec le Modèle 1 à deux phases.

Après avoir introduit les modèles, on rassemble quelques résultats théoriques relatifs à l'étalement d'un volume fixe de liquide à l'interface entre deux autres fluides. Puis des exemples numériques d'étalement d'une goutte en fonction du coefficient d'étalement et des paramètres physiques des fluides montrent que les modèles à trois phases se comportent convenablement.

## 5.2. Généralisation du Modèle 1 et du Modèle 2 à trois phases.

### 5.2.1. Description des modèles.

Les modèles ILB pour l'écoulement à trois phases de la même viscosité ont été introduits par Gunstensen (1992) comme combinaison des modèles ILG à trois phases (voir Gunstensen et Rothman, 1991b) et des modèles ILB à deux phases (Gunstensen et al, 1991; Gunstensen, 1992). Cette généralisation est faite de la même façon que précédemment pour le modèle ILG à trois phases (Gunstensen et Rothman, 1991b) d'après le modèle ILG à deux phases (Rothman et Keller, 1988); la perturbation des populations selon le gradient de couleur est remplacée par la somme des perturbations correspondant aux gradients de couleur de chaque phase. Par analogie, ces modèles peuvent être aisément développés pour l'écoulement à plusieurs phases; par exemple, l'application de ILG avec un nombre arbitraire de composants constitue le modèle d'émulsion de Rothman (1991), qui a déjà été discuté dans la Section 1.4.1. Notons qu'un des avantages principaux des modèles non miscibles ILB par comparaison avec les modèles ILG est la diminution considérable de la diffusion d'un fluide dans l'autre au niveau de l'interface.

Pour commencer les simulations à trois phases, nous avons généralisé le Modèle 1 et le Modèle 2 (voir (4.10)-(4.16) dans le Chapitre 4). La procédure est donc essentiellement la même: on a les populations des trois couleurs de vitesse  $\mathbf{C}_i$ ,  $i = 0, \dots, b_m = 24$ , dans chaque noeud du réseau FCHC. Soit  $N_i^R(\mathbf{r}, t)$ ,  $N_i^B(\mathbf{r}, t)$  et  $N_i^V(\mathbf{r}, t)$  les populations de la phase rouge, bleue et verte. L'index 0 correspond aux particules immobiles; les nombres de particules immobiles sont  $L^R$ ,  $L^B$  ou  $L^V$ . L'algorithme contient cinq étapes qui sont décrites ci-dessous.

## 1. Définition des champs à l'itération $t$ .

1.1. Calcul des densités pour chaque phase  $\rho_R, \rho_B$  et  $\rho_V$

$$\rho_K(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=0}^{24} N_i^K(\mathbf{r}, t) W_i^K, \quad W_0^K = L^K, \quad W_i^K = 1, \quad i = 1, \dots, 24 \quad \text{pour } K \in \{R, B, V\} \quad (5.1a)$$

1.2. Calcul de la population totale  $N_i$  et de la densité totale  $\rho$

$$N_i(\mathbf{r}, t) = \sum_{K \in \{R, B, V\}} N_i^K(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, 24$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{K \in \{R, B, V\}} \rho_K(\mathbf{r}, t) \quad (5.1b)$$

1.3. Addition des forces extérieures  $\mathbf{F}^R, \mathbf{F}^B$  et  $\mathbf{F}^V$ :

$$N_i'(\mathbf{r}, t) = N_i(\mathbf{r}, t) + \delta N_i^F(\mathbf{r}, t); \quad \delta N_i^F(\mathbf{r}, t) \propto \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{C}_i, \quad (5.1c)$$

où l'expression pour  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$  dépend du Modèle choisi:

pour le Modèle 1 par majorité de couleur:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}^K(\mathbf{r}, t) \quad \text{si} \quad \rho_K(\mathbf{r}, t) = \max \{ \rho_R(\mathbf{r}, t), \rho_B(\mathbf{r}, t), \rho_V(\mathbf{r}, t) \}, \quad K \in \{R, B, V\} \quad (5.1d)$$

pour le Modèle 2 :

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_{K \in \{R, B, V\}} \mathbf{F}^K \rho_K(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (5.1e)$$

1.4. Calcul de la vitesse totale  $\mathbf{u}$  de la même manière que pour les modèles en simple et double phases (voir (2.5) et (4.12b))

$$\mathbf{u} = \frac{\sum_{i=1}^{24} N_i'(\mathbf{r}, t) \mathbf{C}_i}{\rho(\mathbf{r}, t)} - \frac{1}{2} \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \quad (5.1f)$$

## 2. Collision des populations totales.

L'équation de collision pour la population totale s'écrit aussi par analogie avec la simple et la double phase (voir (2.1) et (4.13a))

$$N_i^*(\mathbf{r}, t) = N_i'(\mathbf{r}, t) + \sum_{j=0}^{24} A_{ij} N_j^{neq}(\mathbf{r}, t) W_j, \quad i = 0, \dots, 24 \quad (5.2a)$$

$$N^{neq.} = \mathbf{N}' - \mathbf{N}^{eq.}, \quad W_0 = L, \quad W_i = 1, \quad i = 1, \dots, 24$$

où la solution à l'équilibre  $\mathbf{N}^{eq.}$  est donnée par les formules (2.3). L'opérateur de collision  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  et le nombre de particules immobiles  $L(\mathbf{r}, t)$  sont différents pour les Modèles 1 et 2 dans les noeuds où deux ou trois phases coexistent simultanément:

-Modèle 1

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}^K(\mathbf{r}, t), \quad L(\mathbf{r}, t) = L^K(\mathbf{r}, t), \quad K \in \{R, B, V\}$$

$$\text{si } \rho_K(\mathbf{r}, t) = \max \{ \rho_R(\mathbf{r}, t), \rho_B(\mathbf{r}, t), \rho_V(\mathbf{r}, t) \}; \quad (5.2b)$$

-Modèle 2

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}^K(\mathbf{r}, t), \quad L(\mathbf{r}, t) = L^K(\mathbf{r}, t), \quad K \in \{R, B, V\}$$

si  $\rho_K(\mathbf{r}, t) = \max \{ \rho_R(\mathbf{r}, t), \rho_B(\mathbf{r}, t), \rho_V(\mathbf{r}, t) \}$  dans les points triples  $\mathbf{r}$ , c'est-à-dire avec

$$\rho_R(\mathbf{r}, t) \rho_B(\mathbf{r}, t) \rho_V(\mathbf{r}, t) \neq 0,$$

ou

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}^{\text{int.}(K_1, K_2)}(\mathbf{r}, t), \quad L(\mathbf{r}, t) = L^{\text{int.}(K_1, K_2)}(\mathbf{r}, t), \quad \{K_1, K_2, K_3\} \in \{R, B, V\}$$

à l'interface entre les phases  $K_1$  et  $K_2$ , c'est-à-dire avec

$$\rho_{K_1}(\mathbf{r}, t) \rho_{K_2}(\mathbf{r}, t) \neq 0, \quad \rho_{K_3}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (5.2c)$$

La matrice  $\mathbf{A}^{\text{int.}(K_1, K_2)}$  est déterminée en fonction des valeurs propres des phases  $K_1$  et  $K_2$  selon les résultats du chapitre précédent (voir aussi Table 4.1). Pour conserver la masse,  $N_0(\mathbf{r}, t)$  est déterminé par la relation (4.13b) si les nombres de particules immobiles sont différents entre les phases ou entre les phases et l'interface.

Ainsi la matrice de collision est déterminée par la couleur majoritaire dans un noeud pour le Modèle 1. Le Modèle 2 est essentiellement le même qu'à deux phases pour une interface où deux phases coexistent; la matrice de collision est déterminée aussi par la majorité de couleur pour le Modèle 2 dans les points triples. En fait, l'étude théorique des conditions interfaciales pour des points triples n'est pas encore faite. On peut se demander si on peut aboutir à l'introduction d'une tension de ligne.

Rappelons que la viscosité cinématique en volume de chaque phase  $K \in \{R, B, V\}$  est déterminée par une des valeurs propres  $\lambda_\psi^K$  de la matrice de collision correspondante  $A^K$  (voir (1.78)):

$$\nu^K = -\frac{c^2}{D+2} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{\lambda_\psi^K} \right) \quad (5.2d)$$

**3. Tension superficielle:** La perturbation  $\delta N_i^K(\mathbf{r}, t)$  de la population totale pour introduire la tension superficielle est donnée par Gunstensen (1992) sous la forme:

$$N_i''(\mathbf{r}, t+1) = N_i^*(\mathbf{r}, t) + \sum_{K \in \{R, B, V\}} \delta N_i^K(\mathbf{r}, t)$$

$$\delta N_i^K(\mathbf{r}, t) = A^{per.K} Q_{imm}^K, \quad Q_{imm}^K = \left\{ \frac{(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f}^K)^2}{(\mathbf{f}^K \cdot \mathbf{f}^K)^2} - \frac{1}{2} \right\}, \quad K \in \{R, B, V\}$$
(5.3a)

où chaque perturbation  $\delta N_i^K(\mathbf{r}, t)$  est déterminée par sa propre constante  $A^{per.K}$  et par son propre gradient de couleur  $\mathbf{f}^K(\mathbf{r}, t)$

$$\mathbf{f}^K(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^{24} \mathbf{C}_i \rho_k(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t) \quad (5.3b)$$

On voit la différence avec (4.14a)-(4.14b) pour deux phases où la perturbation, puis la séparation des phases, est déterminée par un gradient de couleur (4.14b) censé être perpendiculaire à l'interface.

**4. Coloriage.** Selon la procédure habituelle de Gunstensen et al (1991), on sépare les populations  $N_i''^R$ ,  $N_i''^B$  et  $N_i''^V$  avant propagation. Ces populations peuvent être déterminées à partir de la maximisation de la quantité  $\mathcal{G}(N_i^R, N_i^B, N_i^V)$



$$\mathfrak{G}(N_i^R, N_i^B, N_i^V) = \sum_{K \in \{R, B, V\}} \sum_{i=1}^{24} N_i^K (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f}^K) \quad (5.4a)$$

avec les contraintes:

$$\sum_{i=0}^{24} N_i^K(\mathbf{r}, t) W_i^K(\mathbf{r}, t) = \rho_K(\mathbf{r}, t) \quad \forall K \in \{R, B, V\} \quad (5.4b)$$

$$\sum_{K \in \{R, B, V\}} N_i^K(\mathbf{r}, t) W_i^K(\mathbf{r}, t) = N_i''(\mathbf{r}, t) W_i(\mathbf{r}, t) \quad \forall i = 0, \dots, 24 \quad (5.4c)$$

Le coloriage de la population totale  $N_i''(\mathbf{r}, t)$  est donc déterminé par la relation (5.4c).

