

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA BOUMERDES



Faculté des Sciences de l'Ingénieur

Département Génie Mécanique

GROUPE MODELISATION EN MECANIQUE

MEMOIRE

Présenté par

M. ATIA Abdelmalek

En vue de l'obtention du diplôme de

MAGISTER en GENIE MECANIQUE

OPTION : MODELISATION ET SIMULATION EN MECANIQUE

**Simulation Numérique des Ecoulements
Multiphasiques par une Approche Mésoscopique
Basée sur des Méthodes sans Maillages**

Soutenu le 27/01/2010 devant le jury suivant :

Pr. Slimane	AISSANI	Professeur	UMBB	Président
Dr. Aomar	AIT AIDER	Maître de Conférences	UMMTO	Examinateur
Dr. Idir	BELAIDI	Maître de Conférences	UMBB	Examinateur
Dr. Kacem	MANSOURI	Maître de Conférences	UMBB	Examinateur
Dr. Kamal	MOHAMMEDI	Maître de Conférences	UMBB	Rapporteur

Année universitaire 2009/2010

Résumé : depuis de nombreuses années, les méthodes des éléments finis, des différences finies ou des volumes finis se sont imposées pour la résolution des équations aux dérivées partielles décrivant les systèmes physiques et mécaniques. Cependant, ces techniques souffrent de limitations pour certaines classes de problèmes. Ces inconvénients ont entraîné le développement, depuis une dizaine d'années, d'une nouvelle classe de méthodes appelées méthodes sans maillage. Au lieu de travailler sur un maillage et une connectivité, les méthodes « meshless » utilisent un ensemble discret de points plus ou moins aléatoirement distribués dans le domaine et sur sa frontière. L'objectif du travail consiste en la simulation d'un écoulement multiphasique à l'aide de la méthode Lattice Boltzmann. Le code développé qui s'appuie sur un code source ouvert, a permis de simuler l'écoulement dans un milieu poreux.

Mots clés : simulation numérique ; méthodes sans maillage ; mésoscopique ; LBM ; multiphasique.

Abstract: since many years, the finite element method, the finite differences method or finite volumes method were imposed for the resolution of the partial derivative equations describing the physical and mechanical systems. However, these techniques suffer from limitations for certain classes of problems. These disadvantages brought the development, in recent years, new numerical techniques, have been developed. These methods, coined as mesh free methods. Instead of working on a grid and connectivity, the "meshfree methods" use a set of discrete points distributed more or less aleatory in the field and on its boundary. The aim of this work consists of the simulation of a multiphase flow using a "mesh less method" by using an existing open code source which will be developed and adapted to the needs for the considered case.

Key words: numerical simulation; mesh free methods; mesoscopic, LBM, multiphase.

ملخص: منذ سنوات عديدة، وطريقة العناصر التامة، طريقة الخلافات التامة ، أو الحجوم التامة ظهرت لحل المعادلات التفاضلية الجزئية التي تصف النظم الفيزيائية والميكانيكية. ومع ذلك، فإن هذه التقنيات تعاني من القيود المفروضة على فئات معينة من المشاكل. هذه العيوب أدت في السنوات الأخيرة إلى تطوير فئة جديدة من أساليب التظاهر الرقمي تسمى بطريقة الشبكة الحرة "meshless". فبدلاً من تقسيم ميدان المحاكاة إلى عناصر أو حجوم مربوطة ، تعمل طريقة الشبكة الحرة على استخدام مجموعة من النقاط المنفصلة توزع بطريقة عشوائية في ميدان المحاكاة و على حدوده. هدفنا من هذا العمل هو عبارة عن محاكاة لسيلان متعدد باستخدام طريقة الشبكة الحرة من خلال استخدام مصدر قوانين مفتوح الذي سيتم تطويره وتكييفه مع احتياجات الحالة المدروسة.

الكلمات المفتاحية : النمذجة العددية ; طريقة الشبكة الحرة; ميزوسكوبيك.

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à exprimer mes vifs remerciements et ma gratitude au **Dr. Kamal MOHAMMEDI**, maître de conférence à l'Université de M'hamed Bougara Boumerdes, qui m'a fait l'honneur d'être rapporteur de ce mémoire. Je le remercie pour la patience dont il a fait preuve lors de ses relectures mais également pour les différentes discussions fructueuses que nous avons pu tenir ensemble et les lectures attentives lors différentes étapes de la réalisation de ce travail.

Je tiens à remercier tout particulièrement le **Dr. Idir BELAIDI**, maître de conférence à l'Université M'Hamed Bougara Boumerdès, et membre du Groupe de Recherche 'modélisation en mécanique', Je tiens à le remercier pour ses nombreux conseils et pour l'acuité scientifique qu'il a mise en œuvre lors de nos discussions.

Je remercie vivement le **Pr. Slimane AISSANI (UMBB)** pour avoir bien accepté de présider ce jury.

Je remercie **Dr. Aomar AIT AIDER (UMMTO)**, **Dr. Idir BELAIDI (UMBB)**, **Dr. Kacem MANSOURI (UMBB)**, pour avoir bien voulu examiner ce mémoire et faire partie du jury de soutenance. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma gratitude.

Je tiens également à remercier tous mes collègues étudiants en post graduation pour leurs soutiens et leur motivation.

Que tous mes amis sans exception, et ils sont nombreux, notamment ceux que je ne peux citer trouvent ici mes meilleurs hommages.

Enfin, que toutes les personnes ayant contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail, soient chaleureusement remerciées.

Dédicace

A mes chers parents

A mes frères et sœurs

A toute ma famille...

Sommaire

Résumé	
Remerciements	
Dédicace	
Sommaire.....	i
Liste des figures.....	iii
Liste des tableaux.....	v
Nomenclature.....	vi
Introduction générale	1
I. Méthodes sans maillage: principes et état de l'art	
I.1. Introduction.....	5
I.1.1. Généralités sur les méthodes sans maillage. Historique	5
I.1.2. Avantage des méthodes sans maillage	6
I.1.3. Inconvénients des méthodes sans maillage.....	7
I.2. Méthodes sans maillage particulières.....	9
I.2.1. Méthodes particulières utilisant le principe des noyaux régularisant	9
I.2.1.1. Méthode Smooth Particle Hydrodynamics (SPH).....	9
I.2.1.2. Méthode Reproducing Kernel Particle Method (RKPM) et Corrected-SPH (C-SPH)	14
I.2.2. Méthodes particulières utilisant le principe des moindres carrés mobiles.....	15
I.2.2.1. Définition de l'approximation MLS	15
I.2.2.2. Méthodes DEM (diffuse element method) et EFGM (element-free Galerkin method)	17
I.2.3. Méthodes particulières utilisant le principe Partition de l'unité (PU).....	18
I.2.3.1. Définition de l'approximation Partition de l'unité (PU).....	18
I.2.3.2. Hp-clouds et PUFEM (Partition of Unity Finite Element Method).....	18
I.2.4. Méthodes sans maillage de type éléments naturels	18
I.2.4.1. Méthode NEM.....	18
I.2.4.2. Méthode C-NEM.....	21
I.2.5. Méthodes sans maillage basées sur la mécanique statistique.....	22
I.2.5.1. Méthode de dynamique moléculaire	23
I.2.5.2. Méthode de gaz sur réseau (LGA).....	23
I.2.5.3. Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM).....	24
II. Modélisation et simulation des écoulements multiphasiques	
II.1. Simulation numérique des écoulements multiphasiques par la méthode Element Free Galerkin (EFG).....	25
II.1.1. Méthode EFG	25
II.1.2. Résultats et discussions	26
II.2. Simulation numérique d'écoulement multiphasique à l'aide de la méthode (LBM)	30
II.2.1. Séparation des Phases.....	30
II.2.2. Coalescence des gouttes	31
II.3. Etude de l'effet de viscosité sur l'écoulement multiphasique des fluides immiscible dans les milieux poreux à l'aide de la méthode (LBM).....	31
II.3.1. Résultats et discussions	32
II.3.1.1. Viscosité de la phase mouillante est moins que la viscosité de la phase non-mouillante.....	32
II.3.1.2. Viscosité de la phase mouillante est plus grande que la viscosité de la phase non-mouillante ($M < 1$).....	33
II.4. Simulation numérique d'écoulement multiphasique à l'aide de la méthode SPH	34
II.4.1. Résultats et discussions	34

III. Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM)

III.1.	Introduction.....	36
III.2.	Applications de la méthodes LBM.....	36
III.3.	Equation de Boltzmann	37
III.4.	Modèle bidimensionnel D2Q7 à sept vitesses	38
III.5.	De l'équation de Boltzmann à la méthode LBM.....	39
III.6.	Choix des conditions aux limites dans la méthode LBM.....	43
III.6.1.	Conditions aux limites périodiques.....	43
III.6.2.	Conditions aux limites solides.....	43
III.7.	Méthode LBM pour un écoulement multiphasique	44
III.7.1.	Introduction.....	44
III.7.2.	Approche "énergie libre"	44
III.8.	Equation d'état dans la méthode LBM	46
III.8.1.	Introduction.....	46
III.8.2.	Equations d'état utilisées avec la méthode LBM.....	46
III.8.3.	Influence de l'équation d'état sur le rapport de la masse volumique entre les phases en présence	48
III.9.	Mise en œuvre algorithmique et informatique de la méthode LBM.....	48
III.9.1.	Introduction.....	48
III.9.2.	Algorithme de la méthode Boltzmann sur réseau	48

VI. Résultats et discussions

IV.1.	Introduction.....	53
IV.2.	Présentation du code de calcul FLUENT	53
IV.3.	Simulation d'un écoulement multiphasique dans un milieu dispersé homogène.....	54
IV.3.1.	Les courbes de convergence.....	54
IV.3.2.	Distribution des phases	55
IV.3.3.	Champ de vitesse.....	57
IV.3.4.	Courbes de variation de la vitesse et chute de pression	59
IV.4.	Simulation d'un écoulement multiphasique autour d'un arrangement de carrés homogènes fixes (réseau capillaire) :.....	62
IV.4.1.	Introduction.....	62
IV.4.2.	Etude de l'effet de la mouillabilité et du nombre capillaire sur la distribution des phases	62
IV.4.2.1.	Installation de simulation	62
IV.4.2.2.	Résultats et discussions.....	63
IV.4.3.	Etude de l'effet de l'orientation des canaux sur la formation de piégeage	65
IV.4.3.1.	Introduction.....	65
IV.4.3.2.	Résultats et discussions.....	65
IV.5.	Ecoulement multiphasique dans un milieu poreux reconstruit à partir de traitement d'image	67
IV.5.1.	Introduction.....	67
IV.5.2.	Ecoulement dans les milieux poreux.....	67
IV.5.3.	Résultats et discussions	69
IV.5.1.	Introduction.....	67
IV.5.2.	Ecoulement dans les milieux poreux.....	67
IV.5.3.	Résultats et discussions	69
	Conclusion générale	67
	Références bibliographiques	78
	Annexe	82

Liste des figures

FIG I.1 Support et fonction poids associée aux fonctions de forme moindres carrés mobiles, (d'après [19]).	7
Fig. I.2 : Différentes méthodes numériques de simulation.	8
FIG I.3 Maillage eulérien bidimensionnel, (d'après [10]).	9
FIG I.4 Volume de contrôle Lagrangien, (d'après [10]).	10
FIG I.5 -Domaine d'influence d'une particule, (d'après [10]).	13
FIG I.6 Interpolation par éléments finis et approximation sans maillage, (d'après [16]).	17
FIG. I.7 (a) Diagramme de Voronoi d'un ensemble de points dans le plan; (b) triangulation de Delaunay associée et cercle circonscrit à un triangle, (d'après [19]).	19
FIG. I.8 Calcul des fonctions de forme de Sibson (à gauche) et de Laplace (à droite), (d'après [19]).	20
FIG. I.9: Triangulation de Delaunay non contrainte (en haut) ou contrainte par les arêtes de la frontière et un critère de visibilité (en bas). D'après [19].	22
FIG I.10 Exemple d'un pas de temps dans l'évolution d'un réseau de gaz bidimensionnel. (a) état initial: chaque flèche représente une particule déplacer selon la direction de la flèche ; (b) étape d'advection: chaque particule déplace une unité de réseau dans la direction de sa vitesse ;(c) étape de collision, D'après [24].	24
FIG II.1 le domaine de simulation pour une particule.	27
FIG II.2 Evolution de l'écoulement autour d'une particule mobile :	27
(a) $t = 6,25$ s; (b) $t = 12,5$ s et (c) $t = 18,75$ s.	27
FIG II.3 Domaine de simulation pour deux particules	28
Fig. (II.4) Champ de vitesse d'un système de deux-particule à différents instants :	28
(a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 0,5$ s; (c) $t = 0,62$ s et (d) $t = 0,68$ s.	28
Fig. II.5 Collisions de particules et l'évolution du champ de vitesse: (a) $t = 0,087$ s; (b) $t = 0,088$ s; (c) $t = 0,089$ s et (d) $t = 0,090$ s.	29
Fig. II.6 95 Particules tombant dans une conduite verticale: (a) $t = 0,125$ s; (b) $t = 0,150$ s; (c) $t = 0,175$ s et (d) $t = 0,200$ s.	29
FIG II.7 séparation de phase Instantané.	30
Tableau II.1 Paramètres utilisés pour la simulation de séparation de phase.	30
FIG II.8 coalescence de deux gouttes.	31
FIG II.9 Distribution des phases à différents instants($t = 0, 100, 000, 200, 000, 300, 000$), $M = 10$ et $SW = 0, 2$.	32
FIG. II.10 Perméabilités relatifs de deux phases	33
FIG II.11 Distribution des phases à différents temps ($t = 0, 100, 000, 200, 000, 300, 000$)	33
FIG. II.12 Perméabilités relatifs de deux phases	34
FIG II. 13 Photographie de bulle d'air en nitrobenzène ; $r = 3$ cm, $U = 0.37$ m sec ⁻¹ [34].	35
FIG II.14 Comparaison des résultats de SPH pour l'ascension de bulle avec la formule analytique, $\rho l / \rho d = 0.001$, $r = 0.28$ m [35].	35
FIG II.15 Bulle d'air en ascension dans l'eau à différents instants 0.0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8 sec.	35
FIG III.1 Différents domaines d'applications de la méthode LBM.	36
FIG III.2 Vecteurs vitesses discrètes pour des réseaux en 2-D et 3-D. [22].	38
FIG III.3 Conditions aux limites périodiques utilisées dans la méthode LBM (d'après [44]).	43
FIG III.7 Algorithme 'Stream and collide'	50
FIG III.8 Organigramme de l'algorithme utilisé.	51
FIG IV.1-a : Variation de la vitesse moyenne dans une section du canal en fonction du temps pour le cas du milieu dispersé homogène (LBM)	54
FIG IV.1-b : Convergence du système après un certain nombre d'itérations par FLUENT.	55

FIG IV.2 : Distribution des phases dans un réseau en 2D de porosité $\varepsilon = 0.52$ à différent temps, à gauche par la méthode LBM (t=0, 2600 et 40000), à droite par FLUENT (t=0, 420 et 760). La couleur rouge représente la phase liquide ($\rho_l = 6\text{kgm}^3$), la phase vapeur $\rho_v = 2\text{kgm}^3$ représente par la couleur verte dans la méthode LBM et par la couleur bleu dans le logiciel FLUENT.	56
FIG IV.3 : Champ de vitesse selon l'axe x, cas du milieu dispersé homogène, à gauche par LBM, à droite par FLUENT.	57
FIG IV.4: Champ de vitesse selon l'axe y, cas du milieu dispersé homogène, à gauche par LBM, à droite par FLUENT.	57
FIG IV.5-a Vecteur de vitesse coloré par la composante horizontale.	58
FIG IV.5-b Vecteur de vitesse coloré par la composante verticale.	58
FIG IV.6 -a Variation de la vitesse axiale V_x de l'écoulement dans le milieu dispersé homogène en fonction de y à x=87 lattice obtenu par la méthode LBM.	60
FIG IV.6 -b Variation de la vitesse axiale V_x de l'écoulement dans le milieu dispersé homogène en fonction de y à x=0.87 m obtenu par FLUENT.....	60
FIG IV.7-a Variation de chute de pression sur le long du milieu pour les deux phases a y=33 lattice obtenu par la méthode LBM.....	61
FIG IV.7-b Variation de chute de pression sur le long du milieu pour les deux phases a y=0.33 m obtenu par FLUENT.....	61
FIG IV-8: Variation de vitesse et de chute de pression dans un milieu dispersé homogène trouvée par la méthode. (Hiroshi Mitsuishi, Hiroshi Okabe, Japan National Oil Corporation)..	61
FIG IV-9 Variation de la vitesse moyenne dans une section du canal (x= Lx/2) en fonction du temps.....	63
FIG IV-10 (a) : Distribution initiale de deux phases dans tous les cas, (b) : la distribution de deux phases sans la force de mouillabilité après 30000 d'itérations.	64
FIG IV-11 Distribution de deux phases avec la force de mouillabilité et deux nombre capillaire différent.	64
Fig. IV-12. Etapes consécutives de formation d'un piège, d'après [60].	65
Fig. IV-13 Réseaux capillaires : carré (a) ; carré orienté à 45° (b) ; hexagonal (c). En haut l'état initial, en bas la distribution des phases après certain nombre d'itérations : 40000 itérations pour (a) ; 30000 itérations pour (b), 100000 itérations pour (c).....	66
FIG IV-14: Etapes de traitement d'image.....	69
FIG IV-15: Image traitée d'un milieu poreux d'après [64].....	69
FIG IV-16 Variation de la vitesse moyenne dans une section du milieu (x= Lx/2) en fonction du temps.....	69
FIG IV.17 : Distribution des phases dans un réseau en 2D de porosité $\varepsilon = 0.52$ à différent temps (t=0, 5000, 20000 et 40000), la couleur bleu présente la matrice solide, rouge présente la phase déplaçante et celle verte présente la phase déplacé.	70
FIG IV.18-a Vecteur de vitesse colorée par la composante horizontale.....	71
FIG IV.18-b Vecteur de vitesse colorée par la composante verticale.	72
FIG IV.19 Lignes de courant/trajectoires. La flèche indique la direction principale de l'écoulement.	73
FIG IV.20 Variation de la perméabilité adimensionnelle en fonction de la viscosité dynamique pour deux réseaux de différentes dimensions.	74
FIG IV.21 Gradient de pression en fonction de la vitesse superficielle adimensionnelle pour les deux phases.....	76
FIG IV.22 Gradient de pression en fonction de la vitesse superficielle pour les deux phases pour deux valeurs de viscosité cinématique différentes.....	76

Liste des tableaux

Tableau III.1 Rapports de masses volumiques pour différentes équations d'état [22]	48
Tableau IV.1 : Paramètres de simulation.	62
Tableau IV.2 : Perméabilité adimensionnelle dans le réseau (100 × 100).	75

Nomenclature

Lettres latines

a	Accélération, paramètre d'attraction dans l'équation d'état.
b	Paramètre de répulsion dans l'équation d'état.
c	Vitesse des particules dans le réseau.
c_0	Constante dans l'équation d'état.
c_s	Vitesse de son en réseau.
D	Dimension de l'espace.
e_α	Vecteur de Vitesse des particules dans le réseau.
F	Force extérieure.
f	Fonction représente un paramètre physique.
f_α	Fonction de distribution des particules.
$f_\alpha^{eq}, f_\alpha^0$	Fonction de distribution des particules à l'équilibre.
g	Constante de la gravité. (m/s^2)
K	Perméabilité intrinsèque. (m^2)
K_B	Constante de Boltzmann.
K_r	Perméabilité relative.
K_{tpl}	Perméabilité adimensionnelle.
L_c	Longueur du domaine.
p	Pression.
R	Constante de gaz
r	rayon. (m)
Re	Nombre de Reynolds.
t	Temps. (s)
T	Température.
u, V	Vitesse macroscopique du fluide. (m/s)
w_α, W_α	Coefficients de pondération.
x, x'	Position.

Lettres Grecques

δt	Pas de temps.
$\delta x, \delta y$	Constantes d'espace du réseau.
Δ	Fraction des sites intersectés dans la région liquide.
θ	Angle de contact.
κ	Coefficient de tension de surface.
τ, λ	Temps de relaxation.
μ	Viscosité dynamique. ($kg/m.s$)
ν	Viscosité cinématique. (m^2/s)
ξ_α	Ensemble discret de vitesse
ρ	La masse volumique. (kg/m^3)
σ	Tension de surface.
χ	Coefficient de pondération utilisé dans l'interpolation linéaire.
ψ	La masse effective.
Ψ	Terme de source de chaleur.
Ω	Opérateur de collision.
ε	porosité du milieu

Indices

α	Indice du réseau.
b	Nœud de frontière.
c	Valeur critique.

i	Valeur initiale
l	Phase liquide.
v	Phase vapeur.
w	Nœud solide.

Exposants

*	Quantificateur qui dénote variable sans-dimension.
–	Quantificateur qui dénote les valeurs moyennes.
~	Quantificateur qui dénote l'état après la collision.
(<i>eq</i>)	Quantificateur qui dénote les propriétés d'équilibre.

Abréviations

BGK	Bhatnagar-Gross-Krook
CFD	Computational Fluid Dynamics.
CL	les conditions aux limites.
C-NEM	Constrained Natural Elements Method
C-S	Carnahan-Starling
C-SPH	Corrected- Smooth particle hydrodynamics
DEM	Diffuse element method (La méthode des éléments diffus)
MD	Molecular Dynamics
EFGM	Element Free Galerkin method
EOS	Equation of state (équation d'état).
FH	Filippova and Hänel
FHP	Frisch, Hasslacher, and Pomeau
GFEM	Generalized finite element method
HCZ	He, Chen, and Zhang model
LB	Lattice Boltzmann
LBE	Lattice Boltzmann equation
LGA	Lattice gas automata
MDF	Méthode des différences finis
MEF	Méthode des éléments finis
MLPG	Meshless local Petrov-galerkin method
MLS	Moindres carrés mobiles, Mei, Luo, and Shyy
MRT	multiple relaxation time (temps de relaxation multiple).
MVF	Méthode des Volumes Finis
MWS	Meshfree Weak-Strong
NEM	Natural Elements Method
N-S	Navier-Stokes
PDE	Partial Differential Equation (équation de dérive partielle).
PDF	Particle distribution function (fonction de distribution des particules).
PUFEM	Partition of Unity Finite Element Method
PUM	Partition of Unity Method
R-K	Redlich-Kwong
RKPM	Reproducing Kernel Particle Method
RKS	Redlich-Kwong Soave equation of state.
SC	Shan & Chen equation of state.
SPH	Smooth Particle Hydrodynamics
SRT	Single relaxation time (simple temps de relaxation).
vdW	Van der Waals.
X-FEM	eXtended Finite Element Method (Méthode des éléments finis étendus)
ZFP	Zone faiblement perméable

Introduction générale

Les écoulements multiphasiques constituent sans aucun doute la gamme d'écoulements la plus répandue, que ce soit au niveau naturel (Réservoirs pétroliers, rivières, mouvements des nuages, écoulement sanguin, etc.) ou au niveau des procédés industriels (fluidisation, colonnes à bulles, agitation et mélange de suspensions, extraction liquide-liquide, séparation solide-liquide, fermentation, transport pneumatique, écoulement dans les milieux poreux, etc.). Ce sont des milieux complexes où se développent des interactions diverses entre les phases qui ont généralement des propriétés physiques différentes (densité, viscosité, concentration, etc.).

Afin de prédire correctement le comportement de ces écoulements, il est important de comprendre les phénomènes mis en jeu au cœur du fluide équivalent que l'on dénomme "mélange". Une meilleure compréhension de ces phénomènes physiques permettrait d'avoir une approche plus rationnelle de la modélisation des écoulements complexes que l'on rencontre dans le milieu industriel. De nombreuses avancées théoriques, expérimentales et numériques rendent cette démarche de plus en plus réaliste et permettent de fixer un cadre d'étude mieux formalisé.

Il est bien connu que les méthodes utilisées en mathématique classique sont incapables de résoudre tous les problèmes de la mécanique des fluides. On remplace alors la résolution mathématique exacte du problème par des expériences dans la mesure du possible ou par des résolutions numériques qui sont en général, approchées. La simulation numérique d'écoulements multiphasiques prend aujourd'hui une place de plus en plus importante dans l'industrie. Les objectifs sont, entre autres :

- de limiter les coûts de production en remplaçant les campagnes d'essais traditionnelles par des simulations numériques réalistes et prédictives.
- d'améliorer la qualité des produits réalisés en définissant les jeux de paramètres optimaux pour le procédé.
- de mieux comprendre les causes des différents phénomènes d'interaction et de transfert mis en jeu entre les différentes phases en présence afin de mieux maîtriser l'écoulement multiphasique.

Les outils de simulation permettent d'avoir accès directement aux différents champs de variables, accessibles ou non à la mesure, en tout point de l'écoulement. Ils permettent de confirmer ou d'infirmer les modèles macroscopiques (lois empiriques ou modèles théoriques) qui existent. La simulation numérique est complémentaire des essais expérimentaux en laboratoire car elle permet un contrôle plus facile des conditions d'écoulement et des propriétés physiques des phases.

De nombreuses méthodes numériques (voir figure I.2) ont été développées pour étudier et simuler différents types d'écoulements de fluide. Ces différentes méthodes peuvent être classées principalement en deux catégories : Les méthodes numériques classiques (avec maillage) et les méthodes numériques alternatives sans maillage.

La physique des milieux continus a, très souvent, recours à des méthodes utilisant des techniques de maillage (à l'exemple de la méthode des différences finies, la méthode des éléments finis ou la méthode des volumes finis) dans l'optique de fournir une solution approchée à un problème donné formulé à l'aide d'équations aux dérivées partielles ou sous forme d'une fonctionnelle à minimiser. Ces méthodes bénéficient d'un fondement théorique très solide et de nombreuses techniques sont venues l'améliorer au fil des ans.

Cependant, Les méthodes avec maillage présentent certaines limitations qui restreignent son application, notamment dans le domaine de la modélisation des grandes transformations dans lesquelles le maillage est nécessairement très déformé. Cela a pour conséquence une perte de précision, des problèmes de convergence ou même un arrêt intempestif de la simulation du fait de la présence de singularités ou de discontinuités. Ceci est le cas des écoulements complexes dans les géométries complexes à l'exemple des écoulements multiphasiques en milieux poreux qui font l'objet de ce travail.

Il est nécessaire de reconstruire un maillage à cause de la déformation des éléments afin d'éviter la dégénérescence du Jacobien associé. Cela est aussi nécessaire lorsqu'il s'agit de conformer le maillage aux géométries complexes. Des techniques de remaillages adaptatifs automatiques très performants ont été développées. Cependant, elles entraînent des coûts de calculs additionnels très importants ainsi que des problèmes de robustesse, particulièrement pour les géométries 3D complexes. Par ailleurs, après un remaillage, il est nécessaire d'interpoler les champs (vitesses, pressions, ...) correspondant à la solution courante, ce qui peut introduire des erreurs supplémentaires dans le calcul.

Depuis une dizaine d'années, de nouvelles méthodes numériques alternatives aux méthodes classiques ont été développées. Celles-ci tendent toutes à contourner les difficultés liées au maillage en construisant une partie ou la totalité de l'approximation par d'autres approches que la discrétisation spatiale par éléments. Parmi ces méthodes, on trouve les méthodes appelées méthodes sans maillage. Ces techniques ont prouvé leur efficacité dans le traitement de problèmes délicats à aborder par les méthodes classiques. De plus, il est intéressant de noter que les concepts méthodologiques et/ou mathématiques mis en œuvre dans ces approches très ouvertes offrent de nouvelles perspectives pour la simulation numérique des phénomènes complexes rencontrés dans les écoulements multiphasiques.

Les méthodologies décrites ci-dessus peuvent aussi se décliner, en termes d'échelles spatiales auxquelles les phénomènes se développent, en trois grandes catégories : les méthodes macroscopiques (continues), les méthodes microscopiques et les méthodes mésoscopiques.

L'approche macroscopique conventionnelle consiste en la modélisation d'un domaine réel en utilisant les équations de Navier-Stokes dont la résolution fait appel en général aux méthodes numériques classiques des différences finies, des volumes finis ou des éléments finis. Le domaine réel étant auparavant discrétisé par un processus de maillage. On obtient alors un système d'équations algébriques non-linéaires qui est

alors résolu en utilisant des méthodes directes ou itératives. Cependant, les méthodes employant des mailles de résolution fines avec leur nombre élevé d'inconnues à résoudre sont coûteuses et ne sont pas appropriées pour la modélisation de géométries complexes comme celles trouvées dans les milieux poreux.

Les méthodes alternatives basées sur l'approche microscopique permettent la modélisation à l'échelle atomique ou moléculaire et sont connues sous le terme de simulation de la dynamique moléculaire [21]. Ces méthodes sont simples à implémenter et faciles à paralléliser particulièrement pour des systèmes résolvant les équations du mouvement pour des millions de particules à chaque instant. Ceci est un processus numérique intensif. Pour cette raison la taille et la durée des simulations sont limitées aux systèmes relativement réduits et aux opérations relativement courtes.

A une échelle intermédiaire, on trouve l'approche mésoscopique. Il existe essentiellement deux méthodes: la méthode gaz sur réseau (LGA) et Boltzmann sur réseau (LBM) [36]. Ces méthodes utilisent des automates cellulaires ordonnés dans une structure de réseau limitée. Au lieu de discrétiser les équations de Navier-Stokes, les particules fluides sont situées à chaque point discret du réseau. Par l'intermédiaire des moyennes statistiques on obtient des résultats du comportement global des particules fluides proche de celui donné par les méthodes classiques.

Actuellement, la méthode Boltzmann sur réseau (LBM) offre un important avantage dans les problèmes de la dynamique des fluides. Cette méthode mésoscopique a attiré l'attention des mécaniciens des fluides pour la simulation d'écoulements dans les géométries complexes en particulier dans les milieux poreux. Cette méthode permet de considérer le fluide comme un ensemble de particules qui se déplacent à des vitesses précises dont les positions sont connues à un temps donné t . Elle a l'avantage d'être parallélisable et d'utiliser des expressions simples pour décrire les conditions aux limites. Ceci permet d'envisager le traitement des cas d'écoulements multiphasiques en milieux poreux réels.

Dans ce mémoire, nous avons appliqué la méthode LBM pour l'analyse des écoulements multiphasiques pour différentes configurations de milieux poreux bidimensionnels. Nous avons utilisé le code de calcul FLUENT afin de faire une comparaison des résultats obtenus avec ceux de la méthode utilisée (LBM) dans un but de pré-validation.

Pour la présentation de notre mémoire et de nos principaux résultats nous procéderons comme suit. Après une introduction générale, le lecteur trouvera dans le premier chapitre une étude bibliographique sur les méthodes sans maillage. Cette dernière met en parallèle les avantages et les inconvénients ainsi que les principales caractéristiques des techniques existantes. Après une synthèse bibliographique des travaux relatifs aux méthodes sans maillage faite dans le deuxième chapitre. Dans le troisième chapitre nous exposerons la méthodologie et les concepts généraux de la méthode LBM pour l'écoulement diphasique, sa mise en œuvre algorithmique et informatique.

Enfin, dans le quatrième et dernier chapitre nous présenterons les résultats de trois études de cas concernant l'application de la méthode LBM pour :

- Ecoulement multiphasique dans un milieu dispersé homogène.
- Ecoulement multiphasique autour d'un arrangement de carrés homogènes fixes (réseau capillaire).
- Ecoulement multiphasique dans un milieu poreux réel reconstruit à partir de traitement d'image.

CHAPITRE 1 *Méthodes sans maillage : principes et état de l'art*

I.1. Introduction

I.1.1. Généralités sur les méthodes sans maillage. Historique

Les méthodes numériques classiques de résolution des équations aux dérivées partielles, permettent la recherche d'une solution approchée du problème considéré dans un espace fonctionnel de dimension finie, en se basant généralement sur une discrétisation spatiale du domaine. Ceci permet d'obtenir un nombre fini d'inconnues du problème. Contrairement à l'approche avec maillage dans laquelle l'approximation est liée aux éléments ou aux volumes, dans les méthodes sans maillage l'approximation est construite exclusivement à l'aide des données nodales. Ces caractéristiques offrent de nombreux avantages comme nous le détaillerons dans la section 1.2. Même si certaines approches sans maillage à l'exemple des méthodes des éléments naturels (NEM) utilisent un maillage sous-jacent (pour définir les connectivités et réaliser une partition du domaine pour l'intégration), celui-ci n'est pas utilisé pour construire l'interpolation. Par conséquent, sa qualité n'influe pas sur la précision des résultats. En contrepartie, un certain nombre de difficultés apparaissent dans les méthodes sans maillage, comme nous le montrons dans la section 1.3. Néanmoins, ces techniques semblent prometteuses pour remédier aux difficultés inhérentes à l'utilisation des méthodes de résolution classiques. Nous présentons dans ce qui suit un bref historique des méthodes sans maillage les plus utilisées.

Bien que la mise au point des premières méthodes sans maillage remonte à la fin des années soixante-dix, l'effort de recherche consacré à ce thème jusqu'au début des années 90 est resté très faible. Les méthodes sans maillage furent initiées en 1977 avec la méthode *Smooth Particle Hydrodynamics* (SPH) [1]. A l'origine, elle fut développée pour la simulation des phénomènes astrophysiques non bornés à l'exemple des explosions d'étoiles ou encore des mouvements de poussières dans les nuages stellaires. Le nombre de publications consacrées à cette méthode était alors modeste. Seules quelques améliorations furent apportées à cette période, sans réelles études concernant la qualité de la solution obtenue pour la résolution des équations aux dérivées partielles. Plus tard, Swegle, Hicks and Attaway [2] ont montré l'origine de certains problèmes numériques de la méthode, tels que le phénomène d'instabilité sur les bords libres (*tensile instability*) et ont proposé d'inclure une viscosité artificielle pour stabiliser le phénomène. L'avance la plus notable fut l'introduction d'une fonction de correction dans le noyau d'approximation par Liu *et al.* [3] pour pouvoir obtenir la consistance linéaire ou d'ordres supérieurs. Liu *et al.* ont également étendu la méthode SPH aux

formulations variationnelles alors qu'elle est du type collocation. L'introduction d'une fonction de correction dans le noyau d'approximation des méthodes SPH a donné naissance à la méthode *Reproducing Kernel Particle Method* (RKPM) et la méthode corrected-SPH [3].

Partant d'une idée différente, Nayroles, Thouzot et Villon [4] ont proposé d'utiliser une approximation de type moindres carrés mobiles dans un schéma de discrétisation de type Galerkin. La méthode fut alors baptisée *méthode des éléments diffus* (DEM). La technique dite Élément Free Galerkin (EFG) [5] proposée par Belytschko *et al.* Est une modification de la méthode des éléments diffus dans laquelle les dérivées des fonctions de forme sont calculées exactement (il faut souligner cependant que les dérivées au sens diffus sont plus simples à calculer et convergent vers les dérivées exactes). Cette classe de méthodes est convergente et stable, mais plus coûteuse que la méthode SPH.

Une autre approche repose sur la physique statistique, au niveau "mésoscopique" de l'évolution des "particules" dont est constitué le fluide. Cette méthode s'est développée depuis les années 60 surtout dans l'esprit d'obtenir des informations très détaillées sur la dynamique locale des fluides et de contribuer à la compréhension des équations d'état et des coefficients de transport. Des versions simplifiées de cette approche mésoscopique ont été développées pour étudier les écoulements dans les gaz raréfiés. D'autres types de simplifications ont été proposés pour permettre la simulation d'écoulements de fluides visqueux, en particulier la méthode Lattice Boltzmann sur réseau (LBM).

Une autre méthode sans maillage basée sur des principes totalement différents a émergé très récemment sous le nom de *méthode des éléments naturels* [6]. Cette technique utilise des fonctions de forme très particulières, basées sur les constructions géométriques telles que le *diagramme de Voronoi* et la *triangulation de Delaunay*.

