

Titre: Convection naturelle de nanofluides par la méthode de Boltzmann
Title: sur réseau.

Auteur: Harold Nicolas Noriega
Author:

Date: 2011

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Noriega, H. N. (2011). Convection naturelle de nanofluides par la méthode de Boltzmann sur réseau. [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal].
Citation: PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/630/>

Document en libre accès dans PolyPublie

Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/630/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Marcelo Reggio, & Patrick Vasseur
Advisors:

Programme: Génie mécanique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

CONVECTION NATURELLE DE NANOFUIDES PAR LA MÉTHODE DE
BOLTZMANN SUR RÉSEAU.

HAROLD NICOLAS NORIEGA
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MÉCANIQUE)
AOUT 2011

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

CONVECTION NATURELLE DE NANOFUIDES PAR LA MÉTHODE DE
BOLTZMANN SUR RÉSEAU.

présenté par : NORIEGA, Harold Nicolas

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès Sciences Appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. ROBILLARD, Luc, D.Sc., président

M. REGGIO, Marcelo, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. VASSEUR, Patrick, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. TRÉPANIER, Jean-Yves, Ph.D., membre.

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche, Marcelo Reggio, pour son aide, pour son soutien et parce que, grâce à ses conseils, je me suis intéressé à la méthode de Boltzmann sur réseaux.

Je remercie également mon codirecteur, Patrick Vasseur, pour son aide, et ses conseils qui m'ont permis d'avancer dans le domaine de la convection naturelle des nanofluides.

J'aimerais aussi remercier Jérôme Guiet pour ses conseils qui m'ont permis d'avancer rapidement dans le domaine la méthode de Boltzmann sur réseaux.

Je remercie ma famille, mon épouse et mes enfants.

J'aimerais aussi remercier mes collègues de labo pour la très bonne ambiance de travail qui a régné au quotidien.

Finalement, je remercie l'École Polytechnique, à travers mes directeurs de recherches, qui m'a permis de financer une partie de mes études.

RÉSUMÉ

Ce mémoire présente une recherche en mécanique de fluide numérique. Le noyau de la recherche est l'implémentation d'un modèle de simulation de la convection de nanofluides, en utilisant la méthode de Boltzmann sur réseau. Les recherches récentes en mécanique de fluide numérique justifient le choix adopté dans le cadre de ce mémoire. En effet un nombre croissant de chercheurs et d'ingénieurs utilisent la méthode de Boltzmann sur réseau comme une nouvelle alternative de calcul numérique. La mise en évidence de nouvelles propriétés thermiques, grâce à l'ajout dans un fluide de base de particules en suspension à l'échelle nano, est à la base des problèmes de convection considérés dans cette thèse.

D'une façon générale, la méthode de Boltzmann sur réseau présente une approche mésscopique des fluides dans un domaine qui est discrétement par un maillage cartésien. Une fonction de distribution de probabilité, définie localement sur une cellule, permet de calculer les variables macroscopiques i.e. la densité, la vitesse et la température. Issue de la théorie cinétique de gaz, la méthode de Boltzmann sur réseau s'appuie sur l'équation de transport de Boltzmann. Nous implémenterons le modèle BGK (Bhatnagar, Gross et Krook) qui permet de simplifier l'opérateur de collision de l'équation de transport de Boltzmann. La méthode BGK considère deux processus fondamentaux, à savoir la collision et la propagation. Lors d'un changement d'état d'une particule du à l'interaction de cette dernière avec ses voisines (collision), se succède une transmission d'un nouvel état des particules voisines (propagation).

Pour l'implémentation du modèle thermique, nous utiliserons l'approximation de Boussinesq qui considère que la densité est l'unique paramètre qui dépend de la température. En ce qui concerne le modèle thermoconvectif, nous utiliserons la technique d'une deuxième fonction de distribution. Notre but premier est le développement d'un algorithme thermique de Boltzmann sur réseau pour simuler la convection de nanofluide .