Ainsi on a un problème d'optimisation linéaire (5.4a) - (5.4c) à 50 variables si la contrainte (5.4c) est substituée dans la fonction (5.4a). Notons que les méthodes standards pour le résoudre sont assez lentes. C'est pourquoi nous avons implanté un algorithme approché qui ne garantit pas la solution exacte du problème d'optimisation linéaire, mais qui empêche la formation d'un mélange. Notons que le coloriage de la population totale sur l'interface à deux phases est entièrement défini par le choix de la solution pour l'une des deux phases. Pour cela il suffit, par exemple, d'ordonner les populations en commençant par la direction la plus proche du gradient de couleur lorsqu'on détermine la contribution de la phase rouge (ou par la direction opposée si on cherche d'abord les populations bleues; voir (4.15b) avec (4.14b)) et de recolorier ces populations en suivant cette numérotation et en conservant la masse totale de la phase. La solution pour la phase complémentaire est donc définie ensuite par la condition de conservation de la quantité de mouvement totale (voir (4.15a)).

Pour trois phases, nous agissons de même: on détermine séparément pour chaque phase une numérotation des directions  $i = 0, \dots, 24$ . Ensuite, en commençant par la phase majoritaire dans un noeud, on colorie chaque direction  $i$  de non miscibilité (c'est-à-dire avec  $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f}^K) > 0$ ,  $K \in \{R, B, V\}$ ), selon la numérotation faite pour chaque phase séparément. Pour des directions  $i$  qui appartiennent à l'interface ( $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f}^K) = 0$ ) et des directions de miscibilité ( $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{f}^K) < 0$ ), on commence par contre par la phase minoritaire dans le noeud pour diminuer la distinction de la phase majoritaire introduite par le coloriage des directions de non miscibilité. On conserve la masse de chaque phase et la quantité de mouvement totale par (5.4c) durant le recoloriage.

## 5. Propagation.

$$N_i^K W_i^K(\mathbf{r} + \mathbf{C}_i, t) = N_i''^K W_i^K(\mathbf{r}, t), \quad i = 0, \dots, 24 \quad \text{for } K \in \{R, B, V\}$$

Ensuite le processus itératif 1 - 5 se répète.

### 5.2.2. Tension de surface.

Les évaluations théoriques de la tension superficielle entre toutes les phases prises deux à deux sont analogues à celles des modèles à deux phases (voir Section 4.5 du Chapitre 4) si on suppose que seulement deux gradients de couleur (5.3b) de ces phases sont différents de zéro dans les noeuds près de l'interface. Soit l'interface entre les phases  $\alpha$  et  $\beta$ . Si les fluctuations entre leurs gradients de couleur  $\mathbf{f}^\alpha$  et  $\mathbf{f}^\beta$  sont négligées de manière à ce que

$$\mathbf{f}^\alpha = -\mathbf{f}^\beta \quad (5.5a)$$

et par conséquent

$$Q_{im}^\alpha = Q_{im}^\beta \quad (5.5b)$$

on peut déduire, par la linéarité de l'équation de Boltzmann, la formule pour la tension superficielle sous la même forme que (4.54). Donc la perturbation (5.3a) avec les gradients de couleur (5.3b) implique pour les phases  $\alpha$  et  $\beta$  prises deux à deux

$$\sigma_{\alpha\beta} = -8 \frac{\cos\alpha}{S} \sum_{\mathbf{r} \in B, \lambda_\psi(\mathbf{r}, t)} \frac{1}{\lambda_\psi(\mathbf{r}, t)} \sum_{K \in \{\alpha, \beta\}} A^{per.K} |\mathbf{f}^K(\mathbf{r}, t)|, \quad \forall \{\alpha, \beta\} \in \{R, B, V\} \quad (5.5c)$$

Par conséquent, la tension superficielle entre les phases  $\alpha$  et  $\beta$  se met sous la forme:

$$\sigma_{\alpha\beta}^{(\kappa)} = \left\{ A^{per.\alpha} \omega_\alpha^{(k)(\alpha\beta)} + A^{per.\beta} \omega_\beta^{(k)(\alpha\beta)} \right\} + \delta_1^{(k)} + \delta_2^{(k)}, \quad (5.6a)$$

où  $\forall \gamma \neq \delta, \{\gamma, \delta\} \in \{R, B, V\}$ , les termes  $\omega_\gamma^{(\kappa)(\delta\gamma)}$  ( $k=1, 2$ ) dépendent du modèle:

- Modèle 1 (voir Fig.4-4a, interface de largeur égale à deux unités de réseau;  
formule (4.63b) pour comparaison avec deux phases):

$$\omega_\gamma^{(1)(\delta\gamma)} = \omega_\gamma^{(1)(\gamma\delta)} = -48d^{real}(24 + L^\gamma) \left( \frac{1}{\lambda_\psi^\gamma} + \frac{1}{\lambda_\psi^\delta} \right) \quad (5.6b)$$

- Modèle 2 (voir Fig.4-4b, interface de largeur égale à une unité de réseau;  
formule (4.64b) pour comparaison avec deux phases):

$$\omega_\gamma^{(2)(\delta\gamma)} = \omega_\gamma^{(2)(\gamma\delta)} = -48d^{real}(24 + L^\gamma) \left( \frac{1}{\lambda_\psi^\gamma} + \frac{1}{\lambda_{\psi}^{int.(\gamma\delta)}} \right) \quad (5.6c)$$

Les termes  $\delta_1^{(k)}$  et  $\delta_2^{(k)}$  contiennent certaines erreurs de calcul de tension superficielle qui sont analogues aux termes (4.63c) et (4.64c) dans les solutions pour deux phases. Comme précédemment pour le Modèle 2 (voir (4.64c)) on va relier le terme  $\delta_1^{(k)}$  à la distribution de couleurs sur l'interface et le terme  $\delta_2^{(k)}$  aux fluctuations de densité au niveau de l'interface induites par la perturbation (5.3). Rappelons que dans le chapitre précédent on a montré d'après la solution de l'équation de Boltzmann que la densité totale proche de l'interface est différente des densités en volume même pour une interface plane; par exemple, pour l'interface non inclinée, la distribution de la densité le long de la normale est donnée par les solutions (4.56) et (4.57). Dans ce cas, la différence  $\delta(\mathbf{z})$  entre la densité totale, définie de façon (5.1b) et la densité  $\rho^{real}$ , définie dans (4.59) selon la densité cellulaire dans les noeuds situés loin de l'interface, est

$$\delta(\mathbf{z}) = \frac{C^{per.}}{2\lambda_\psi} [24 + L](\mathbf{z}), \quad C^{per.} = \sum_{K \in \{\alpha, \beta\}} A^{per. K} |\mathbf{f}^K(\mathbf{r}, t)| \quad (5.6d)$$

Dans ce cas, on peut exprimer les corrections complémentaires  $\delta_1^{(k)}$  et  $\delta_2^{(k)}$  sous la forme:

- Modèle 1 (voir Fig.4-4a; formule (4.63c) pour comparaison avec deux phases):

$$\delta_1^{(1)} \cong 0, \quad \delta_2^{(1)} \cong -48(A^{per.\beta}\delta(\mathbf{z}^\beta) - A^{per.\alpha}\delta(\mathbf{z}^\alpha))\left(\frac{1}{\lambda_\psi^\alpha} - \frac{1}{\lambda_\psi^\beta}\right) \quad (5.6e)$$

- Modèle 2 (voir Fig.4-4b; formule (4.64c) pour comparaison avec deux phases):

$$\delta_1^{(2)} \cong -48(A^{per.\beta}\rho^\beta(\mathbf{z}_0) - A^{per.\alpha}\rho^\alpha(\mathbf{z}_0))\left(\frac{1}{\lambda_\psi^\alpha} - \frac{1}{\lambda_\psi^\beta}\right), \quad \delta_2^{(2)} \cong -48 \sum_{k \in \{\alpha, \beta\}} A^{per.k}\delta(\mathbf{z}^k)\left(\frac{1}{\lambda_\psi^{int.}} - \frac{1}{\lambda_\psi^k}\right) \quad (5.6f)$$

On retrouve alors la solution de Gunstensen (1992) pour des fluides de même viscosité lorsque  $L^R = L^B = L^V$  et  $\lambda_\psi^R = \lambda_\psi^B = \lambda_\psi^V$ , si nous négligeons la différence entre la densité  $d^{real}$  et la densité moyenne  $d_0$  dans les relations (5.6a) avec (5.6b) et (5.6e) ou avec (5.6c) et (5.6f). On voit aussi que des combinaisons arbitraires de coefficients de tension superficielle peuvent être obtenues par le choix des constantes  $A^{per.\gamma}$ ,  $\gamma \in \{R, B, V\}$ . Néanmoins, la perturbation (5.3) ne doit pas être trop grande pour assurer la convergence de la solution à l'équilibre.

### 5.3. Étalement: éléments de théorie.

Des phénomènes de mélanges de trois fluides non miscibles, différents qualitativement de ceux à deux phases, peuvent être modélisés par les Modèles ILB à trois phases.