I.1.2. Avantage des méthodes sans maillage

1. Le principal avantage des méthodes sans maillage dans la simulation des procédés est la possibilité de traiter plus facilement les problèmes en grandes transformations que dans les méthodes classiques. Les performances des méthodes meshless sont expliquées par les facteurs suivants :

(a) dans les formulations lagrangiennes, totales, l'opérateur gradient de la transformation calcule en un point d'intégration est construit sur la base d'un voisinage de nœuds généralement plus important que les seuls nœuds de l'élément dans la MEF. Ainsi, la matrice jacobienne associée ne deviendra singulière que pour des distorsions beaucoup plus importantes du voisinage [7].

(b) la qualité de la solution est beaucoup moins sensible à la position relative des nœuds, autorisant, de construire la solution à partir de positions relatives entre les nœuds, ce qui interdites dans les méthodes classique.

(c) la non-nécessité de construire un maillage pour la construction de l'approximation permet de traiter des domaines de géométries complexes, en 2D et en 3D, en utilisant seulement le nuage de nœuds [8].

2. Un autre avantage majeur des méthodes sans maillage est la possibilité d'insérer, ou de retirer des nœuds très facilement, la position relative des nœuds entre eux étant très peu influente sur la qualité de la solution.

I.1.3. Inconvénients des méthodes sans maillage

1. Le principal défaut de la plupart des méthodes sans maillage " classiques " (SPH, RKPM, DEM, EFG) est la difficulté liée à l'imposition des conditions aux limites. En effet, pour pouvoir imposer les conditions aux limites de type Dirichlet de manière directe comme dans la méthode des éléments finis, il est nécessaire (a) que l'approximation construite passe par les valeurs nodales (interpolation stricte) et que l'influence des nœuds intérieurs s'annule sur le bord du domaine. Or la fonction d'approximation construite par les méthodes sans maillage les plus répandues ne vérifient aucune de ces deux conditions.

2. Le second inconvénient est lié à l'intégration numérique. En effet, dans la majorité des cas, les fonctions de forme meshless ne sont pas polynomiales mais rationnelles, ce qui rend les schémas d'intégration de type Gauss non-optimaux. Dolbow et Belytschko [9] ont prouvé que des schémas d'intégration très fins sont nécessaires pour minimiser l'erreur due à la non-coïncidence entre le support des fonctions de forme et les cellules d'intégrations, entraînant des couts de calcul excessifs a cause d'un nombre de points d'intégrations nécessaire très important.

3. Un autre inconvénient de ces techniques est lie au support des fonctions de forme. Dans la plupart de ces approches, le support, ou domaine d'influence d'un nœud est défini par une sphère ou un parallélépipède centre sur le nœud. Comme il en est discute dans Liu et al. Dans [3], ce support doit couvrir un nombre suffisant de particules pour que la méthode soit stable et donc être suffisamment large. Au contraire, un support trop large entraine des couts de calcul plus importants et une qualité fortement dégradée. L'utilisation d'un support fixe dans les problèmes ou le nuage de nœuds subit de fortes distorsions peut entrainer l'instabilité de la méthode. Le réajustement continu de la taille du support au cours de la simulation peut permettre d'éviter ce problème mais entraine des problèmes de robustesse.

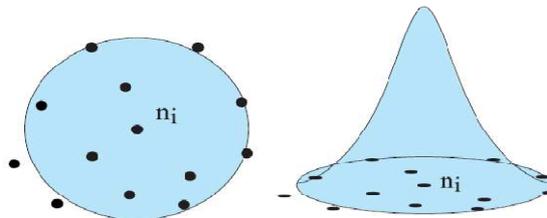


FIG I.1 Support et fonction poids associée aux fonctions de forme moindres carres mobiles, (d'après [19]).

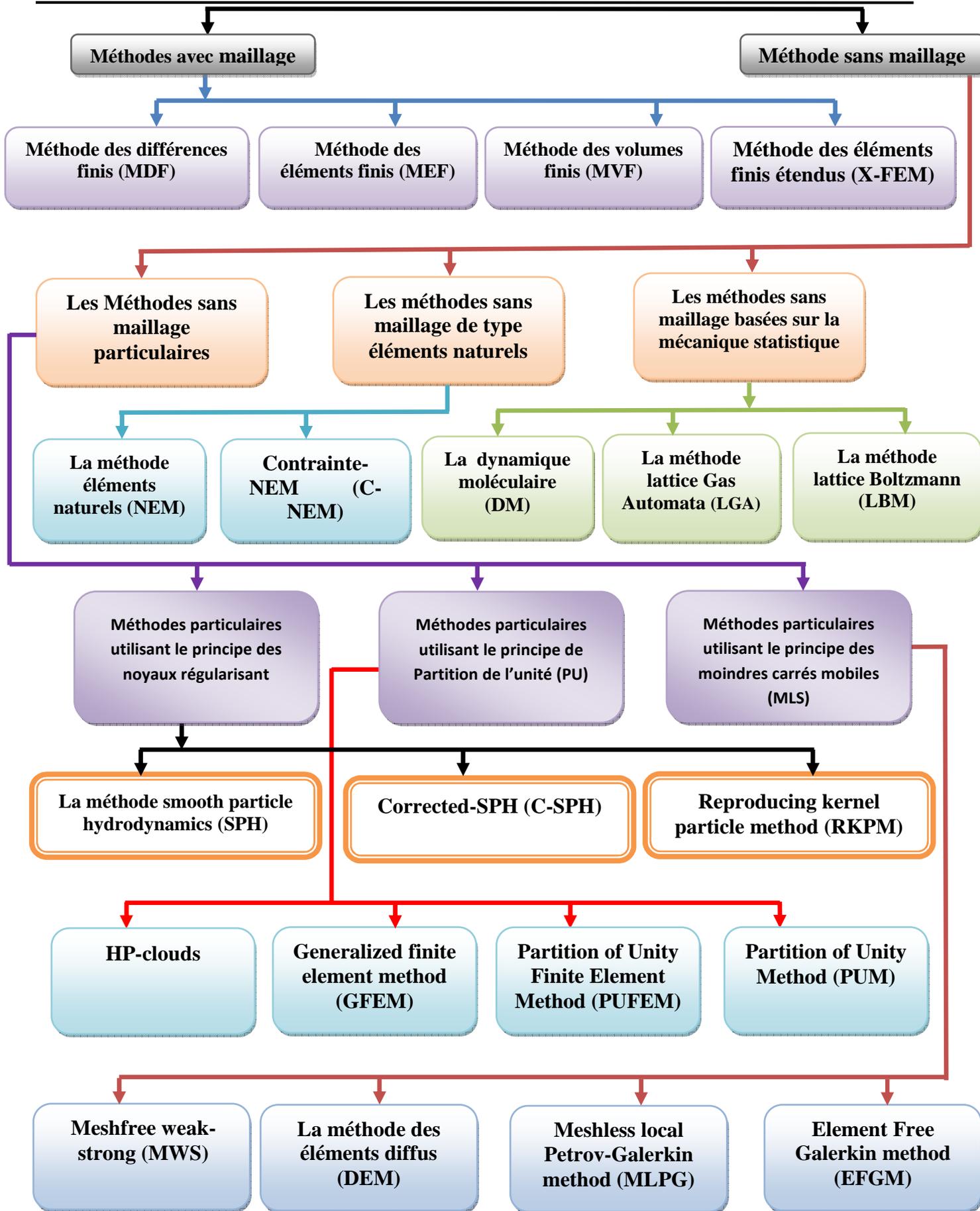


Fig. I.2 : Différentes méthodes numériques de simulation.

I.2. Méthodes sans maillage particulières

I.2.1. Méthodes particulières utilisant le principe des noyaux régularisant

I.2.1.1. Méthode Smooth Particle Hydrodynamics (SPH)

On présente dans cette partie, les caractéristiques et les éléments de base de la méthode particulière SPH [10, 11]. Cette dernière est une méthode particulière lagrangienne de simulation d'écoulement, dans laquelle la matière est représentée à l'échelle mésoscopique ou microscopique par un ensemble de (n) particules de masse m_i , de vitesse v_i et d'autres propriétés hydrodynamiques comme la pression p_i , la température T_i , l'énergie interne U_i , l'entropie ... etc.

1) Caractéristiques

La méthode SPH, est une méthode sans maillage, particulière et Lagrangienne. Ces trois caractéristiques sont décrites ci-dessous.

- **Méthode sans maillage**

Un maillage est une discrétisation spatiale d'un milieu continu. La figure I.2 présente un exemple de maillage eulérien bidimensionnel. Lors d'une simulation, le maillage reste fixe et les variables à chaque nœud du maillage sont calculées.

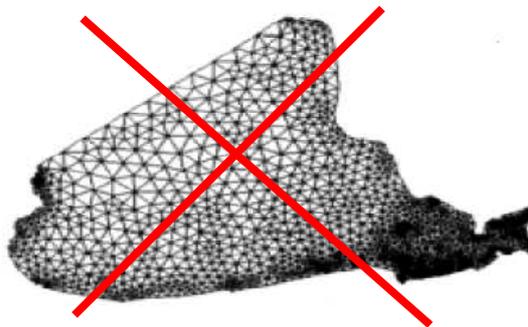


FIG I.3 Maillage eulérien bidimensionnel, (d'après [10]).

L'idée de base des méthodes sans maillage est d'obtenir une solution numérique précise et stable pour un ensemble d'équations intégrales ou de dérivées partielles pour un ensemble de particules arbitrairement distribuées avec n'importe quelles conditions aux frontières et sans avoir recours à un maillage qui définit les connections entre les particules.

- **Méthode particulière**

La méthode particulière est un type de méthode sans maillage dans laquelle un nombre fini de particules discrètes sont utilisées pour représenter l'état d'un système et suivre son mouvement. Chaque particule peut représenter un objet physique discret ou une partie d'un domaine continu.

- **Méthode Lagrangienne**

La figure I.3 montre un volume de contrôle de dimensions finies, de volume V et de surface S placé dans un écoulement. Dans l'approche Eulérienne, ce volume est fixe. Le bilan entre les quantités entrantes et sortantes du volume de contrôle doit satisfaire les lois de conservation. Dans l'approche Lagrangienne, le volume de contrôle (volume élémentaire) se déplace avec le fluide de manière à ce que la même portion de fluide demeure à l'intérieur du volume. Ainsi, bien que l'écoulement crée l'expansion, la compression et la déformation du volume de contrôle, la masse de fluide à l'intérieur du volume demeure inchangée. En appliquant les lois de conservation au fluide à l'intérieur du volume de contrôle Lagrangien, on obtient les équations de base sous forme intégrale.

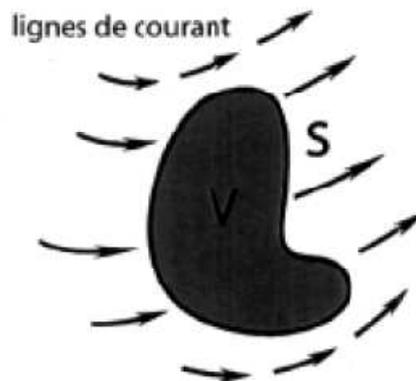


FIG I.4 Volume de contrôle Lagrangien, (d'après [10]).

2) Concepts fondamentaux

La formulation de la méthode SPH se divise en deux étapes. La première est la représentation intégrale de la fonction (et de sa dérivée) et la seconde est l'approximation particulière.

- **Représentation intégrale de la fonction**

La valeur d'une fonction f à une position x est donnée par la représentation intégrale suivante :

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x') \delta(x - x') dx' \quad (I.1)$$

Où Ω représente le domaine d'intégration, x' est une position appartenant au domaine Ω et $\delta(x - x')$ est la fonction delta de Dirac :

$$\delta(x - x') = \begin{cases} 1 & x = x' \\ 0 & x \neq x' \end{cases} \quad (I.2)$$

En remplaçant la fonction delta de Dirac par une fonction poids $W(x-x', h)$, la représentation intégrale de $f(x)$ devient :

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x')W(x-x', h)dx' \quad (I.3)$$

Où h est la longueur définissant l'aire d'influence de la fonction poids W . Il est à noter que, puisque W n'est pas la fonction delta de Dirac, l'équation (I.3) est une approximation de la représentation intégrale. Selon la convention SPH, cette approximation est symbolisée par des crochets $\langle \rangle$. L'équation I.3 devient donc :

$$\langle f(x) \rangle = \int_{\Omega} f(x')W(x-x', h)dx' \quad (I.4)$$

• Fonction de poids

La fonction poids joue un rôle important dans la méthode SPH puisqu'elle détermine la précision de la représentation intégrale d'une fonction. Elle doit posséder certaines propriétés afin de représenter convenablement une fonction $f(x)$. Il doit s'agir d'une fonction paire et strictement positive. Plus x' est éloignée de x , plus la valeur de la fonction poids doit être faible.

De plus, la fonction poids doit être normalisée (condition d'unité) afin d'assurer la consistance de la formulation :

$$\int_{\Omega} W(x-x', h)dx' = 1 \quad (I.5)$$

Ensuite, la fonction poids doit correspondre à la fonction delta de Dirac lorsque la longueur d'influence h tend vers zéro :

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(x-x', h) = \delta(x-x') \quad (I.6)$$

Finalement, la fonction poids doit respecter la condition de compacité :

$$W(x-x', h) = 0 \text{ pour } |x-x'| > \kappa h \quad (I.7)$$

Où κ est un facteur d'échelle qui définit la limite d'influence de la fonction poids.

D'un point de vue numérique, lorsque la fonction de poids W a un support compact, c.-à-d. :

$$\begin{cases} W(x) \neq 0 & \text{si } a \leq x \leq b \\ W(x) = 0 & \text{si non} \end{cases} \quad (I.8)$$

Les algorithmes de recherche de voisins peuvent être utilisés pour accélérer le calcul itératif. Plusieurs expressions de la fonction poids W sont utilisées dans la littérature, le premier choix est la fonction gaussienne qui est donnée en 2D par l'expression :

$$W(r, h) = \frac{1}{\pi h^2} e^{-\left(\frac{r}{h}\right)^2} \quad (I.9)$$

C'est une fonction à décroissance rapide, mais elle n'est pas à support compact, par conséquent, un nombre important de particules doit être pris en compte dans le calcul de l'intégrale de l'équation (I.1), pour minimiser l'erreur issue de la troncature.

Le deuxième type de fonctions poids utilisées est la fonction polynomiale Spline définie par morceaux :

$$W(r, h) = \alpha D \begin{cases} \frac{2}{3} - \left(\frac{r}{h}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{r}{h}\right)^3 & 0 \leq \frac{r}{h} < 1 \\ \frac{1}{6}\left(2 - \left(\frac{r}{h}\right)\right)^3 & 1 \leq \frac{r}{h} < 2 \\ 0 & \frac{r}{h} \geq 2 \end{cases} \quad (\text{I.10})$$

Avec αD un coefficient de normalisation dont l'expression dépend de la dimension de l'espace, il est de $\alpha D \frac{1}{h}$, $\frac{15}{7\pi h^2}$, ou $\frac{3}{2\pi h^3}$ selon les dimensions de l'espace 1D, 2D ou 3D. Le choix de l'ordre de la fonction Spline dépend du problème étudié et les variations de la fonction à interpoler.

- **Longueur de lissage**

La longueur de lissage h [12], ou la distance d'influence, est définie comme étant le rayon h du domaine d'influence autour de la particule considérée. Le choix d'une petite longueur rend le résultat du calcul peu précis et rend le schéma instable. Par contre, lorsque h est choisie grand, la solution est diffuse et les formes locales de la solution ne sont pas captées correctement. D'une façon générale, sa valeur détermine le nombre de voisins à prendre en compte dans le calcul. Cette longueur est souvent choisie telle que $h = 2\delta x$. (Avec δx , la distance initiale entre les particules).

- **Représentation intégrale de la dérivée de la fonction**

L'approximation de la divergence de la fonction $\nabla f(x)$ est obtenue en substituant $f(x)$ par $\nabla f(x)$ dans l'équation (I.4) :

$$\langle \nabla f(x) \rangle = \int_{\Omega} [\nabla f(x')] W(x - x', h) dx' \quad (\text{I.11})$$

En se basant sur la propriété suivante [13] :

$$\nabla(fv) = (\nabla f)v + f(\nabla v) \quad (\text{I.12})$$

L'équation (I.11) devient :

$$\langle \nabla f(x) \rangle = \int_{\Omega} \nabla[f(x')] W(x - x', h) dx' - \int_{\Omega} f(x') \nabla W(x - x', h) dx' \quad (\text{I.13})$$

La première équation intégrale du côté droit de l'équation (I.13) peut être convertie en une intégrale sur une surface S délimitant le domaine d'intégration Ω en utilisant le théorème de divergence de Gauss [14] Ainsi, l'équation (I.13) devient :

$$\langle \nabla f(x) \rangle = \int_S f(x') W(x - x', h) \cdot \vec{n} \cdot ds - \int_{\Omega} f(x') \nabla W(x - x', h) dx' \quad (\text{I.14})$$

Où \vec{n} est le vecteur unitaire normal à la surface S.

En appliquant la condition de compacité exprimée par l'équation (I.7) pour les particules dont le domaine d'influence est situé exclusivement à l'intérieur du domaine du problème, l'intégrale sur la surface S de l'équation (I.14) devient égale à zéro. Ainsi, l'équation (I.14) se simplifie :

$$\langle \nabla f(x) \rangle = - \int_{\Omega} f(x') \nabla W(x - x', h) dx' \quad (\text{I.15})$$

• Représentation particulière

Dans la méthode SPH, un système est représenté par un nombre fini de particules qui possèdent une masse et occupent un espace. La représentation intégrale continue d'équations (I.3) peut être discrétisée sous la forme d'une sommation sur toutes les particules à l'intérieur du domaine d'influence. La figure (I.4) montre le domaine d'influence d'une particule i. L'indice j désigne une particule voisine de la particule i.

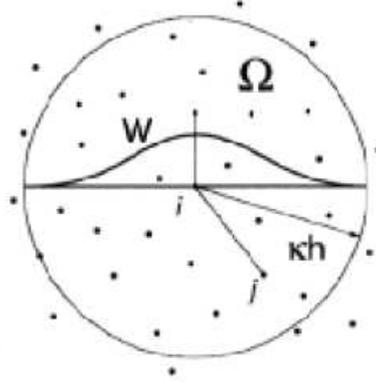


FIG I.5 -Domaine d'influence d'une particule, (d'après [10]).

L'intégrale de l'équation (I.3) peut être approximée par une quadrature qui englobe les particules voisines de la particule (i) selon l'expression :

$$f(x_i) = \sum_{j=1}^n f(x_j) W_{x_i}(x_j) dV_j \quad (\text{I.16})$$

Or le volume élémentaire dV_j associée à chaque particule, est égale à $\frac{m_j}{\rho_j}$, ce qui donne :

$$f(x_i) = \sum_{j=1}^n \frac{m_j}{\rho_j} f_j W_{ij} \quad (\text{I.17})$$

Dans le cas où la masse du fluide est constante on peut écrire :

$$f(x_i) = \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^n m_j f_j W_{ij} \quad (\text{I.18})$$

Par exemple, la température en i peut être calculée par la formule suivante :

$$T_i = \sum_{j=1}^n \frac{m_j}{\rho_j} T_j W_{ij} \quad (\text{I.19})$$

De la même façon, la masse volumique est donnée par la somme :

$$\rho_i = \sum_{j=1}^n m_j W_{ij} \quad (\text{I.20})$$

Le calcul du gradient de la grandeur f par la méthode SPH revient à calculer le gradient de la fonction poids W , c.-à-d. :

$$\nabla f = \sum_{j=1}^n \frac{m_j}{\rho_j} f_j \nabla W_{ij} \quad (\text{I.21})$$

Cette expression du gradient, facile à réaliser, est un avantage de la méthode SPH.

I.2.1.2. Méthode Reproducing Kernel Particle Method (RKPM) et Corrected-SPH (C-SPH)

Dans le cas général, la méthode SPH n'est pas consistante à l'ordre 1. Pour la restauration de la consistance on fait une correction de la fonction de poids par l'introduction d'une fonction de correction C :

$$f(x) = \int_{\Omega} f(x') C(x, x - x') W(x - x', h) dx' \quad (\text{I.22})$$

Sous la forme suivante :

$$C(x, x - x') = \beta_0(x) + \beta_1(x)(x - x') + \beta_2(x)(x - x')^2 + \dots \quad (\text{I.23})$$

Par identification des paramètres β_i , la fonction de correction permet d'imposer la consistance linéaire. Il faut pour cela résoudre le système suivant :

$$\begin{pmatrix} m_0(x) & m_1(x) & \dots & m_k(x) \\ m_1(x) & m_2(x) & \dots & m_{k+1}(x) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ m_k(x) & m_{k+1}(x) & \dots & m_{2k}(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0(x) \\ \beta_2(x) \\ \dots \\ \beta_k(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.24})$$

$$m_p(x) = \sum_{i=1}^n (x - x')^p \phi_i(x) \quad (\text{I.25})$$

$$\phi_i(x) = \frac{m_j}{\rho_j} W_{ij} \quad \forall x \in \Omega \quad (\text{I.26})$$

Le principe de la fonction de correction peut aussi être utilisé pour minimiser l'influence des nœuds intérieurs sur le bord du domaine pour faciliter l'imposition des conditions aux limites de Dirichlet. Cette technique est utilisée dans les méthodes reproducing kernel particle method (RKPM) et Corrected-SPH (C-SPH) [3].

L'inconvénient de cette technique est l'accroissement de la complexité du calcul des fonctions de forme, avec pour conséquence des temps de calcul accrus.

I.2.2. Méthodes particulières utilisant le principe des moindres carrés mobiles

I.2.2.1. Définition de l'approximation MLS

Dans la méthode [15] moving least squares (MLS), la solution est décomposée sur une base de fonctions polynomiales $(p_i) i \in \{1, \dots, m\}$ par exemple tous les monômes de degré inférieur ou égale à 2, soit en 2D $p^t(x, y) = (1, x, y, x^2, y^2, xy)$ qu'on peut enrichir en fonction du problème (par exemple pour prendre en compte des discontinuités ou des singularités connues de la solution) :

$$f(x) = p^t(x)a(x) = \sum_i a_i(x) p_i(x) \quad (I.27)$$

Où les a_i sont des coefficients hétérogènes. Le nom de la méthode vient du fait que les coefficients sont calculés par une méthode de moindres carrés. Les fonctions poids sont introduites à cette occasion. Elles sont similaires aux noyaux régularisant de la section 2.1. On appelle domaine d'influence du point x' le support de la fonction $W(x - x', h)$.

Le problème de l'interpolation consiste alors en un problème de minimisation :

$$\min_a \frac{1}{2} \sum_i W(x - x', h) (p^t(x')a(x') - f_i)^2 \quad (I.28)$$

Pour cela, on écrit une approximation locale de f par rapport à un point x' ; autrement dit, pour identifier les coefficients $a(x)$, on fixe la base de fonctions $p(x')$:

$$f_{loc}(x - x') = p^t(x')a(x) = \sum_i a_i(x) p_i(x') \quad (I.29)$$

Dans la pratique, on s'intéresse aux points $x' = X_j, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. On cherche alors les coefficients $a_i(x)$ en minimisant la différence entre l'approximation (I.29) et les valeurs f_i connues par une méthode de moindres carrés (où les $W(x - x', h)$ sont les fonctions poids). Cela revient à minimiser la fonctionnelle $j_x(a)$:

$$j_x(a) = \sum_i W(x - x', h) (f_{loc}(x - x') - f_i)^2 = \sum_i W(x - x', h) (p^t(x')a(x) - f_i)^2 \quad (I.30)$$

On cherche alors à annuler $Dj_x(a)$:

$$\begin{aligned} Dj_x(a) = 0 &\Leftrightarrow \sum_i W(x - x', h) p(x') (p^t(x')a(x) - f_i) = 0 \\ \Leftrightarrow \sum_i W(x - x', h) p(x') p^t(x') a(x) &= \sum_i W(x - x', h) p(x') f_i \\ \Leftrightarrow A(x)a(x) &= b(x) \end{aligned} \quad (I.31)$$

avec

$$A(x) = \sum_i W(x - x', h) p(x') p^t(x') \text{ et } b(x) = \sum_i W(x - x', h) p(x') f_i$$

La matrice $A(x)$ est carrée, et sa taille est égale à m (nombre de fonctions de base p_i). Pour que le problème admette une solution unique, la matrice A doit être inversible. Si on note $n(x)$ le nombre de voisins de x , on peut montrer que, si au moins m (parmi les $n(x)$) matrices des produits dyadiques $p(x')p^t(x')$ sont linéairement indépendantes, alors la matrice $A(x)$ est symétrique définie positive. Cette condition porte sur le nombre et la configuration des points x' .

On en déduit que :

$$\begin{aligned} f(x) &= p^t(x)a(x) = p^t(x)A^{-1}b(x) = \sum_i p^t(x)A^{-1}W(x-x',h)p(x')f_i \\ &= p^t(x)A^{-1}(x) \left(\sum_i W(x-x',h)p(x')f_i \right) \end{aligned} \quad (I.32)$$

Que nous réécrivons

$$f(x) = \sum_{i=1}^N \phi_i(x) f_i(x) \quad (I.33)$$

Les fonctions de forme en x sont donc :

$$\begin{aligned} \phi_i(x) &= p^t(x)A^{-1}(x)W(x-x',h)p(x') \quad \forall i \in \{1, \dots, m\} \\ \phi_i(x) &= c^t(x)(x)W(x-x',h)p(x') \quad \forall i \in \{1, \dots, m\} \end{aligned} \quad (I.34)$$

avec $c(x) = A^{-1}(x)p(x)$

Une illustration [16] à une dimension de l'utilisation des fonctions de forme MLS est fournie à la figure I.5. Cinq nœuds sont uniformément répartis sur l'intervalle $[0, 4]$. Les valeurs d'une fonction à approcher y sont connues :

x_i	0	1	2	3	4
f_i	1	3	4	3	2.5

Dans la colonne de gauche, l'interpolation par éléments finis est illustrée pour comparer. La figure (a) présente les fonctions de forme des éléments finis linéaires construits sur les nœuds et montre en gras la fonction de forme du nœud central. La figure (b) présente l'interpolation de la fonction inconnue obtenue en multipliant les fonctions de forme par les valeurs connues et en sommant les contributions. Dans la colonne de droite, trois figures illustrent l'approximation MLS. Les fonctions poids $W(x-x',h)(x)$ choisies sont présentées sur la figure (c) en mettant à nouveau en évidence le nœud central. Les fonctions de forme $\phi_i(x)$ construites à l'aide de celles-ci sont présentées sur la figure (d). Enfin, l'approximation MLS de la fonction inconnue, obtenue en multipliant les fonctions de forme par les valeurs connues et en sommant les contributions par application de (I.33), est illustrée sur la figure (e).

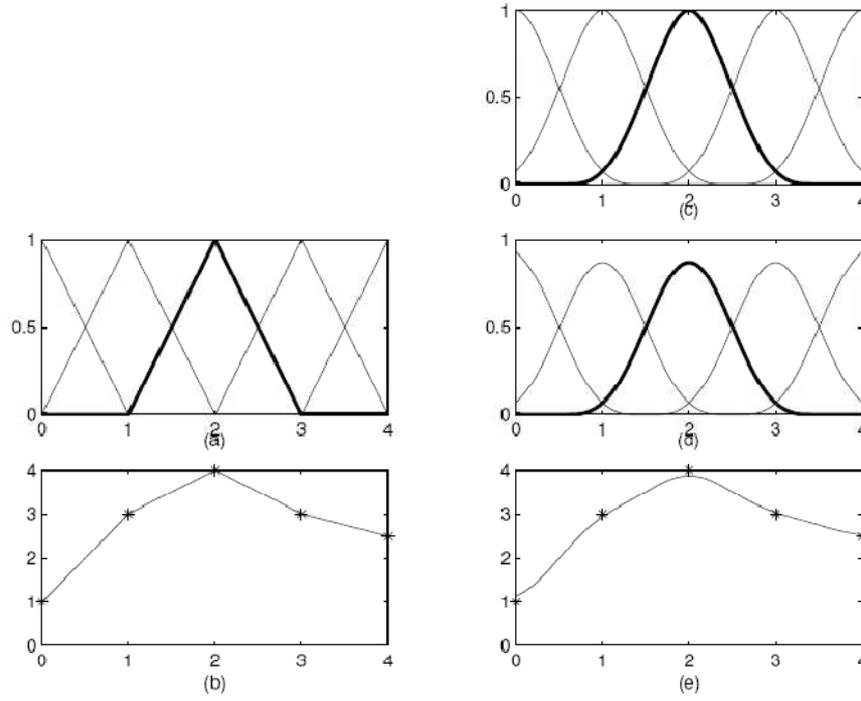


FIG I.6 Interpolation par éléments finis et approximation sans maillage, (d'après [16]).

I.2.2.2. Méthodes DEM (diffuse element method) et EFGM (element-free Galerkin method)

Les fonctions de forme MLS sont utilisées dans deux méthodes de résolution d'PDE : la méthode des éléments diffus (DEM) [4] et la méthode EFGM (Element-free Galerkin method) [5]. Ces méthodes sont très proches, à la différence que les dérivées des fonctions de forme sont calculées de manière approchée dans la première :

$$\frac{\partial f}{\partial x_j}(x) = \frac{\partial p^t}{\partial x_j}(x)a(x) + \underbrace{\frac{\partial p^t(x)}{\partial x_j} \frac{\partial a}{\partial x_j}(x)}_{\text{négligé dans la méthode DEM}} \quad (I.35)$$

1) Dérivées des fonctions de forme

Les termes en gras sont ignorés dans la méthode des éléments diffus.

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial x_j}(x) = \frac{\partial}{\partial x_j}(c^t(x))W(x-x',h)p(x') + \mathbf{c}^t(x) \frac{\partial W}{\partial x_j}(x-x',h)p(x') \quad (I.36)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial x_j}(x) &= \frac{\partial(A^{-1})}{\partial x_j}(x)\mathbf{p}(x) + A^{-1}(x) \frac{\partial p}{\partial x_j}(x) \\ &= -A^{-1} \frac{\partial(A)}{\partial x_j}(x)A^{-1}(x)\mathbf{p}(x) + A^{-1}(x) \frac{\partial p}{\partial x_j}(x) \\ &= A^{-1}(x) \left(-\frac{\partial(A)}{\partial x_j}(x)c(x)\mathbf{p}(x) + A^{-1}(x) \frac{\partial p}{\partial x_j}(x) \right) \end{aligned} \quad (I.37)$$

$$\frac{\partial(A)}{\partial x_j}(x) = \sum_i \frac{\partial W}{\partial x_j}(x - x^i, h) p(x^i) p^t(x^i) \quad (I.38)$$

I.2.3. Méthodes particulières utilisant le principe Partition de l'unité (PU)

I.2.3.1. Définition de l'approximation Partition de l'unité (PU)

Une partition de l'unité sur un domaine Ω borné est définie [15] par la donnée d'une partition du domaine (ensemble fini d'ouverts Ω_k tels que $\Omega_k \in \Omega$ et $\cup_k \Omega_k = \Omega$) et de fonctions u_k continues sur Ω (en général à valeurs dans $[0,1]$) telles que $Supp(u_k) \in \Omega_k$ et

$$\sum_k u_k(x) = 1 \quad \forall x \in \Omega \quad (I.39)$$

Supposons qu'on dispose de fonctions de forme (EF, MLS, SPH ou autre) qui définissent une partition de l'unité, ce qui est équivalent à imposer la consistance à l'ordre 0. On peut alors enrichir l'approximation de la manière suivante :

$$f(x) = \sum_i f_i \phi_i(x) + \sum_j \tilde{f}_j \varphi(x) \phi_j(x) \quad (I.40)$$

Dans le terme ajouté, on peut utiliser qu'un sous-ensemble des points i dans la somme, ou on peut utiliser une autre partition de l'unité à la place des ϕ_j (ce qui permet de réduire la dépendance entre les f_i et les \tilde{f}_j , en prenant des points différents ou des supports différents). Ce faisant, on a ajouté la fonction φ dans l'ensemble des fonctions approchées de manière exacte.

I.2.3.2. Hp-clouds et PUFEM (Partition of Unity Finite Element Method)

Utilise les fonctions de forme EF et des fonctions de base polynomiales [15].

$$f(x) = \sum_j \phi_j(x) \left(f_j + \sum_{k=1}^L P_k(x) a_{jk} \right) \quad (I.41)$$

$$P_k(x) = \phi_j(x) f_j \quad (I.42)$$

I.2.4. Méthodes sans maillage de type éléments naturels

I.2.4.1. Méthode NEM

1) Diagramme de Voronoi, triangulation de Delaunay et voisins naturels

Les notions de voisins naturels et l'interpolation basée sur les éléments naturels ont été introduites par Sibson [17] pour réaliser des interpolations à partir d'ensembles de points très irréguliers. Cette interpolation est basée sur les constructions géométriques connues sous le nom de diagramme de Voronoi et de triangulation de Delaunay. Le concept de diagramme de Voronoi a été introduit à l'origine par les mathématiciens

(Dirichlet, 1850; Voronoi, 1908) et plus tard applique dans de nombreux domaines scientifiques. Le diagramme de Voronoi est défini de la manière suivante : un diagramme de Voronoi d'un ensemble de points dans R^m divise l'espace de dimension m en régions T_i , chacune associée à un nœud n_i , telles que tout point à l'intérieur d'une de ces régions définissant la cellule. Un exemple de diagramme de Voronoi dans le cas 2D est présent dans la figure I.6.

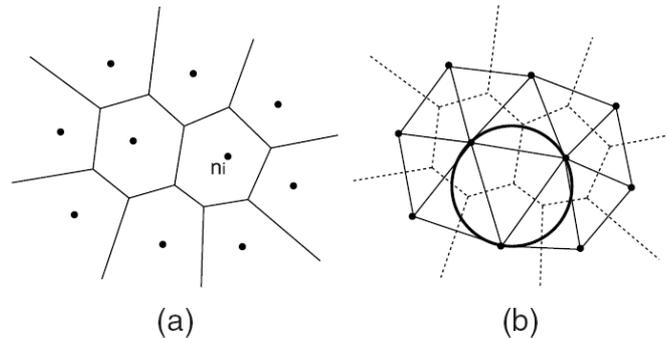


FIG. I.7 (a) Diagramme de Voronoi d'un ensemble de points dans le plan; (b) triangulation de Delaunay associée et cercle circonscrit à un triangle, (d'après [19]).

Le diagramme de Voronoi est unique pour un ensemble de points donné. Il réalise une partition de l'espace et peut être étendu à n'importe quelle dimension. Le diagramme de Voronoi est formellement défini par :

$$T_i = \{x \in R^m : d(x, x_i) < d(x, x_j), \forall j \neq i\} \quad \forall i \quad (I.43)$$

Où T_i est une cellule de Voronoi associée à un nœud n_i , x est la position d'un point quelconque, x_i définit les coordonnées du nœud n_i , et $d(x, x_j)$ est la distance entre le nœud n_j et un point x .

En reliant les nœuds partageant une face de cellule de Voronoi commune, on obtient la triangulation de Delaunay (introduite par Voronoi (1908) et étendue par Delaunay (1934)) (figure I.6 (b)). Les cercles circonscrits aux triangles de Delaunay ont la propriété de ne contenir aucun nœud. Les cellules de Voronoi T_i sont des polygones (polyèdres en 3D) strictement convexes, et non bornes pour les nœuds présents sur l'enveloppe convexe du domaine. Enfin les sommets des cellules de Voronoi sont les orthocentres des triangles de Delaunay, centres des cercles circonscrits à ces triangles. Ces définitions se généralisent en 3D (les triangles sont alors des tétraèdres, les cercles des sphères, et les polygones de Voronoi des polyèdres).