La mise en œuvre d'une telle formulation se réduit à une discréétisation des fonctions de distributions dans l'espace et dans le temps. Les variables macroscopiques thermiques et mécaniques de l'écoulement sont déduites de ces fonctions de distributions. L'implémentation de la méthode de Boltzmann sur réseau thermique se fait en deux étapes : une étape mécanique et ensuite une autre thermique. Pour chacune de ces deux étapes l'algorithme se réduit à trois étapes : collision, propagation et correction de valeurs sur les frontières.

Pour les simulations de l'écoulement de nanofluides, nous avons choisi les modèles de Maxwell-Garnett et de Koo-Kleinstreuer ; ces derniers tiennent compte du mouvement brownien des nanoparticules. La viscosité dynamique se calcule par le modèle de Brinkman. Nous avons implémenté le modèle des nanofluides en se basant sur l'hypothèse que les nanoparticules sont bien mélangées dans le fluide et qu'aucune interaction (aucune force) n'est impliquée entre les nanoparticules et le fluide.

Le code développé a fourni des résultats satisfaisants dans la simulation de cas classiques thermiques, à savoir, l'étude de l'écoulement dans une cavité carrée chauffée isothermiquement sur les cotés et dans une cavité avec une source de chaleur à l'intérieur du domaine. Par la suite, nous avons fait des simulations pour des cavités allongées, une verticale et l'autre horizontale, chauffées par des flux de chaleur. Notre étude centrale a porté sur une cavité carrée, chauffée sur la paroi inférieure. Une comparaison des caractéristiques mécaniques et thermiques a été faite pour l'eau pure et pour deux modèles de convection avec des nanofluides. Nous avons démontré la possibilité d'obtenir de deux types d'écoulements : l'unicellulaire et l'autre bicellulaire, l'écoulement final résultant dépendant des conditions initiales choisies pour initier les calculs numériques. Les deux modèles utilisés pour modéliser les solutions de nanofluides : le modèle de Koo-Klainstreuer et le modèle de Maxwell-Garnett ont montré une augmentation de la valeur des Rayleigh critiques pour les bifurcations du type fourche ainsi que ceux marquant les bifurcations de type Hopfs. Un accroissement linéaire du transfert de chaleur avec la concentration en nanoparticules est obtenu avec le modèle de Maxwell-Garnett. Ce résultat est valable aussi bien pour les écoulements unicellulaires que pour les écoulements bicellulaires. D'autre part, le modèle de Koo-Klainstreuer montre une augmentation du transfert de chaleur qui atteint un maximum pour une concentration d'environ 2% pour les deux types d'écoulements.

Nous illustrerons l'effet d'ajouter de nanoparticules dans de l'eau par la présentation de lignes de courant et d'isothermes pour différents nombres de Rayleigh et différentes concentrations. Nous présenterons les courbes du régime oscillant obtenu à haut nombre de Rayleigh $Ra = 5 \times 10^5$, ces dernières présentent des caractéristiques similaires pour l'eau et pour les nanofluides modélisés selon Maxwell-Garnett mais différente selon le modèle de Koo-Klainstreuer. Les cellules de convection pour le régime oscillatoire sont présentées et discutées.

L'effet de l'inclinaison de la cavité carrée chauffée en bas, pour l'eau et diverses solutions de nanofluides, a été étudiée pour des angles de 0° , 30° , 60° et 90° . Une augmentation considérable du nombre de Nusselt a été obtenu pour l'angle de 60° .

La programmation a été faite en C++ pour obtenir une amélioration de temps de calcul. L'optimisation du code développé a été effectuée en utilisant les techniques de parallélisation à mémoire partagée et à mémoire distribuée. La technique OpenMP est implémentée pour la programmation multicoeur pendant que la technique de passage de données est implémentée sur plusieurs noeuds. Pour l'implémentation de MPI nous avons utilisé la technique de découpage du domaine qui permet de distribuer la charge de calcul sur différents noeuds.