Nous allons nous intéresser à une région où trois fluides se rencontrent, définissant une courbe appelée ligne triple. Si chacun des coefficients de tension superficielle est inférieur à la somme des deux autres, toutes les lignes triples de contacts seront stables. Cependant, une couche mince de phase  $\gamma$  (verte, par exemple) existe toujours entre les phases  $\alpha$  et  $\beta$  (rouge et bleue) lorsque le coefficient de tension superficielle  $\sigma_{\alpha\beta}$  viole cette condition. Ainsi quand la couche de phase  $\gamma$  s'amincit et que la force de gravité devient moins importante, l'étalement ou non de la phase  $\gamma$  dépend du signe de coefficient d'étalement de Harkins (1952):

$$S_\gamma = \sigma_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha\gamma} - \sigma_{\beta\gamma}, \quad \{\alpha, \beta, \gamma\} \in \{R, B, V\} \quad (5.7)$$

Lorsque  $S_\gamma > 0$  la phase  $\gamma$  s'étale sur l'interface entre les phases  $\alpha$  et  $\beta$ ; la forme de la lentille liquide correspondante est déterminée par le bilan des forces de gravité et des forces capillaires. En particulier, si une des phases, disons  $\alpha$ , est remplacée par un solide, l'angle de contact de l'interface avec le plan tangent au solide (Figure 5-1) est relié au coefficient d'étalement (5.7) par la relation d'Young sous la forme

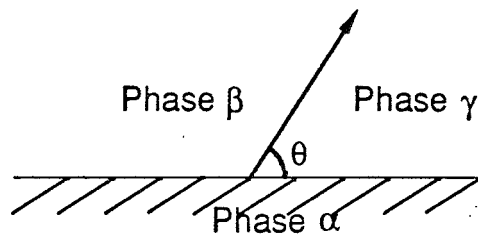
$$\cos\theta = 1 + \frac{S_\gamma}{\sigma_{\alpha\gamma}}, \quad S_\gamma < 0 \quad (5.8a)$$

Si  $S_\gamma < 0$ , le solide a intérêt à être le plus possible en contact direct avec la phase  $\beta$ , et la phase  $\gamma$  reste rassemblée sous forme de gouttes. Ce cas est appelé *mouillage partiel*.

Dans le cas contraire du *mouillage total*, une goutte déposée sur le solide tend à s'étaler indéfiniment:

$$\theta(t) \rightarrow 0 \quad \text{si} \quad S_\gamma \geq 0 \quad (5.8b)$$

Dans ce dernier cas, quand un volume fixe  $V$  de phase  $\gamma$  est déposé sur la surface liquide, Fay (1969) identifie quatre forces principales qui peuvent accélérer ou retarder l'étalement. En effet, le modèle de l'étalement d'huile sur une interface air-eau a été proposé sur la base d'une analyse dimensionnelle du problème.



**Figure 5-1:** Ligne triple sur un solide avec un angle de contact  $\theta$ .

Soit

$$V \cong hR^{n-1} \quad (5.9a)$$

où  $R$  est le rayon caractéristique d'étalement et  $h$  est l'épaisseur caractéristique de la phase  $\gamma$ .  
L'exposant dépend de la dimension de l'espace

$$n = \begin{cases} 1, & \text{axisymétrique} \\ 0, & \text{unidimensionnel} \end{cases} \quad (5.9b)$$

Par conséquent, les quatre forces sont:

-la force de gravité:  $(\rho g \Delta h) h R^n$  (5.10a)

avec  $\Delta = \frac{\rho - \rho_\gamma}{\rho}$ ,  $\rho$  et  $\rho_\gamma$  sont les densités de l'eau et d'huile, respectivement.

-l'inertie:  $\rho(Rt^{-2})hR^{n-1}$  (5.10b)

-la force visqueuse:  $[\mu(Rt^{-1})\delta^{-1}]R^{n-1}$  (5.10c)

où  $\delta = (\nu t)^{\frac{1}{2}}$  est l'épaisseur de couche limite dans l'eau,  $\mu = \rho\nu$  est la viscosité dynamique de l'eau;

-la force de tension superficielle:  $S_\gamma R^n$  (5.10d)

où  $S_\gamma$  est le coefficient de Harkins de l'huile.

On distingue ensuite trois régimes principaux dans l'étalement en fonction de l'épaisseur  $h$  de l'huile. Par bilan des forces dans chaque régime, on déduit les formes de loi d'étalement (voir Buckmaster, 1973 pour  $n = 0$  et Hoult, 1972 pour  $n = 1$ ). Les résultats de ces analyses sont réunis dans la Table 5.1.

**Table 5.1.**

**Lois d'étalement.**

Régime	Critère	Loi d'étalement
gravité $\cong$ inertie	$h > \left( \frac{S_\gamma}{\rho g \Delta} \right)^{\frac{1}{2}}$	$R \propto (g \Delta V)^{\frac{1-n}{3} \frac{2-n}{12} t^{\frac{2-n}{6}}}$
inertie $\cong$ force visqueuse	$\left( \frac{S_\gamma}{\rho g \Delta} \right)^{\frac{1}{2}} < h < \sqrt{\nu t}$	$R \propto (\mu^{-\frac{1}{2}} \Delta V^2)^{\frac{1-n}{4} \frac{3-n}{12} t^{\frac{3-n}{8}}}$
force visqueuse $\cong$ force de tension superficielle	$h < \left( \frac{S_\gamma}{\rho g \Delta} \right)^{\frac{1}{2}}$	$R \propto (S_\gamma^{-2} \nu)^{-\frac{1}{4}} t^{\frac{3}{4}}$

Lorsque  $S_\gamma > 0$  l'huile s'étale jusqu'à ce que la surface disponible soit couverte par une couche monomoléculaire (dite aussi *film précurseur*). On a observé que durant l'étalement, une couche monomoléculaire se forme dans le front étant suite par une couche plus épaisse dite *bulk* (voir les références dans DiPietro et al, 1978; DiPietro et Cox, 1979). Les équations générales de chacune de ces zones sont déduites par DiPietro et al (1978) en supposant que dans une couche monomoléculaire l'étalement est dû aux gradients de tension de surface (Adamson, 1967) causés par les variations de l'épaisseur de la couche, tandis que dans la couche bulk, l'étalement résulte des forces de gravité et de la pression capillaire. Dans les deux cas, on suppose d'abord que l'étalement est retardé par une couche limite entre l'huile et l'eau. Ces équations sont ensuite développées par DiPietro et Cox (1979) pour le cas où la viscosité de l'huile est très grande devant celle de l'eau. En particulier, quand la traînée de la couche limite est complètement négligée, des solutions de similitude sont obtenues pour certaines conditions initiales. Ces solutions sont vérifiées par l'expérience de Ahn et Cox (1978) quand les rapports entre les viscosités des deux fluides sont très grandes

$$\frac{\nu_\gamma}{\nu_{eau}} \cong 10^3 \div 10^5 \quad (5.11a)$$

Ces rapports de viscosité correspondent aux valeurs propres limites dans les modèles ILB (voir (5.2d))

$$\lambda_{\psi^\gamma} \rightarrow 0, \quad \lambda_{\psi^{eau}} \rightarrow -2 \quad (5.11b)$$

Elles sont difficiles à réaliser numériquement pour des raisons de stabilité des modèles et de temps de calcul. C'est pourquoi nous nous limiterons dans les tests préliminaires de cette partie à la comparaison des résultats numériques pour le rayon d'étalement

$$R = rt^{\tilde{n}} \quad (5.12)$$

avec les valeurs théoriques pour l'exposant  $\tilde{n}$  (voir lois d'étalement dans la Table 5.1).

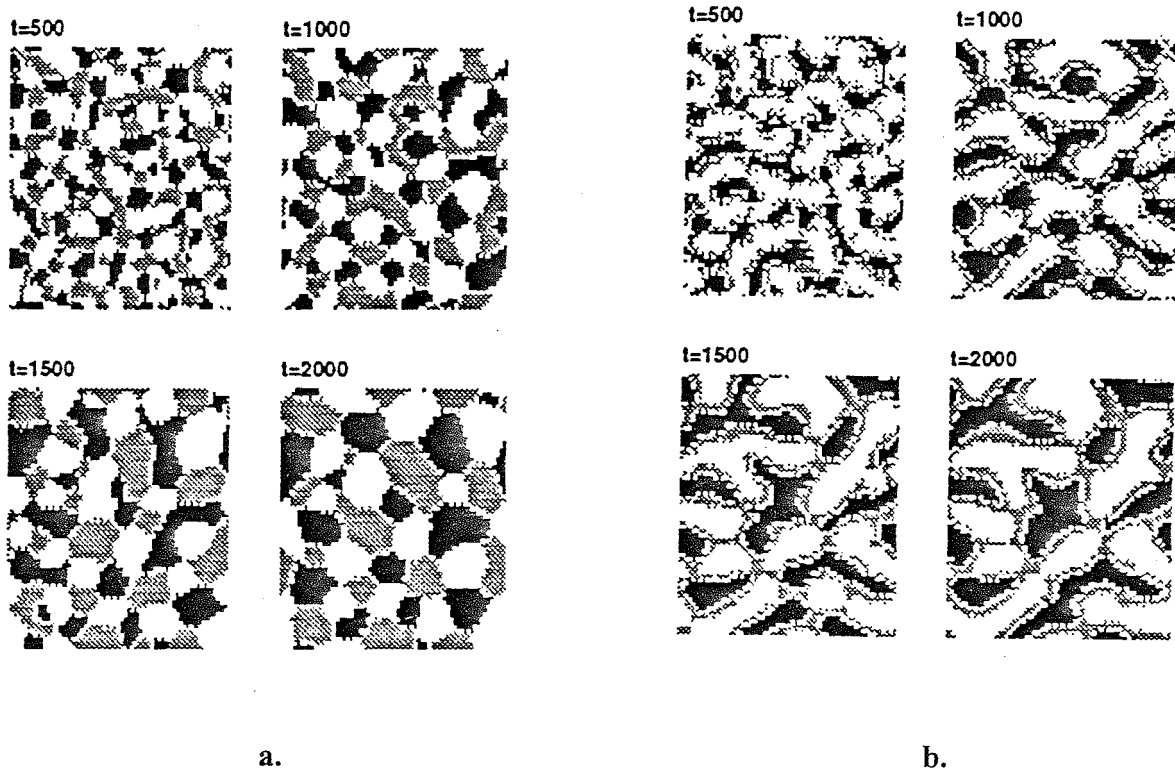
#### 5.4. Exemple numérique: étalement d'une goutte.