Les voisins naturels d'un nœud sont les nœuds associés aux cellules de Voronoi voisines, ou encore qui sont connectés au nœud par une arête d'un triangle (tétraèdre en 3D) de Delaunay. On peut remarquer que dans tous les cas, même lorsque la disposition des nœuds est irrégulière, que la distance entre nœuds est importante dans certaines zones ou encore que la distribution nodale est fortement anisotrope, que l'ensemble des voisins naturels d'un nœud représente toujours le meilleur choix possible de nœuds voisins. Ces nœuds sont donc de bons candidats pour définir un schéma d'interpolation locale.

2) Fonctions de forme éléments naturels

Les fonctions de forme éléments naturels ont été introduites par Sibson [17] pour construire une interpolation à partir de nuages de nœuds quelconques. Les concepts de voisin le plus proche et de voisins naturels sont associés aux cellules de Voronoï décrites précédemment, appelées encore cellules du premier ordre. Par extension, on peut définir des cellules de Voronoï d'ordre supérieur (à l'ordre k , $k > 1$). Le cas de l'ordre 2 a un intérêt particulier. Une cellule de Voronoï du second ordre T_{ij} est associée à un couple de nœuds (k nœuds pour l'ordre k), telle que T_{ij} est la zone dans laquelle tout point x a pour plus proche voisin le nœud n_i et pour deuxième voisin le plus proche le nœud n_j . La cellule du second ordre T_{ij} est définie formellement par :

$$T_{ij} = \{x \in R^m : d(x, x_i) < d(x, x_j) < d(x, x_k), \forall k \neq i, \forall k \neq j, \quad j \neq i\} \quad (\text{I.44})$$

Si l'on considère l'exemple 2D de la figure I.7, la cellule du premier ordre T_x associée au point x est le polygone (bcdf) et la cellule du second ordre T_{xi} associée au point x et au nœud n_i est le polygone (abcd).

Pour calculer la valeur de l'interpolation en un point x , on construit la cellule de Voronoï associée au point x dans le diagramme de Voronoï du nuage de points.

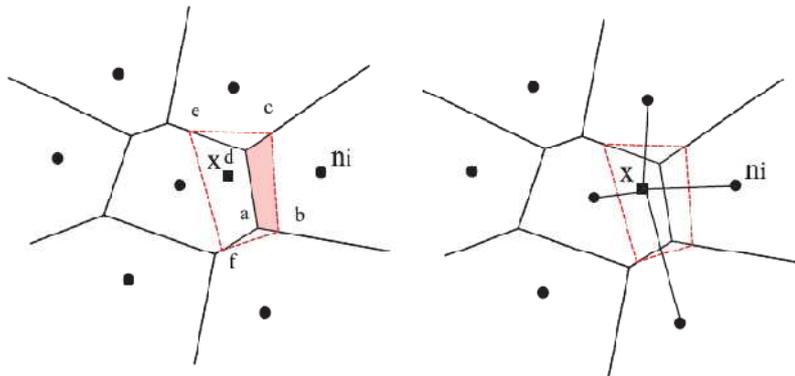


FIG. I.8 Calcul des fonctions de forme de Sibson (à gauche) et de Laplace (à droite), (d'après [19]).

• Fonctions de forme de Sibson

Soit k_x une mesure, (longueur en 1D, aire en 2D, volume en 3D) de la cellule du premier ordre T_x et k_{xi} la mesure de la cellule du second ordre T_{xi} . La fonction de forme calculée au point x associée au nœud n_i est défini comme le rapport entre k_{xi} et k_x , soit :

$$\phi_i(x) = \frac{k_{xi}}{k_x}, \quad k_x = \sum_{i=1}^n k_{xi} \quad (\text{I.45})$$

Si l'on considère l'exemple 2D de la figure I.7 (gauche), la fonction de forme calculée en x et associée au nœud n_i est donnée par :

$$\phi_i(x) = \frac{\text{Aire}(abcd)}{\text{Aire}(bcef)} \quad (\text{I.46})$$

- **Fonctions de forme de Laplace (ou non-Sibsoniennes)**

Il existe d'autres fonctions de forme similaires de type éléments naturels, appelées fonctions de forme de Laplace ou fonctions de forme non-Sibsoniennes [18]. Soit f_i la mesure de la face de Voronoi (longueur en 2D, aire en 3D) séparant le point x du nœud n_i et d_i la distance euclidienne entre x et n_i (figure. I.7 (droite)). Les fonctions de forme sont alors données par l'expression suivante :

$$\phi_i(x) = \frac{\alpha_i(x)}{\sum_{i=1}^n \alpha_i(x)}, \quad \alpha_i(x) = \frac{f_i(x)}{d_i(x)} \quad (\text{I.47})$$

Où n est le nombre de voisins naturels. Les fonctions de forme de Laplace sont moins coûteuses à calculer que les fonctions de forme de Sibson, car elles ne nécessitent que l'évaluation de longueurs (aires en 3D), alors que les fonctions de forme de Sibson nécessitent l'évaluation des aires (volumes en 3D) des intersections entre cellules de Voronoi.

I.2.4.2.Méthode C-NEM

Pour remédier au problème des bords non convexes, la solution la plus simple consiste à utiliser la triangulation de Delaunay contrainte associée à un critère de visibilité. La triangulation de Delaunay contrainte permet d'imposer les arêtes du bord dans la liste des arêtes de la triangulation. Le critère de visibilité permet d'éviter que des points situés de part et d'autre d'une frontière interne du modèle ne s'influencent mutuellement (figure I.8). Ainsi, deux points situés de part et d'autre d'une frontière du modèle ne pourront pas être des voisins naturels. La méthode NEM devient alors C-NEM (contraint-NEM) [19]. De cette manière, comme sur un bord convexe, les cellules de Voronoi associées aux points de la frontière sont toutes infinies dans la direction de la normale extérieure au domaine, et leurs éventuelles intersections ne sont pas prises en compte puisque les points ne sont pas considérés comme voisins naturels. Ce critère de visibilité, qui tronque artificiellement l'ensemble des voisins naturels d'un nœud, est matérialisé sur la figure I.8 (en bas) par des lignes en pointillés. On constate que les sommets n_1 et n_4 ne sont plus voisins naturels et que, leurs cellules de Voronoi n'étant pas bornées, l'influence que pourraient avoir les nœuds intérieurs (par exemple l'influence de n_2 sur n_1) disparaît.

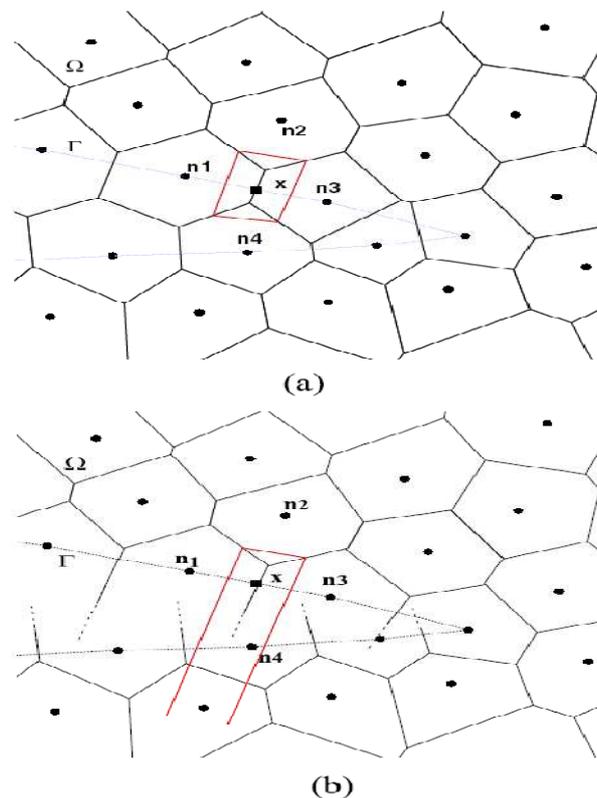


FIG. I.9: Triangulation de Delaunay non contrainte (en haut) ou contrainte par les arêtes de la frontière et un critère de visibilité (en bas). D'après [19].

I.2.5. Méthodes sans maillage basées sur la mécanique statistique

L'écoulement d'un fluide peut se présenter sous une variété de configurations s'étendant des écoulements simples tels que l'écoulement laminaire dans une conduite (écoulement de poiseuille) aux écoulements plus complexes tels que les écoulements turbulents, les écoulements multiphasiques, les écoulements dans les milieux poreux, les écoulements des fluides complexes, etc.

Plusieurs configurations d'écoulement ont été étudiées expérimentalement, cependant il est avantageux de développer des modèles numériques capables de simuler ces écoulements. Les méthodes numériques classiques pour la simulation des fluides sont basées essentiellement sur la résolution des équations de Navier-Stokes. Pendant ces dix dernières années, la méthode de dynamique moléculaire (DM), la méthode de gaz sur réseau (LGA) et la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) sont apparues comme de nouvelles approches numériques alternative basées sur la mécanique statistique [20].

I.2.5.1. Méthode de dynamique moléculaire

Il est bien connu qu'un fluide est composé par des atomes/molécules discret. Par conséquent, la trace des mouvements et les collisions de toutes les molécules devient une manière évidente de la simulation d'écoulement. C'est l'approche de dynamique moléculaire et il est souvent utilisé en science des matériaux et la recherche biologique, en particulier pour étudier la structure, la dynamique et la thermodynamique des molécules biologiques [21]. La méthode de DM est déterminée: à chaque pas de temps, la nouvelle position et la vitesse de toutes les molécules qui est calculées à partir de leur position et la vitesse précédentes basées sur la deuxième loi de Newton.

Evidemment, la simulation par la méthode de DM demandé un temps de calcul trop cher. En conséquence, le nombre de molécules qui peuvent être simulées encore très limité à ce stade. On a proposé deux manières possibles [22] de réduire les demandes de la méthode de DM. D'abord, au lieu de considérer chaque molécule individuelle à l'échelle microscopique, on remplacé par des particules fluide à l'échelle mésoscopique, qui se composent d'un groupe de molécules sont considérées dans la simulation. En second lieu, le degré de la liberté du système peut être réduit d'un forçant que les particules se déplacer dans une direction indiquées. Il est basé sur ces concepts la méthode de Boltzmann sur réseau et son ancêtre la méthode de gaz sur réseau, qui sont appliqué avec succès pour simuler l'écoulement du fluide et les phénomènes de transport.

I.2.5.2. Méthode de gaz sur réseau (LGA)

En 1973, apparaissent les automates cellulaires, les gaz booléens sur réseau proposés par Hardy, de Pazzis et Pomeau [23]. En effet dans cette méthode l'espace, le temps, les vitesses et le nombre de particules présentes à un instant donné en un point donné sont discrets. Cela dans le but de disposer d'un simulateur le plus simple possible à programmer sur ordinateur, pour modéliser les écoulements fluides.

Le modèle Hardy, de Pazzis et Pomeau [23] est un automate bidimensionnel. Il consiste à discrétiser l'espace par un réseau carré de pas $\Delta x = 1$. On associe à chaque lien (*i.e.* arête) du réseau une quantité qui prend la valeur 1 s'il y a une particule ou 0 sinon. L'évolution en un pas de temps unité (*i.e.* $\Delta t = 1$) se décompose de la manière suivante :

1. Collision : Cette étape est locale et implique uniquement les liens qui arrivent au même nœud. Parmi les configurations possibles se trouve la collision frontale de deux particules qui peuvent subir une variation de $\pi/2$ de la direction de leur vitesse.

2. Advection : Les particules présentes en chaque lien sont transporter vers les quatre plus proches voisins selon leurs vitesses respectives, qui sont données par $v_j = \{v_1 = (1,0), v_2 = (0,1), v_3 = (-1,0), v_4 = (0,-1)\}$. On note que les mouvements sont synchronisés de sorte qu'après advection toutes les particules sont exactement sur les sites (nœuds) du réseau.

L'équation d'évolution du schéma s'écrit alors :

$$n_j(x_i + v_j, t + 1) = n_j(x_i, t) + C_j(n_k) \quad (\text{I.48})$$

Où $n_j(x_i, t)$ est le nombre de particules de vitesse v_j au nœud x_i au temps t et $n_j \in \{0,1\}$. Les indices j, k désignent le numéro de la vitesse discrète, $j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$. Le terme C_j modélise l'opérateur de collision.

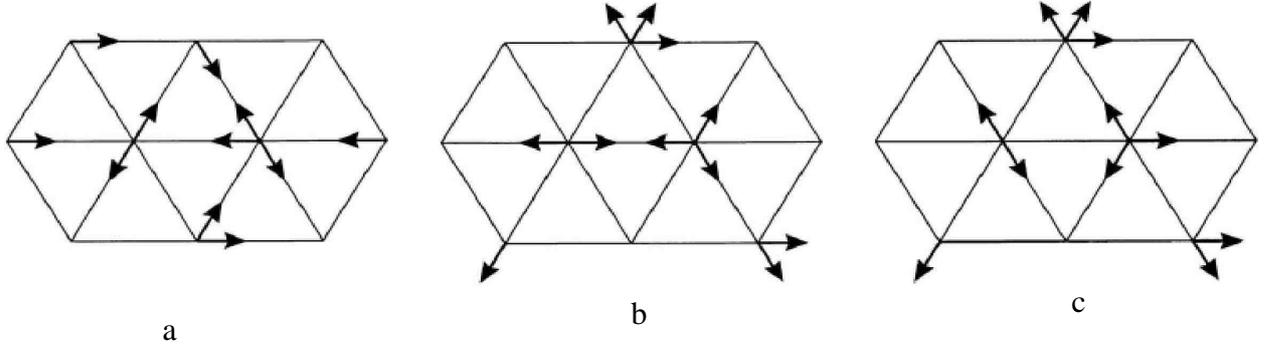


FIG I.10 Exemple d'un pas de temps dans l'évolution d'un réseau de gaz bidimensionnel. (a) état initial: chaque flèche représente une particule à déplacer selon la direction de la flèche ; (b) étape d'advection: chaque particule déplace une unité de réseau dans la direction de sa vitesse ;(c) étape de collision, D'après [24].

I.2.5.3.Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM)

Historiquement le schéma de Boltzmann sur réseau est obtenu à partir des automates cellulaires. En effet Mac Namara et Zanetti [25] ont proposé de remplacer dans l'équation (1.48) les variables booléennes n_j par leur moyenne f_j et d'obtenir une formulation fondée sur l'équation de Boltzmann avec comme équation d'évolution :

$$f_j(x_i + v_j, t + 1) = f_j(x_i, t) + C_j(f)(x, t) \quad \forall i \in \mathbb{Z}^2 \quad 0 \leq j \leq b \quad (\text{I.49})$$

La variable de base est f_j qui est la moyenne spatiale de l'ancienne variable discrète n_j effectuée sur un nombre de nœuds donné. Cette grandeur f_j est continue, prend ses valeurs dans le segment $[0,1]$ et peut s'interpréter comme une distribution, ou probabilité de présence de particules. On note ici la difficulté d'exprimer l'opérateur de collision C_j surtout lorsque le nombre de vitesses discrètes est important (espace de dimension trois). Pour simplifier le schéma on peut introduire l'opérateur de collision linéarisé autour d'un état d'équilibre f_j^{eq} [26]. Ainsi le schéma de Boltzmann est simplifié et l'opérateur de collision s'écrit sous la forme suivante :

$$C_j(f) = -\frac{1}{\lambda} [f - f^{eq}] \quad (\text{I.50})$$

Où f^{eq} est la fonction de distribution d'équilibre (la fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann), et λ est le temps de relaxation.

CHAPITRE 2 *Modélisation et simulation des écoulements multiphasiques*

Dans ce chapitre, nous présentons une synthèse de quelques travaux récents relatifs à diverses applications des méthodes “meshless” notamment pour des écoulements multiphasiques.

II.1. Simulation numérique des écoulements multiphasiques par la méthode Element Free Galerkin (EFG)

Changfu You, Xi Wang, Haiying Qi, Ruichang Yang, Delong Xu (2008) [27] ont utilisé la méthode EFG pour simuler la collision des particules dans un écoulement multiphasique avec une distribution des nœuds appropriée aux méthodes “meshless”. Les équations de contrôle ont été discrétisées par la méthode de Galerkin dans l'espace et la méthode des éléments finis dans le temps. Les forces du fluide sur les particules ont été obtenues par l'intégration des forces de tension et de cisaillement sur les surfaces des particules. Lors de la simulation du mouvement d'une particule dans un canal une allée de Von Karman se forme derrière la particule avec l'augmentation de la vitesse de celle-ci. Des écoulements avec un nombre élevé de particules ont été simulés. Les résultats obtenus montrent que la méthode EFG est capable de traiter des collisions de particules réelles.

II.1.1. Méthode EFG

On considère une approximation d'une fonction $u(x)$ dans un domaine Ω . Ce dernier est discrétisé en sous-domaines. Le domaine Ω contient un ensemble de nœuds x_i , où $i = 1, 2 \dots n$, sont construits avec l'approximation liée à la fonction au nœud u_i .

La méthode EFG utilise l'approximation des moindres carrés mobiles pour construire la fonction de forme.

$$u^h(x) = \sum_{j=1}^m p_j(x) a_j(x) = p^T(x) a(x) \quad p^T(x) = [1 \ x \ y] \quad (\text{II} - 1)$$

où m est le nombre de termes dans la fonction de base, $p_j(x)$ est le polynôme des fonctions de base et $a_j(x)$ des coefficients.

Lancaster et Salkauskas [28] définissent une approximation locale par :

$$u^h(x, \bar{x}) = \sum_{j=1}^m p_j(\bar{x}) a_j(x) = p^T(\bar{x}) a(x) \quad (\text{II} - 2)$$

On cherche alors les coefficients $a_j(x)$ en minimisant la différence entre l'approximation (II.2) et les valeurs u_i connues par la méthode des moindres carrés. Cela revient à minimiser la fonction $j_x(a)$:

$$j_x(a) = \sum_{i=1}^n W(x - x_i) (p^t(x_i) a(x) - u_i)^2 \quad (\text{II} - 3)$$

L'équation (II-3) peut être écrite comme suit :

$$j_x(a) = (Pa - u)^T W(x) (Pa - u)$$

Où

$$u^T = (u_1, u_2 \dots \dots u_n), \quad \text{et } P^T = (p(x_1), p(x_1) \dots \dots \dots p(x_n))$$

$$w(x) = \text{diag}(W(x - x_1), W(x - x_2) \dots \dots W(x - x_n))$$

La méthode des moindres carrés est utilisée pour trouver les coefficients $a_j(x)$

$$\frac{\partial J(x)}{\partial a(x)} = A(x)a(x) - B(x)u = 0$$

Où

$$A(x) = P^T W(x) P \text{ et } B(x) = P^T W(x) \text{ donc}$$

$$a(x) = A^{-1}(x) B(x) u \quad (\text{II} - 4)$$

La substitution de l'Equation (II - 4) dans l'Equation (II - 1) donne :

$$u^h(x) = P^T(x) A^{-1}(x) B(x) u$$

La fonction de poids utilisée dans est également choisie par (Luo et al.) [29] :

$$W_I(x) = \begin{cases} \frac{r_i^2}{r_I^2 + 1} \left(1 - \frac{r_I^2}{r_i^2}\right)^4, & r_I \leq r_i \\ 0, & r_I > r_i \end{cases}$$

Où $r_I = \|x - x_I\|$ est la distance entre x et x_I et r_i est le rayon de domaine l'influence du nœud i .

II.1.2. Résultats et discussions

Le mouvement des particules dans un canal a été simulé par la méthode EFG. Les caractéristiques du fluide et des particules sont respectivement les suivants : $\rho_f = 1,0 \text{ kg/m}^3$, $\gamma = 1,0 \times 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$ et $\rho_p = 1,01 \text{ kg/m}^3$, $D = 1,0 \text{ m}$. On suppose le canal horizontal et on néglige les forces de pesanteur. Le domaine est représenté sur la figure (II-1). On applique à la particule une force extérieure constante, $f_x = m \cdot a$, avec m représentant la masse de la particule et l'accélération $a = 1 \text{ m/s}^2$. Comme montré sur la

figure (II-2), les vortex qui se forment derrière la particule avec l'augmentation de la vitesse de particules deviennent de plus en plus asymétriques et forment une allée de Von Karman.

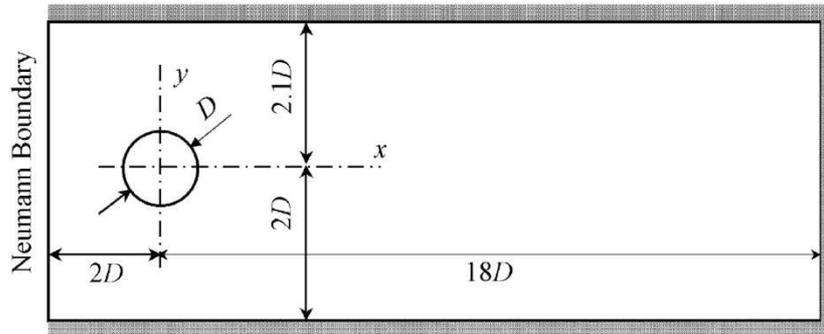


FIG II.1 le domaine de simulation pour une particule

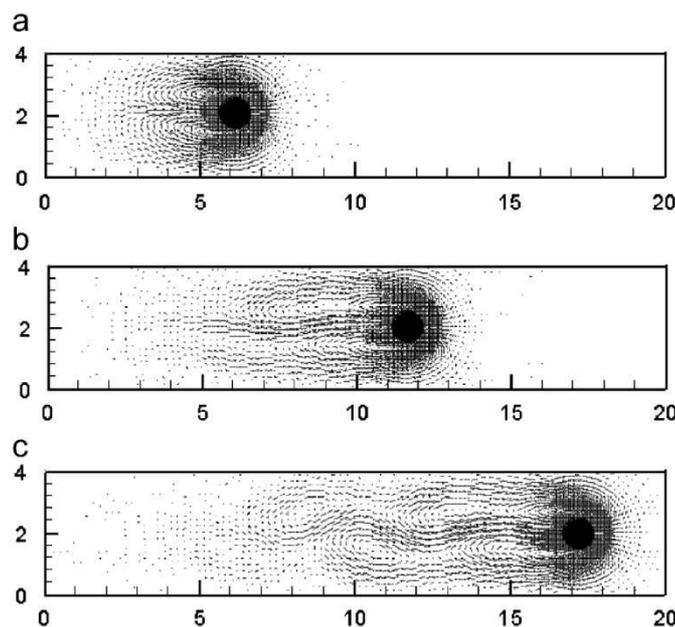


FIG II.2 Evolution de l'écoulement autour d'une particule mobile :
(a) $t = 6,25$ s; (b) $t = 12,5$ s et (c) $t = 18,75$ s.

Le mouvement de deux particules se déplaçant dans un fluide a été également simulé. Le domaine de simulation est montré sur la figure (II.3). Les hypothèses de travail sont identiques au cas précédent sauf pour ce qui concerne les caractéristiques du fluide et des particules qui sont respectivement : $\rho_f = 1.0 \text{ kg/m}^3$, $\nu = 1.0 \times 10^{-2} \text{ m}^2/\text{s}$ et $\rho_p = 1.05 \text{ kg/m}^3$, $D = 1.0 \text{ m}$

La Fig. (II.4) montre l'évolution du champ de vitesse à différents instants ainsi que l'interaction entre les deux particules. Etant donné que la première particule exerce une force de résistance sur la deuxième particule, cette dernière se déplace plus rapidement.

Dans les écoulements gaz-particules, les collisions de particules affectent considérablement le champ d'écoulement et rendent difficile la simulation par les méthodes classiques. Par contre, les méthodes "meshless" qui ne nécessitent pas un maillage, ont plus de flexibilité et d'adaptabilité pour ces écoulements.

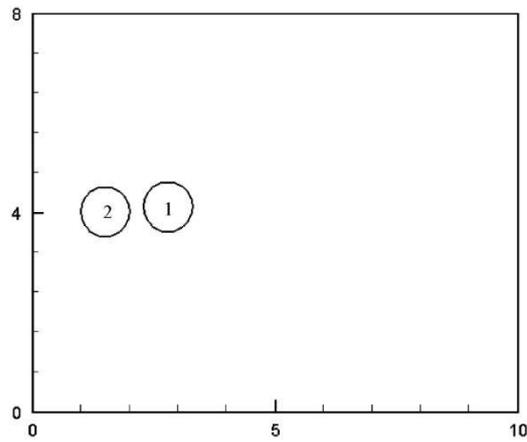


FIG II.3 Domaine de simulation pour deux particules

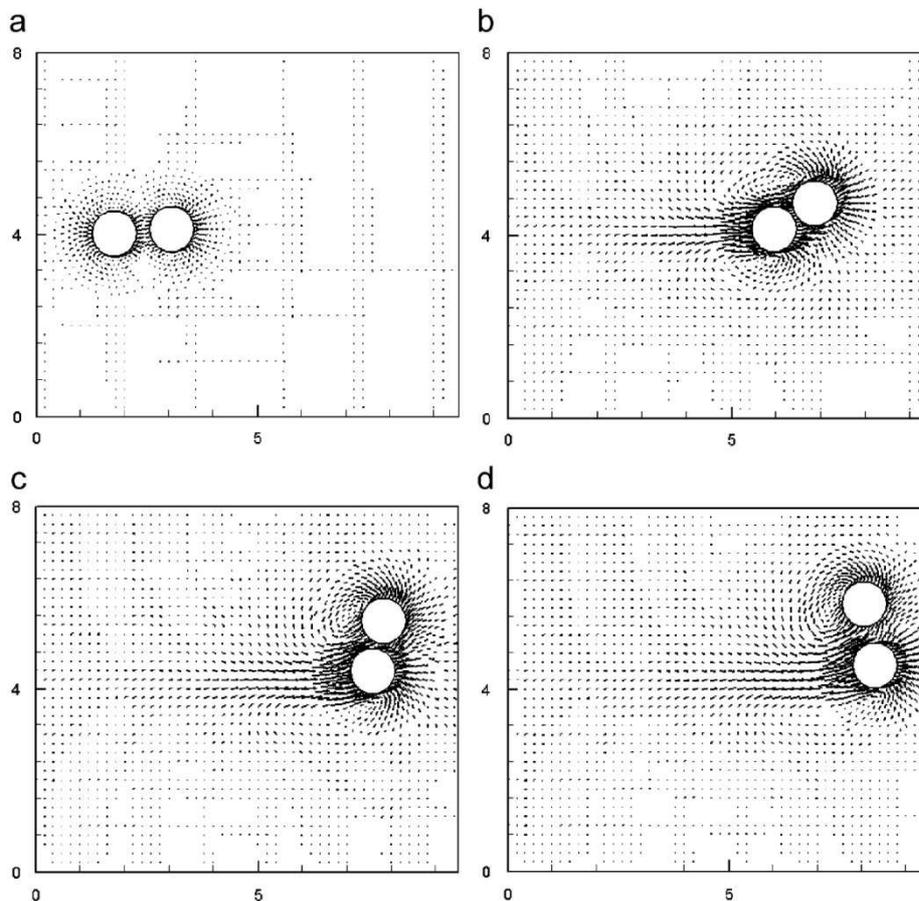


Fig. (II.4) Champ de vitesse d'un système de deux-particule à différents instants :
 (a) $t = 0,1$ s; (b) $t = 0,5$ s; (c) $t = 0,62$ s et (d) $t = 0,68$ s.

La Fig. II.5 montre plusieurs collisions entre les particules de $t = 0,087$ à $0,090$ s avec le changement rapide des vitesses de particules. Les résultats montrent que les méthodes "meshless" peuvent modéliser et simuler les collisions réelles de particules.

Un autre exemple est simulé avec 95 particules tombant dans une conduite verticale pour un fluide et des particules possédant respectivement les caractéristiques suivantes: $\rho_f = 1,0 \text{ kg/m}^3$, $\gamma = 1,0 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ et $\rho_p = 1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, $D = 1,0 \text{ mm}$.

La Fig. II.6 montre pendant le processus, un grand nombre de collisions se sont produites non seulement entre les particules mais également entre les particules et les parois. Ces collisions ont alors un effet significatif sur le champ d'écoulement. Par conséquent, les méthodes "meshless" offrent de grandes possibilités intéressantes pour analyser des écoulements de particules très compliqués.

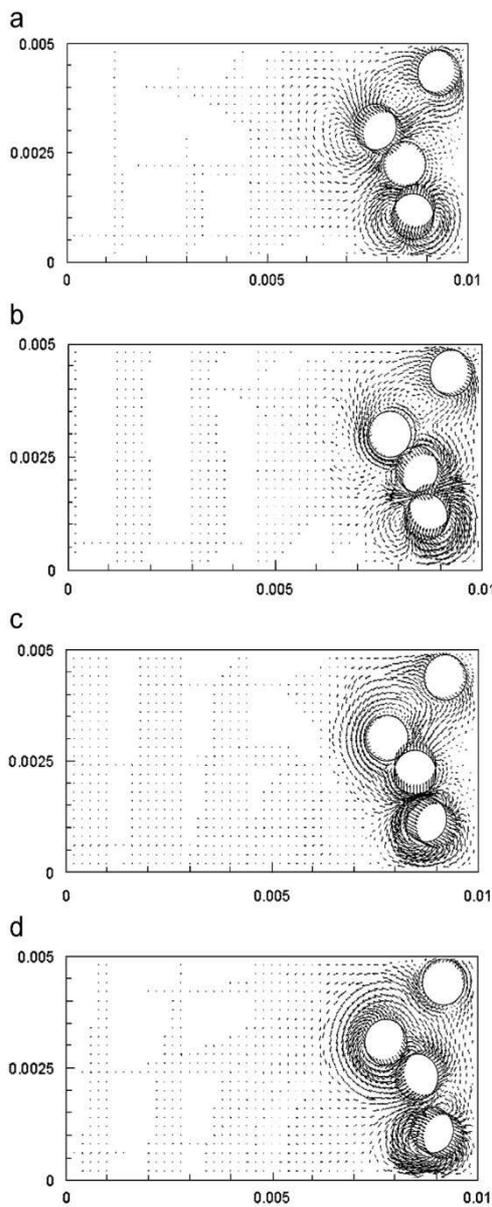


Fig. II.5 Collisions de particules et l'évolution du champ de vitesse: (a) $t = 0,087$ s; (b) $t = 0,088$ s; (c) $t = 0,089$ s et (d) $t = 0,090$ s.

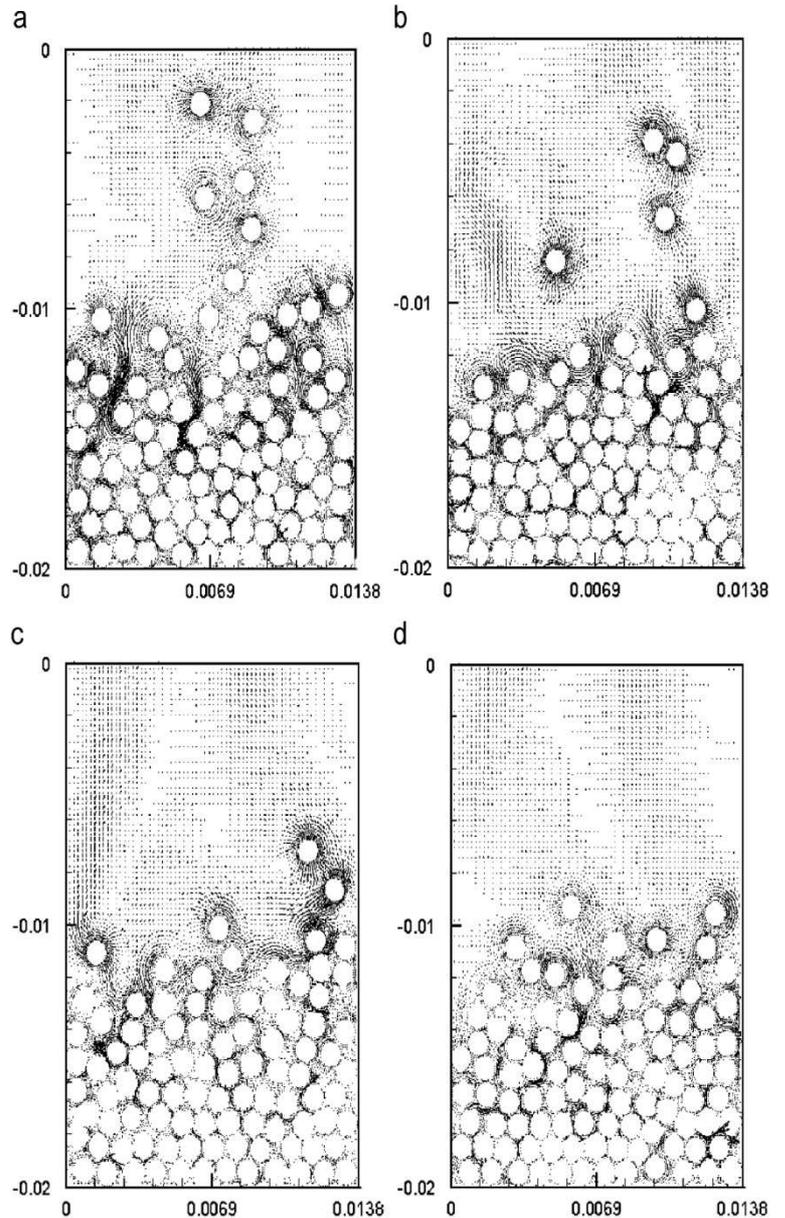


Fig. II.6 95 Particules tombant dans une conduite verticale: (a) $t = 0,125$ s; (b) $t = 0,150$ s; (c) $t = 0,175$ s et (d) $t = 0,200$ s.

II.2. Simulation numérique d'écoulement multiphasique à l'aide de la méthode (LBM)

Nor Azwadi Che Sidik, Takahiko Tanahashi [30] ont étudié la simulation d'écoulements multiphasiques en 2D par la méthode lattice Boltzmann. Ils ont développé un nouveau modèle d'énergie libre. Quelques résultats de simulation, qui ont été testés ailleurs, sont répétés pour examiner la validité de ce modèle.

II.2.1. Séparation des Phases

Dans cette section, la séparation de phase qui est basée sur l'instabilité thermodynamique du fluide de Van-Der Waals est simulée. Si l'état initial du système est placé à une région isotherme instable, selon l'équation d'état, le système automatiquement sépare à une phase liquide et phase vapeur.

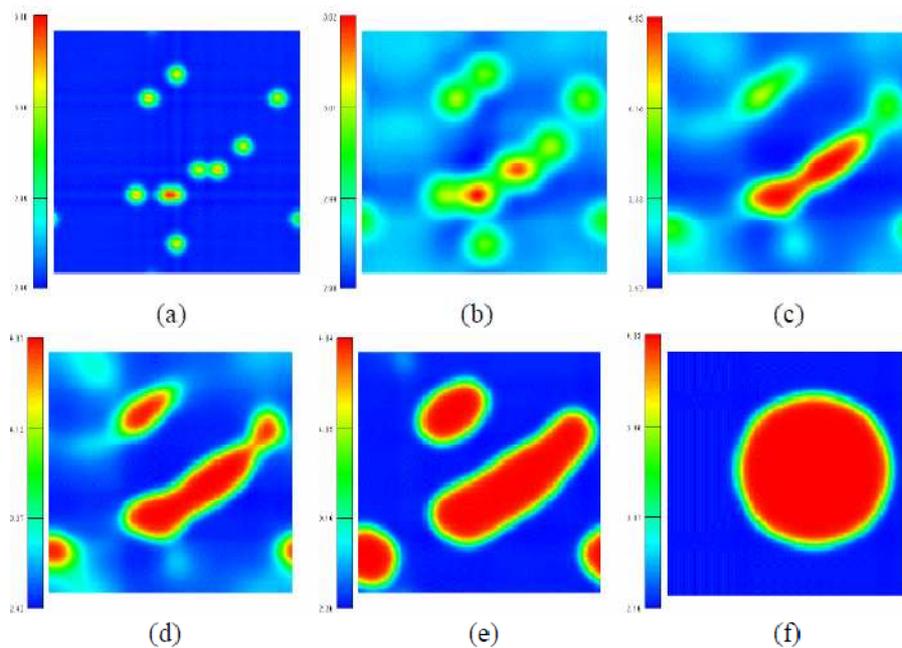


FIG II.7 séparation de phase Instantané

Le modèle D2Q9 avec le réseau de 101×101 lattice sont utilisés, la simulation a été faite à $T_c = 0,55$. D'autres paramètres sont présentés dans le tableau II.1.