Pour les applications suivantes, on obtient d'après les solutions (5.6a)-(5.6c) un coefficient d'étalement  $S_\gamma^k$  dans le modèle  $k$ ,  $k = 1, 2$ , pour toutes les phases  $\gamma \in \{R, B, V\}$  sous la forme suivante:

$$S_\gamma^k \cong A^{per.\alpha} (\omega_\alpha^{k(\alpha\beta)} - \omega_\alpha^{k(\alpha\gamma)}) + A^{per.\beta} (\omega_\beta^{k(\alpha\beta)} - \omega_\beta^{k(\beta\gamma)}) - A^{per.\gamma} (\omega_\gamma^{k(\alpha\gamma)} + \omega_\gamma^{k(\beta\gamma)}) \quad (5.13)$$

Gunstensen (1992) a montré sur quelques exemples qualitativement différents que son algorithme ILB à trois phases a un bon comportement physique en fonction du signe du coefficient d'étalement. Il a obtenu d'abord une transition de phase à partir d'un mélange de trois phases; quand les phases se sont séparées, leur distribution est qualitativement correcte du point de vue du signe de coefficient de l'étalement (Figure 5-2). En effet, lorsque les points triples sont stables ( $S_\gamma < 0 \forall \gamma$ ), le fluide se sépare en bulles polygonales (Fig.5-2a); quand  $S_\gamma > 0$ , une couche mince de la troisième phase  $\gamma$  se trouve toujours entre les deux autres phases (Fig.5-2b).

On peut ainsi supposer que quand  $S_\gamma < 0$ , la phase  $\gamma$  sera plus facilement bloquée dans les pores; dans le cas contraire, cette phase peut toujours s'infiltrer entre les deux autres fluides. Cela est particulièrement important dans l'étape finale de mobilisation du pétrole dans les petits pores. Dans une deuxième série d'expériences numériques, Gunstensen (1992) a vérifié que l'algorithme ILB à trois phases confirme cette analyse. Plus précisément, il a montré que lorsqu'une certaine saturation critique est atteinte, l'écoulement commence à réagir au signe du coefficient d'étalement de façon cohérente avec la théorie et avec les expériences de Kalaydjian et Tixier (1991).



**Figure 5-2:** Séparation de phases par le modèle ILB à trois phases dans un échantillon de  $64 \times 64$  unités de réseau (Gunstensen, 1992): (a) Points triples stables; (b) Points triples instables. La distribution initiale est un mélange équiprobable de trois espèces.

Les modèles (5.1)-(5.4) sont en fait un développement du modèle de Gunstensen pour des fluides avec des viscosités différentes. On teste d'abord ces modèles pour vérifier qualitativement la sensibilité de l'algorithme (5.1)-(5.4) au signe du coefficient d'étalement sur l'exemple d'une goutte (phase verte, par exemple) proche d'une interface entre les phases rouge et bleue dans une boîte solide. On considère le problème en 2D (étalement dans une direction). Puisque les densités macroscopiques désirées ne peuvent pas être imposées par ILB (voir discussion (4.18)-(4.20) dans Chapitre 4), des constantes de gravité différentes sont introduites dans chaque phase pour modéliser les forces de gravité exercées sur chaque fluide.



Un exemple d'étalement avec un coefficient  $S_\gamma = 0.22$  (unités du réseau) est donné par la Figure 5-3 ( $S_\gamma \rightarrow S_{VERT}$ ); dans ce cas, les rapports entre les paramètres numériques pour les viscosités et pour les densités correspondent à l'étalement d'une goutte de nitroéthane sur une interface air-eau dans l'expérience de Santiago (1994). La comparaison pour les trois coefficients d'étalement  $S_\gamma = 0.22$ ,  $S_\gamma = 0.092$  et  $S_\gamma = -0.272$  est présentée sur la Figure 5-4: à l'exception des coefficients de tension superficielle, les phases (Fig.5-4) ont les mêmes paramètres physiques que celles de la Fig.5-3. On constate la différence entre les solutions avec des coefficients d'étalement positifs et négatifs (comparer les Fig.5-4a et Fig.5-4b avec la Fig.5-4c): la goutte s'étale dans les deux premiers cas ( $S_\gamma > 0$ ) et elle tombe dans le troisième cas ( $S_\gamma < 0$ ). On voit ensuite la différence entre les cas  $S_\gamma = 0.22$  et  $S_\gamma = 0.092$  (Fig.5-4a et Fig.5-4b): à partir d'un certain temps quand probablement les forces de tension superficielle deviennent importantes (comparer les itérations  $T = 100$  et  $T = 500$  pour les deux cas), l'étalement pour  $S_\gamma = 0.22$  est visiblement plus rapide que pour  $S_\gamma = 0.092$  en accord avec la loi d'étalement dans le troisième régime de la Table 5.1. Par ailleurs, le critère  $h < \left(\frac{S_\gamma}{\rho g \Delta}\right)^{\frac{1}{2}}$  est très vite satisfait dans ces cas ( $R \cong 2.5$  pour  $S_\gamma = 0.22$  et, par conséquent,  $R \cong 4$  pour  $S_\gamma = 0.092$ ) et donc on ne peut pas seulement par ces critères séparer les régimes.

Cependant, les exposants de la fonction (5.12) peuvent être évalués (voir Figure 5-5 avec  $S_\gamma = S_{VERT}$ )

$$\tilde{n} \cong 0.513, \quad \text{pour } S_\gamma = 0.22, v^V = 0.2$$

$$\tilde{n} \cong 0.375 \quad \text{pour } S_\gamma = 0.092, v^V = 0.2.$$

Ils indiquent que l'étalement se trouve entre le deuxième et le troisième régime (voir Table 5.1 avec  $n = 0$ ).

En outre, la vitesse moyenne d'étalement se trouve aussi entre les vitesses caractéristiques pour le régime visqueux et pour le régime de tension superficielle dans les deux cas considérés:

-vitesse caractéristique du régime visqueux (Hoult, 1972)

$$u \cong \sqrt{g\Delta L}, \quad L = \begin{cases} V^{\frac{1}{3}}, & n=1 \\ V^{\frac{1}{2}}, & n=0 \end{cases} \quad (5.14a)$$

-vitesse caractéristique du régime de tension superficielle, évaluée dans DiPietro et Cox (1979) selon une analyse différente de celle de Fay (1969)

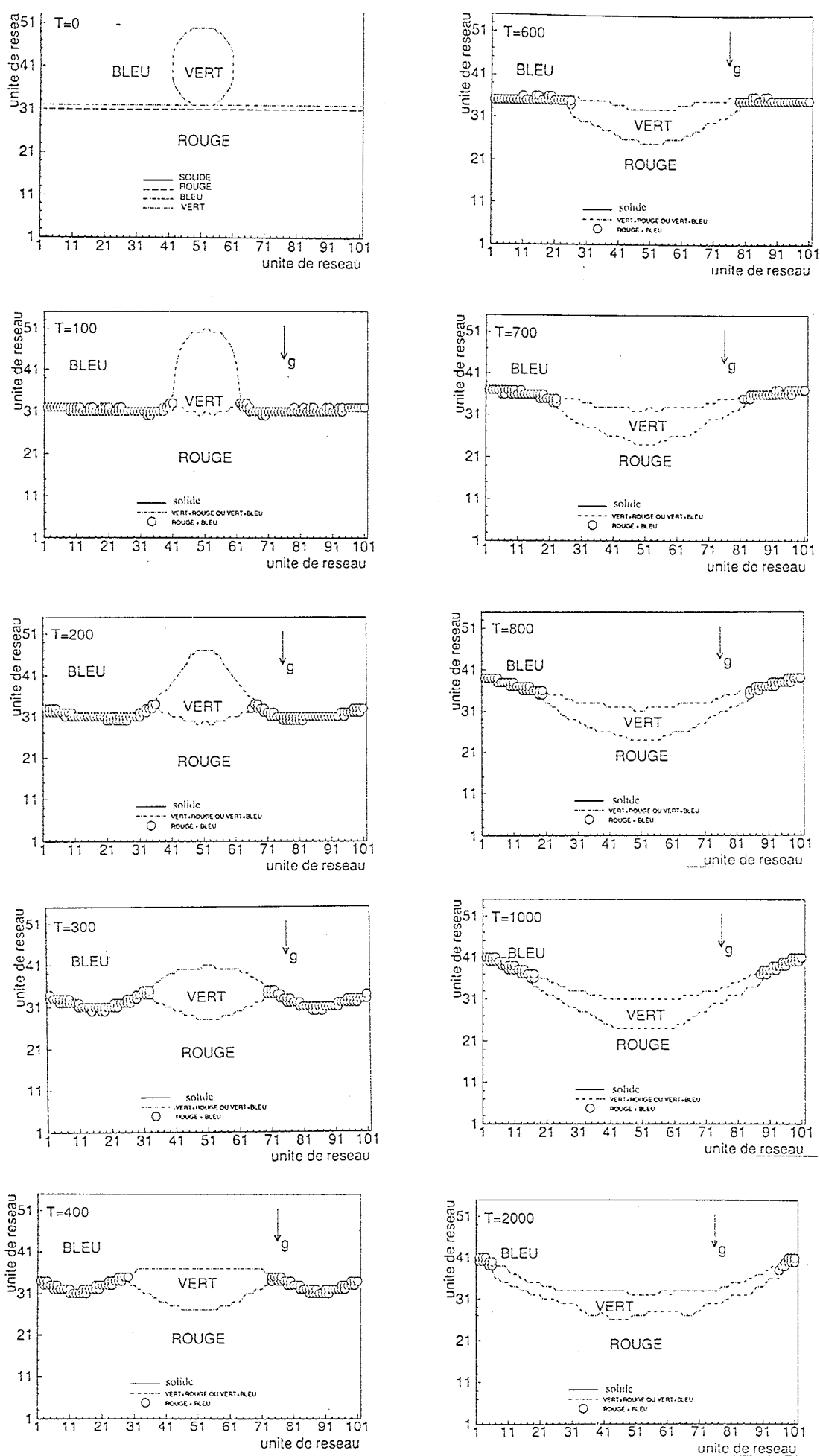
$$u \cong \frac{\sigma_{\gamma-eau}}{\mu_{\gamma}} \varepsilon_h, \quad \varepsilon_h = \frac{h}{R} . \quad (5.14b)$$

La vitesse (5.14b) dépend donc de la viscosité de la goutte dans le troisième régime au contraire de la loi d'étalement dans cette zone (voir Table 5.1).