Δx	Δy	Δt	τ	κ
0.05	0.05	0.01	1.00	0.0001

Tableau II.1 Paramètres utilisés pour la simulation de séparation de phase

La figure II.7 montre la morphologie de domaine à différents instants $t = 200, 800, 2400, 2700, 3300$ et 8000 . Bien que les noyaux initiaux de bulle soient petits, comme illustre sur la figure II.7(a). Les petites bulles forment un grande bulle pendant le temps évolue, Une bulle sphérique à l'état d'équilibre est illustrée dans la figure II.7 (f).

II.2.2. Coalescence des gouttes

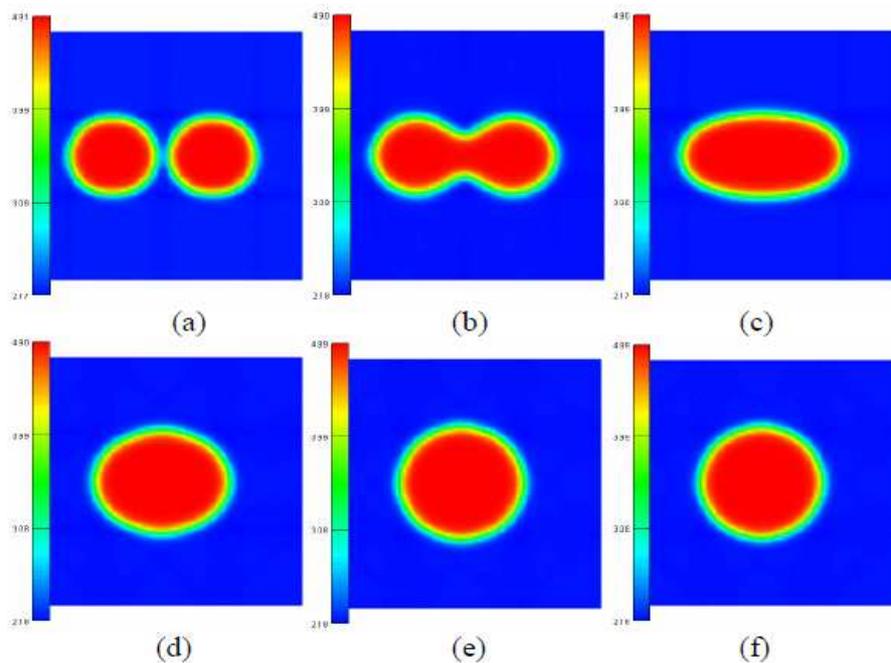


FIG II.8 coalescence de deux gouttes.

La coalescence de bulles a été étudiée par Zheng et al [31]. Zheng a constaté que la distance entre les bulles et l'épaisseur d'interface (W) sont les facteurs principaux pour décider si les deux bulles coalescent ou pas. Si la distance entre les deux bulles est plus grande que $2W$, les deux bulles ne coalescent pas. Autrement, ils coalescent.

Pour étudier l'effet de l'épaisseur d'interface sur les résultats numériques, deux bulles est considérées comme représente la figure II.8. L'espace entre les deux bulles (d) et l'épaisseur d'interface (w) sont pris 0,8, 1,8 respectivement.

II.3. Etude de l'effet de viscosité sur l'écoulement multiphasique des fluides immiscible dans les milieux poreux à l'aide de la méthode (LBM)

Andreas G. Yiotis, John Psihogios, Michael E. Kainourgiakis, Aggelos Papaioannou et Athanassios K. Stubos [32] ont appliqué la méthode LBM pour étudier l'effet visqueux sur l'écoulement multiphasique non-miscible dans les pores irréguliers. Le modèle utilisé montrer son capacités pour modeler ce type d'écoulement, en raison de la facilité d'appliqué les conditions aux limites dans les géométries complexes, et d'estimé correctement les propriétés physiques de l'écoulement comme la perméabilité relative.

II.3.1. Résultats et discussions

Une série de simulations numériques a été effectuée en 2D dans un milieu poreux de porosité $\varepsilon = 0.77$, pour deux valeurs différentes de rapport de viscosité. Le domaine de simulation est un réseau carré de 400×400 lattices.

L'écoulement immiscible dans le milieu poreux caractérisé par trois nombre dimensionnels, le rapport de viscosité $M = \mu_{nw}/\mu_w$, le nombre de Reynolds $Re = ud/v$, et le nombre de capillarité $Ca = u\mu/\gamma$.

La viscosité cinématique est $\nu = (1/3)(\tau - (1/2))(\delta x^2/\delta t)$, Le temps dimensionnelles de relaxation a été choisi $\tau = 0.8$, donc $\nu = 0.1(\delta x^2/\delta t)$, Le nombre de Reynolds maximum est $Re = 0.2$. Ceci s'assure que le débit est suffisamment basse de sorte que la loi de Darcy soit valable dans le réseau considéré. Le nombre capillaire est $Ca = 0.002$.

II.3.1.1. Viscosité de la phase mouillante est moins que la viscosité de la phase non-mouillante ($M > 1$)

La Fig. II.9 représente l'évolution de distribution de deux phases quand la saturation est de $S_w = 0.2$ de la phase mouillante (colore bleu) couvre la surface solide. La phase non mouillante (rouge) est pratiquement immobile et sa perméabilité est égale à zéro.

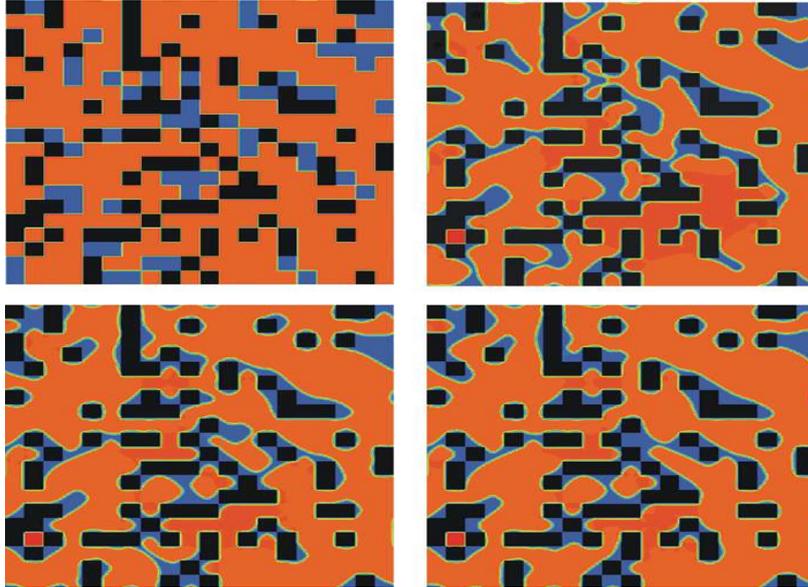


FIG II.9 Distribution des phases à différents instants ($t = 0, 100,000, 200,000, 300,000$), $M = 10$ et $S_w = 0,2$.

La fig. II.10 montre les perméabilités relatives de deux phases en fonction de saturation de la phase mouillante quand $M=10$. Pour les valeurs intermédiaires de saturation, la perméabilité relative de la phase non mouillante est plus grande que 1.

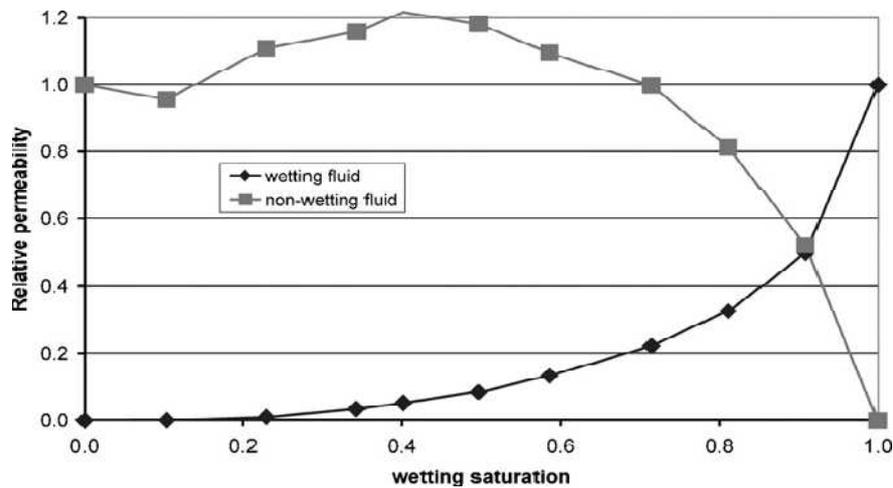
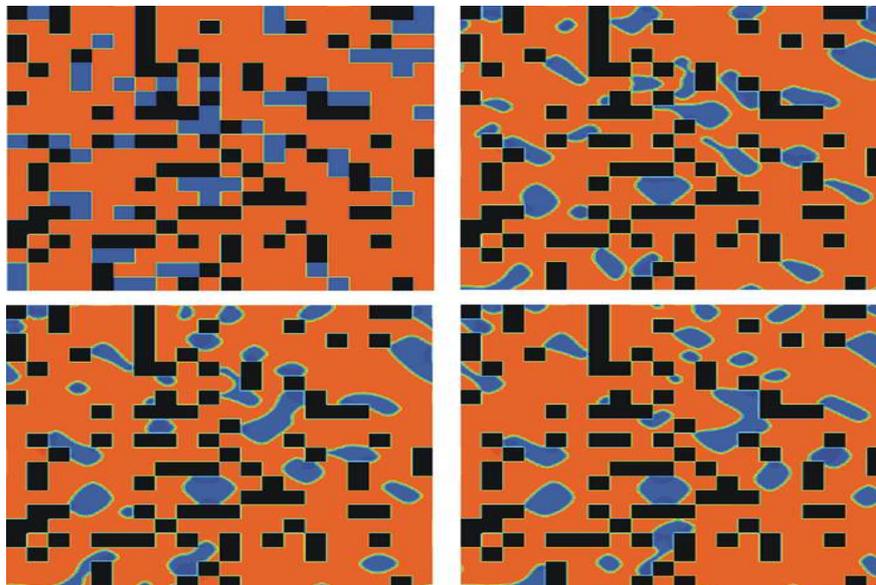


FIG. II.10 Perméabilités relatives de deux phases

II.3.1.2. Viscosité de la phase mouillante est plus grande que la viscosité de la phase non-mouillante ($M < 1$)

La Fig. II.11 montre l'évolution des distributions des phases quand la saturation de la phase moins visqueuse (non-mouillante) est $S_{nW} = 0.2$ et $M = 0,1$. La phase mouillante (rouges) couvre la plus grande partie de surface solide, alors que la phase non-mouillante gazeuse (bleu) coule sous forme de petites gouttes dans la partie centrale du vide entouré par le fluide mouillant.

La fig. II.12 montre que Les perméabilités relatives de deux phases en fonction de la saturation de la phase mouillante sont inférieures à 1.

FIG II.11 Distribution des phases à différents temps ($t = 0, 100,000, 200,000, 300,000$)

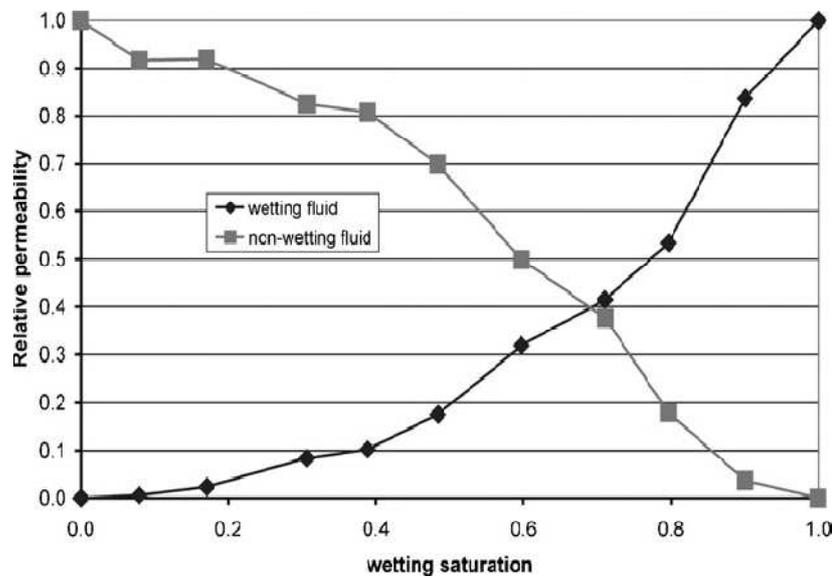


FIG. II.12 Perméabilités relatives de deux phases

II.4. Simulation numérique d'écoulement multiphasique à l'aide de la méthode SPH

A.Valizadeh, M. Shafieefar, J.J. Monaghan et A.A. Salehi Neyshaboori [33] ont proposé d'utiliser la méthode SPH pour la simulation des écoulements multiphasiques. Pour montrer l'efficacité de cette méthode une application d'une bulle d'air en ascension dans l'eau a été examinée.

II.4.1. Résultats et discussions

Selon les résultats expérimentaux et analytiques [34-35], si le volume d'une bulle dans l'eau augmente au delà de 0,0006 cc, la bulle devient aplatie aux pôles, au-dessus de 5 cc, la bulle est formée comme un parapluie. La bulle se lève à travers l'eau à une vitesse U , selon la solution analytique de Batchelor (1974) et la comparaison avec des résultats expérimentaux (Davis et Taylor, 1950) pour différents tailles de bulle, la vitesse U est calculée par la relation suivante :

$$U = \frac{1}{2} \sqrt{g \left(\frac{\rho_d - \rho_l}{\rho_d} \right) r} \quad (\text{II. 5})$$

Où, r est le rayon de courbure de la surface de bulle et g est l'accélération de pesanteur. ρ_d et ρ_l sont les masses volumiques de liquide et de la bulle, respectivement.

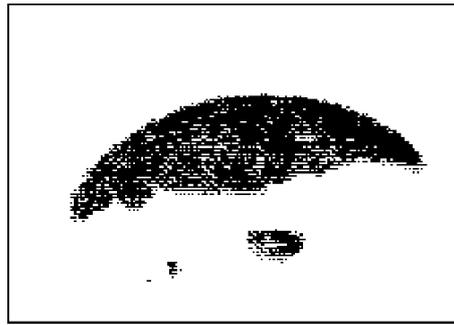


FIG II. 13 Photographie de bulle d'air en nitrobenzène ; $r = 3 \text{ cm}$, $U = 0.37 \text{ m sec}^{-1}$ [34]

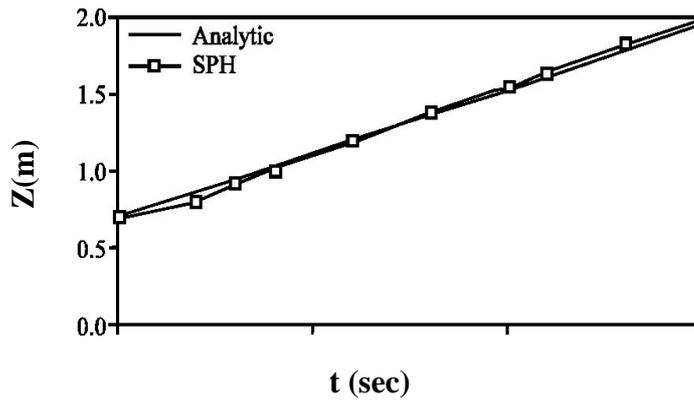


FIG II.14 Comparaison des résultats de SPH pour l'ascension de bulle avec la formule analytique, $\rho_l/\rho_d = 0.001$, $r = 0.28 \text{ m}$ [35].

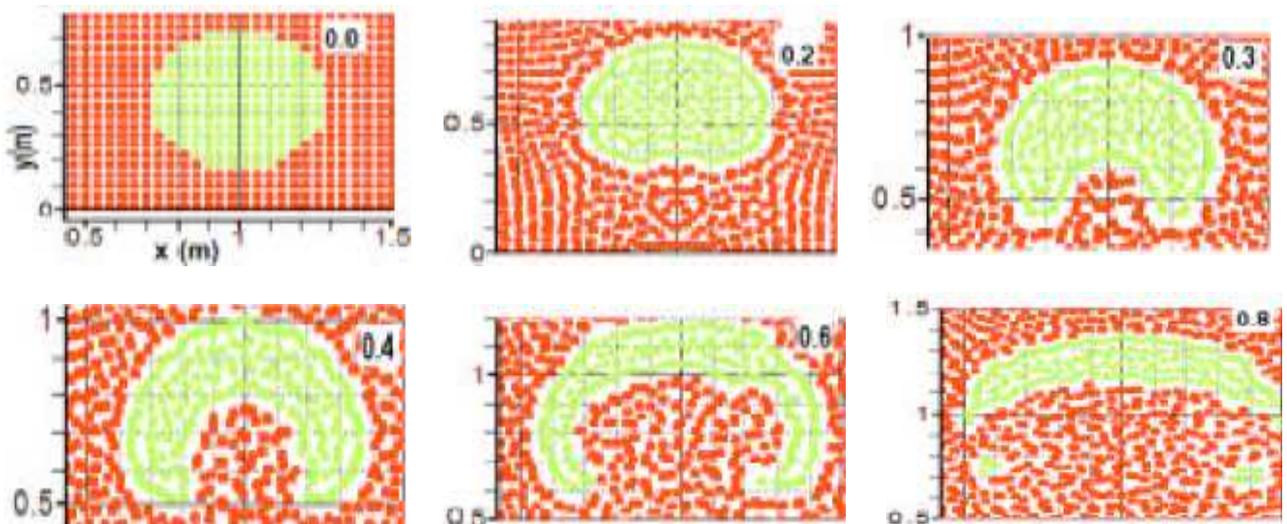


FIG II.15 Bulle d'air en ascension dans l'eau à différents instants 0.0, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8 sec.

CHAPITRE 3

Méthode de Boltzmann sur réseau (LBM)

III.1. Introduction

Depuis de nombreuses années, la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) a été appliquée avec succès pour simuler les écoulements de fluides et les phénomènes de transport. Différemment des méthodes conventionnelles à l'image de la CFD, la méthode LBM est basée sur une approche mésoscopique dans laquelle le comportement collectif des particules dans un système est employé pour prédire les propriétés macroscopiques. Pour cette raison, la méthode LBM s'est avérée particulièrement utile dans les applications relatives à la simulation de la dynamique des interfaces et aux géométries complexes, à l'exemple des écoulements multiphasiques dans les milieux poreux [36].

III.2. Applications de la méthodes LBM

La méthode LBM a montré une grande capacité de simulation des systèmes hydrodynamiques [37], des systèmes magnétohydrodynamiques [38], des écoulements multiphasiques et à plusieurs composants [39], des écoulements réactifs [40] et des écoulements multi-composants dans les milieux poreux [41].

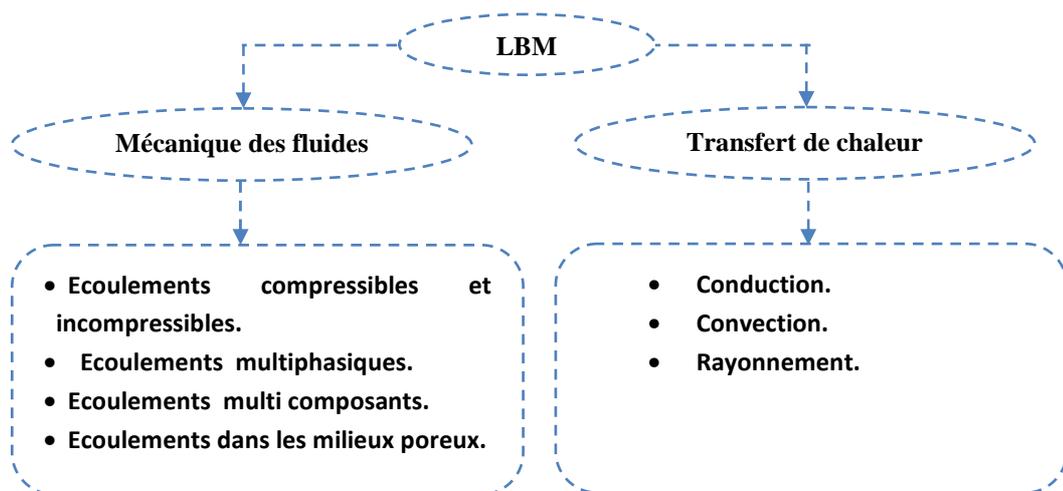


FIG III.1 Différents domaines d'applications de la méthode LBM.

III.3. Equation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann est une équation intégro-différentielle [22], qui décrit l'évolution de la fonction de distribution $f(x, \xi, t)$ d'une particule :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla_x f + \mathbf{a} \cdot \nabla_\xi f = Q(f, f) \quad (\text{III. 1})$$

Le terme de collision est donné par l'expression suivante:

$$Q(f, f) = \int d^3 \xi_1 \int d\Omega \sigma(\Omega) |\xi - \xi_1| [f(\xi')f(\xi'_1) - f(\xi)f(\xi_1)] \quad (\text{III. 2})$$

avec $\sigma(\Omega)$: la section de collision de deux-particules dans laquelle la vitesse change de $\{\xi, \xi_1\}$ (entrant) à $\{\xi', \xi'_1\}$ (sortant). La position dans l'espace physique est notée par x et dans l'espace de vitesse par ξ . $f(x, \xi, t)d^3x d^3\xi$ représente la probabilité de trouver une particule dans le volume d^3x autour de x avec la vitesse entre ξ et $\xi + d\xi$. \mathbf{a} est la force par unité de masse agissant sur la particule.

L'équation de Boltzmann est fondée sur la dynamique des gaz. Elle fournit les informations microscopiques détaillées qui sont nécessaires pour modéliser le comportement du fluide complexe. En raison de la complexité de l'intégrale de collision, la solution directe de l'équation complète de Boltzmann est un travail difficile pour les deux techniques, analytique et numérique [42].

Une difficulté majeure dans l'équation de Boltzmann est la nature compliquée de l'intégrale de collision. Par conséquent, une simplification importante pour ce terme a été proposée par Bhatnagar, Gross et Krook (BGK) en 1954 [43]. L'équation de Boltzmann-BGK prend alors la forme :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f = -\frac{1}{\lambda} [f - f^{(0)}] \quad (\text{III. 3})$$

où ξ est la vitesse de particules $f^{(0)}$ représente la fonction de distribution d'équilibre de Maxwell-Boltzmann et λ représente le temps de relaxation.

$$f_\alpha^{(0)} = \rho w_\alpha \left[1 + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_\alpha \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u \cdot u \right] \quad (\text{III. 4})$$

avec w_α : coefficient de pondération, $c = \delta x / \delta t$: vitesse des particules dans le réseau, e_α représente l'ensemble de vitesses discrètes, δx et δt sont les pas d'espace et de temps dans le réseau, respectivement et u est la vitesse macroscopique.

Pour résoudre f numériquement, l'équation (III.3) est d'abord discrétisée dans l'espace de vitesse en utilisant un ensemble fini de vitesses $\{\xi_\alpha\}$.

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \xi_\alpha \cdot \nabla f_\alpha = -\frac{1}{\lambda} [f_\alpha - f_\alpha^{(0)}] \quad (\text{III. 5})$$

Dans l'équation ci-dessus, $f_\alpha(x, t) = f(x, \xi_\alpha, t)$ et $f_\alpha^0(x, \xi, t) = f_\alpha^0(x, \xi_\alpha, t)$ sont les fonctions de distribution et la fonction de distribution d'équilibre de la $\alpha^{ème}$ vitesse discret ξ_α respectivement.

Pour l'écoulement en 2-D, le modèle à 9 vitesses, défini comme le modèle D2Q9, a été largement utilisé. Pour simuler l'écoulement en 3-D il y a plusieurs modèles employés, tels que D3Q15, D3Q19 et le modèle D3Q27. La figure (III.2) représente les modèles les plus utilisés.

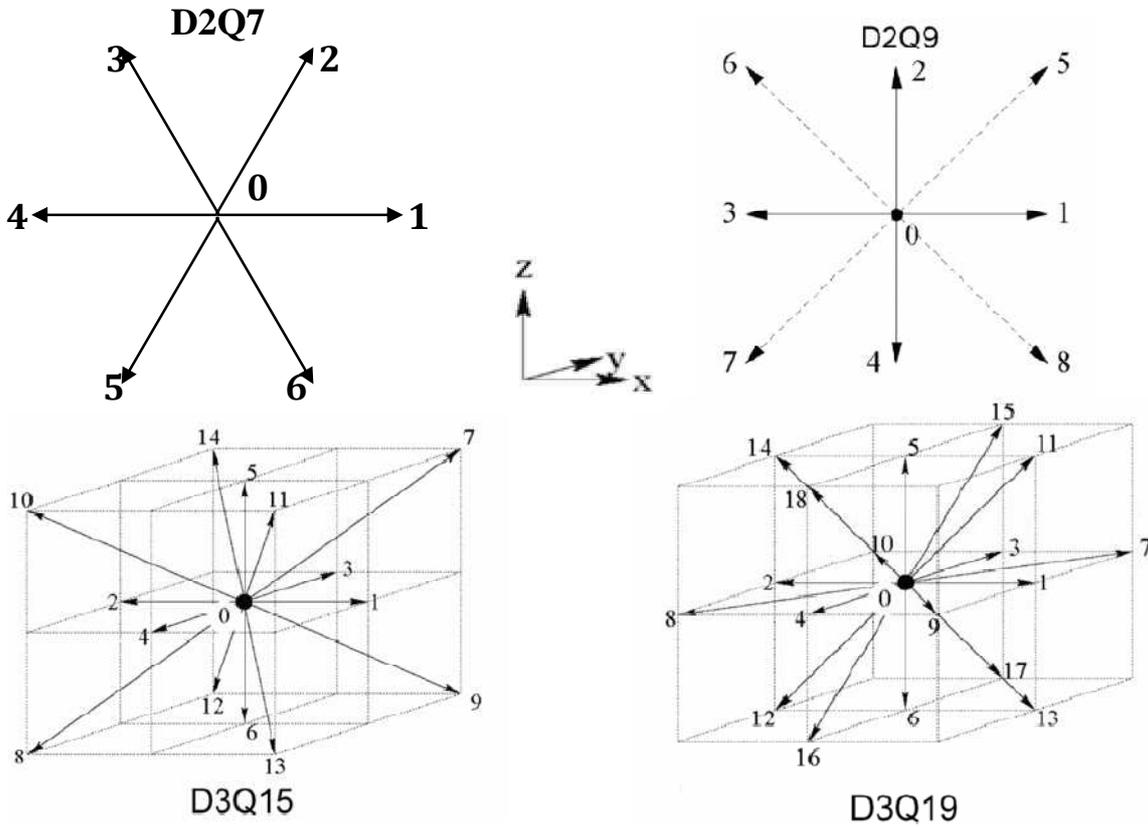


FIG III.2 Vecteurs vitesses discrètes pour des réseaux en 2-D et 3-D. [22]

III.4. Modèle bidimensionnel D2Q7 à sept vitesses

Dans nos applications, nous utiliserons le modèle D2Q7. Les particules pour les nœuds correspondant à \mathbb{Q}_0 ne se déplacent pas. Le mouvement des particules (1, 2, 3, 4, 5 et 6) le long des directions diagonales et horizontales se fait avec la vitesse $c = \Delta x / \Delta t$. Les coefficients de pondération et l'ensemble des vitesses discrètes pour ce modèle sont donnés ci-dessous.

$$\omega_\alpha = \begin{cases} 1/2, & \alpha = 0 \\ 1/12, & \alpha = 1,2,3,4,5,6 \end{cases} \quad (III.6)$$

$$\mathbb{Q}_\alpha = \begin{cases} (0,0) & \alpha = 0 \\ (\pm 1,0)c & \alpha = 1,4 \\ ((\pm 1/2, \pm \sqrt{3}/2)c & \alpha = 2,3,5,6. \end{cases} \quad (III.7)$$

La masse volumique ρ et la quantité de mouvement ρu peuvent être évaluées comme suit:

$$\rho = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha} = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha}^{eq} \quad (\text{III. 8})$$

$$\rho u = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha} \varpi_{\alpha} = \sum_{\alpha=0}^N f_{\alpha}^{eq} \varpi_{\alpha} \quad (\text{III. 9})$$

La vitesse du son du modèle D2Q7 est donnée par $c_s = c/2$ [44].

L'équation (III.3) peut être également discrétisée dans l'espace x et dans le temps t . La forme complètement discrétisée de l'équation (III.3) devient :

$$f_{\alpha}(x + \varpi_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = f_{\alpha}(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{(eq)}(x, t)] \quad (\text{III. 10})$$

L'équation (III. 10) est souvent résolue en deux étapes:

1. Étape de collision :

$$\tilde{f}_{\alpha}(x, t) = f_{\alpha}(x, t) - \frac{1}{\tau} [f_{\alpha}(x, t) - f_{\alpha}^{eq}(x, t)] \quad (\text{III. 11})$$

2. Étape de propagation :

$$f_{\alpha}(x + \varpi_{\alpha} \delta t, t + \delta t) = \tilde{f}_{\alpha}(x, t) \quad (\text{III. 12})$$

où f_{α} et \tilde{f}_{α} représentent respectivement les états "avant" et "après" collision des particules.

La viscosité cinématique est obtenue à partir de l'équation (III. 10) à l'aide de la décomposition de Chapman-Enskog :

$$\nu = \frac{3}{8} (\tau - 1/2) c_s^2 \delta t$$

III.5. De l'équation de Boltzmann à la méthode LBM

Historiquement, la méthode LBM a été obtenue à partir de la méthode Lattice Gas Automata (LGA). Plus tard, Il a été montré par He et Luo [45] que le schéma LBM pouvait être rigoureusement établie à partir de l'équation de Boltzmann.

A partir de l'équation de Boltzmann (équation (III.3)), on construit le modèle BGK en approximant f^0 par une fonction de distribution de Maxwell-Boltzmann:

$$f^0 \equiv \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{(\xi - u)^2}{2RT}\right) \quad (\text{III. 13})$$

Les propriétés macroscopiques peuvent être évaluées par les équations suivantes:

$$\rho = \int f d\xi = \int f^0 d\xi \quad (\text{III. 14 - a})$$

$$\rho u = \int \xi f d\xi = \int \xi f^0 d\xi \quad (\text{III. 14 - b})$$

$$\rho\theta = \frac{1}{2} \int (\xi - u)^2 f d\xi = \frac{1}{2} \int (\xi - u)^2 f^0 d\xi \quad (\text{III. 14 - c})$$

avec $\theta = \frac{k_B T}{m}$: la température normalisée.

Par l'intégration de l'équation (III.3) pour un pas de temps δt , on obtient l'expression suivante [22]:

$$f(x + \xi\delta t, \xi, t + \delta t) = \mathbb{Q}^{-\delta t/\lambda} f_\alpha(x, \xi, t) + \frac{1}{\lambda} \mathbb{Q}^{-\delta t/\lambda} \int_0^{\delta t} \mathbb{Q}^{t'/\lambda} f^{(0)}(x + \xi t', \xi, t + t') dt' \quad (\text{III. 15})$$

A l'aide d'un développement de Taylor, avec un pas δt relativement petit et $\lambda \equiv \tau/\delta t$ nous trouvons [22]:

$$f(x + \xi\delta t, \xi, t + \delta t) - f(x, \xi, t) = -\frac{1}{\tau} [f(x, \xi, t) - f^{(0)}(x, \xi, t)] \quad (\text{III. 16})$$

Le développement de la fonction de distribution équilibrée $f^{(0)}$ en série de Taylor à l'ordre 2 en (u) donne [22]:

$$f^0 = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{(\xi \cdot u)}{RT} + \frac{(\xi \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right] + O(u^3) \quad (\text{III. 17})$$

Afin de dériver les équations de Navier-Stokes, le développement du second degré est suffisant, d'où :

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \left[1 + \frac{(\xi \cdot u)}{RT} + \frac{(\xi \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right] \quad (\text{III. 18})$$

Pour évaluer numériquement les variables hydrodynamiques de l'Equation (III.14), il est nécessaire de discrétiser l'espace de vitesse ξ .