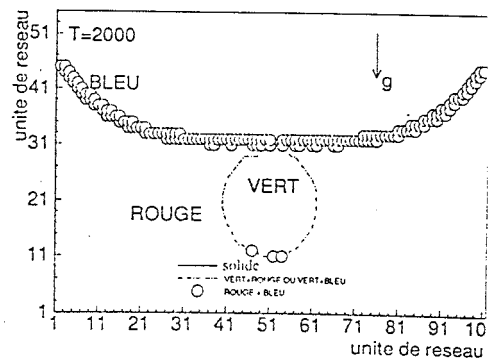
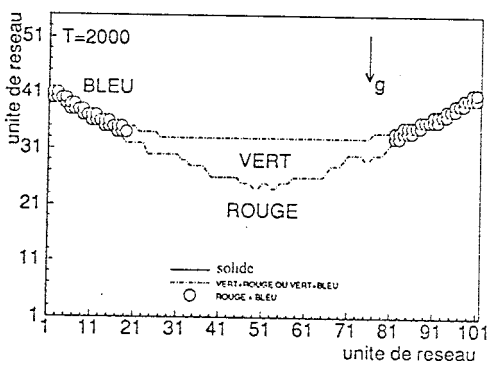
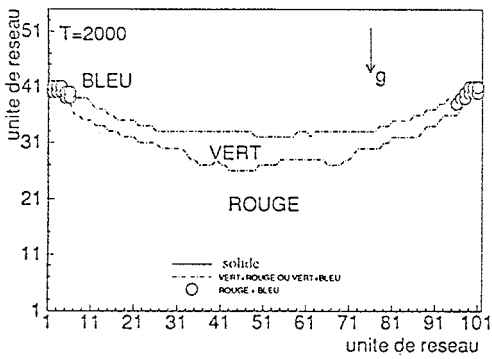
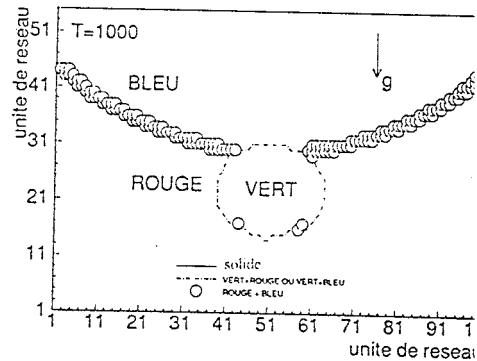
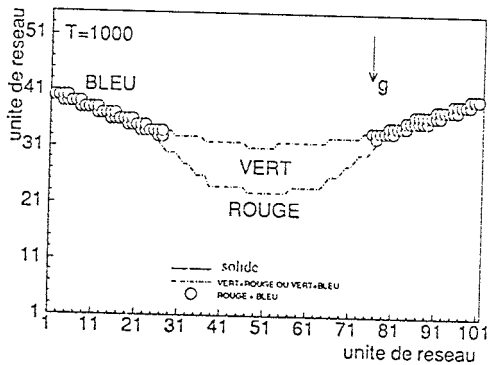
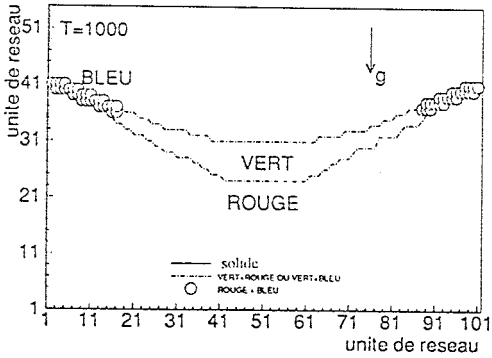
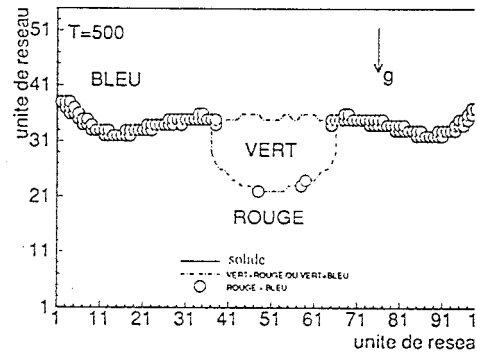
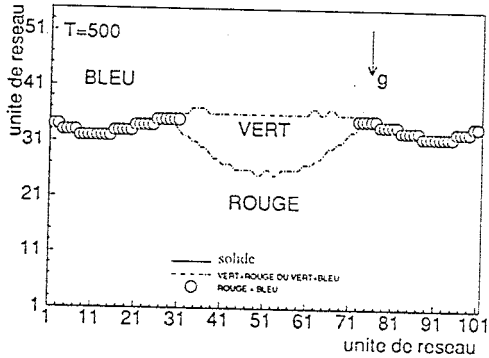
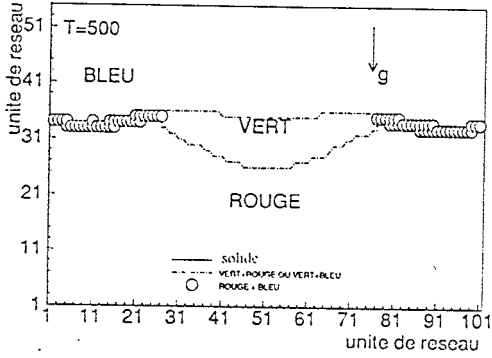
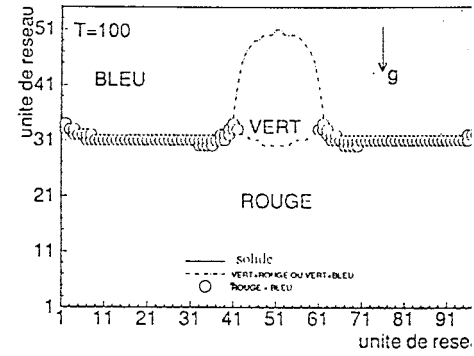
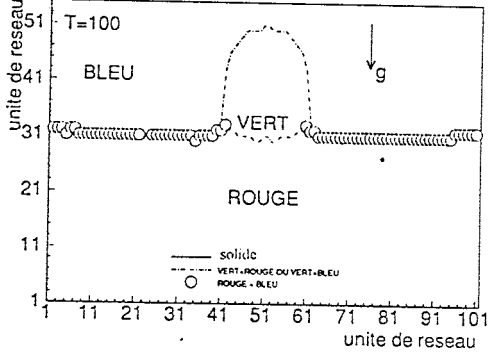
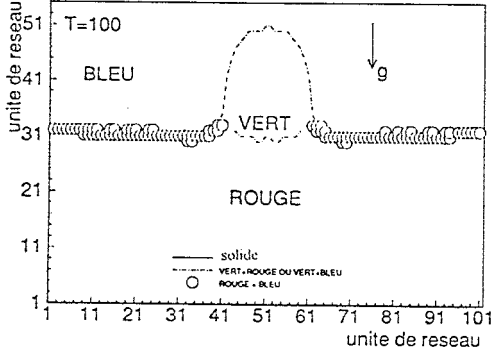
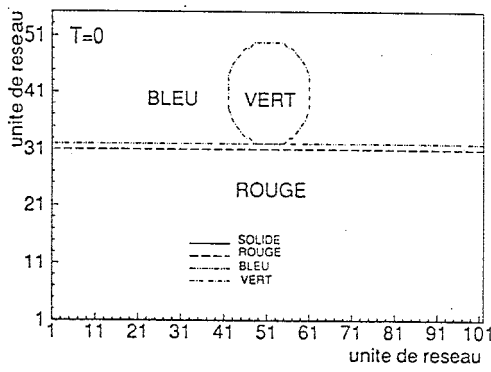
La Fig.5-5 présente aussi une comparaison pour  $S_{\gamma} = 0.22$  entre trois viscosités cinématique différentes:  $\nu^{\nu} = 0.2$ ,  $\nu^{\nu} = 0.1(1)$  et  $\nu^{\nu} = 0.0(5)$ . Dans tous les cas, on se trouve encore entre le deuxième et le troisième régime: on constate que la vitesse d'étalement est en accord avec le sens physique (voir (5.14b) pour la vitesse d'étalement en fonction de la viscosité de la goutte). A partir d'un certain temps, la vitesse d'étalement ne dépend plus de la viscosité de la goutte en accord avec la loi d'étalement dans le troisième régime de la Table 5.1.

Les étalements présentés sur les Figures 5-3, 5-4 et 5-5 sont obtenus par le Modèle 1 (voir (5.1)-(5.6)). La comparaison de la solution par le Modèle 1 avec la solution par le Modèle 2 est donnée sur la Figure 5-6. Les paramètres physiques sont les mêmes que pour la Fig.5-3. On constate que la différence donnée par les deux modèles pour le front de la goutte n'excède pas une unité de réseau en accord avec le traitement de l'interface par le Modèle 1 et par le Modèle 2 (voir (5.2b) et (5.2c)).

Ainsi les premiers tests montrent un comportement physique adéquat. Des tests plus quantitatifs pour le premier régime exigeraient une discrétisation beaucoup plus fine de la goutte, tandis que les simulations plus détaillées du troisième régime ont besoin d'une boîte beaucoup plus longue par rapport au rayon initial de la goutte.



**Figure 5-3:** Etallement d'une goutte (phase verte) sur l'interface entre les phases rouge et bleu. Le temps  $T$  est donné en itérations. Paramètres de phases:  $\sigma_{RB}^{(1)} = 0.7387$ ,  $\sigma_{RI}^{(1)} = 0.0718$ ,  $\sigma_{BI}^{(1)} = 0.4464$ ;  $S_{VERT} = 0.22$ ;  $v^R = 0.2823$ ,  $v^B = 0.00877$ ,  $v^I = 0.2$ ;  $F_z^R = -0.1953 \cdot 10^{-3}$ ,  $F_z^B = 0$ ,  $F_z^I = -0.2032 \cdot 10^{-3}$ ;  $L^R = L^B = L^I = 0$ ;  $\rho_{OR} = \rho_{OB} = \rho_{OI} = 7.2$ . Rayon initial de la goutte:  $R_0 = 10$ ; la taille de la boîte est de  $100 \cdot 53$  unités de réseau.