La discrétisation de l'espace doit être faite de telle manière à ce que tous les moments hydrodynamiques ρ , ρu et $\rho\theta$, soient estimés de façon exacte. Ceci est valable pour le moment quadratique suivant [46]:

$$\begin{aligned} I &= \int f^{eq} \Psi(\xi) d\xi \\ &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{D/2}} \int \Psi(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \times \left[1 + \frac{(\xi \cdot u)}{RT} + \frac{(\xi \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right] d\xi \end{aligned} \quad (\text{III. 19})$$

L'intégrale ci-dessus devient :

$$I = \int \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \Psi(\xi) d\xi \quad (\text{III. 20})$$

où $\Psi(\xi)$ est un polynôme en ξ . L'intégrale ci-dessus peut être calculée par la quadrature Gaussienne [46]:

$$I = \int \exp\left(-\frac{\xi^2}{2RT}\right) \Psi(\xi) d\xi = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \exp\left(-\frac{\xi_{\alpha}^2}{2RT}\right) \Psi(\xi_{\alpha}) \quad (\text{III. 21})$$

Où W_{α} et ξ_{α} sont les coefficients de pondération et les vitesses discrètes. En conséquence, les moments hydrodynamiques peuvent être aussi bien calculés par quadrature [46]:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{eq} \quad (\text{III. 22 - a})$$

$$\rho u = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} f_{\alpha} = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} f_{\alpha}^{eq} \quad (\text{III. 22 - b})$$

Où

$$f_{\alpha} \equiv f_{\alpha}(x, t) \equiv W_{\alpha} f(r, \xi_{\alpha}, t), \quad f_{\alpha}^{eq} \equiv f_{\alpha}^{eq}(x, t) \equiv W_{\alpha} f^{eq}(x, \xi_{\alpha}, t) \quad (\text{III. 23})$$

Les coordonnées polaires de (ζ, θ) sont employés. Pour la simplicité, supposons :

$$\Psi_{m,n}(\xi) = (\sqrt{2RT})^{(m+n)} \zeta^{m+n} \cos^m \theta \sin^n \theta \quad (\text{III. 24})$$

où $\zeta = \xi/\sqrt{2\theta}$, l'intégrale de l'équation (III.19) devient :

$$\begin{aligned} I &= \int \Psi_{m,n}(\xi) f^{eq} d\xi \\ &= \frac{\rho}{\pi} (\sqrt{2RT})^{(m+n)} \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-\zeta^2} \zeta^{m+n} \cos^m \theta \sin^n \theta \\ &\quad \times \left[1 + \frac{2\zeta(\hat{e} \cdot u)}{\sqrt{2RT}} + \frac{\zeta^2 (\hat{e} \cdot u)^2}{RT} - \frac{u^2}{2RT} \right] d\theta \zeta d\zeta \end{aligned} \quad (\text{III. 25})$$

Pour obtenir l'équation de Boltzmann sur réseau à 7-vitesses, la variable angulaire θ doit être discrétisée à 6 sections dans l'intervalle $[0, 2\pi]$, c'est-à-dire, $\theta_{\alpha} = (\alpha - 1)\pi/3$, pour $\alpha = \{1, 2, \dots, 6\}$. Avec la discrétisation de θ nous avons :

$$\int_0^{2\pi} \cos^m \theta \sin^n \theta d\theta = \begin{cases} \frac{\pi}{3} \sum_{\alpha=1}^6 \cos^m \theta_{\alpha} \sin^n \theta_{\alpha}, & (m+n) \text{ pair} \\ 0, & (m+n) \text{ impair} \end{cases} \quad (\text{III. 26})$$

Pour $(m+n) \leq 5$ et en utilisant le résultat ci-dessus, nous obtenons :

$$I = \begin{cases} \frac{\rho}{3} (\sqrt{2RT})^{(m+n)} \sum_{\alpha=1}^6 \cos^m \theta_{\alpha} \sin^n \theta_{\alpha} \left\{ \left(1 - \frac{u^2}{2RT} \right) I_{m+n} + \frac{(\hat{e} \cdot u)^2}{RT} I_{m+n+2} \right\}, & (m+n) \text{ pair} \\ \frac{\rho}{3} (\sqrt{2RT})^{(m+n)} \sum_{\alpha=1}^6 \cos^m \theta_{\alpha} \sin^n \theta_{\alpha} \frac{2(\hat{e} \cdot u)}{\sqrt{2RT}} I_{m+n+2}, & (m+n) \text{ impair} \end{cases} \quad (\text{III. 27})$$

Puisque le modèle D2Q7 possède seulement deux vitesses c.-à-d., ($n=2$), dont une est fixée à 0, il est clair que les abscisses de la quadrature pour évaluer I_m devraient être $\zeta_0 = 0$ et $\zeta_1 = \gamma^{-1}$, où γ est un paramètre positif. La formule de Radau-Gauss est choisie pour évaluer l'intégrale I_m :

$$I_m = \omega_0 \zeta_0^m + \sum_{j=1}^n \omega_j \zeta_j^m \quad (\text{III. 28})$$

Nous avons les trois équations suivantes :

$$I_0 = \omega_0 + \omega_1 = 1/2 \quad (\text{III. 29 - a})$$

$$I_2 = \omega_1 \gamma^{-2} = 1/2 \quad (\text{III. 29 - b})$$

$$I_4 = \omega_1 \gamma^{-4} = 1 \quad (\text{III. 29 - c})$$

dont les solutions sont :

$$\omega_0 = 1/4 \quad (III.30 - a)$$

$$\omega_1 = 1/4 \quad (III.30 - b)$$

$$\gamma = 1/\sqrt{2} \quad (III.30 - c)$$

Par conséquent :

$$I_m = \frac{1}{4}(\zeta_0^m + \zeta_1^m), m = 0,2,4 \quad (III.31)$$

La quadrature I_m est exacte pour $m = 0, 2 \text{ et } 4$. Donc, l'égalité suivante est exacte pour $(m+n) \leq 5$:

$$\begin{aligned} I &= \frac{\rho}{12} (\sqrt{2RT})^{(m+n)} \sum_{\alpha=1}^6 \cos^m \theta_\alpha \sin^n \theta_\alpha \left\{ \left(1 - \frac{u^2}{2RT}\right) (\zeta_0^{m+n} + \zeta_1^{m+n}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{2(\hat{e}_\alpha \cdot u)}{\sqrt{2RT}} (\zeta_0^{m+n+1} + \zeta_1^{m+n+1}) + \frac{(\hat{e}_\alpha \cdot u)^2}{RT} (\zeta_0^{m+n+2} + \zeta_1^{m+n+2}) \right\} \\ &= \frac{\rho}{12} \Psi_{m,n}(\xi_0) \left\{1 - \frac{u^2}{2RT}\right\} + \frac{\rho}{12} \sum_{\alpha=1}^6 \Psi_{m,n}(\xi_\alpha) \\ &\quad \times \left\{1 + \frac{(\xi_\alpha \cdot u)}{RT} + \frac{(\xi_\alpha \cdot u)^2}{2(RT)^2} - \frac{u^2}{2RT}\right\}; \end{aligned} \quad (III.32)$$

avec $\|\xi_0\| = \sqrt{2RT}\zeta_0 = 0 \text{ et } \xi_\alpha = \sqrt{2RT}\zeta_1 \hat{e}_\alpha$. Il devient évident que la fonction de distribution d'équilibre pour le modèle utilisé est :

$$f_\alpha^{eq} = \omega_\alpha \rho \left[1 + \frac{4(\hat{e}_\alpha \cdot u)}{c^2} + \frac{8(\hat{e}_\alpha \cdot u)^2}{c^4} - \frac{2u^2}{c^2}\right] \quad (III.33)$$

avec $\alpha \in \{0,1,2 \dots \dots \dots,6\}$

$$c = \frac{\delta x}{\delta t} \quad (III.34)$$

où c représente la vitesse des particules dans le réseau.

$$e_\alpha = \begin{cases} (0,0) & \alpha = 0 \\ ((\cos\theta_\alpha, \sin\theta_\alpha)c, & \theta_\alpha = (\alpha - 1)\pi/3, & \alpha = 1,2,3,4,5,6 \end{cases} \quad (III.35)$$

et

$$\omega_\alpha = \begin{cases} 1/2, & \alpha = 0 \\ 1/12, & \alpha = 1,2,3,4,5,6. \end{cases} \quad (III.36)$$

La substitution de $RT = c_s^2 = c^2/4$, dans l'équation (III.33) est équivalente à $\|\xi_\alpha\| = c$ pour $\alpha \neq 0$. Le coefficient W_α défini dans l'équation (III.23), est donné par la formule suivante :

$$W_\alpha = (2\pi RT)^{D/2} e^{\xi_\alpha^2/2RT} \omega_\alpha \quad (III.37)$$

où ω_α et ξ_α sont identiques à ceux donnés dans l'équation (III.6) et (III.7). Les modèles pour les autres configurations de réseau (D2Q9, D3Q27) peuvent être dérivés d'une façon semblable [46].

III.6. Choix des conditions aux limites dans la méthode LBM

Dans les chapitres précédents, le rôle des conditions aux limites (CL) n'a pas été discuté. Cependant, dans une certaine mesure, un développement des CL précis et efficace, est aussi important que le développement d'un modèle de calcul précis, puisqu'ils influenceront l'exactitude et la stabilité du calcul [47,48]. Il y a deux classes de CL dans la simulation par la méthode LBM: les conditions aux limites ouvertes (périodiques) et les conditions aux limites solides.

III.6.1. Conditions aux limites périodiques

Les conditions aux limites périodiques sont les plus faciles des CL. Elles sont appliquées directement sur la fonction de distribution des particules. Ceci signifie que toutes les particules sortant d'une frontière entreront dans la frontière opposée.

Supposons que $i = 1$ est la frontière d'entrée et $i = nx$ est la frontière de sortie. Dans le cas 2D, Les conditions aux limites périodiques peuvent être exprimées sous la forme suivante:

$$\tilde{f}_\alpha(i = 1, j) = \tilde{f}_\alpha(i = 1, j) \quad (\text{III. 38 - a})$$

$$\tilde{f}_\alpha(i = nx, j) = \tilde{f}_\alpha(i = nx - 1, j) \quad (\text{III. 38 - b})$$

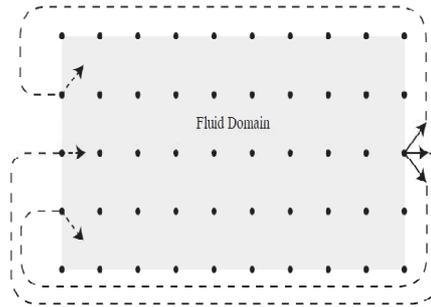


FIG III.3 Conditions aux limites périodiques utilisées dans la méthode LBM (d'après [44])

III.6.2. Conditions aux limites solides

Les conditions aux limites de rebondissement-en arrière (Bounce-back) sont les plus simples des conditions aux limites solides. Quand une distribution des particules entre en collision avec un nœud solide, ces derniers rebondissent en arrière. Il y a beaucoup de conditions aux limites proposés dans la littérature scientifique [49, 50]. Parmi les schémas les plus utilisés on retrouve le schéma "halfway bounce-back" [51]. Ils sont faciles à mettre en application et donnent une précision de second ordre pour les limites solides droites. Les conditions aux limites proposées par Mei et Al [52] possèdent la capacité de traiter les géométries complexes, à l'exemple des frontières incurvées.

III.7. Méthode LBM pour un écoulement multiphasique

III.7.1. Introduction

De nombreux modèles d'écoulement multiphasique ont été présentés dans plusieurs publications. Le premier modèle diphasique non-miscible proposé par Gunstensen et al. utilise les couleurs bleue et rouge pour les particules pour représenter deux fluides [53]. La séparation de phase est alors produite par l'interaction répulsive basée sur le gradient de couleur. Le modèle proposé par Shan et Chen impose une interaction non-locale entre les particules liquides [54]. Une autre approche basée sur l'énergie libre a été proposée par Swift et al [55]. Dans le modèle multiphasique proposé par He, Chen et Zhang (HCZ) [56], deux fonctions de distribution de particules sont utilisées pour simuler la pression et les champs de vitesse puis capturer l'interface respectivement.

III.7.2. Approche "énergie libre"

La différence essentielle par rapport au cas où il y a un seul composant est qu'il y a maintenant deux fluides différents. Par conséquent, deux fonctions de distribution de Boltzmann $\{f_i\}$ et $\{g_i\}$ sont maintenant nécessaires pour refléter correctement la dynamique des quantités conservées :

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \delta t) - f_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_1} [f_i - f_i^0] \quad (\text{III. 39 - a})$$

$$g_i(x + e_i \Delta t, t + \delta t) - g_i(x, t) = -\frac{1}{\tau_2} [g_i - g_i^0] \quad (\text{III. 39 - b})$$

Un choix commode des variables physiques consiste à prendre : la masse volumique totale ρ , la vitesse moyenne u et la différence de masse volumique entre les deux composants $\Delta\rho = \rho_1 - \rho_2$, où ρ_1 et ρ_2 sont les différentes masses volumiques des composants. Les variables physiques sont liées aux fonctions de distribution par :

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho u_\alpha = \sum_i f_i e_{i\alpha}, \quad (\text{III. 40 - a})$$

$$\Delta\rho = \sum_i g_i \quad (\text{III. 40 - b})$$

Ces trois quantités sont localement conservées quelle que soit la collision, donnant trois contraintes sur les fonctions de distribution d'équilibre :

$$\sum_i f_i^0 = \rho, \quad \sum_i f_i^0 e_{i\alpha} = \rho u_\alpha, \quad (\text{III. 41 - a})$$

$$\sum_i g_i^0 = \Delta\rho \quad (\text{III. 41 - b})$$

La dynamique d'un mélange multiphasique est décrite par les équations suivantes :

$$\sum_i f_i^0 e_{i\alpha} e_{i\beta} = P_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (\text{III. 42 - a})$$

$$\sum_i g_i^0 e_{i\alpha} = \Delta\rho u_\alpha \quad (\text{III. 42 - b})$$

$$\sum_i g_i^0 e_{i\alpha} e_{i\beta} = \Gamma \Delta\mu \delta_{\alpha\beta} + \Delta\rho u_\alpha u_\beta, \quad (\text{III. 42 - c})$$

où $P_{\alpha\beta}$ est le tenseur de pression, $\Delta\mu$ la différence de potentiel chimique entre les deux composants et Γ la mobilité.

L'équation de continuité pour les deux fluides :

$$\partial_t \rho + \partial_t (\rho u_\alpha) = 0 \quad (\text{III. 43})$$

L'équation de Navier-Stokes pour la vitesse macroscopique du fluide :

$$\partial_t (\rho u_\beta) + \partial_t (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\beta p_0 + \nu \nabla^2 (\rho u_\beta) + \partial_\beta \{ \lambda(\rho) \partial_\alpha (\rho u_\alpha) \} \quad (\text{III. 44})$$

Et l'équation de convection-diffusion :

$$\partial_t \Delta\rho + \partial_t (\Delta\rho u_\alpha) = \Gamma \tau \nabla^2 \Delta\mu - \tau \partial_\alpha \left(\frac{\Delta\rho}{\rho} \partial_\beta P_{\alpha\beta} \right) \quad (\text{III. 45})$$

Les paramètres dans ces équations sont donnés par :

$$\begin{aligned} \tau &= (\Delta t)(\tau_2 - 1/2), & \nu &= \frac{(2\tau_1 - 1)}{8} (\Delta t) c^2, \\ \lambda(\rho) &= \left(\tau_1 - \frac{1}{2} \right) \Delta t \left(\frac{c^2}{2} - \frac{dp_0}{d\rho} \right) \end{aligned} \quad (\text{III. 46})$$

où λ mesure la force de l'interaction. Pour $T < T_c = \frac{1}{2} \lambda$, le système se sépare en deux phases. La différence de potentiel chimique est donnée par:

$$\Delta\mu(\Delta\rho, \rho, T) = -\frac{\lambda \Delta\rho}{2 \rho} + \frac{T}{2} \ln \left(\frac{1 + \Delta\rho/\rho}{1 - \Delta\rho/\rho} \right) - k \nabla^2 (\Delta\rho) \quad (\text{III. 47})$$

Les aspects thermodynamiques du modèle interviennent dans le tenseur de pression $P_{\alpha\beta}$. D'après la description de Cahn-Hilliard de la dynamique du non-équilibre, cette fonction à partir de l'énergie libre d'équilibre d'un mélange multiphasique. Nous choisissons le modèle le plus simple d'un système binaire non idéal, tel que le fluide de Van der Waals :

$$\Psi = \int d\vec{r} \left(\psi(T, \rho) + \frac{k}{2} (\nabla\rho)^2 \right) \quad (\text{III. 48 - a})$$

où $\psi(T, \rho)$ est la masse effective d'énergie libre à la température T :

$$\psi(T, \rho) = \rho T \ln \left(\frac{\rho}{1 - \rho b} \right) - a \rho^2 \quad (\text{III. 48 - b})$$

Le tenseur de pression est lié à l'énergie libre de la manière suivante [55]:

$$P_{\alpha\beta}(\vec{r}) = P(\vec{r}) \delta_{\alpha\beta} + k \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \quad (\text{III. 49})$$

où

$$P(\vec{r}) = p_0 - k \rho \nabla^2 \rho - \frac{k}{2} |\vec{\nabla} \rho|^2 \quad (\text{III. 49})$$

où $p_0 = \rho \psi'(\rho) - \psi(\rho)$ est l'équation d'état du fluide.

En conclusion, nous présentons des expressions pour f_i^0 et g_i^0 pour le modèle utilisé :

$$f_i^0 = A + Bu_\alpha e_{i\alpha} + Cu^2 + Du_\alpha u_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} + G_{\alpha\beta} e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (\text{III. 50})$$

$$f_0^0 = A_0 + C_0 u^2 \quad (\text{III. 51})$$

$$g_i^0 = H + Ku_\alpha e_{i\alpha} + Ju^2 + Qu_\alpha u_\beta e_{i\alpha} e_{i\beta} \quad (\text{III. 52})$$

$$g_0^0 = H_0 + J_0 u^2 \quad (\text{III. 53})$$

Un choix approprié des coefficients dans ces développements doit être conforme aux équations (III. 41 – a) et (III. 41 – b) :

$$A_0 = \rho - 6A, \quad A = (p_0 - k\Delta\rho\nabla^2\Delta\rho - k\rho\nabla^2\rho)3c^2,$$

$$B = \frac{\rho}{3c^2}, \quad C = -\frac{\rho}{6c^2}, \quad C_0 = -\frac{\rho}{c^2}, \quad D = \frac{2\rho}{3c^4}$$

$$G_{xx} = -G_{yy} = \frac{k}{3c^4} \left\{ \left(\frac{\partial\rho}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial\rho}{\partial y} \right)^2 \right\} + \frac{k}{3c^4} \left\{ \left(\frac{\partial\Delta\rho}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial\Delta\rho}{\partial y} \right)^2 \right\}$$

$$G_{xy} = \frac{2k}{3c^4} \left[\frac{\partial\rho}{\partial x} \frac{\partial\rho}{\partial y} + \frac{\partial\Delta\rho}{\partial x} \frac{\partial\Delta\rho}{\partial y} \right]$$

$$H_0 = \Delta\rho - 6H, \quad H = \frac{\Gamma\Delta\mu}{3c^2}, \quad K = \frac{\Delta\rho}{3c^2}, \quad J = -\frac{\Delta\rho}{6c^2}$$

$$J_0 = -\frac{\Delta\rho}{c^2}, \quad Q = \frac{2\Delta\rho}{3c^2} \quad (\text{III. 54})$$

les dérivées sont approximées l'aide de différence-finies :

$$\partial_\alpha\rho \approx \frac{1}{3c\Delta x} \sum_i \rho(\vec{r} + \vec{e}_i\Delta t) e_{i\alpha} \quad (\text{III. 55})$$

$$\Delta^2\rho \approx \frac{2}{3(\Delta x)^2} \left[\sum_i \rho(\vec{r} + \vec{e}_i\Delta t) - 6\rho(\vec{r}) \right] \quad (\text{III. 56})$$

III.8. Equation d'état dans la méthode LBM

III.8.1. Introduction

Les équations d'état permettent de décrire la relation entre la température, pression, et volume (ou densité) pour une substance ou un mélange donné. Comme montré dans l'équation (III. 57), la loi des gaz parfaits qui donne une relation linéaire entre la pression p et la masse volumique ρ quand la température T est constante (R est la constante des gaz), est l'équation d'état la plus simple.

$$p = \rho RT \quad (\text{III. 57})$$

III.8.2. Equations d'état utilisées avec la méthode LBM

Pour les gaz à basses pressions et à températures élevées, l'application de la loi des gaz parfaits est inappropriée. Cela est dû aux non-idéalités induites par le volume non-négligeable de molécules du gaz et des interactions moléculaires. En 1873, Van der

Waals a considéré ces non-idéalités et a proposé l'équation d'état de van der Waals (VdW) qui sera utilisée dans nos applications [22] :

$$p_0 = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - a\rho^2 \quad (\text{III. 58})$$

où a est le paramètre d'attraction et b le paramètre de répulsion (ou volume moléculaire efficace). Dans nos applications, on prendra $a = 9/49$ et $b = 2/21$ qui correspondent à la température critique $T_c = 4/7$.

D'autres équations d'état ont été utilisées lors de simulations par la méthode LBM. On citera à titre d'exemple :

- Equation d'état de « Shan & Chen » :

$$p = \frac{\rho}{3} - \frac{c_0}{2} \lambda \rho_0^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right) \right]^2 \quad (\text{III. 59})$$

où c_0 est une constante dépendante de la structure du réseau choisi. Pour les réseaux D2Q9 et D3Q19, $c_0 = 6$, et pour le réseau D3Q15, $c_0 = 10$ [22].

- Equation d'état de « Redlich-Kwong » :

$$p = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2}{\sqrt{T}(1 + b\rho)} \quad (\text{III. 60})$$

$$a = \frac{0.42748R^2T_c^{2.5}}{P_c} \quad \text{et} \quad b = \frac{0.08664RT_c}{P_c}$$

- Equation d'état de « Redlich-Kwong Soave » :

$$p = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\alpha(T)\rho^2}{1 + b\rho} \quad (\text{III. 61})$$

$$\alpha(T) = \left[1 + (0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2)(1 - \sqrt{T/T_c}) \right]^2$$

$$a = \frac{0.42748R^2T_c^2}{P_c} \quad \text{et} \quad b = \frac{0.08664RT_c}{P_c}$$

- Equation d'état de « Carnahan-Starling » :

$$p = \rho RT \frac{1 + b\rho/4 + (b\rho/4)^2 - (b\rho/4)^3}{(1 - b\rho/4)^3} - a\rho^2 \quad (\text{III. 62})$$

$$a = \frac{0.4963R^2T_c^2}{P_c} \quad \text{et} \quad b = \frac{0.18727RT_c}{P_c}$$

III.8.3. Influence de l'équation d'état sur le rapport de la masse volumique entre les phases en présence

En réalité, pour un système d'écoulement multiphasique de vapeur-liquide, le rapport de masse volumique entre le liquide et vapeur généralement est supérieur à 100/1. Comme rapporté dans l'article de Swift et al [55] le rapport de la masse volumique par l'utilisation de l'approche d'énergie libre (free-energy) est moins de 10/1. Le plus grand rapport de masse volumique examiné dans le modèle HCZ (He, Chen, and Zhang) est de 40/1 [56]. Peng Yuan [22] a trouvé par transformation de l'équation d'état, qu'on peut atteindre un rapport de masse volumique de plus de 1000/1 dans le modèle SC (Shan et Chen).

Equation d'état de:	$\rho_{\text{liquide}}/\rho_{\text{vapeur}}$
Shan et Chen (SC)	58,49753
Van der Waals (VdW)	7,202862
Carnahan-Starling (S-C)	1359,497

Table III.1 Rapports de masses volumiques pour différentes équations d'état [22]

III.9. Mise en œuvre algorithmique et informatique de la méthode LBM

III.9.1.Introduction

L'algorithme de Boltzmann sur réseau est basé sur une distribution discrétisée $f_{\alpha}(x)$, où α représente une des directions des vitesses discrètes. Les vitesses discrètes sont représentées par des vecteurs déplacements vers les sites voisins du réseau e_{α} où $\alpha = 1, \dots, b$ où b est le nombre total des directions de déplacement. La fonction de distribution est définie pour chacun des sites du réseau dans le système et un nouvel ensemble de distribution est obtenue à chaque étape de temps après collision des particules.

III.9.2.Algorithme de la méthode Boltzmann sur réseau

L'idée de base pour la mise en œuvre d'un algorithme de simulation LBM est inspirée de l'algorithme 'Stream and collide' [57] qui est composé de deux parties de calcul : advection et collision (figure III.7).

L'algorithme de la méthode LBM peut être synthétisé par les deux étapes suivantes (figure III.8) :

- Etape d'initialisation : dans cette étape les paramètres tels que les masses volumiques des deux fluides ou gaz, accélération des particules, le temps de relaxation doivent être déclarés. Définir la dimension du domaine, la géométrie de l'obstacle.
- **Etape de propagation** : advection des particules vers les nœuds voisins selon leur direction de vitesse discrète selon l'équation (III.12).
- **Etape des conditions aux limites** : on impose les conditions aux limites de type rebondissement en arrière des particules (condition de non glissement), (no-slip boundary condition) ou les conditions aux limites périodiques.
- **Etape de collision** : cette étape correspond à la collision des particules entre elles. Après cette étape les particules de fluides se retrouvent avec une nouvelle vitesse.
- **Etape de calcul des paramètres** : après un temps plein (collision + propagation) on calcule les quantités macroscopiques selon les équations (III.22) ; calcul de la distribution d'équilibre selon les équations (III.50), (III.51), (III.52) et (III.53) et calcul de la nouvelle fonction de distribution (redistribution) selon l'équation (III.11). Finalement, aller à la deuxième étape pour un nouveau cycle de calcul.

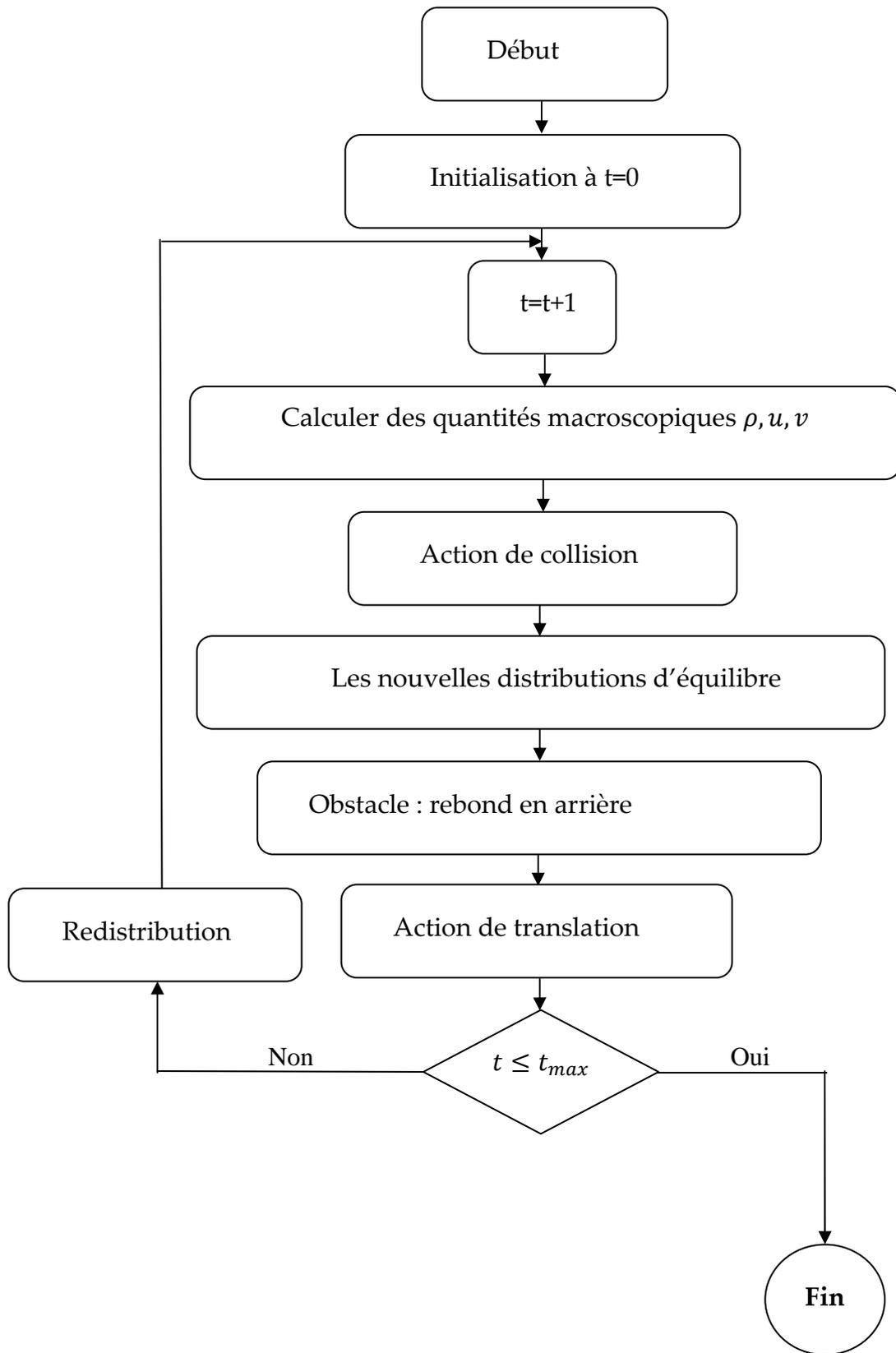


FIG III.7 Algorithme 'Stream and collide' [57]

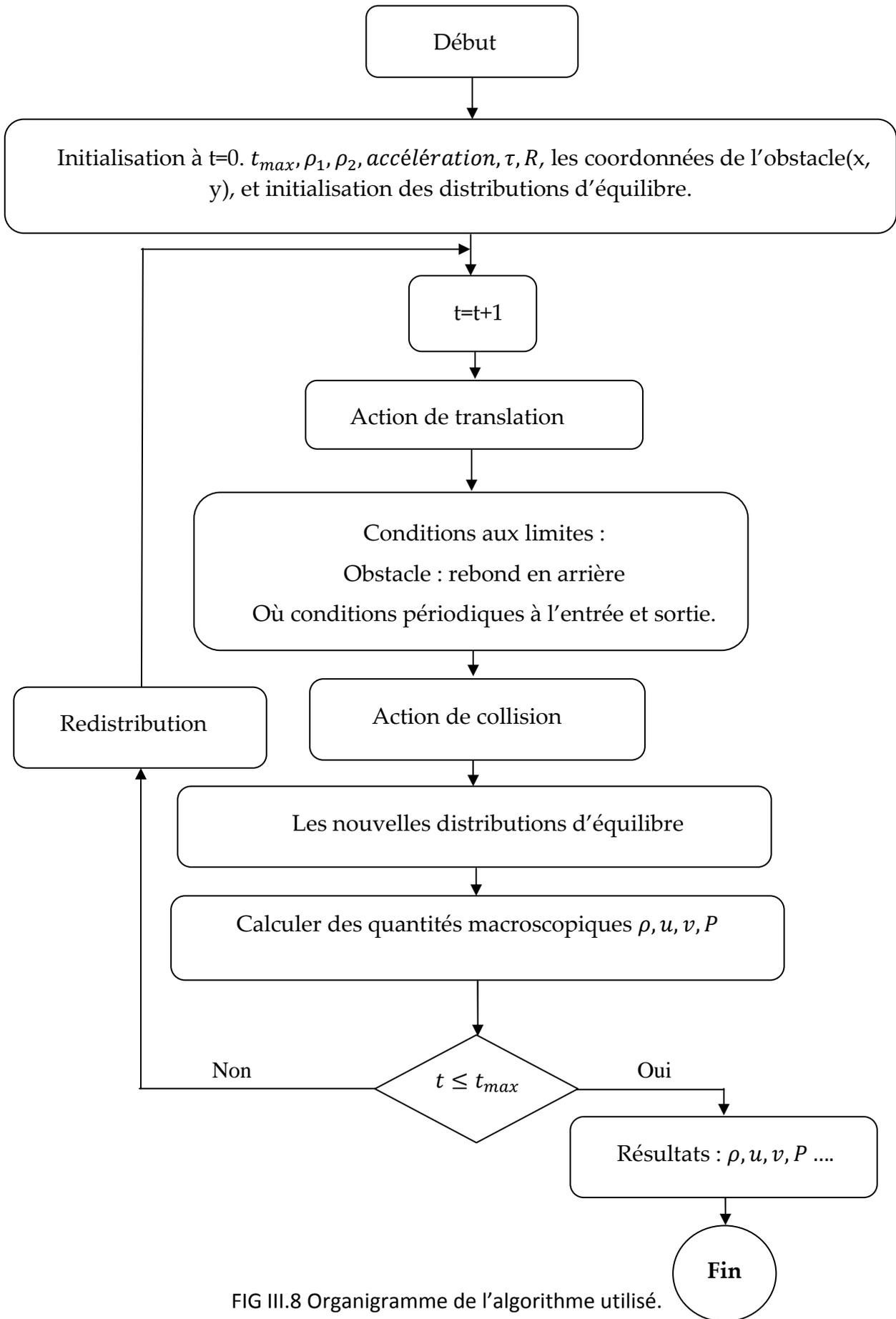


FIG III.8 Organigramme de l'algorithme utilisé.

La mise en œuvre algorithmique dans le code développé a lieu selon la procédure décrite par le pseudo-code suivant :

Début

lire les données, intégration de géométrie

Début

Les données d'entrée

L_x Nombres des nœuds suivant X

L_y Nombres des nœuds suivant Y

t_{\max} Nombre maximale d'itération

M_1 Masse volumique de fluide 1

M_2 Masse volumique de fluide 2

τ Temps de relaxation

Intégration de la géométrie

Pour $x=1$ à L_x

Pour $y=1$ à L_y

Ouvrir (anb.obs)

Lire les coordonnées (x,y) de l'obstacle

Fin

Translation des particules

Début

node : position d'un particule avant la translation

n_hlp : position d'un particule après la translation

Pour $x=1$ à L_x

Pour $y=1$ à L_y

$n_hlp(0,x,y) = node(0,x,y)$

$n_hlp(1,x_e,y) = node(1,x,y)$

$n_hlp(4,x_w,y) = node(4,x,y)$

$n_hlp(2,x_e,y_n) = node(2,x,y)$

$n_hlp(3,x_w,y_n) = node(3,x,y)$

$n_hlp(5,x_w,y_s) = node(5,x,y)$

$n_hlp(6,x_e,y_s) = node(6,x,y)$

Fin

Conditions aux limites

Début

Pour $x=1$ à L_x

Pour $y=1$ à L_y

Si (x,y) coordonnée de l'obstacle

Alors

$node(1,x,y) = n_hlp(4,x,y)$

$node(4,x,y) = n_hlp(1,x,y)$

$node(2,x,y) = n_hlp(5,x,y)$

$node(3,x,y) = n_hlp(6,x,y)$

$node(5,x,y) = n_hlp(2,x,y)$

$node(6,x,y) = n_hlp(3,x,y)$

Fin

Fin

CHAPITRE

4

*Résultats et discussions***IV.1. Introduction**

Dans ce chapitre nous présentons une série d'applications de la méthode de Boltzmann sur réseau pour l'écoulement multiphasique à faible nombre de Reynolds dans différents milieux. Les deux étapes de l'algorithme "stream and collide" [57] pour un réseau hexagonal (D2Q7) sont utilisés pour simuler l'équation de Boltzmann. Le cas bidimensionnel a été choisi parce qu'il donne l'occasion d'une visualisation facile des distributions de phases. Le domaine peut être décomposé en cellules d'unité de longueur L . Le fluide choisi par Swift et al [55] a été retenu pour notre étude et on prendra les coefficients $a = 9/49$ et $b = 2/21$, correspondant à une masse volumique critique $\rho_c = 7/2$ et une température critique $T_c = 4/7$. Le coefficient de tension de surface est tel-que $k = 0.01$.ace. Enfin, on a posé les conditions de rebondissement en arrière sur les frontières solides. Les résultats obtenus ont été comparés à ceux obtenus par la simulation à l'aide du logiciel commercial FLUENT (CFD):

- Ecoulement multiphasique dans un milieu dispersé homogène.
- Ecoulement multiphasique autour d'un arrangement de carrés homogènes fixes (réseau capillaire).
- Ecoulement multiphasique dans un milieu poreux reconstruit à partir d'un traitement d'image.

Les simulations ont été réalisées sur un PC core duo avec 1 GB de RAM.

IV.2. Présentation du code de calcul FLUENT

Le code de calcul Fluent est commercialisé par le groupe FLUENT. Ce groupe est actuellement l'un des pôles de compétence en mécanique des fluides numérique les plus importants. Il développe et commercialise une solution complète sous forme de logiciels de CFD (Computational Fluid Dynamics) généralistes qui simulent tous les écoulements fluides, compressibles ou incompressibles, impliquant des phénomènes physiques complexes tels que la turbulence, le transfert thermique, les réactions chimiques, les écoulements multiphasiques pour toute l'industrie. Les produits et services proposés

par le groupe FLUENT aident les ingénieurs à développer leurs produits, à optimiser leur conception et à réduire leurs risques.

Le logiciel Fluent modélise par la méthode des volumes finis des écoulements très variés dans des configurations plus ou moins complexes. Il est composé, comme tout logiciel de type CFD, de trois éléments clés qui sont : le préprocesseur, le solveur et le post-processeur.

IV.3. Simulation d'un écoulement multiphasique dans un milieu dispersé homogène

IV.3.1. Les courbes de convergence

La figure (IV.1-a) montre la variation de la vitesse moyenne dans une section du canal. On remarque sur cette figure que la convergence des résultats est obtenue après un certain nombre d'itérations par la méthode LBM, la vitesse moyenne obtenue dans une section du canal située à $x=Lx/2$. La figure (IV.1-b) montre la convergence du système après un certain nombre d'itérations par le logiciel FLUENT. La convergence sous "Fluent" est principalement surveillée suivant la valeur des résidus des différents paramètres de l'écoulement. Le logiciel cessera les itérations dès que tous les résidus calculés soient sous la valeur du critère de convergence entré par l'utilisateur. Cette valeur est fixée selon le degré de précision désiré de la solution approchée par le code de calcul.