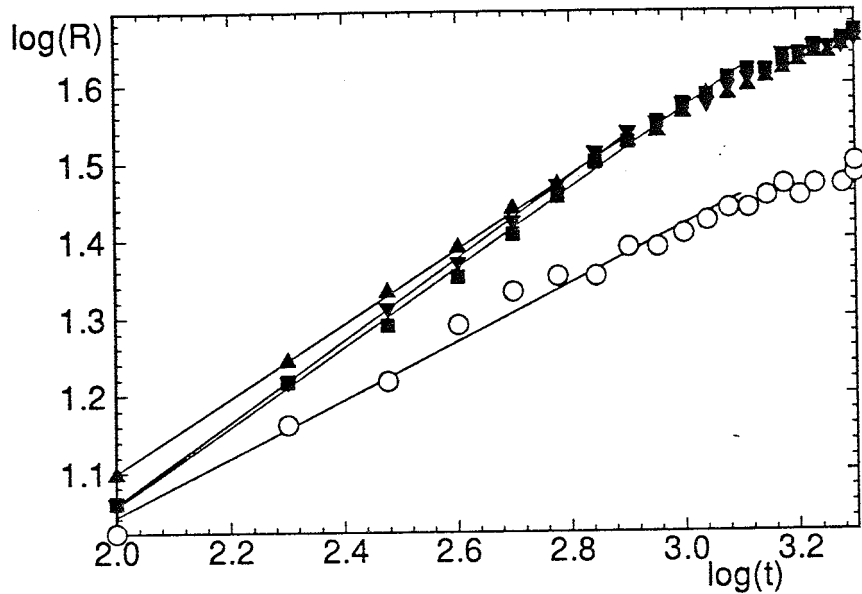


a.

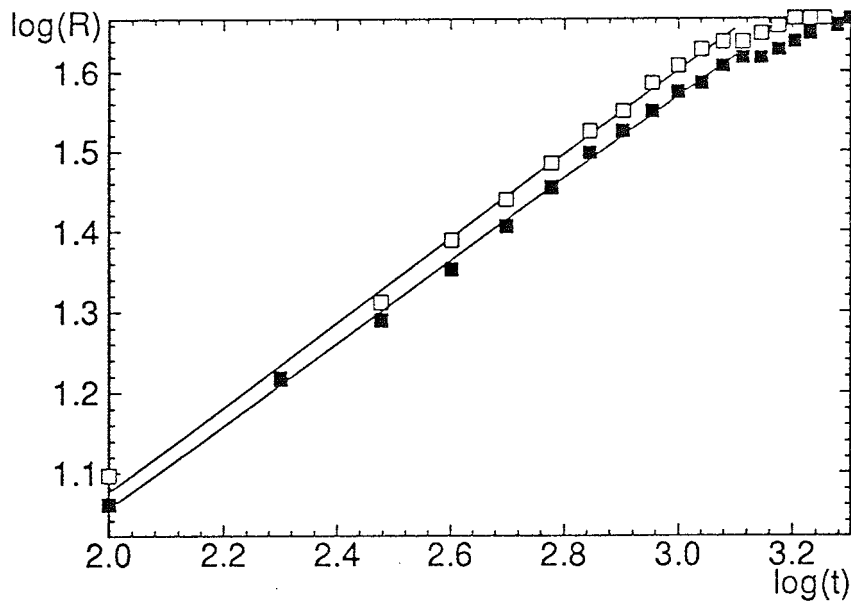
b.

c.

**Figure 5-4:** Comparaison des étalements d'une goutte (phase verte) sur l'interface entre la phase rouge et la phase bleu pour  $S_{VERT} = 0.22$  (a),  $S_{VERT} = 0.092$  (b),  $S_{VERT} = -0.2702$  (c); les paramètres  $\nu$ ,  $F_z$ ,  $\rho_0$  sont les mêmes que pour la Figure 5-3; les coefficients de tension superficielle sont  $\sigma_{RB}^{(1)}=0.7387$ ,  $\sigma_{RI}^{(1)}=0.0718$ ,  $\sigma_{BI}^{(1)}=0.4464$  (a);  $\sigma_{RB}^{(1)}=0.5685$ ,  $\sigma_{RI}^{(1)}=0.0858$ ,  $\sigma_{BI}^{(1)}=0.391$  (b);  $\sigma_{RB}^{(1)}=0.5297$ ,  $\sigma_{RI}^{(1)}=0.1313$ ,  $\sigma_{BI}^{(1)}=0.6686$  (c).



**Figure 5-5:** Rayon d'étalement  $R$  en fonction du temps  $t$ . Les lignes continues représentent l'approximation des valeurs numériques par la fonction ( $R \approx r t^{\tilde{n}}$ ). Les paramètres physiques pour  $S_{VERT} = 0.22$  (■,  $\tilde{n} = 0.513$ ,  $r = 1.07$ ) et  $S_{VERT} = 0.092$  (○,  $\tilde{n} = 0.375$ ,  $r = 1.96$ ) sont ceux des Fig.5-4a et Fig.5-4b, respectivement. Dans le cas  $S_{VERT} = 0.22$ , les résultats pour des viscosités différentes sont également présentés: (■):  $v^V = 0.2$ ,  $r = 1.07$ ,  $\tilde{n} = 0.513$ ; (▼):  $v^V = 0.1(1)$ ,  $r = 1.01$ ,  $\tilde{n} = 0.528$ ; (▲):  $v^V = 0.05(5)$ ,  $r = 1.39$ ,  $\tilde{n} = 0.478$ .



**Figure 5-6:**

Comparaison du rayon d'étalement  $R$  en fonction du temps  $t$  ( $R \approx r t^{\tilde{n}}$ ) pour  $S_{VERT} = 0.22$ ,  $v^V = 0.2$  pour les Modèle 1 (■,  $\tilde{n} = 0.513$ ,  $r = 1.07$ ) et Modèle 2 (□,  $\tilde{n} = 0.52$ ,  $r = 1.01$ ).

**Conclusion.**

Puisque l'objet de ce travail était une recherche des voies d'analyse de la précision des modèles de Boltzmann, nous n'avons pas enrichi la liste des modèles déjà existant par des algorithmes originaux et susceptibles d'induire des phénomènes physiques de plus en plus compliqués. Les modèles connus, LBE et ILB avec des particules immobiles sur le réseau FCHC, ont été seulement généralisés de façon à avoir des paramètres supplémentaires à faire varier. Les conditions aux limites, imposées aux parois solides ou bien à l'interface se trouvent être les points les plus faibles et très peu étudiés pour les modèles de Boltzmann en simple et double phase.

Le résultat principal du travail effectué consiste en l'estimation de la précision avec laquelle les modèles étudiés imposent les conditions aux parois solides ou bien à l'interface en fonction des paramètres des modèles, de la géométrie et de l'écoulement.

Seule la forme des distributions en équilibre, le type du réseau ou la forme de l'opérateur de collision distinguent un modèle de Boltzmann de l'autre en simple phase. Par conséquent, l'extension la plus naturelle et la plus simple de ce travail est l'évaluation de la précision des modèles LBE sur des réseaux différents de FCHC ainsi que l'analyse de modèles PCLBE en 2D, 3D ou 4D et des modèles avec opérateur de collision diagonalisée. En double phase, il est très intéressant d'essayer de vérifier les conditions de continuité de la vitesse à l'interface pour la version de Boltzmann du modèle *liquide - gaz* au moins pour les faibles vitesses parce que dans ce cas ces modèles pourront confirmer leurs capacités à avoir des densités différentes dans les coeurs de phase et à satisfaire les conditions interfaciales. Rappelons que les modèles ILB ne peuvent pas actuellement satisfaire ces deux conditions d'après notre étude.

Néanmoins les modèles cellulaires peuvent subsister seulement si leurs possibilités à décrire quantitativement les phénomènes physiques sont prouvées. L'analyse théorique accessible dans des géométries simples et pour des écoulements particuliers peut aider à estimer les paramètres libres des modèles de façon efficace, mais elle n'est pas suffisante en général pour évaluer des limites de grandeurs caractéristiques et des paramètres physiques pour lesquels on peut déduire un comportement macroscopique convenable. Une autre approche qui consisterait en l'interprétation théorique en termes de modèles physiques classiques des résultats numériques obtenus semble être très féconde parce qu'elle aiderait à éclaircir les analogies entre le comportement des modèles cellulaires et des modèles physiques. Par exemple, Adler et al (1994) montrent que les fluctuations observées à l'interface dans les modèles ILG sont en accord avec l'analyse classique des fluctuations d'énergie de surface à l'équilibre. Appert et Zaleski (1993) confirment une dépendance linéaire entre la pression d'équilibre et la pression capillaire avec le coefficient positif de correction

des relations de Gibbs-Thomson. Dans ce travail, nous avons essayé de relier les résultats obtenus pour l'étalement d'une goutte avec les lois connues.

Comme nous l'avons déjà indiqué quelques points nécessitent un approfondissement. Des efforts plus importants sont nécessaires pour définir des familles de méthodes stables et susceptibles d'optimisation parmi les algorithmes aux limites proposés. Si même le développement de méthodes précises ne semble pas être irremplaçable pour la simple phase où des méthodes alternatives aux différences finies et aux éléments finis s'acquittent assez bien de ces tâches, des modèles précis aux parois solides sont importants aussi pour les écoulements à plusieurs phases pour lesquels actuellement les automates cellulaires sont les plus intéressants. Pour illustrer cela, il suffit de considérer le problème de la mobilisation du pétrole dans les milieux poreux. Pour ces processus, les conditions aux parois solides jouent un rôle important tout comme les conditions interfaciales. Néanmoins lorsque deux ou plusieurs phases coexistent près de la paroi solide, des termes supplémentaires anisotropes dus à la tension de surface doivent être inclus dans le développement des populations selon la méthodologie inverse de construction des populations. Cela rejoint le problème général de l'estimation des tenseurs anisotropes dans les solutions des populations pour une géométrie quelconque en fonction du type de modèle à l'interface.



## **Références.**

- [1] A.W.Adamson, *Physical Chemistry of Surfaces*, Interscience, 1967
- [2] C.Adler, D.d'Humières, D.H.Rothman, *Surface tension and interface fluctuations in immiscible lattice gases*, J.Phys. I France, **4**, 29, 1994
- [3] C.Appert, S.Zaleski, *A lattice gas with a liquid-gas transition*, Phys.Rev.Lett., **64**, 1, 1990
- [4] C.Appert, D.H.Rothman, S. Zaleski, *A liquid-gas model on a lattice*, Physica D, **47**, 85, 1991
- [5] C.Appert, S.Zaleski, *Dynamical liquid-gas phase transition*, J.Phys.II France, **3**, 309, 1993
- [6] C.Appert, *Transition de phase dynamique de type liquide-gaz et création d'interfaces dans un gaz sur réseau*, Thèse de doctorat de l'Université PARIS VI, 1993
- [7] D.B.Ahn, R.G.Cox, *The spreading of a very viscous liquid on a water surface*, Technical Report 78-2 (FML), McGill University, 1978
- [8] H.Bénard, *Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide transportant de la chaleur par convection en régime permanent*, Ann. Chim. Phys., **23**, 62, 1901
- [9] R.Berker, *Mouvement d'un fluide visqueux incompressible*, Handbuch der Physik, Fluid Dynamics II, Herausgegeben von S.Flügge, Band VIII/2, Springer-Verlag, 1959
- [10] E.Bloch, *Théorie Cinétique des gaz*, Collection Armand Collin, 1958
- [11] L.Boltzmann, *Further Studies on the Thermal Equilibrium Among Gas-Molecules*, Wien. Ber. **66**, 275, 1872 (Collected Works, **1**, 316)
- [12] J.Broadwell, *Study of a rarefied shear flow by the discrete velocity method*, J. Fluid Mech., **7**, 367, 1964
- [13] J.Buckmaster, *Viscous-gravity spreading of an oil slick*, J.Fluid Mech., **59**, 481, 1973
- [14] C.Burges, S.Zaleski, *Buoyant Mixtures of Cellular Automaton Gases*, Complex Systems, **1**, 31, 1987
- [15] D.Burgess, F.Hayot, W.F.Saam, *Model for surface tension in lattice-gas hydrodynamics*, Phys. Rev. A, **38**, 3589, 1988
- [16] D.Burgess, F.Hayot, *Saffman-Taylor instability in a lattice gas*, Phys. Rev. A, **40**, 5187, 1989
- [17] A.Cancelliere, C.Chang, E.Foti, D.H.Rothman, S.Succi, *The permeability of a random medium: comparison of simulation with theory*, Phys. Fluids A, **2**, 2085, 1990
- [18] C.Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory*, Macmillan, 1969

- [19] C.Cercignani, W.Greenberg, P.F.Zweifel, *Global solutions of the Boltzmann equation on a lattice*, J.Stat.Phys, **20**, 449, 1979
- [20] S.Chapman, *On the law of distribution of velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monoatomic gas*, Phil.Trans.Roy.Soc.A, **216**, 279, 1916
- [21] S.Chapman, T.G.Cowling, *The mathematical theory of non-uniform gases*, Cambridge, University Press, 1960
- [22] H.Chen, S.Chen, W.H.Matthaeus, *Recovery of the Navier-Stokes Equations Using A Lattice Gas Boltzmann Method*, Phys.Rev. A, **45**, R5339, 1992
- [23] S.Chen, Z.Wang, X.Shan, G.Doolen, *Lattice Boltzmann Computational Fluid Dynamics in Three Dimensions*, J.Stat.Phys., **68**, 379, 1992
- [24] X.L.Chen, *Surface tension in immiscible lattice gases*, In MIT Porous Flow Project, **4**, 115, 1991
- [25] P.Clavin, P.Lallemand, Y.Pomeau, G.Searby, *Simulations of free boundaries in flow systems by lattice gas models*, J.Fluid.Mech, **188**, 437, 1988
- [26] A.Clouqueur, D.d'Humières, *RAP1, a Cellular Automaton Machine for Fluid Dynamics*, Complex System, **1**, 585, 1987
- [27] R.Cornubert, D.d'Humières, D. Levermore, *A Knudsen layer theory*, Physica **D**, **47**, 241, 1991
- [28] N.D.DiPietro, R.G.Cox, *The spreading of a very viscous liquid on a quiescent water surface*, Quarterly Journal of Mech. and Appl. Math., **XXXII(4)**, 355, 1979
- [29] N.D.DiPietro, C.Huh, R.G.Cox, *The hydrodynamics of the spreading of one liquid on the surface of another*, J. Fluid Mech., **84**, 529, 1978
- [30] P.J.Davis, *Circulant matrices*, John Wiley & Sons, New York, 1979
- [31] B.Dubrulle, U.Frisch, M.Hénon, J.P.Rivet, *Low-viscosity lattice gas*, J. Stat. Phys., **59**, 1187, 1990
- [32] D.A.Edwards, H.Brenner, D.T.Wasan, *Interfacial transport processes and rheology*, Butterworth-Heinemann Series in Chemical Engineering, 1991
- [33] D.Enskog, *The kinetic theory of Phenomena in fairly rare gases*, Dissertation, Upsala, 1917
- [34] J.A.Fay, *In Oil on the Sea* (ed. D.P.Hoult), Plenum, **53**, 1969

- [35] U.Frisch, B.Hasslacher, Y.Pomeau, *Lattice gas automata for the Navier-Stokes equation*, Phys. Rev. Lett., **56**, 1505, 1986
- [36] U.Frisch, D.d'Humières, B.Hasslacher, P.Lallemand, Y.Pomeau, J.P.Rivet, *Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions*, Complex Systems, **1**, 649, 1987
- [37] R.Gatignol, *Théorie cinétique d'un gaz à répartition discrète de vitesses*, Zeit. für Flügwissenschaften, **18**, 93, 1970; Lecture Notes in Physics, **36**, Springer, 1975
- [38] I.Ginzbourg, P.M.Adler, *Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model*, J.Phys. II France, **4**, 191, 1994
- [39] I.Ginzbourg, P.M.Adler: *Boundary conditions at a plane liquid-liquid interface in FCHC lattice Boltzmann model*, soumis à Physical Review E
- [40] I.Ginzbourg, P.M.Adler: *Surface tension models with different viscosities*, soumis à Transport in Porous Media
- [41] A.K.Gunstensen, D.H.Rothman, *A Galilean-invariant immiscible lattice gas*, In MIT Porous Flow Project, **2**, 69, 1989
- [42] A.K.Gunstensen, D.H.Rothman, S.Zaleski, G.Zanetti, *Lattice Boltzmann model of immiscible fluids*, Phys.Review A, **43**, 1991
- [43] A.K.Gunstensen, D.H.Rothman, *Microscopic modeling of immiscible fluids in three dimensions by a lattice Boltzmann method*, In MIT Porous Flow Project, **4**, 20, 1991a
- [44] A.K.Gunstensen, D.H.Rothman, *A Lattice-Gas Model for three immiscible fluids*, Physica **D**, **47**, 47, 1991b
- [45] A.K.Gunstensen, *Lattice-Boltzmann studies of multiphase flow through porous media*, PHD-MIT, 1992
- [46] A.K.Gunstensen, D.H.Rothman, *Lattice-Boltzmann Studies of Immiscible Two-Phase Flow Through Porous Media*, J. Geophys. Res., **B 98**, 6431, 1993
- [47] D.W.Grunau, *Lattice Methods for Modeling Hydrodynamics*, PHD-Colorado State University, 1993
- [48] D.W.Grunau, T.Lookman, S.Y.Chen, A.S.Lapedes, *Domain Growth, Wetting, and Scaling*
- [49] J.Happel, H.Brenner, *Low Reynolds number hydrodynamics*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NY, 1965
- [50] F.Hayot, *Fingering Instability in a Lattice gas*, Physica **D**, **47**, 64, 1991
- [51] J.Hardy, Y.Pomeau, O. de Pazzis, *Time evolution of a two-dimensional model system. I-Invariant states and time correlation functions*, J. Math. Phys., **14**, 1746, 1973

- [52] W.D.Harkins, *The Physical Chemistry of Surface Films*, Reinhold, 1952
- [53] M.Hénon, *Isometric collision rules for the four-dimensional FCHC lattice gas*, Complex Systems, **1**, 475, 1987a
- [54] M.Hénon, *Viscosity of a lattice gas*, Complex Systems, **1**, 763, 1987b
- [55] F.J.Higuera, J.Jimenez, *Boltzmann approach to lattice gas simulations*, Europhys. Lett., **9**, 663, 1989
- [56] F.J.Higuera, S.Succi, *Simulating the flow around a circular cylinder with a lattice Boltzmann equation*, Europhys. Lett., **8**, 517, 1989
- [57] F.J.Higuera, S.Succi, R.Benzi, *Lattice Gas Dynamics with Enhanced Collisions*, Europhys.Lett., **9**, 345, 1989
- [58] C.W.Hirt, B.D.Nichols, *Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries*, J.Comput.Phys., **39**, 201, 1981
- [59] R.Holme, D.H.Rothman, *Lattice-gas and Lattice-Boltzmann models of miscible fluids*, In MIT Porous Flow Project, **4**, 70, 1991
- [60] D.P.Hoult, *Oil spreading on the sea*, Ann. Rev. Fluid Mech., **4**, 341, 1972
- [61] D.d'Humières, Y.Pomeau, P.Lallemand, *Simulation of Two-dimensional Von Karman Street using a Lattice Gas*, C.R.Acad.Sc.Paris, **301**, série 2, 1391, 1985
- [62] D.d'Humières, P.Lallemand, U.Frisch, *Lattice gas models for 3D hydrodynamics*, Europhys. Lett., **2**, 291, 1986
- [63] D.d'Humières, P.Lallemand, *Numerical simulations of hydrodynamics with lattice gas automata in two dimensions*, Complex Systems, **1**, 599, 1987
- [64] D.d'Humières, P.Lallemand, J.P.Boon, D.Dab, A.Noullez, *Fluid dynamics with lattice gases*, In R.Livi, S.Ruffo, S.Cilberto, and M.Buiatti editors, Chaos and Complexity, Word Scientific Singapore, 278, 1988
- [65] F.Kalaydjian, M.Tixier, *Effect of the spreading coefficient on gas-oil capillary pressure curves in presence of connate water*, 5th Annual SCA Technical Conference, San Antonio, 1991
- [66] F.Kalaydjian, *Origin and quantification of coupling between relative permeabilities for two-phase flows in porous media*, Transp.Porous.Media, **5**, 215, 1990
- [67] M.Knudsen, *The Kinetic Theory of Gases*, Methuen Monographs, 1934
- [68] J.M.V.A.Koelman, *A Simple Lattice Boltzmann Scheme for Navier Stokes Fluid Flow*, Europhys. Lett., **15**, 607, 1991