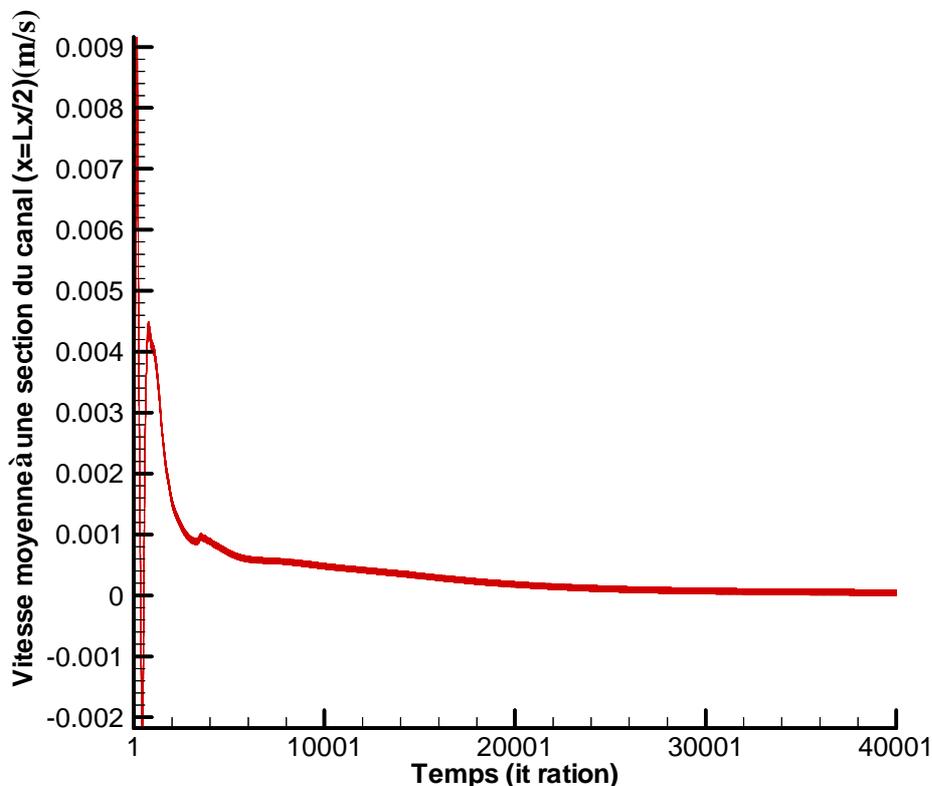


FIG IV.1-a : Variation de la vitesse moyenne dans une section du canal en fonction du temps pour le cas du milieu dispersé homogène (LBM)

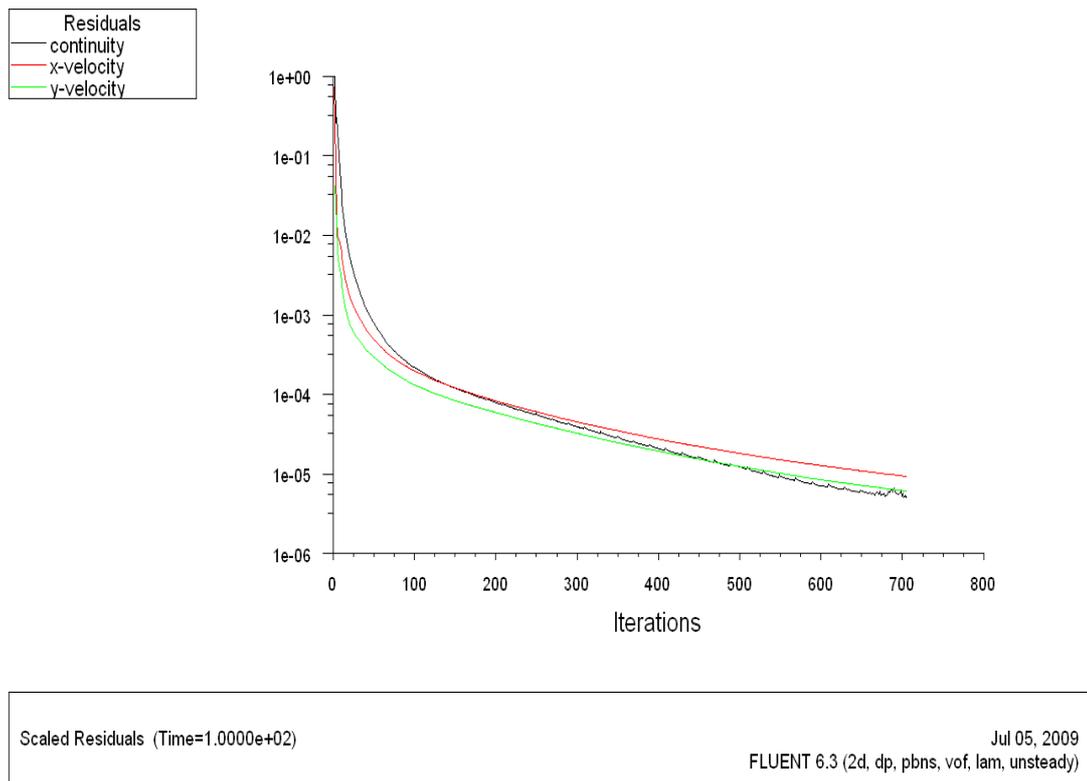


FIG IV.1-b : Convergence du système après un certain nombre d'itérations par FLUENT.

IV.3.2. Distribution des phases

Le déplacement non-miscible de la vapeur par le liquide dans un milieu dispersé homogène est analysé dans cette section. L'espace vide du milieu est représenté comme collection de grands cylindres homogènes, comme monté sur les figures IV.2. Le liquide déplaçant la vapeur à un nombre capillaire grand ($C_a = 1.77 \times 10^{-3}$) est atteint pendant l'écoulement qui mène à un drainage très efficace. Aucun mouillage préférentiel n'est imposé dans cette simulation. Cependant, l'introduction de la mouillabilité dans le système peut mener aux changements énergiques du processus de déplacement. Après 40000 d'itérations, le liquide a traversé la totalité des pores laissant une certaine vapeur emprisonnée avec similitude dans tous les pores. Pour un drainage complet nous devons exécuter notre programme plus de 80000 d'itérations. Ce type de simulation est utile pour prévoir le processus d'inondation dans les domaines réels d'hydrocarbure avec une mouillabilité non uniforme. Notre résultat est comparé par le logiciel FLUENT, cependant on a observé une légère différence entre les résultats obtenus, tel que le liquide ne laissant pas une certaine vapeur emprisonnée à cause de l'injection continue du liquide par le côté gauche du milieu, et le drainage peut être fait à un temps plus petit parce qu'on peut imposer une vitesse d'injection importante.

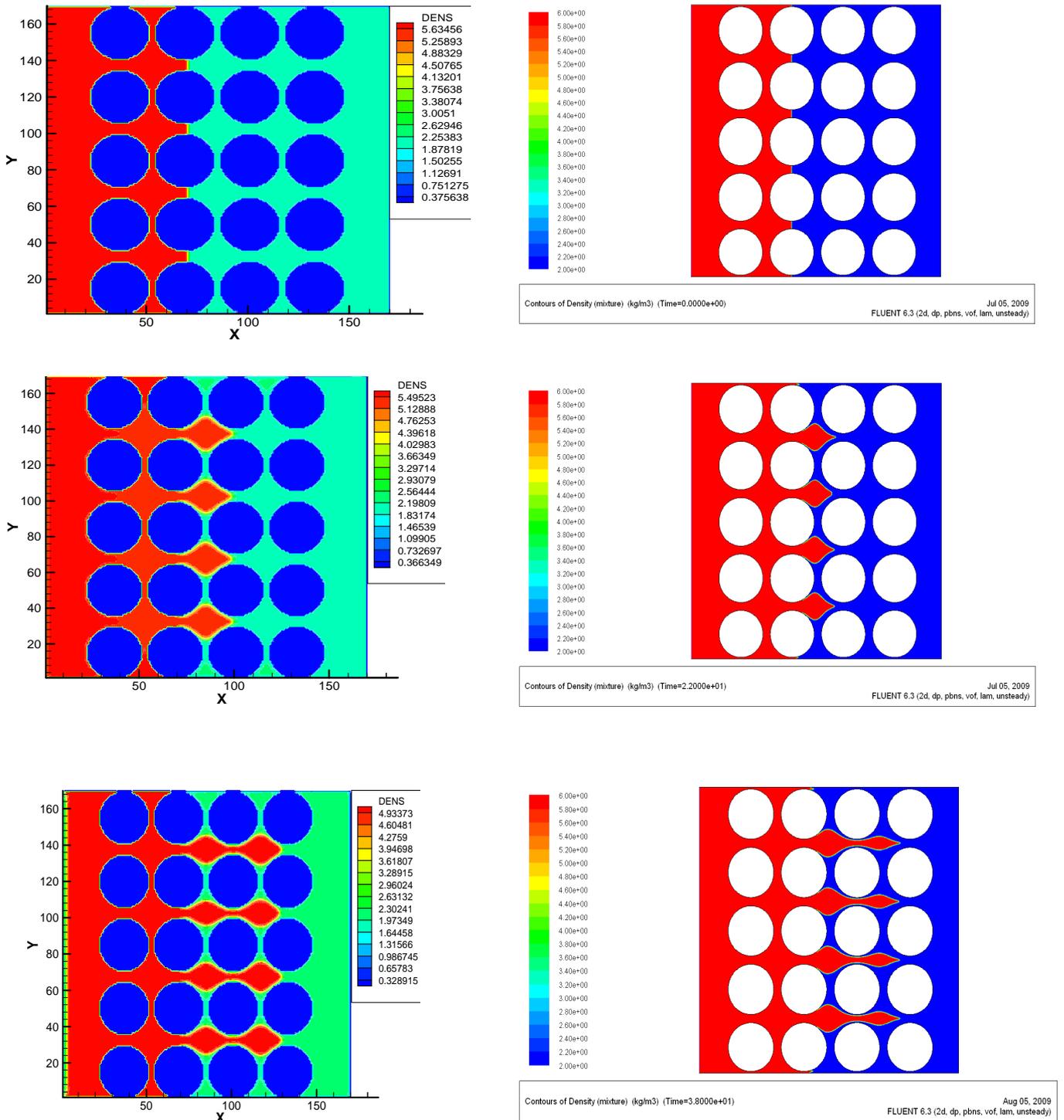


FIG IV.2 : Distribution des phases dans un réseau en 2D de porosité $\varepsilon = 0.52$ à différent temps, à gauche par la méthode LBM ($t=0, 2600$ et 40000), à droite par FLUENT ($t=0, 420$ et 760). La couleur rouge représente la phase liquide ($\rho_l = 6 \text{ kg/m}^3$), la phase vapeur ($\rho_v = 2 \text{ kg/m}^3$) représentée par la couleur verte dans la méthode LBM et par la couleur bleu dans le logiciel FLUENT.

IV.3.3. Champ de vitesse

Les figures IV.3 et IV.4 représentent le champ de vitesse selon x et y respectivement, le champ de couleur montre bien les endroits où les vitesses sont faibles ainsi que celles importantes, le nombre de Reynolds calculé à partir de cette simulation à $x=Lx/2$ et de $R_{\square} = 8.04$. On remarque sur la figure (IV.3) de la composante horizontale que la vitesse maximale est trouvée entre les obstacles à cause de la diminution de la section de passage de fluide et elle est très faible en dehors de cette section à cause de la disposition des obstacles. La figure de la composante verticale montre que le champ de vitesse est symétrique pour tous les obstacles.

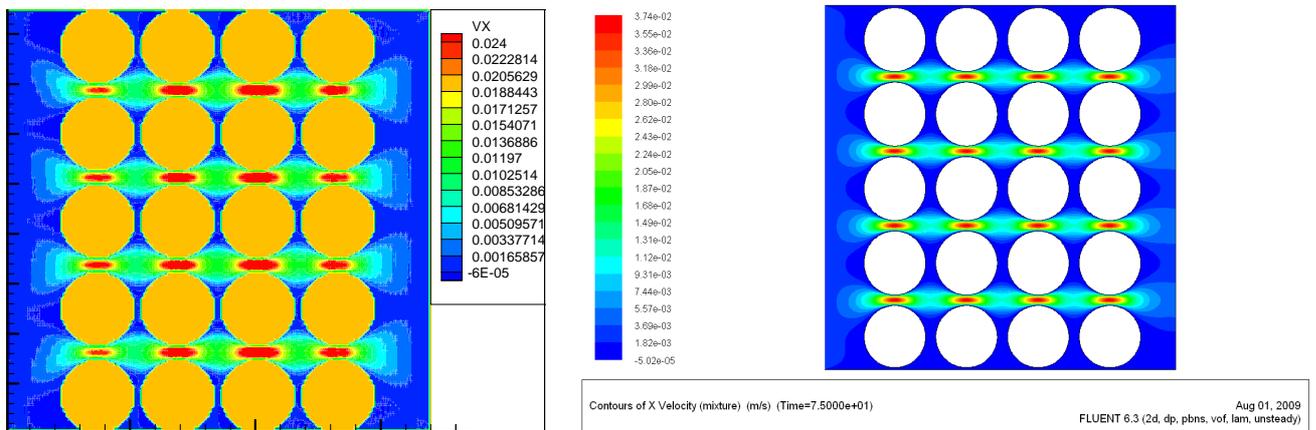


FIG IV.3 : Champ de vitesse selon l'axe x, cas du milieu dispersé homogène, à gauche par LBM, à droite par FLUENT.

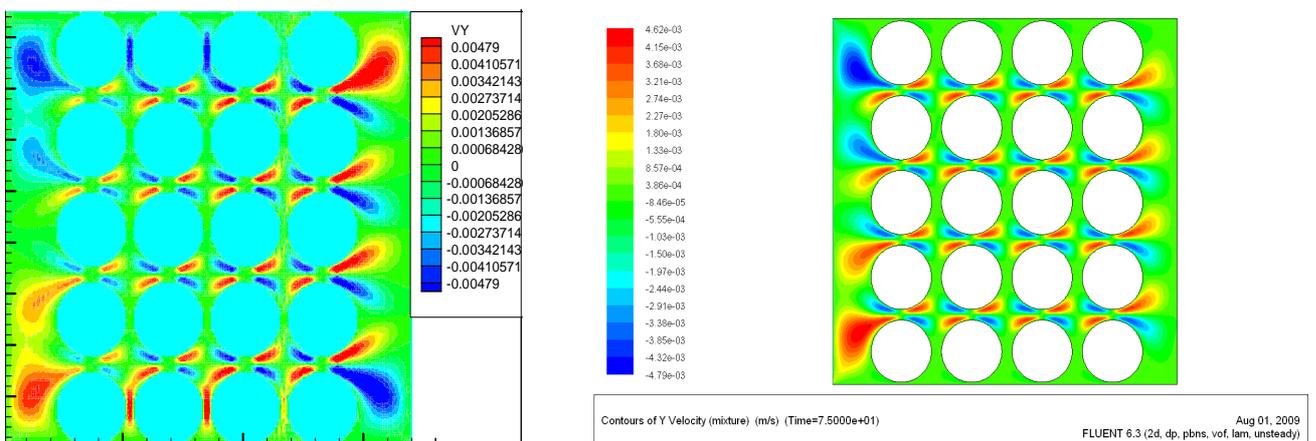


FIG IV.4: Champ de vitesse selon l'axe y, cas du milieu dispersé homogène, à gauche par LBM, à droite par FLUENT.

Les figures IV.5-a et IV.5-b représentent le vecteur de vitesse coloré par la composante horizontale et verticale respectivement. Les figures montrent le comportement irrégulier du champ de vitesse. La distribution des couleurs indiquent qu'il y a des zones d'accélération (rouge) et des zones de ralentissement (bleu).

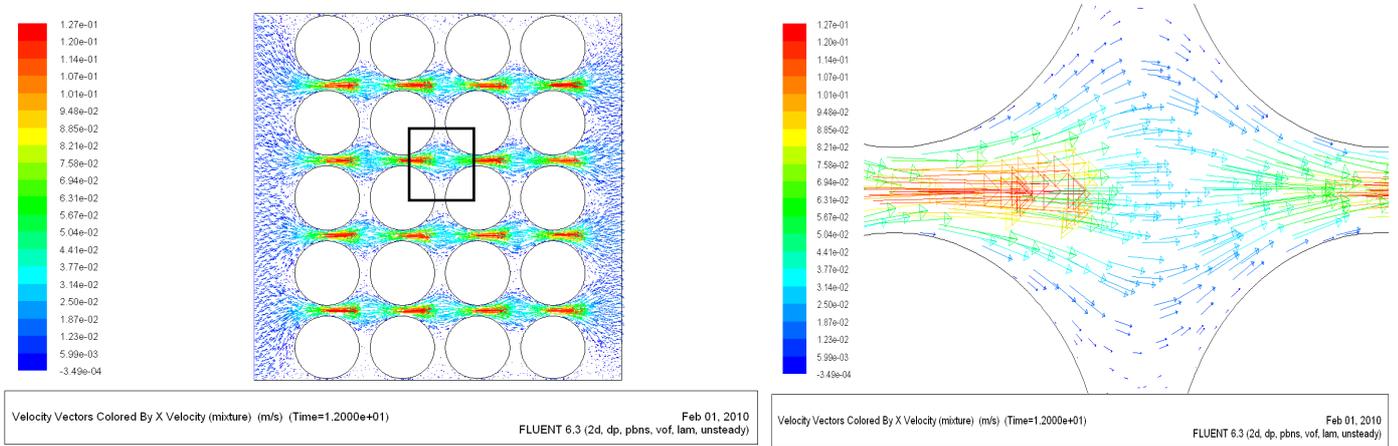


FIG IV.5-a Vecteur de vitesse coloré par la composante horizontale.

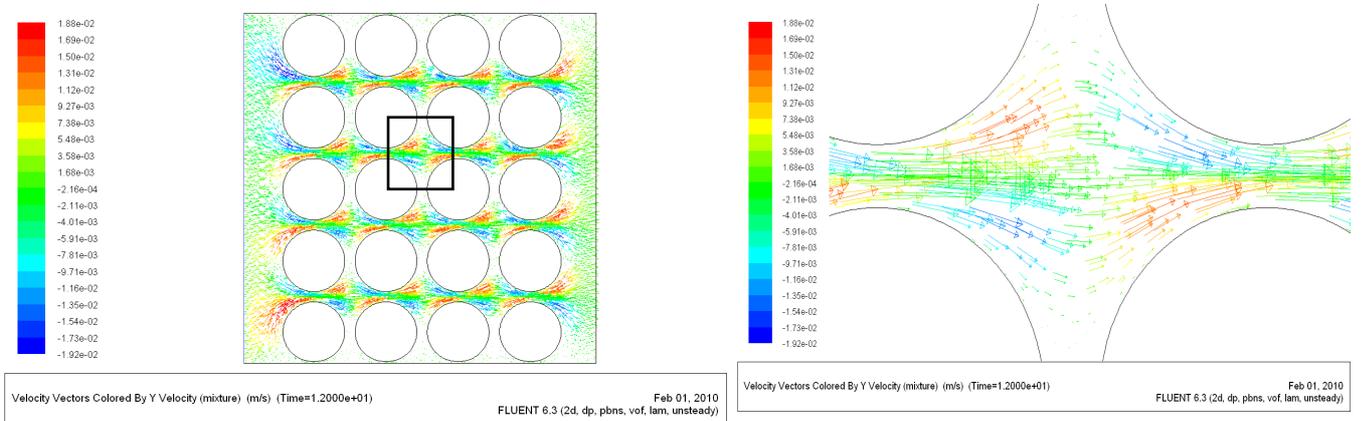


FIG IV.5-b Vecteur de vitesse coloré par la composante verticale.

IV.3.4. Courbes de variation de la vitesse et chute de pression

Les figures IV.6 montrent la variation de la vitesse axiale V_x de l'écoulement dans le milieu dispersé homogène selon l'axe y à ($x=87$ lattice) pour la méthode LBM ($x=0.87$ m pour FLUENT), on remarque sur cette figure que la variation de la vitesse est périodique due à la disposition des cylindres.

Les figures IV.7 montrent la variation de chute de pression sur le long du milieu pour les deux phases à ($y=33$ lattice) pour la méthode LBM (0.33 m pour FLUENT), la viscosité cinématique est de $0.07216 \text{ m}^2/\text{s}$ et la différence de pression entre l'entrée et la sortie est de $\sim 2 \text{ pascal}$ pour la méthode LBM et de $\sim 3 \text{ pascal}$ pour le logiciel FLUENT. D'après cette figure on trouve que la chute de pression présente un changement complexe sur le long de la direction d'écoulement à l'intérieur du milieu dispersé (la chute de pression n'est pas une fonction linéaire due à la présence de deux phases), et on peut considérer que la chute de pression est constante entre deux obstacles. La photo de la figure (IV.8) [58] montre la variation de la vitesse et la chute de pression sur le long d'un milieu dispersé homogène composé de plusieurs obstacles, qui peut être comme une référence pour valider les résultats obtenus. On constate presque les mêmes observations que les figures (IV.6 et IV.7).

Dans la présente étude nous avons présenté les résultats obtenus avec la méthode Boltzmann sur réseau pour différentes applications, pour l'écoulement autour d'un arrangement des obstacles fixes. Ces résultats montrent que la méthode LBM modélise correctement ce type d'écoulement. La méthode LBM pour l'analyse d'un écoulement dans un milieu dispersé homogène a donné des résultats qualitativement bons et également validés avec ceux obtenus par FLUENT. Ils sont comparables aussi à ceux trouvés dans la référence [58]. Nous soulignons également qu'il serait intéressant d'étendre ce travail afin de l'appliquer pour étudier des géométries plus complexes telles que celles trouvées dans les milieux poreux réels.

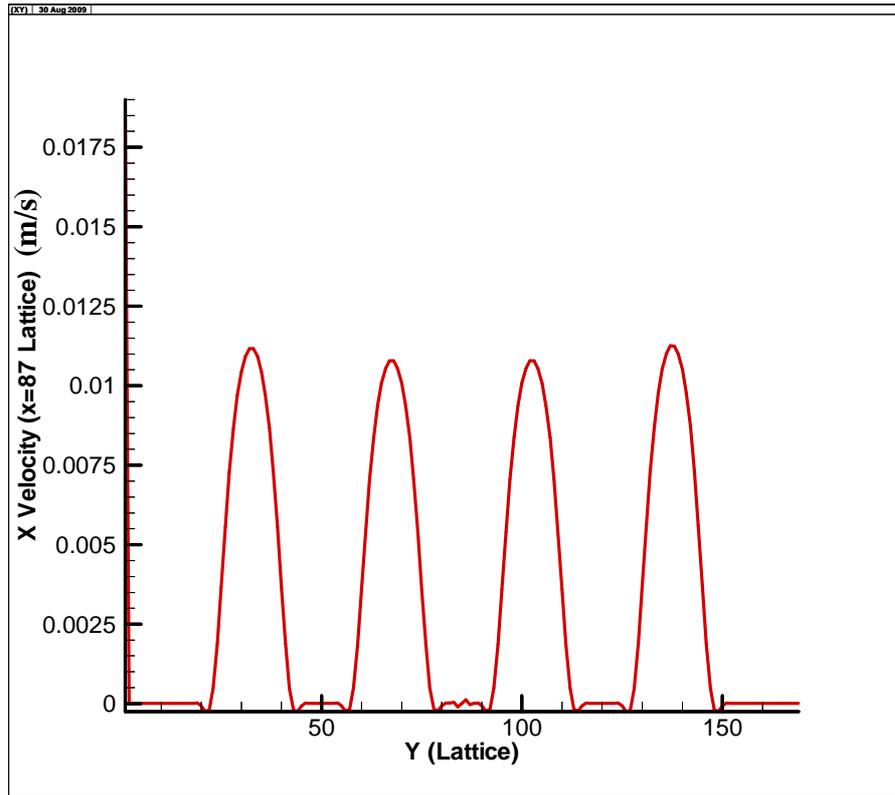


FIG IV.6 -a Variation de la vitesse axiale V_x de l'écoulement dans le milieu dispersé homogène en fonction de y à $x=87$ lattice obtenu par la méthode LBM.

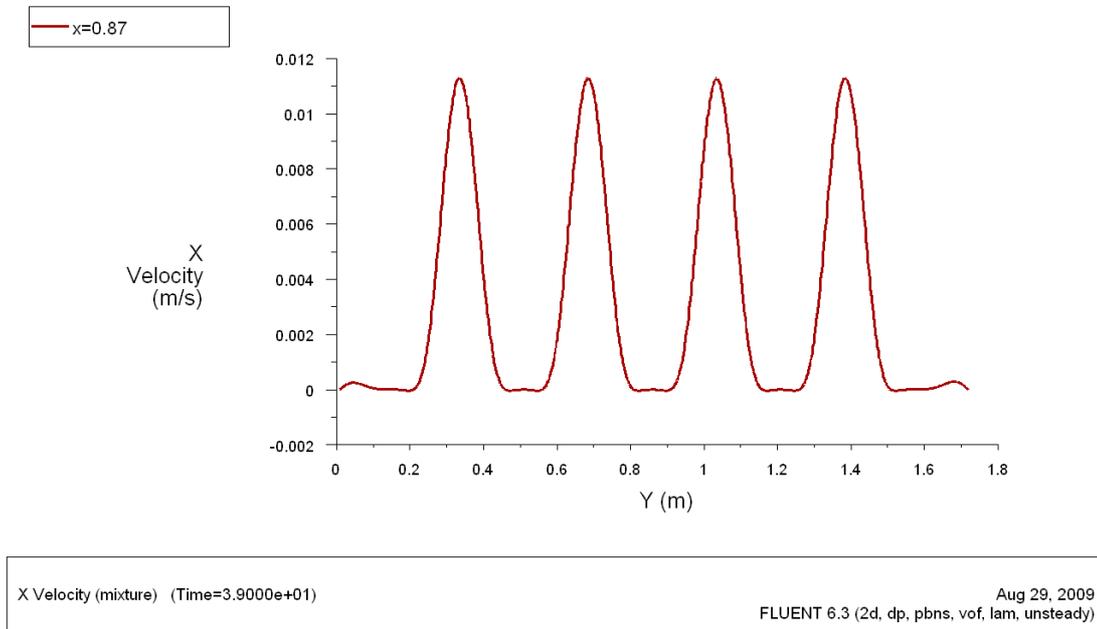


FIG IV.6 -b Variation de la vitesse axiale V_x de l'écoulement dans le milieu dispersé homogène en fonction de y à $x=0.87$ m obtenu par FLUENT.

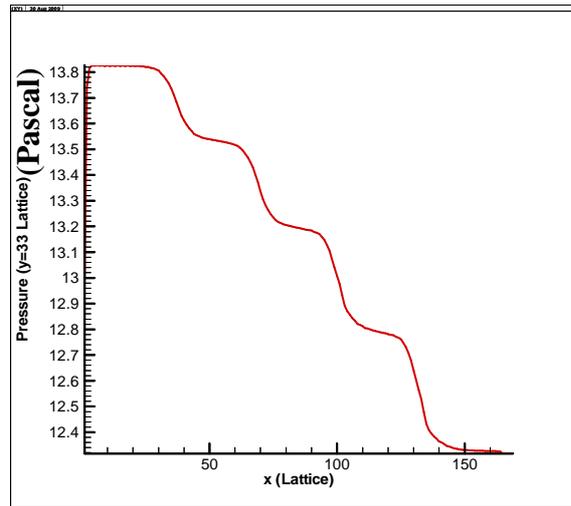


FIG IV.7-a Variation de chute de pression sur le long du milieu pour les deux phases a $y=33$ lattice obtenu par la méthode LBM.

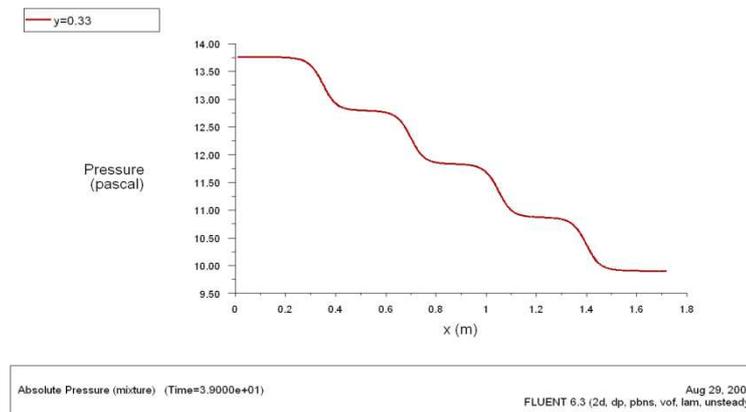


FIG IV.7-b Variation de chute de pression sur le long du milieu pour les deux phases a $y=0.33$ m obtenu par FLUENT.

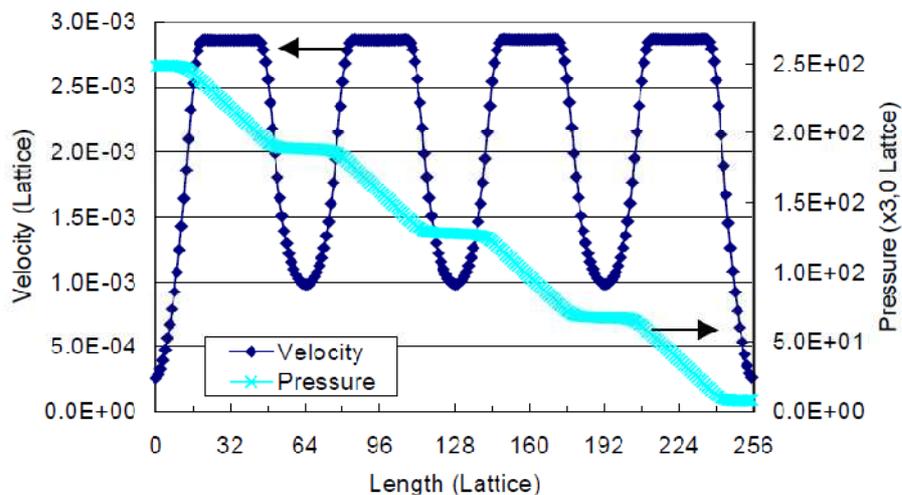


FIG IV-8: Variation de vitesse et de chute de pression dans un milieu dispersé homogène trouvée par la méthode. (Hiroshi Mitsubishi, Hiroshi Okabe, Japan National Oil Corporation).

IV.4. Simulation d'un écoulement multiphasique autour d'un arrangement de carrés homogènes fixes (réseau capillaire) :

IV.4.1. Introduction

Les écoulements multiphasiques en milieux poreux sont caractérisés par des structures géométriques différentes de répartition des phases dans l'espace poreux, que l'on appelle configuration multiphasique ou structure multiphasique. Bien qu'il y ait plusieurs processus qui influent directement sur la distribution des phases comme la mouillabilité, le nombre capillaire, la structure des pores etc.

Dans cette partie, nous présentons les résultats d'utilisation de la simulation d'un écoulement multiphasique dans un réseau capillaire. Les objectifs de la présente étude sont les suivants :

- Etude de l'effet de mouillabilité et de nombre capillaire sur la distribution des phases.
- Etude de l'effet de l'orientation des canaux sur la formation de piégeage.

IV.4.2. Etude de l'effet de la mouillabilité et du nombre capillaire sur la distribution des phases

IV.4.2.1. Installation de simulation

La simulation a été effectuée dans un milieu poreux bidimensionnel. Le milieu a 173x173 sites avec une porosité de 44% et est composé de 72 chambres carré identiques reliées par des canaux aux conditions de limite périodiques dans toutes les directions. Chaque site a été initialisé avec une distribution de liquide r (couleur rouge) ou de liquide v (couleur verte).

La saturation de deux phases définie comme :

$$s_r = \frac{\text{nombre des sites occupé par le liquide } r}{\text{nombre des sites total occupé par les deux fluides}}$$

$$s_v = \frac{\text{nombre des sites occupé par le liquide } v}{\text{nombre des sites total occupé par les deux fluides}}$$

La simulation a été faite avec et sans force de mouillabilité pour examiner son effet. Dans le cas où la force de mouillabilité est prise en compte, deux nombres capillaires différents ont été aussi employés. Le nombre capillaire défini comme $Ca = \mu \cdot \bar{u} / \sigma$, tel que μ est la viscosité dynamique, \bar{u} est la vitesse moyenne, σ est la tension interfaciale, les paramètres de simulation sont présentés dans le tableau IV.1.

La viscosité cinématique	La tension interfaciale	Le nombre capillaire
$\nu^I = 4.167 \cdot 10^{-2}$	$\sigma^I = 5.99 \cdot 10^{-4}$	$Ca^I = 1.76 \cdot 10^{-2}$
$\nu^{II} = 4.167 \cdot 10^{-2}$	$\sigma^{II} = 9.610^{-3}$	$Ca^{II} = 3.55 \cdot 10^{-2}$

Tableau IV.1 : Paramètres de simulation.

IV.4.2.2. Résultats et discussions

La figure IV-9, représente la variation de la vitesse moyenne dans la section du canal située à la position ($x=Lx/2$), on remarque qu'après un temps déterminé le régime d'écoulement est permanent ce qui se traduit par une vitesse moyenne constante à un instant ($t+1$), cette courbe est un bon indicateur pour la convergence des résultats obtenus.

La figure IV-10-a montre la distribution initiale de deux phases dans tous les cas. La figure IV-10-b montre la distribution de deux phases sans force de mouillabilité après 30000 d'itérations, on remarque sur cette figure un petit déplacement de liquide r. Pour que le liquide r traverse la totalité des pores nous avons besoin d'exécuter notre programme plus de 100000 d'itérations.

La figure IV-11 montre la distribution de deux phases obtenues à l'état d'équilibre avec la force de mouillabilité à deux nombres capillaires différents ($Ca^I = 1.76 \cdot 10^{-2}$ et $Ca^{II} = 3.55 \cdot 10^{-2}$). Le système est complètement mouillé par le fluide v.

Au nombre capillaire Ca^I faible, le fluide r d'abord coalescent dans la forme des gouttes qui circulent par les canaux. Vu aux conditions des limites périodiques le fluide r forme des ganglions immobiles entre les chambres. Le fluide v traverse les canaux et contracté entre le fluide r et le solide. Dans les milieux poreux réalistes la phase mouillable peut couler comme des films épais, mais en raison du manque de connectivité de cette matrice solide, il est emprisonné dans les canaux par le fluide non mouillant.

Au nombre capillaire élevé (Ca^{II}), la configuration dans l'état d'équilibre sont complètement différentes. Le fluide r circule comme des grandes gouttes qui coalescent par la suite entre les chambres et sont plus tard cassées pour passer par les canaux. Ceci confirmé par les résultats obtenus par **Carlos E. Pico et al [59]**.

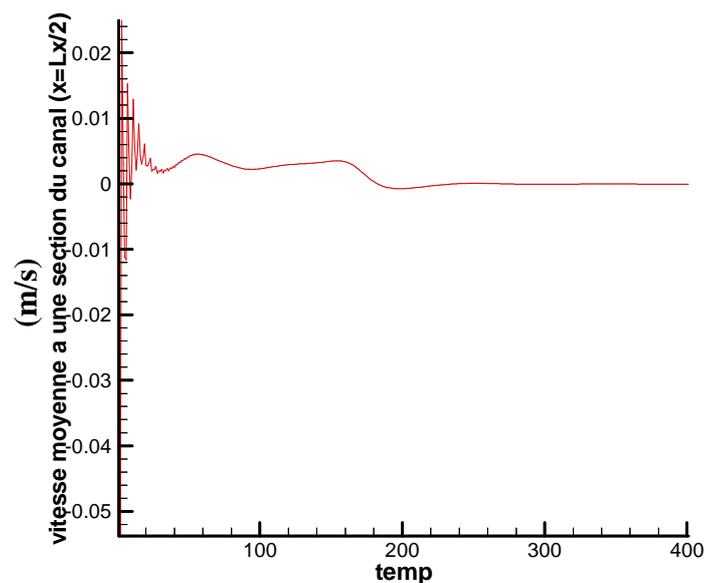


FIG IV-9 Variation de la vitesse moyenne dans une section du canal ($x= Lx/2$) en fonction du temps.