- [86] D.H.Rothman, *Simple models of complex fluids*, In MIT Porous Flow Project, **4**, 42, 1991
- [87] D.H.Rothman, *From Ordered Bubbles to Random Stripes: Pattern Formation in a Hydrodynamic Lattice Gas*, **71**, 641, 1993
- [88] J.Rowlinson, B.Widom, *Molecular Theory of Capillarity*, Clarendon Press, Oxford, 1982
- [89] R.Santos, *Lattice - gas studies of immiscible two-phase flow in inhomogeneously wet 2D porous media*, In MIT Porous Flow Project, **2**, 33, 1989
- [90] M.Santiago, communications privées, 1994
- [91] H.Schlichting, *Boundary layer theory*, McGraw Hill, 1968
- [92] P.A.Skordos, *Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method*, Phys.Review E, **48**, 4823, 1993
- [93] J.A.Somers, P.C.Rem, *Analysis of surface tension in two phase lattice gases*, Physica **D**, **47**, 39, 1991
- [94] J.A.Somers, P.C.Rem, *Obtaining numerical results from the 3D FCHC-lattice gas*, Lecture Notes in Physics, **398**, 59, 1992
- [95] J.D. Sterling, S.Y.Chen, *Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods*, soumis à J.Comp. Phys., 1993
- [96] S. Succi, E. Foti, F.Higuera, *Three-dimensional flows in complex geometries with the lattice Boltzmann method*, Europhys. Lett., **10**, 433, 1989
- [97] S. Succi, R.Bensi, F.Higuera, *The lattice Boltzmann equation: a new tool for computational fluid dynamics*, Physica **D**, **47**, 219, 1991
- [98] T.Toffoli, N.Margolus, *Programmable Matter: concepts and realization*, Physica **D**, **47**, 263, 1991
- [99] C.Truesdell, R.Toupin, in *Principles of Classical mechanics and field theory*, in Flugge S., ed. Handbuch der Physik **III/1**, Springer-Verlag, Berlin, 1960
- [100] B.Widom, *Structure of the Interface between Fluid Phases*, Faraday symposia of the chemical society, 16, 1981
- [101] S.Wolfram, *Cellular Automata Fluids 1: Basic Theory*, J. Stat. Phys., **45**, 471, 1986
- [102] D.P.Ziegler, *Boundary Conditions for Lattice Boltzmann Simulations*, J.Stat.Phys., **71**, 1993

## Appendice 2.A.

Article: "*Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model*"

Par comparaison avec cet article, certains changements de notation sont faits dans cette thèse. Les plus importants sont:

Article	→	Thèse
$\mathbf{c}_i$	→	$\mathbf{C}_i$
$c_s^2$	→	$C_s^2$
$M_c$	→	$L$
$N_i^{lf}$	→	$N_i^{lF}$
$i \pm$	→	$\pm i$

### Errata.

Equations (5)-(6) doivent être

$$\begin{aligned} N_i^0(\mathbf{r}, t) &= d + d'\rho\mathbf{u}\cdot\mathbf{c}_i + dG(\rho)\mathbf{u}^t \cdot \{\mathbf{Q}_i + (c^2/D - c_s^2)\mathbf{I}\} \cdot \mathbf{u}, \quad i=1, \dots, b_m \\ N_0^0(\mathbf{r}, t) &= d[1 - c_s^2 G(\rho)\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}] \end{aligned} \quad (5)$$

where

$$\begin{aligned} d &= \rho/b, \quad b = b_m + M_c, \quad d' = D/(b_m c^2), \quad c_s^2 = [d'b]^{-1} \\ G(\rho) &= (1-2d)[2(1-d)c_s^4]^{-1}, \quad \mathbf{Q}_i = \mathbf{c}_i\mathbf{c}_i - \mathbf{I}c^2/D \end{aligned} \quad (6)$$

L'équation (33a) doit être:

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}^0) = (\theta - 0.5) \nabla \cdot (\rho \mathbf{F})$$

L'équation (45) doit être:

$$\begin{aligned} & \left[ u_x^0 c_{i-x} + \lambda_\psi^{-1} \partial_z u_x^0 Q_{i-xz} - 0.5 f_x c_{i-x} - \lambda_2^{-1} f_x (C_{i-x} - 3C_{i-x} C_{i-z}^2) \right] \{ \pm z_0 \} \\ &= \left[ u_x^0 c_{i+x} + \lambda_\psi^{-1} \partial_z u_x^0 Q_{i+xz} - 0.5 f_x c_{i+x} - \lambda_2^{-1} f_x (C_{i+x} - 3C_{i+x} C_{i+z}^2) \right] \{ \pm(z_0 + 1) \} \end{aligned}$$

La formule (57c) doit être:

$$u = \frac{a}{\sqrt{g}} x; \text{ hence}$$

$$f' = \frac{a}{\sqrt{g}}, \quad y = \infty$$

Classification  
*Physics Abstracts*  
47.11 — 47.55M

## Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model

I. Ginzbourg and P. M. Adler

LPTM, Asterama 2, Avenue du Téléport, 86360 Chasseneuil, France

*(Received 10 May 1993, revised 17 September 1993, accepted 22 October 1993)*

**Abstract.** — In the continuum limit, the velocity of a Newtonian fluid should vanish at a solid wall. This condition is studied for the FCHC lattice Boltzmann model with rest particles. This goal is achieved by expanding the mean populations up to the second order in terms of the ratio  $\varepsilon$  between the lattice unit and a characteristic overall size of the medium. This expansion is applied to two extreme flow situations. In Poiseuille flow, the second eigenvalue of the collision matrix can be chosen so that velocity vanishes at the solid walls with errors smaller than  $\varepsilon^2$ ; however the choice depends on the angle between the channel walls and the axes of the lattice. In a plane stagnation flow, the tangential and normal velocities do not vanish at the same point, except for particular choices of the parameters of the model; this point does not coincide with the solid wall. It is concluded that the boundary conditions are as a matter of fact imposed with errors of second order.

### 1. Introduction.

Lattice-gas and lattice Boltzmann models have been recently introduced (see [1] as some of the first contributions to the topic) to simulate macroscopic fluid mechanics. The particular application we have in mind in using these methods is porous media which are characterized by complex and random shapes [2]. In such an application, it is crucial to be able to discretize the porous medium by a numerical mesh as large as possible and to impose the usual no slip condition for velocity at the solid walls.

The major purpose of this work is to study this no slip condition both from a numerical and a theoretical standpoint in simple geometries. At lattice nodes close to the surface, bounce back conditions are usually used (and sometimes specular reflections). Problems on the location of the solid boundaries were already apparent in earlier papers [3, 4], but they were directly addressed in a recent publication [5].

This paper is organized as follows. Section 2 is devoted to a general exposition of the face centered hypercubic (hereafter referred to as FCHC) lattice Boltzmann model with rest particles on which our numerical computations are based. It does not provide any new feature since it was already developed [6], but it provides all the necessary background for future developments. However, it should be mentioned that we could determine all the eigenvalues and eigenvectors of the collision matrix analytically. The classical bounce back condition is used at nodes close to the solid wall.



## **Boundary conditions problems in lattice gas methods for single and multiple phases.**

This thesis report presents an investigation about the precision of the no-slip condition imposed by LBE models on the FCHC lattice with bounce-back and specular reflections of mean populations at solid boundaries on the one hand, and about the precision of the boundary conditions imposed at the interface of the two-phase ILB models on the other hand. It has been demonstrated that the precision depend on the geometry, on the flow as well as on the eigenvalues of the collision matrices, though some of them do not directly influence any physical parameters of the modelled flow. The analysis has been performed considering the first order and second order terms with respect to a small parameter which represents the ratio between the lattice unit and the characteristic overall length of the medium. For this purpose, the mean populations solutions have been developed up to second order.

In the first part, devoted to the study of no-slip conditions introduced by classical reflections, two different analytical solutions are obtained for exact position of the solid boundaries: first of all for the Poiseuille flow in a horizontal channel and afterwards for a channel inclined at angle  $45^\circ$  with lattice axes. In order to introduce the boundary conditions with second order precision in arbitrary flows, some alternative algorithms are proposed based on the inverse methodology of LBE methods. These approaches use finite difference to construct the undetermined from Boltzmann equation mean populations at the lattice nodes near the wall.

In the second part, devoted to the study of two phase ILB models, the eigenvalues of the collision matrices are determined in order to satisfy the conditions at a plane interface to the first order, and for certain flows, to the second order. By using the mechanical tests, the surface tension coefficient is derived for ILB models with different viscosities from analytical solutions to lattice Boltzmann equation.

## **Les problèmes de conditions aux limites dans les méthodes de gaz sur réseaux à plusieurs phases**

Ce mémoire est consacré à l'étude de la précision de la condition d'adhérence imposée par le modèle LBE sur le réseau FCHC avec une combinaison de réflexions en arrière et spéculaire des populations moyennes près de la paroi solide, et de la précision des conditions imposées par les modèles ILB à l'interface entre deux phases. Il a été démontré que ces précisions dépendent de la géométrie, de l'écoulement et des valeurs propres de la matrice de collision parmi lesquelles certaines n'influencent pas directement les paramètres physiques de l'écoulement modélisé. L'analyse est faite au premier et au second ordre en termes d'un petit paramètre qui représente le rapport entre le pas du réseau et une dimension caractéristique du système. Pour ce faire, les populations moyennes ont été développées jusqu'au second ordre.

Dans la première partie, consacrée à l'étude de la condition d'adhérence imposée par les réflexions classiques, deux solutions exactes pour la position des frontières solides sont obtenues: d'abord pour l'écoulement de Poiseuille dans un canal non incliné et ensuite dans un canal incliné d'un angle  $45^\circ$  par rapport aux axes du réseau FCHC. Pour obtenir la précision au second ordre des conditions aux frontières solides, on propose des algorithmes basés sur la méthodologie inverse des modèles LBE. Ces méthodes utilisent des différences finies pour construire les populations non déterminées, par l'équation de Boltzmann, aux noeuds près des parois.

Dans la deuxième partie, consacrée à l'étude des modèles ILB à deux phases, on déduit les valeurs propres des matrices de collision afin de satisfaire les conditions à l'interface plane au premier ordre et, dans des cas particuliers, au second ordre. En utilisant le test mécanique la tension de surface est déduite des solutions de l'équation de Boltzmann des modèles ILB pour des viscosités différentes.