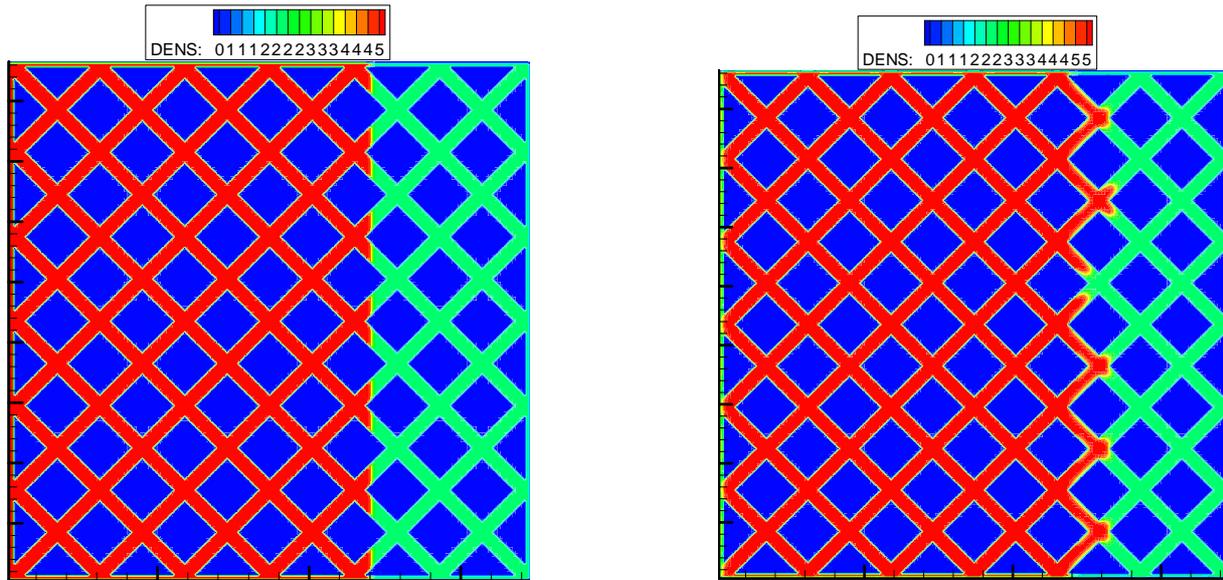
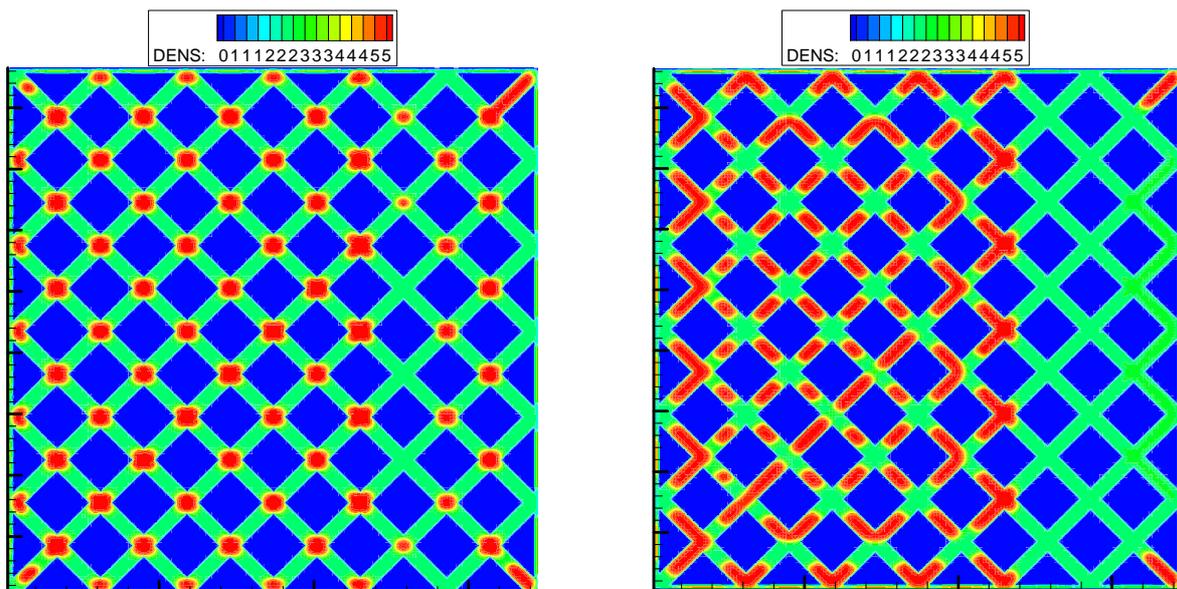


FIG IV-10 (a) : Distribution initiale de deux phases dans tous les cas, (b) : la distribution de deux phases sans la force de mouillabilité après 30000 d'itérations.



$$Ca^I = 1.76 \cdot 10^{-2}$$

$$Ca^{II} = 3.55 \cdot 10^{-2}$$

FIG IV-11 Distribution de deux phases avec la force de mouillabilité et deux nombre capillaire différent.

IV.4.3. Etude de l'effet de l'orientation des canaux sur la formation de piègeage

IV.4.3.1. Introduction

Le processus d'écoulement multiphasique en milieu hétérogène est accompagné de l'apparition des volumes isolés de la phase déplacée. Dans la littérature anglo-américaine, un tel processus porte le nom de trapping (piégeage). L'étude du phénomène de piégeage a une grande importance pratique dans l'ingénierie pétrolière, étant à l'origine des pertes du pétrole dans les gisements lors de leur exploitation.

Le mécanisme standard de formation d'un piège est le suivant (Fig. IV-12) :

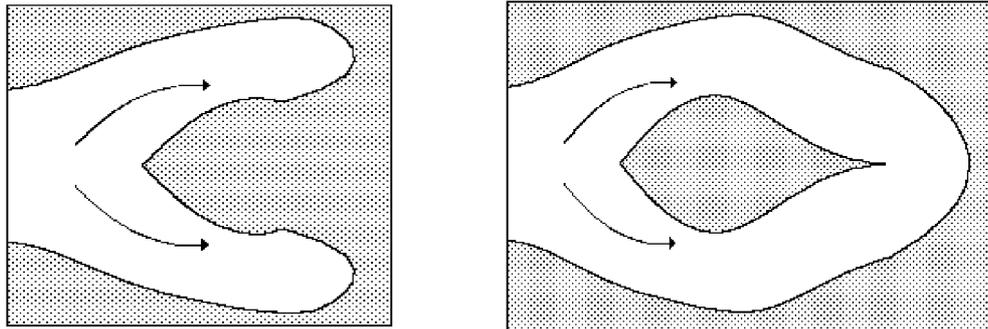


Fig. IV-12. Etapes consécutives de formation d'un piège, d'après [60].

Lorsque le front de déplacement rencontre une zone faiblement perméable (ZFP), la phase déplaçante prend des passages à travers les voies les plus perméables en contournant la phase non déplacée dans la ZFP. Alors, la phase non déplacée devient séparée de la sortie du milieu. Ainsi, un piège est formé. Le problème crucial de ce phénomène est que le piège reste immobile quelque soient les gradients de pression appliqués (pour de très forts gradients de pression, de faibles mouvements des pièges deviennent possibles.)

IV.4.3.2. Résultats et discussions

Un réseau capillaire, même parfaitement homogène, est favorable à la formation des pièges comme montré sur les résultats obtenus. En outre, ceci dépend de l'orientation des axes du réseau par rapport aux directions de l'écoulement. La Fig. IV-13 illustre le cas d'un même réseau de canaux homogènes. Les canaux sont orientés différemment par rapport à la direction principale de l'écoulement. Supposons que la direction macroscopique de l'écoulement soit horizontale avec un déplacement global de gauche à droite.

Dans le cas a, on observe la formation des pièges, car le front avance à la même vitesse le long des canaux horizontaux, en bloquant la phase non déplacée dans les pores verticaux. On voit que le piégeage s'effectue au moment où la phase déplaçante (couleur rouge) passe à travers un nœud. Nous appelons « piège » un volume piégé de la phase déplacée (couleur vert), tel que la phase entre les points A-B, B-C, D-E, E-F est piégée.

Dans le cas b, les pièges ne seront pas formés car tous les canaux sont à angles droits. Ainsi le piégeage dépend considérablement de l'orientation du réseau ou de la direction du déplacement. Cet effet d'orientation n'est pas inhérent à certains types de réseaux. En particulier, il n'est jamais observé dans les réseaux hexagonaux (Fig. IV-13- c) à cause de son isotropie, ce qui confirme avec les résultats obtenus par Irina PANFILOVA [60].

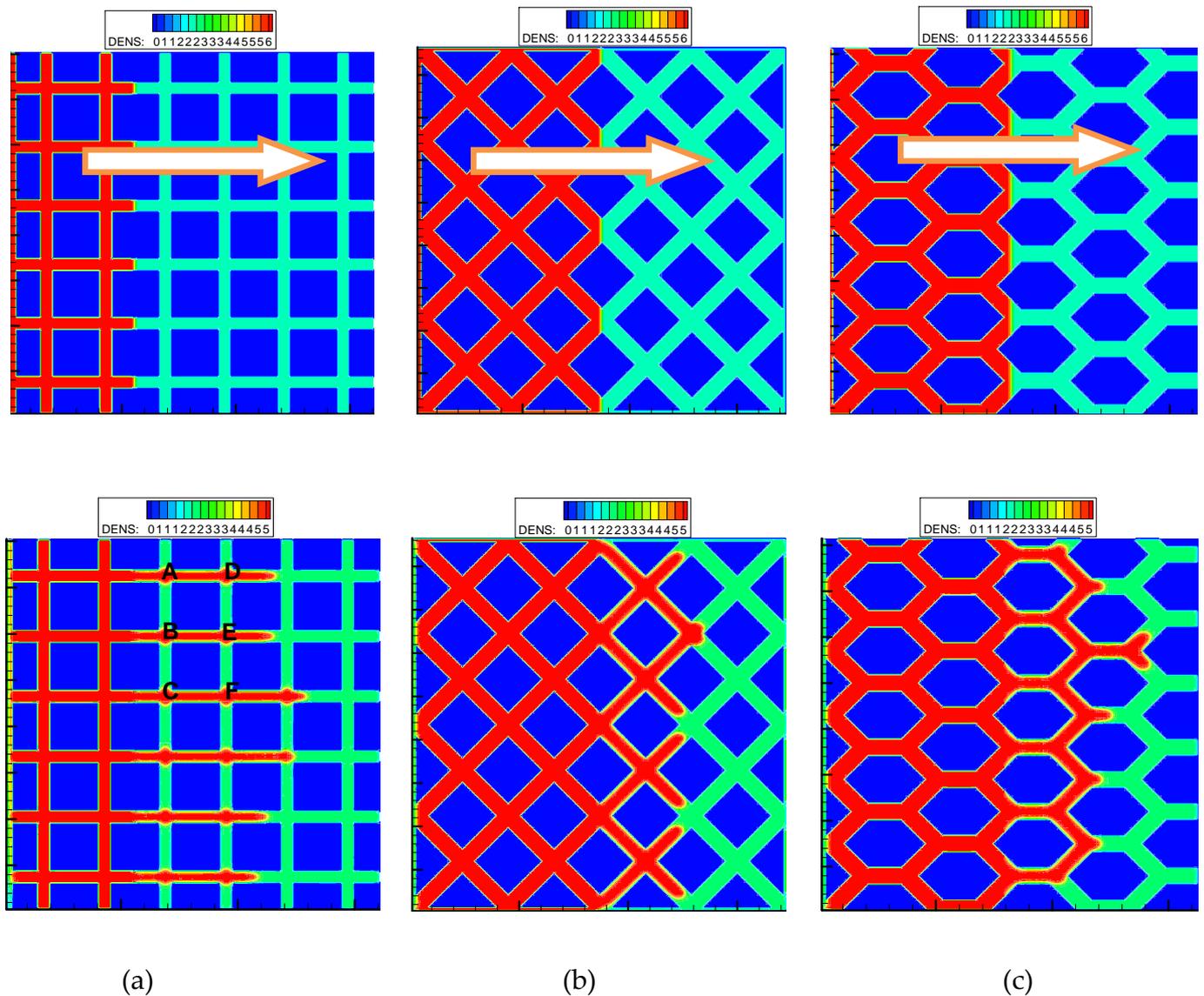


Fig. IV-13 Réseaux capillaires : carré (a) ; carré orienté à 45° (b) ; hexagonal (c). En haut l'état initial, en bas la distribution des phases après certain nombre d'itérations : 40000 itérations pour (a) ; 30000 itérations pour (b), 100000 itérations pour (c).

IV.5. Écoulement multiphasique dans un milieu poreux reconstruit à partir de traitement d'image

IV.5.1. Introduction

L'évaluation de propriétés physiques des matériaux poreux est d'importance cruciale particulièrement pour les couches déposées par écoulement de fluide ou par projection thermique. La mesure expérimentale directe coûte cher et prend du temps. Elle est aussi difficile en raison de leur architecture complexe inhomogène en porosité, fissuration et composition. Les méthodes indirectes par simulations sont donc attrayantes. La méthode Boltzmann sur réseau LBM est proposée pour caractériser les matériaux poreux par simulation à partir d'images de leur structure.

Un milieu poreux est défini par une image en coupe de matériau, obtenue par traitement d'image, puis traitée de manière à obtenir une image binaire lisible par le code de LBM. La figure IV-14 montre un exemple de telle image.

Pour des petits domaines, la représentation du milieu poreux dans le modèle est obtenue en définissant des obstacles solides. La condition standard de Bounce-Back est appliquée comme condition aux limites. Cette condition a été imposée aux surfaces solides (y compris les obstacles) pour assurer ce que l'on appelle la condition de non-glissement.

IV.5.2. Écoulement dans les milieux poreux

Dans un milieu poreux, l'écoulement peut être approximé numériquement pour les faibles vitesses selon la loi de Darcy [61]:

$$\langle u \rangle = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho_0 f) \quad \text{avec} \quad f = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p \quad (\text{IV. 1})$$

Où $\langle u \rangle$ est la vitesse de fluide moyenne dans le milieu, ∇p est le gradient de pression, $\rho_0 f$ est la force extérieure appliquée sur le fluide, μ est la viscosité dynamique de fluide, K est la perméabilité intrinsèque du milieu représentant la résistance du matériau au passage de matière.

S.D.C. Walsh et al [62] ont proposé une expression analytique pour calculer la perméabilité intrinsèque qui dépend de la structure du milieu poreux :

$$K = \frac{(1 - n_s)v}{2n_s} = \frac{\varepsilon \cdot v}{2(1 - \varepsilon)} \quad (\text{IV. 2})$$

Où n_s est la fraction de solide dans le milieu poreux, ε est la porosité du milieu poreux.

La valeur adimensionnelle de la perméabilité est donnée par [61] :

$$K_{tpl} = (1/L_c^2) \times K \quad (\text{IV. 3})$$

Où L_c représente la longueur d'un coté du réseau.

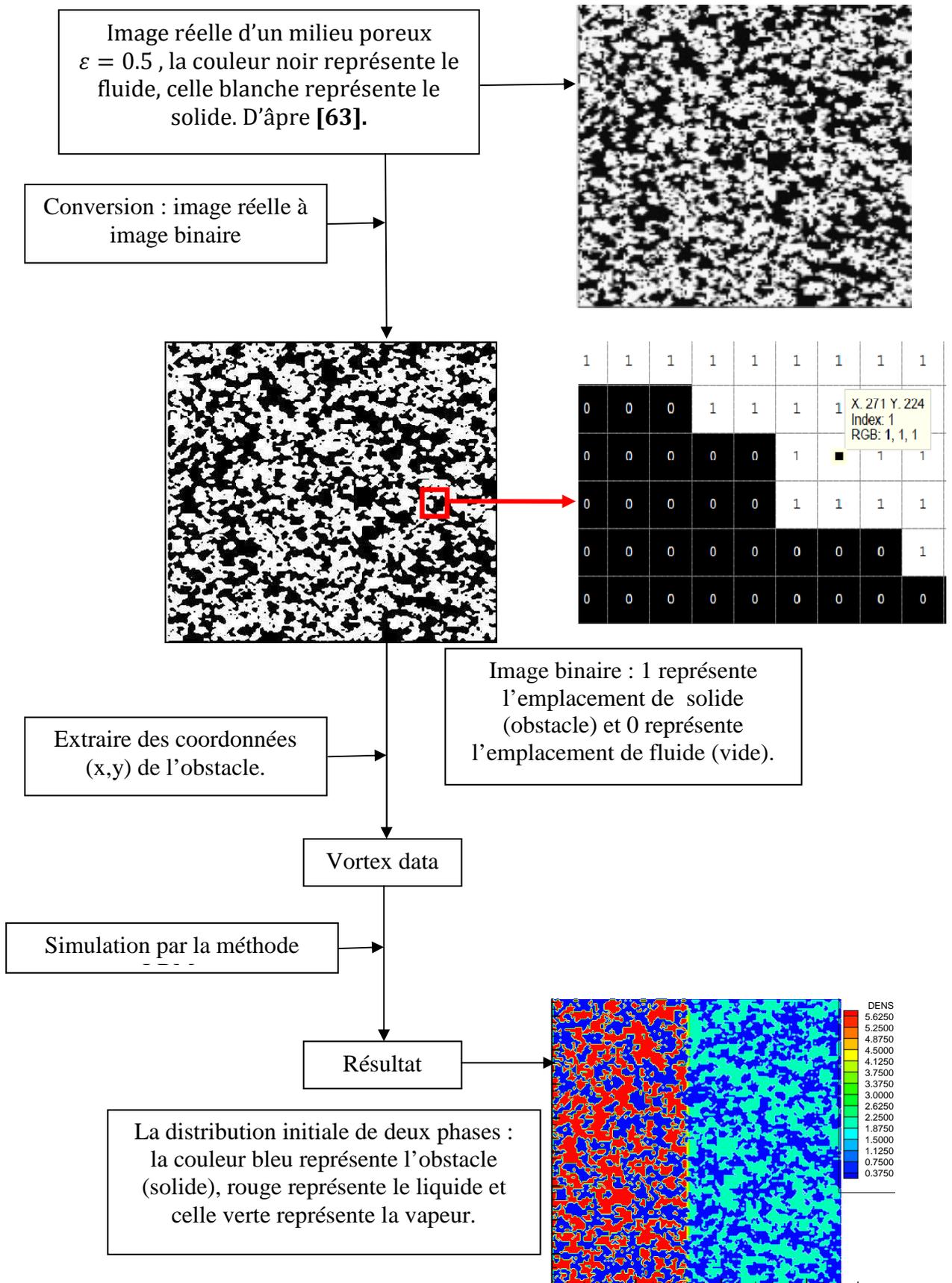


FIG IV-14 Etapes de traitement d'image.

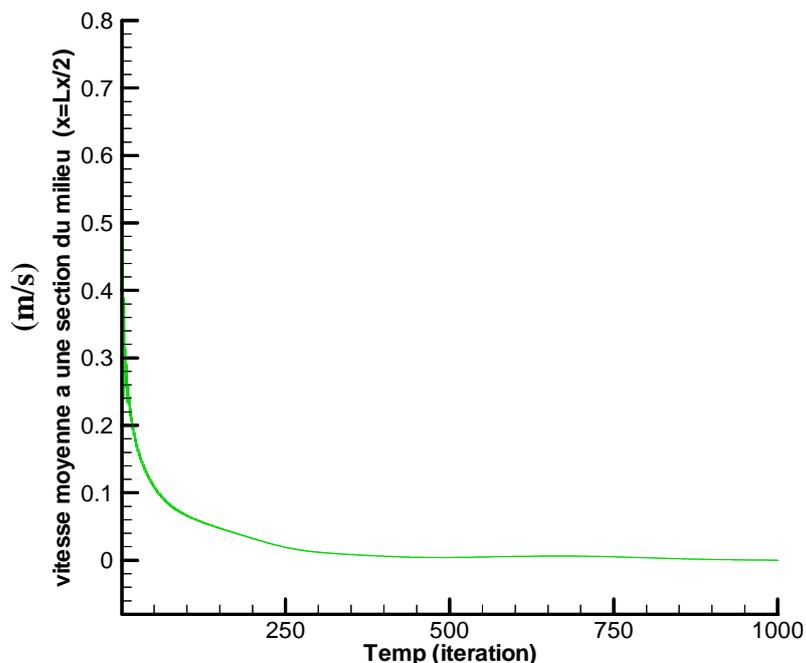
IV.5.3. Résultats et discussions

Dans la suite, un milieu poreux est considéré [64]. Une image en coupe de matériau obtenue en MEB puis traitée de manière à distinguer les zones fluides et les zones solides (figure IV-15). Par la suite est imposé un gradient de pression avec $P_{in} > P_{out}$. Le milieu poreux est caractérisé par sa perméabilité évaluée à partir de la loi de Darcy (Eq. IV.1).



FIG IV-15: Image traitée d'un milieu poreux d'après [64].

La figure IV-16, représente la variation de la vitesse moyenne dans la section du milieu située à la position ($x=Lx/2$). On remarque d'après un temps déterminé le régime d'écoulement est permanent ce qui se traduit par une vitesse moyenne constante à un instant ($t+1$), cette courbe est un bon indicateur pour la convergence des résultats obtenus.

FIG IV-16 Variation de la vitesse moyenne dans une section du milieu ($x= Lx/2$) en fonction du temps.

Le processus de déplacement d'un fluide par un autre sans la force capillaire pour le milieu poreux considéré, est représenté sur les figures IV-17. Pour assurer un drainage très efficace nous utilisons un nombre capillaire grand ($C_a = 1.76 \cdot 10^{-2}$). la phase déplaçante représentée par la couleur rouge celle déplacé représentée par la couleur verte. Pour caractériser et interpréter les configurations spatiales des phases obtenues, nous utilisons les notions de branchement micro et de branchement macro. Un branchement micro constitue la formation des nouvelles branches du groupe continu de la phase déplaçante à l'échelle d'un pore. Ce type de branchement est provoqué par la micro hétérogénéité du milieu. Un branchement macro représente le processus de formation de grandes branches de la phase déplaçante sous forme de doigts pénétrant dans le fluide déplacé. La distance séparant deux doigts voisins est de l'ordre de quelques dizaines de longueurs de pore. Le branchement macro est provoqué soit par une hétérogénéité macroscopique du milieu, soit par une instabilité hydrodynamique. Les doigts macro sont allongés suivant la direction de la différence de pression globale. Ceci est causé par le fait que les voies de sorties les plus courtes ont une résistance minimale. Après 40000 d'itérations, la phase déplaçante traversé la totalité des pores. Pour un drainage complet nous devons exécuter notre programme plus de 80000 d'itérations.

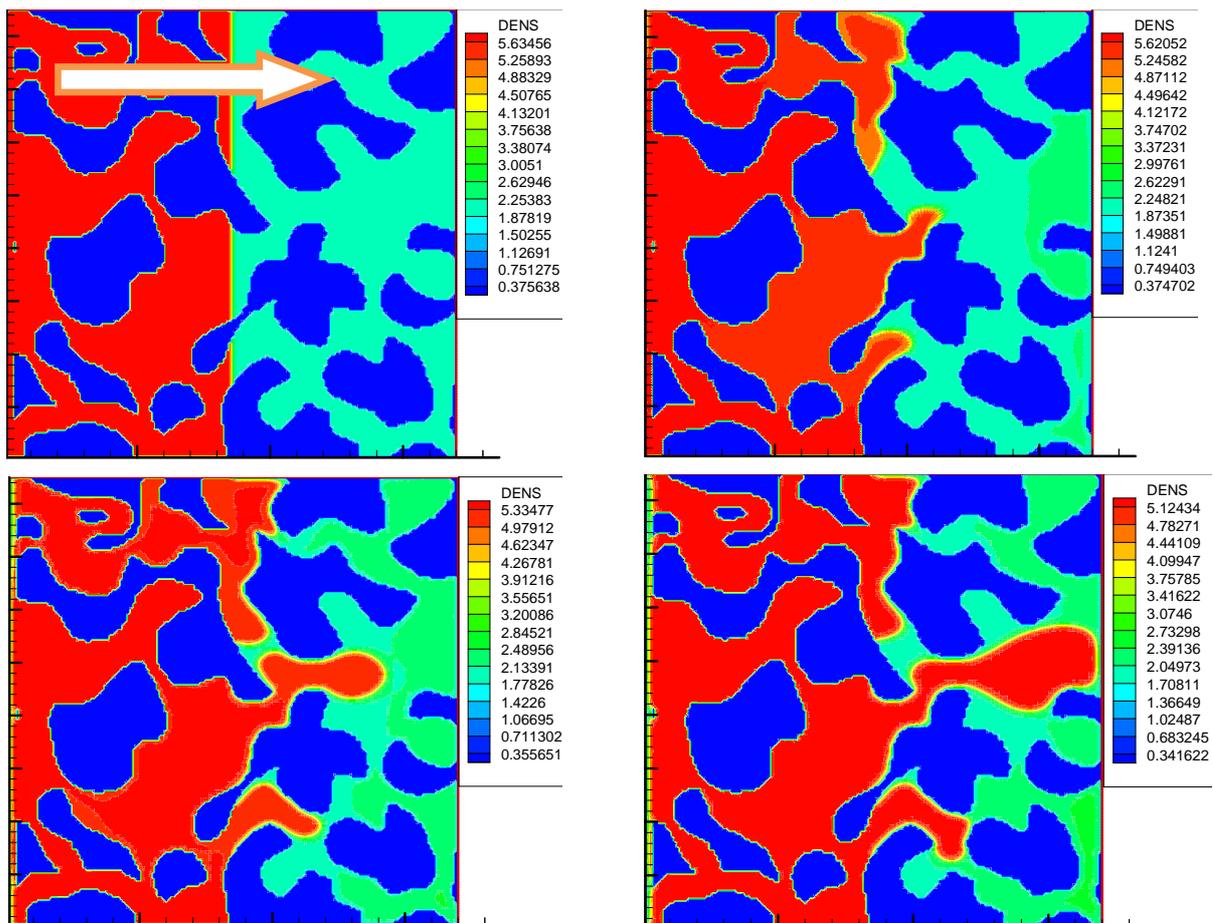


FIG IV.17 : Distribution des phases dans un réseau en 2D de porosité $\varepsilon = 0.52$ à différent temps ($t=0, 5000, 20000$ et 40000), la couleur bleu présente la matrice solide, rouge présente la phase déplaçante et celle verte présente la phase déplacé.

Les figures IV.18-a et IV.18-b représentent le vecteur de vitesse coloré par la composante horizontale et verticale respectivement obtenu après 500 itérations, les figures montrer le comportement irrégulier et randomisé de champ de vitesse, les zones blanches présentent la matrice solide (les roches). Les endroits de la vitesse indiquent qu'il y a des zones d'accélération (rouge) et des zones de ralentissement (bleu) dans laquelle l'écoulement presque stagnant. Ainsi, même si une répartition très homogène des écoulements en entrée et en sortie du milieu est observée, l'écoulement dans un pore ne suit pas la direction principale de l'écoulement sur la totalité du flux entrant. Une partie du fluide est déviée et alimente le pore voisin.

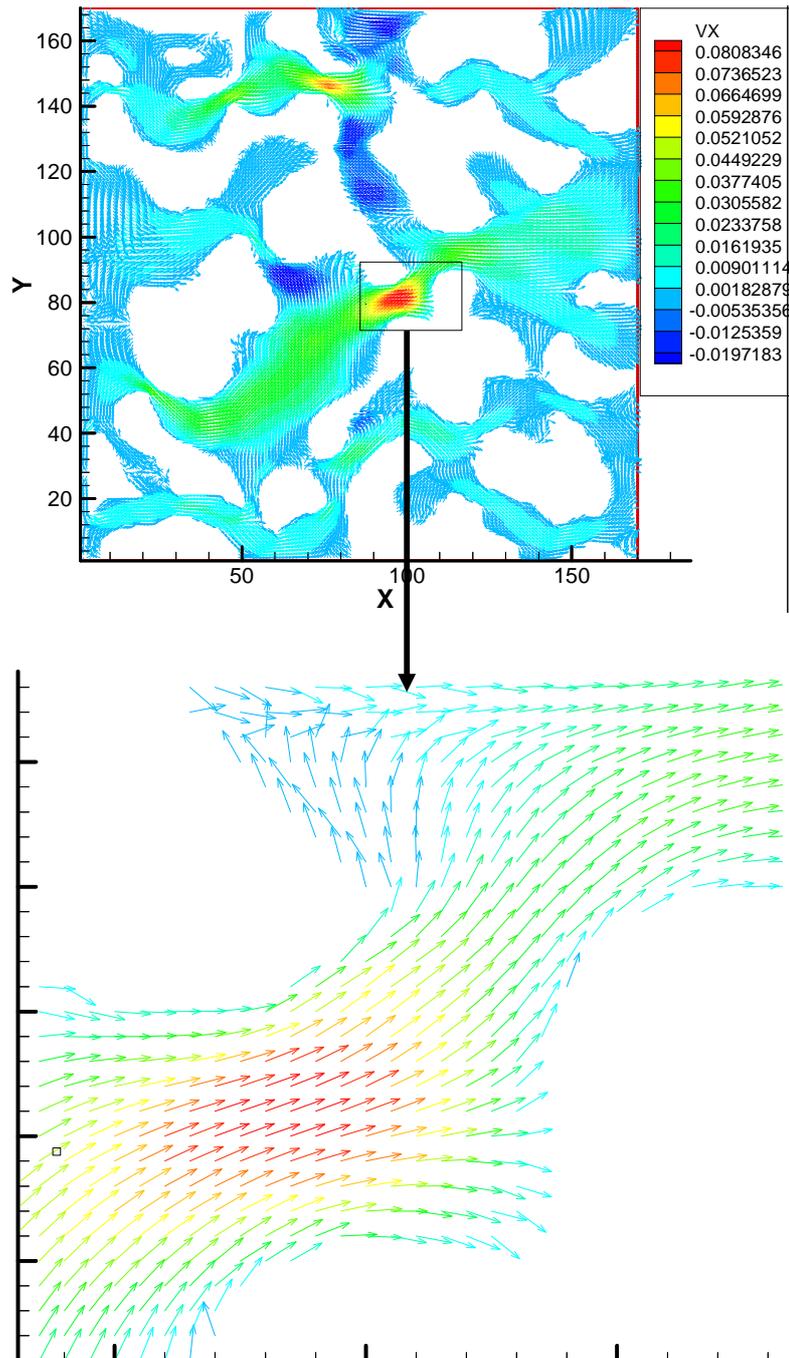


FIG IV.18-a Vecteur de vitesse colorée par la composante horizontale.

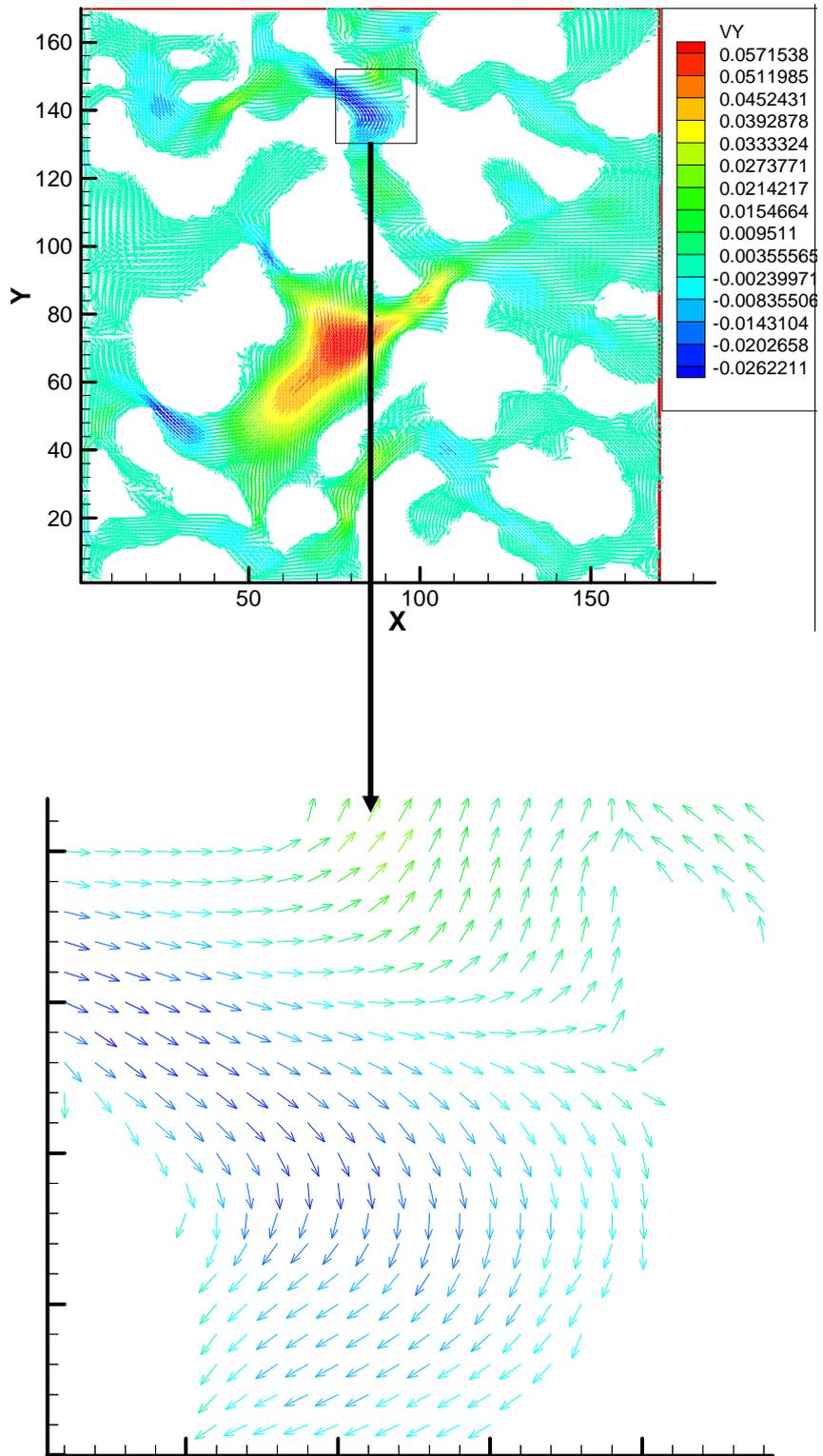


FIG IV.18-b Vecteur de vitesse colorée par la composante verticale.

Les lignes de courant/trajectoires de particules fluides (Figure IV.19) ont été déterminées à partir des champs de vitesses en suivant les positions successives de ces particules fluides. L'observation des résultats obtenus au cours de ces simulations montrent que la totalité des particules fluides émises prennent le chemin direct proposé par la direction principale de l'écoulement. En conséquence il y a des particules réorientées.

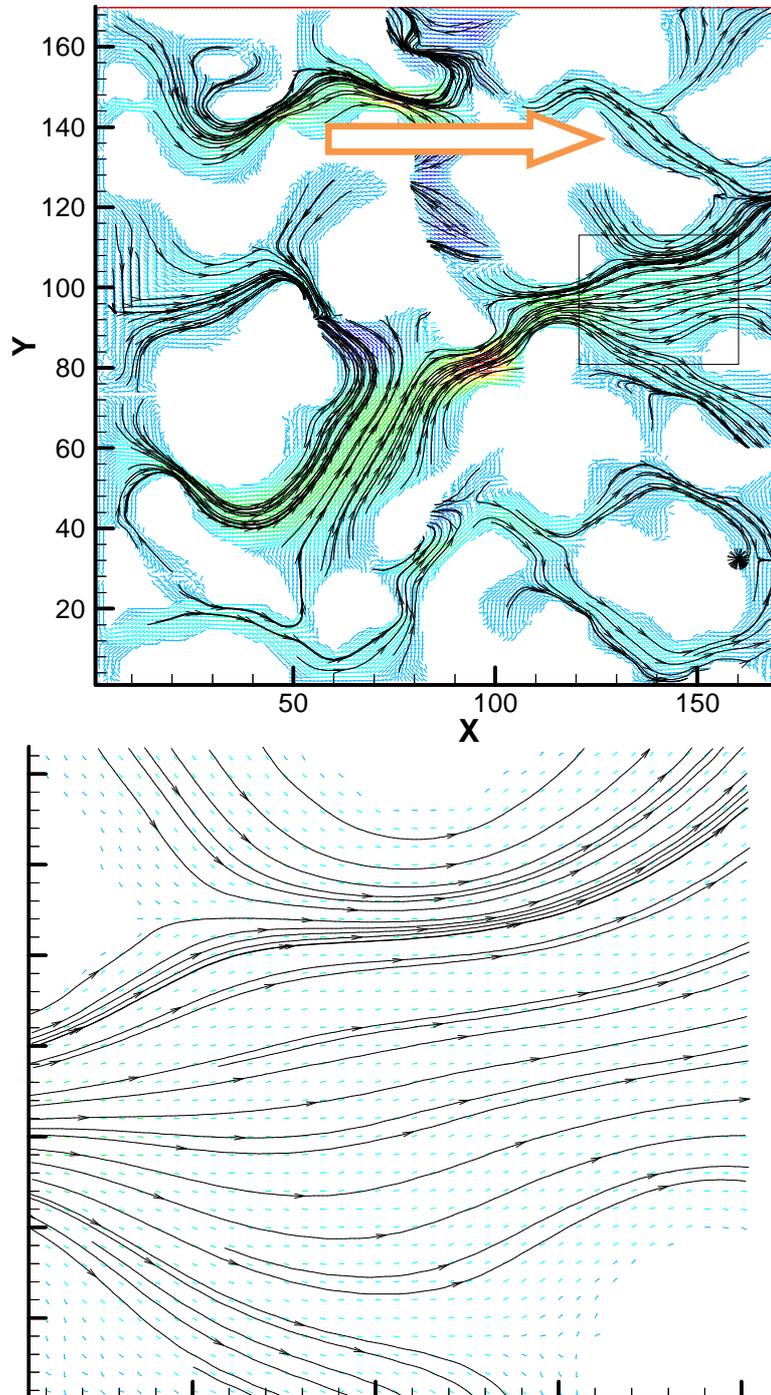


FIG IV.19 Lignes de courant/trajectoires. La flèche indique la direction principale de l'écoulement.

La variation de la perméabilité adimensionnelle en fonction de la viscosité dynamique est obtenue à partir de l'équation (IV. 1) et (IV. 2). La figure (IV.20) représente ces résultats pour deux réseaux à différente dimension : (170×170) et (100×100) . les résultats obtenus montrent que les valeurs de la perméabilité adimensionnelle diminuent avec l'augmentation de la dimension du réseau, ceci est en accord avec les résultats obtenus par **Hidemitsu Hayashi [61]**. La figure (IV.20) montre aussi que la perméabilité adimensionnelle augmente avec l'augmentation de la viscosité dynamique mais l'effet de la viscosité dynamique sur la variation de la perméabilité adimensionnelle devient négligeable pour un écoulement visqueux dans les réseaux de grande dimension.

La comparaison entre les résultats obtenus numériquement avec la méthode LBM par l'application de la loi de Darcy (l'équation IV. 1) et la formule analytique proposé par S.D.C. Walsh et al [62] (l'équation IV. 2), sont très proches. L'erreur relative trouvé est inférieure à 4% dans tous les valeurs (tableau IV.2). Par conséquent, la méthode LBM est capable d'estimer correctement les paramètres physiques caractéristiques des matériaux poreux comme la perméabilité.

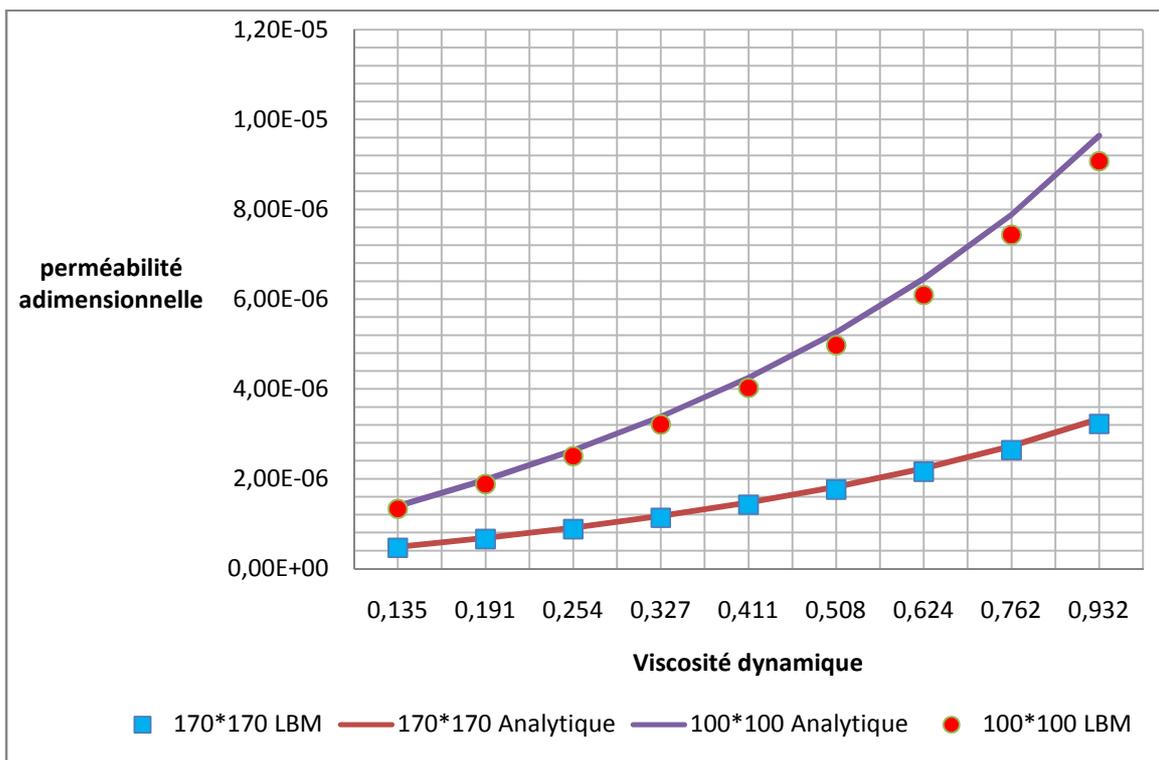


FIG IV.20 Variation de la perméabilité adimensionnelle en fonction de la viscosité dynamique pour deux réseaux de différentes dimensions.

μ	LBM	Analytique	L'erreur relative %
0.135	4.63E-07	4.82E-07	3.88E+00
0.191	6.57E-07	6.83E-07	3.75E+00
0.254	8.77E-07	9.10E-07	3.63E+00
0.327	1.13E-06	1.17E-06	3.52E+00
0.411	1.42E-06	1.47E-06	3.44E+00
0.508	1.76E-06	1.82E-06	3.40E+00
0.624	2.16E-06	2.23E-06	3.40E+00
0.762	2.64E-06	2.73E-06	3.45E+00
0.932	3.22E-06	3.34E-06	3.56E+00

Tableau IV.2 : Perméabilité adimensionnelle dans le réseau (100 × 100).

La recherche de la validation d'une loi d'écoulement dans le milieu poreux passe par l'établissement d'une relation entre la perte de pression sur une longueur L de milieu, et la vitesse débitante u du fluide qui s'écoule. Les valeurs numériques des coefficients de loi d'écoulement sont obtenues par estimation de paramètres à partir des données de perte de pression et des vitesses associées.

Selon la loi de Darcy [65], deux fluides de même viscosité, s'écoulant à la même vitesse u dans le même milieu poreux, génèrent la même perte de pression indépendamment de leur masse volumique. Expérimentalement, la linéarité de la relation entre le gradient de pression et la vitesse débitante u n'est vérifiée que pour de faibles vitesses d'écoulements. Ce modèle est particulièrement utilisé dans le domaine de l'hydrogéologie où les écoulements s'effectuent dans des milieux à faible porosité et où les vitesses d'écoulement sont faibles.

Dans la présente étude, les calculs de l'écoulement ont été faits en fixant comme conditions aux limites à l'entrée et à la sortie du milieu un écart de pression et en laissant évoluer le calcul vers l'état stationnaire. La méthode LBM est plus facile à appliquer à des nombres de Reynolds assez faibles. Lorsque l'écoulement devient instationnaire, une instabilité numérique peut faire diverger le calcul numérique. Le nombre de Reynolds utilisé ici est celui basé sur la dimension du réseau [64] :

$$R_e = u^* \cdot L / \nu \qquad u^* = \langle u \rangle / c \qquad (IV.4)$$

Où u^* est la vitesse adimensionnelle, $\langle u \rangle$ représente la vitesse macroscopique moyenne, c représente la vitesse des particules dans le réseau, L représente la longueur d'un côté de réseau et ν représente la viscosité cinématique. Même pour des valeurs assez faibles de R_e , la simulation peut sortir des résultats montrant un comportement qui suit l'équation de Darcy (équation IV.1). Sur la Figure IV.21, on voit des résultats obtenus avec le milieu représenté sur la figure IV-15 : ils suivent parfaitement une loi linéaire, ici pour R_e entre 3.15 et 13.86. Dans cette gamme de nombre de Reynolds commencent à être comparables aux effets visqueux.

Des résultats similaires ont été obtenus avec le même milieu (voir la figure IV.22). Alors que les points de la Fig. IV.21 ont été tous obtenus avec une viscosité

cinématique $\nu = 0.5$, ceux de la Fig. IV.22 furent obtenus pour 2 valeurs différentes de ce paramètre 0,5 (points en bleu) et 0.1875 (points en rouge). On voit qu'il n'y a pas une parfaite continuité entre les deux séries de valeurs. Ceci se coïncide avec les résultats obtenus par **M.J. Clifton [66]**. (NB : les mesures expérimentales sont très difficiles pour des faibles vitesses). Pour faire des calculs à des nombres de Reynolds plus élevés, il faut utiliser des viscosités cinématiques encore plus faibles.

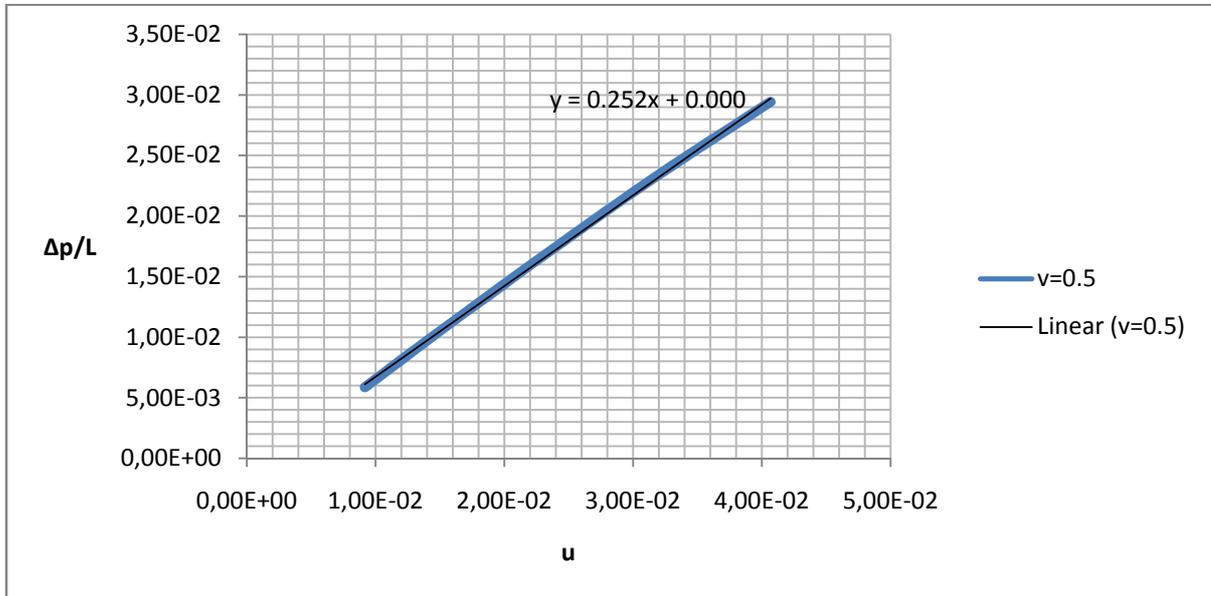


FIG IV.21 Gradient de pression en fonction de la vitesse superficielle adimensionnelle pour les deux phases.

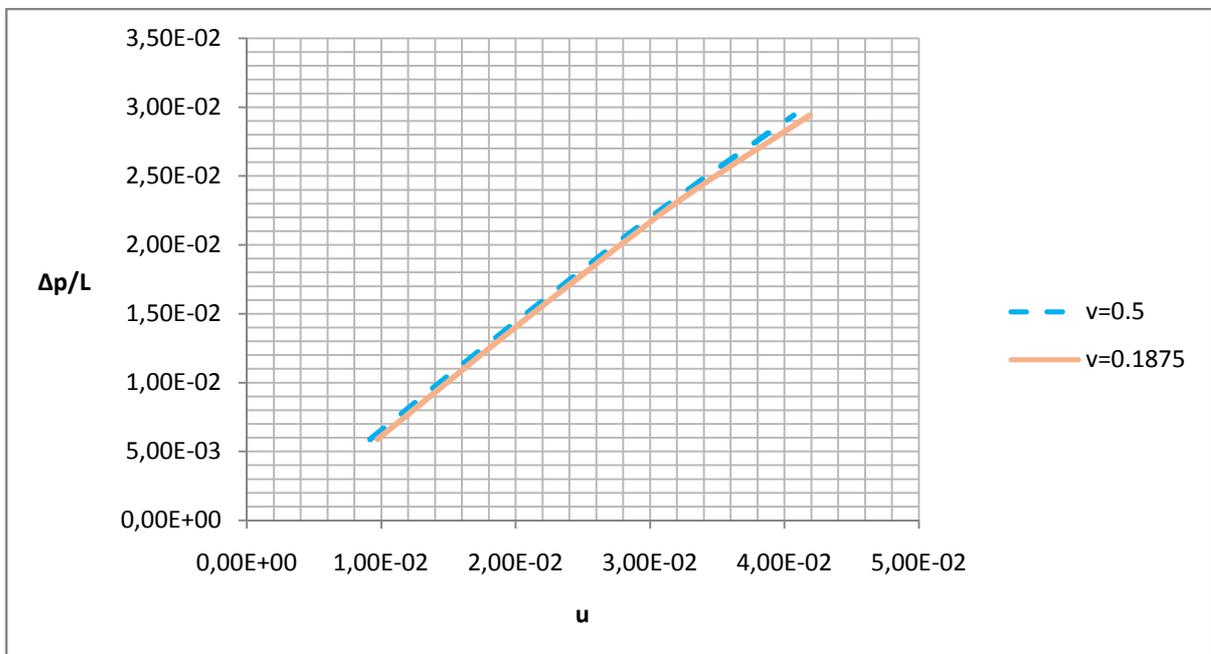


FIG IV.22 Gradient de pression en fonction de la vitesse superficielle pour les deux phases pour deux valeurs de viscosité cinématique différentes.

Conclusion Générale

Le travail effectué dans ce mémoire se rapporte à la mise en œuvre de la méthode de Boltzmann sur réseau (Lattice Boltzmann Method: LBM) pour l'écoulement multiphasique en milieux poreux. Un intérêt particulier a été porté aux méthodes basées sur la physique statistique en général et à la méthode de Boltzmann sur réseau, en particulier. Cette dernière, offre des avantages intéressants comparé aux méthodes classiques de CFD à savoir, la simplicité de sa mise en œuvre et la facilité de la parallélisation des algorithmes de calcul. Aussi, la méthode (LBM) facilite l'intégration des géométries complexes qu'il serait difficile de modéliser avec les méthodes (CFD), à l'instar de celles trouvées dans les milieux poreux et les écoulements multiphasiques.

A titre d'application, un code de calcul en Fortran 90 fondé sur la technique de Boltzmann sur Réseau pour l'écoulement multiphasique a été développé. Il permet notamment de simuler les écoulements dans les milieux poreux.

Dans la présente recherche nous avons appliqué la technique décrite ci-dessus pour trois applications à savoir, écoulement multiphasique dans un milieu dispersé homogène, écoulement multiphasique autour d'un arrangement de carrés homogènes fixes (réseau capillaire) et écoulement multiphasique dans un milieu poreux reconstruit à partir d'un traitement d'image sous Matlab. Les résultats de cette technique testée sur des configurations bidimensionnelles montrent l'aptitude de la méthode LBM à simuler avec une bonne précision des phénomènes qui caractérisent les écoulements multiphasiques en milieux poreux comme le déplacement d'un fluide par un autre, la formation de piégeage et la mouillabilité. L'étude numérique est étendue à l'estimation des paramètres physiques caractéristiques des matériaux poreux comme la perméabilité et la validité de la loi de Darcy pour l'écoulement de fluide à faible vitesse. Aussi, pour prédire le champ de vitesse, les lignes de courant et la chute de pression aux seins de ces matériaux, il serait intéressant d'étendre ce travail afin d'estimer la perméabilité relative de chaque phase.

Le code de calcul élaboré offre des possibilités d'élargissement aux écoulements de plus de deux phases dans les géométries complexes en 3D mais aussi avec un rapport de masse volumique très grand entre les phases à l'instar de l'écoulement multiphasique dans les roches-réservoirs des gisements qui contiennent généralement un ou plusieurs fluides (eau, huile et/ou gaz). En particulier, cela ouvre la voie à la continuation de cette recherche dans le domaine de la récupération et la quantification de piégeage lors de la mise en exploitation d'un gisement des hydrocarbures.

Références Bibliographiques

1. **Lucy L.B** "A numerical approach to the testing of fusion process. *The astronomic journal*" 88: 1013-1024, 1977.
2. **Attaway S.W., Heinstejn M.W., Swegle J.W** "Coupling of smooth particle hydrodynamics with the finite element method. *Nuclear engineering and design*"150: 199-205, 1994.
3. **Liu W.K., Jun S., Zhang Y.F** "Reproducing Kernel Particle Methods". *Int. J. Numer. Methods Fluids*. 1996.
4. **Nayroles B., Touzot G., Villon P.** "Generalizing the finite element method: diffuse approximation and diffuse elements". *Computational mechanics*, 10: 307-318, 1992.
5. **Belytschko T., Lu Y.Y., Gu L.** "Element-free Galerkin methods". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37:229-256, 1994.
6. **Sukumar N., Moran B., Belytschko T.** "The natural elements method in solid mechanics". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 43:839-887, 1998.
7. **Li S., Hao W., Liu W.K.** "Mesh-free simulations of shear banding in large deformation". *International Journal of solids and structures*, 37:7183-7206, 2000.
8. **Martinez M.A., Cueto E., Alfaro I., Doblare M., Chinesta F.** "Updated lagran-gian free surface flow simulations with Natural Neighbor Galerkin methods", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 60(13):2105-2129, 2004.
9. **Dolbow J., Belytschko T.,** "Volumetric locking in the finite element free Galerkin method" *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 46:925-942, 1999.
10. **Nolin S.,** « Modélisation "smoothed particle hydrodynamics" de la formation d'un embâcle fluvial et de son relâchement » Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures de l'Université Laval dans le cadre du programme de maîtrise en génie civil pour l'obtention du grade de maître ès sciences (M. Se.) ,2008.
11. **Monaghan J. J.:** "Smoothed particle hydrodynamics". *Reports on Progress in Physics*, 68(8):1703-1759, 2005.
12. **Mounif E.** « Résines époxy/amine pour le roto moulage réactif : Etude de la rhéocinétique et Simulation numérique de l'écoulement » Thèse de doctorat de l'Université PARIS VI (2008)
13. **Liu G. R. , Liu M. B.** "Smoothed Particle Hydrodynamics: A Meshfree Particle Method", page 60. *World Scientific, New Jersey*, 2003.
14. **Kreysig, E.** "Advanced Engineering Mathematics." 8th Edition, John Wiley & Sons, Inc. 1999.
15. **Wolf S.** « Méthodes sans maillage », Laboratoires MAS – ECP, 2007
16. **Duflot M.** « Application des méthodes sans maillage en mécanique de la rupture » Thèse de doctorat en sciences appliquées, Université de Liège 2004
17. **Sibson R.,** "A vector Identity for the Dirichlet tessellations". *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 87:151-155, 1980.
18. **Belikov V.V., Ivanov, V.D., Kontorovich V.K., Korytnik S.A., Semenov A.Y.,** "The non-Sibsonian interpolation: a new method of interpolation of the values of a function on an arbitrary set of points". *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 37(1):9-15, 1997.

19. **Yvonnet J.** « Nouvelles approches sans maillage basées sur la méthode des éléments naturels pour la simulation numérique des procédés de mise en forme ». PhD thèses, Ecole Nationale des Arts et Métiers, Paris, 2004.
20. **Brey J. J. and Moreno .F, Dufty. W** "Reply to Comment on Model kinetic equation for low-density granular flow". *Physical Review E*; Volume 57, Number 5; (MAY 1998).
21. **Evans.D.J., and Morris. G.P.,** "Non equilibrium molecular-dynamics simulation of couette flow in two-dimensional fluids", *Phys. Rev.* 1983.
22. **Peng,Y,** "Thermal Lattice Boltzmann Two-Phase Flow Model For Fluid Dynamics" Thèse de doctorat, University of Pittsburgh, 2005
23. **Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O.,** "Time evolution of a two-dimensional model system. Invariant states and time correlation functions", *J. Mathematical Phys.*, vol. 14, p. 1746-1759, (1973).
24. **Van Genabee. k O, and Rothman. D. H,** "Macroscopic manifestations of microscopic flows through porous media: Phenomenology from simulation", *Ann. Rev. of Earth and Planetary Sciences*, 24, pp. 63-87, 1996.
25. **McNamara G., Zanetti,** "Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata", *Physical Review Letters*, vol. 61, p. 2332-2335, (1988).
26. **Higuera F.J., Jimenez J.,** "Boltzmann approach to lattice gas simulation", *Europhys. Lett*, vol. 9, p. 663-668, (1989).
27. **You. C Et Al.** "Direct numerical simulation of particle collisions in two-phase flows with a meshless method" *Chemical Engineering Science* 63 3474 – 3484, (2008).
28. **Lancaster, P., Salkauskas, K.** "Surfaces generated by moving least-squares methods". *Mathematics of Computation* 37, 141--158. 1981.
29. **Luo, S.M., Cai, Y.C., Zhang, X.W.** "Object-oriented element free Galerkin method" *Chinese Journal of Mechanical Engineering* 36, 23--26. 2000.
30. **Nor Azwadi Che Sidik, Takahiko Tanahashi,** "Two-phase flow simulation with lattice boltzmann method" *Jurnal Mekanikal*, No. 24, 68 - 79 December 2007.
31. **Zheng, H.W., Shu, C., Chew, Y.T.** "Lattice Boltzmann Interface Capturing Method for Incompressible Flows", *Physical Review E* 72, 056705-056715. 2005.
32. **Andreas G. Yiotis et al** "A lattice Boltzmann studies of viscous coupling effects immiscible two-phase flow in porous media". *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* 300 (2007) 35–49.
33. **Valizadeh.A, Shafieefar.M, Monaghan.J.J et Salehi Neyshaboori A.A,** "Modeling Two-Phase Flows Using SPH Method", *Journal of Applied Sciences* 8 (21): 3817-3826, 2008.
34. **Davies, R.M. and G. Taylor,** "The mechanics of large bubbles rising through extended liquids and through liquids in tubes". *Proc. R. Soc. London Series A, Math. Phys. Sci* 200: 375-390, 1950.
35. **Batchelor, G.K.,** "An Introduction to Fluid Mechanics". 4th Edn. Cambridge University Press, Cambridge, pp: 653, 1974.
36. **Luo. L.-S,** "The lattice-gas and lattice Boltzmann methods: Past, Present, and Future," *Proceedings of the International Conference on Applied Computational Fluid Dynamics, Beijing, China*, pp. 52-83, 2000.
37. **Benzi .R, Succi.S, and Vergassola.M,** "Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models" *Phys. Rep.* 222, 145 1992
38. **Chen S., Chen H., Martinez D, and Matthaeus.W,** "Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics". *Phys. Rev. Lett.* 67, 3776 - 3779, 1991.

39. **Shan .X and Chen .H** "Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation", *Phys. Rev. E* 49, 2941 - 2948 (1994).
40. **Chen .S, Diemer .K, Doolean .G, Eggert .K, Fu .C, Gutman .S and Travis .B,** "Lattice gas models for non ideal fluids", *Physica D* 47, 97, 1991.
41. **Chen .S, Dawson .S. P, Doolen .G. D, Janecky .D. R, and Lawniczak. A,** "Lattice methods and their applications to reacting systems" *Comput. Chem. Eng.* 19, 617, 1995.
42. **R.K .Pathria,** "Statistical Mechanics", *2nd Edition, Butterworth-Heinemann,* 1996.
43. **Bhatnagar .P.L, Gross .E.P, and Krook .M,** "A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component system", *Phys. Rev.*, 94, pp. 511-525, 1954.
44. **James Muirhead Parker,** "A Novel Lattice Boltzmann Method for Treatment of Multicomponent Convection, Divusion, and Reaction Phenomena in Multiphase Systems", for the degree of Doctor of Philosophy in *Chemical Engineering* ,2008.
45. **He.X and Luo.L.-S,** "A priori derivation of the lattice Boltzmann equation", *Phys. Rev. E*, 55, pp. R6333-R6336, 1997.
46. **X. He and L.-S. Luo,** "Theory of the lattice Boltzmann equation: from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation", *Phys. Rev. E*, 56, pp. 6811-6817, 1997.
47. **Maier. R. S., Bernard.R.S, and Grunau .D.W,** "Boundary conditions for the lattice Boltzmann method", *Phys. Fluids*, 8 (7), pp.1788-1801, 1996.
48. **Ziegler .P,** "Boundary conditions for lattice Boltzmann simulations", *J. Stat. Phys.*, 71, pp. 1171-1177, 1993.
49. **Inamuro.T, Yoshino.M, and Ogino. F,** "A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations", *Phys. Fluids*, 7, pp. 2928-2930, 1995.
50. **Mei.R, and Shyy.W,** "On the finite difference-based lattice Boltzmann method in curvilinear coordinates", *J. Compu. Phys.* 143, pp. 426-448, 1998.
51. **Aidun .C.K, Lu.Y,** "Lattice Boltzmann simulations of solid particles suspended in fluid", *J. Stat. Phys.*, 81, pp. 49-61, 1995.
52. **Mei .R, Luo.L.-S. and Shyy.W,** "An accurate curved boundary treatment in the lattice Boltzmann method", *J. Compu. Phys.* 155, pp. 307-329, 1999.
53. **Gunstensen. A.K, Rothman D.H, Zaleski. S and Zanetti. G,** "A lattice-Boltzmann model of immiscible fluids" *Phys. Rev. A* 43, 4320, 1991.
54. **Shan.X and Chen.H,** "Lattice Boltzmann model for simulation flows with multiple phases and components, *Phys. Rev. E* 47, 1815 1993.
55. **Swift.M, Orlandini.S, Osborn.W, and Yeomans. J,** "Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary-fluid systems", *physical review E*, volume 54, number 5, november 1996, 5041-5052.
56. **He. X, Chen.S, and Zhang.R,** "A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability", *J. Comput. Phys.*, 152, pp. 642-663, 1999.
57. **R.R. Nourgaliev, Dinh.T.N , Theofanous. T.G, Joseph.D."**The lattice Boltzmann equation method: theoretical interpretation, numeric and implications". *International journal of multiphase flow.* 29 (2003) 117-169.
58. **Hiroshi .M, Hiroshi. O** "Micro-scale two-phase flow simulation of lattice Boltzman method for capillary hysteresis", *Japan National Oil Corporation, SCA* 2001-55.

59. **Carlos E. Pico et al**, « lattice-Boltzmann simulation of two-phase fluid flow through porous media », *18th International Congress of Mechanical Engineering*, 2005.
60. **Irina .P**, « Ecoulements diphasiques en milieux poreux : modèle de ménisque » Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de Géologie de Nancy, 2003.
61. **Hidemitsu .H**, "Lattice Boltzmann Method and its Application to Flow Analysis in Porous Media", *Research Report, R&D Review of Toyota CRDL* Vol. 38 No. 1, 2002.
62. **Walsh. S.D.C. et al**, « A new partial-bounceback lattice-Boltzmann method for fluid flow through heterogeneous media " *Computers & Geosciences* 35 (2009) 1186–1193, 2008.
63. **Moran .W et al**, "Mesoscopic simulations of phase distribution effects on the effective thermal conductivity of microgranular porous media" *Journal of Colloid and Interface Science* 311 (2007) 562–570, 2007.
64. **Arab.M. R. et al**, « caractérisation physique des matériaux poreux par une méthode de type Boltzmann sur réseau », *13èmes Journées Internationales de Thermique*. France, 2007.
65. **Jean-Philippe.B**, « Phénomènes de transport dans les mousses métalliques: approche expérimentale des écoulements monophasiques et liquide-gaz » Université de Provence Aix-Marseille 1, 2007.
66. **Clifton. M.J.**, "Simulation de l'écoulement et du transfert thermique dans les mousses métalliques », Rapport du partenaire, Laboratoire de Génie Chimique, Toulouse, 2008.
67. **Vincent. B**, « Étude de l'influence d'une couche de polymère adsorbé sur des écoulements diphasiques (gaz/eau dans des milieux poreux modèles », Thèse de doctorat, 2006.

Généralités sur les milieux poreux

1. Définitions

Un milieu poreux est un milieu continu, consolidé ou non, qui présente intérieurement une fraction de volume accessible à l'écoulement d'un fluide. Cette fraction de volume "vide" se compose d'un système de pores interconnectés par des canaux de sections variables.

La figure (A.1) illustre les trois grandes catégories de milieux poreux :

- les milieux fibreux : filtres, etc. ;
- les milieux consolidés : les grès, les argiles, les granites, etc. ;
- les milieux non-consolidés : les sables, les graviers.

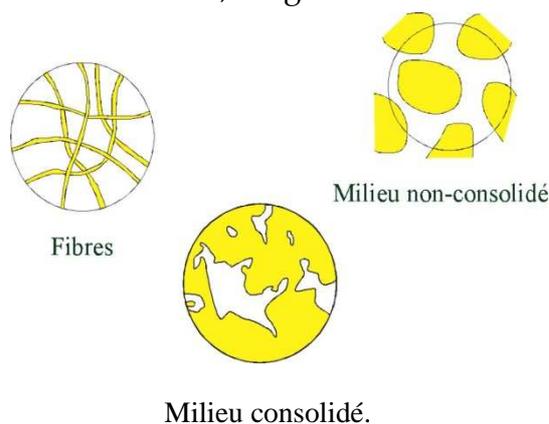


FIG. A.1 Illustration des grandes catégories de milieu poreux. (D'après [67])

2. Différents paramètres les plus intéressantes dans un milieu poreux

1) Porosité ε :

Le paramètre principal décrivant un milieu poreux est la porosité définie par :

$$\varepsilon = \frac{V_P}{V_0} = \frac{\text{volume des pores}}{\text{volume total}} \quad (1)$$

Il varie entre 0 (solide plein) et 1 (volume complètement vide). Ce paramètre de porosité est complémentaire de la fraction volumique de solide φ telle que :

$$\varepsilon + \varphi = 1 \quad (2)$$

La définition (1) de la porosité est une définition tridimensionnelle. Elle peut être transposée à un rapport de surfaces. En effet, une coupe d'un échantillon poreux (un exemple est donné sur la figure A.2) montre une surface composée de deux phases. On définit alors la porosité surfacique (à deux dimensions):

$$\varepsilon_s = \frac{S_P}{S_0} = \frac{\text{surface des pores}}{\text{surface total}} \quad (3)$$

Pour chaque section effectuée à la cote z , on peut mesurer l'aire $A_p(z)$ occupée par les pores. Si le milieu est homogène (donc la porosité surfacique ne dépend pas de la cote

z), on peut écrire que cette aire vaut $\varepsilon_S A_0$, où A_0 est l'aire totale de la section. À partir de ces mesures, on peut calculer le volume des pores de l'échantillon par :

$$V_P = \int A_p(z) dz = \varepsilon_S A_0 \int dz = \varepsilon_S V_0 \quad (4)$$

Par conséquent, on obtient une égalité entre la porosité volumique et la porosité surfacique $\varepsilon_S = \varepsilon$.

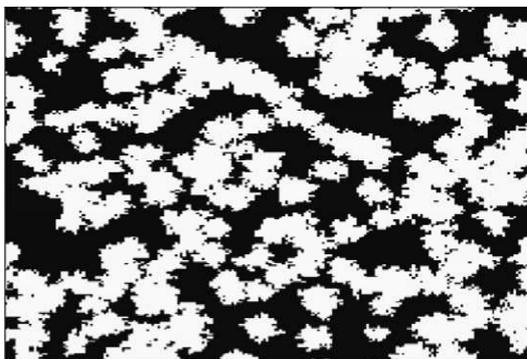


FIG. A.2 Exemple de coupe d'un milieu poreux tel que le couleur blanc représente le solide et le couleur noir représente le vide (porosité), (d'après [63]).

2) Perméabilité k

C'est la capacité de la roche à laisser circuler un fluide (liquide ou gaz ou leurs mélanges), lorsqu'il y a une différence de pression. Elle caractérise quantitativement les propriétés d'écoulement de la roche.

3) Les types de la perméabilité :

- Perméabilité absolue K : La perméabilité intrinsèque (absolue) d'une roche, est l'aptitude de cette roche à laisser circuler à travers ses pores un fluide.
- Perméabilité effective K_e (phasique) : L'aptitude de l'espace poreux imprégné d'un liquide hétérogène à laisser passer à travers les pores, chacune des phases particulière, ($K_e < K$).
- Perméabilité relative K_r : Le rapport en % de la perméabilité effective à celle absolue, exprimé par la relation suivante : $K_r = K_e / K$.

4) Saturation

C'est le rapport entre le volume occupé par le fluide et le volume total des pores, elle est notée « S » et s'exprime en pourcentage.

Il existe plusieurs types de saturation qui peuvent intervenir :

- $S_w = V_w / V_P$: saturation en eau de la zone vierge.
- $S_H = V_H / V_P$: Saturation en huile.
- $S_G = V_G / V_P$: Saturation en gaz.

Avec $V_w + V_H + V_G = V_P$ et $S_w + S_H + S_G = 100\%$.

3. Application de la méthode Boltzmann sur réseau dans les milieux poreux

La méthode de Boltzmann sur réseau présenté dans le troisième chapitre considère la masse volumique et la vitesse comme des variables indépendantes. Pour créer un gradient de pression dans le milieu poreux il faut ajouter un terme dans l'équation de Boltzmann (l'équation 5), qui représente la force extérieure [58] :

$$\begin{aligned} f_\alpha(x + \mathbb{Q}_\alpha \delta t, t + \delta t) &= f_\alpha(x, t) \\ &- \frac{1}{\tau} [f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{(eq)}(x, t)] \end{aligned} \quad (5)$$

L'équation de Boltzmann avec la force extérieure et la vitesse macroscopique devient :

$$\begin{aligned} f_\alpha(x + \mathbb{Q}_\alpha \delta t, t + \delta t) - f_\alpha(x, t) &= -\frac{1}{\tau} [f_\alpha(x, t) - f_\alpha^{(eq)}(x, t)] - \frac{\tau - 0.5}{\tau} \delta_t F_\alpha \end{aligned} \quad (6)$$

$$u = \sum_{\alpha=0}^N f_\alpha \mathbb{Q}_\alpha + 0.5 f \delta_t \quad (7)$$

Où $f_\alpha^{(eq)}$ et F_i représentent la fonction d'équilibre et la force extérieure respectivement.

$$f_\alpha^{(eq)} = \rho w_\alpha \left[1 + \frac{3}{c^2} e_\alpha \cdot u + \frac{9}{2c^4} (e_\alpha \cdot u)^2 - \frac{3}{2c^2} u \cdot u \right] \quad (8)$$

$$F_\alpha = -\frac{f \cdot (e_\alpha - u) f_\alpha^{(eq)}}{RT} \quad (9)$$

La perméabilité représente la propriété physique fondamentale du milieu poreux définie par la loi de Darcy :

$$\langle u \rangle = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho_0 f) \quad \text{avec} \quad f = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p = -c_s^2 \cdot \nabla p^* \quad (10)$$

Où $\langle u \rangle$ est la vitesse de fluide moyenne dans le milieu, ∇p est le gradient de pression, $\rho_0 f$ est la force extérieur appliqué sur le fluide, μ est la viscosité dynamique de fluide, c_s représente la vitesse de son dans le réseau et K est la perméabilité intrinsèque du milieu représentant la résistance du matériau au passage de matière.