En conclusion, la méthode de Boltzmann sur réseau thermique tel que nous l'avons développée a fourni des bons résultats numériques. La méthode se présente comme une nouvelle alternative pour les simulations thermiques avec de nanoparticules.

ABSTRACT

This memory presents a research work in the field of computational fluid dynamics. The core of the study is the lattice Boltzmann method applied to the prediction of natural convection problems involving nanofluids. These can be defined by new thermal properties appearing when suspended nanoscale particles are added to a base fluid.

Following the kinetic theory of gases, the lattice Boltzmann method can be seen as a particular discretization of Boltzmann's transport equation. Usually, the method is applied into a domain that is discretized by a regular Cartesian grid in which a probability distribution function is calculated. This leads to the computation of the macroscopic variables, i.e., the density, the speed and the temperature. A key element in the lattice Boltzmann method is the modeling of the collision term appearing in the right-hand-side of Boltzmann's transport equation. In this study we have followed the BGK (Bhatnagar, Gross and Krook) model.

For the implementation of the thermal model, we used Boussinesq's approximation, which considers that the density is the only parameter that depends on the temperature. For the thermoconvective model, we will use the method known as double distribution function.

For simulations of the flow of nanofluids, we chose the models of Maxwell-Garnett and the model of Koo-Kleinstreuer, which take into account the Brownian motion of nanoparticles. The dynamic viscosity is calculated by the model of Brinkman. We have implemented a model for nanofluids based on the assumption that the nanoparticles are well mixed in the fluid and no interaction (forces) is involved between the nanoparticles and the fluid.

The computer program that we have developed provided satisfactory results in the simulation of the thermal classic cases: the flow in a square cavity heated isothermally on the sides and, a cavity with a heat source inside the field. Subsequently, we made simulations for a shallow cavity heated from below and for a vertical enclosure heated laterally. Our central study focused on a square cavity heated on the lower wall. A comparison of mechanical and thermal characteristics has been made for pure water and for two models of convection with nanofluids. We have shown the possibility of obtaining two types of flows: the unicellular and the other two-cell, with the final result depending on the initial conditions chosen to begin the numerical calculation. The two models used to handle the nanofluid solutions: the Koo-Kleinstreuer model and the Maxwell-Garnett model, showed an increase in the value of

the critical fork-like bifurcations Rayleigh as well in the value of Hopf critical bifurcations Rayleigh numbers. A linear increase in heat transfer with the concentration of nanoparticles is obtained with the Maxwell-Garnett model. This result is valid for both, unicellular flows and for two-cell flow. On the other hand, the model of Koo-Klainstreuer shows an increase of heat transfer which reaches a maximum for a concentration of approximately 2% for both types of flows.

We have illustrated the effect of adding nanoparticles in water by the presentation of the streamlines and isotherms for different Rayleigh numbers and different concentrations. We also have presented the curves of the oscillating system obtained at high Rayleigh number $Ra = 5 \times 10^5$, these last have similar characteristics for water and for Maxwell-Garnett nanofluids model, but different for Koo-Klainstreuer model. Convective cells for the oscillatory regime are presented and discussed.

The effect of the inclination of the heated square cavity by below, for water and various nanofluids solutions, has been studied for angles of 0° , 30° , 60° and 90° . A significant increase in the Nusselt number was obtained for the angle of 60° .

The programming was carried out in C++ for improved computation time. The optimization of the code developed was performed using the techniques of parallelization in shared and distributed memory. The OpenMP technique is implemented for multi-core programming technology, while MPI technique is implemented for multiple nodes. In the MPI implementation we used the technique of cutting the domain that distributes the computational load on different nodes.

In conclusion, the lattice Boltzmann method for thermal problems, as we have developed, has provided reasonable numerical results and shows that the method offers a plausible alternative for the simulation of natural convection problems involving nanofluids.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS	iii
RÉSUMÉ	iv
ABSTRACT	vii
TABLE DES MATIÈRES	ix
LISTE DES TABLEAUX	xii
LISTE DES FIGURES	xiv
LISTE DES ANNEXES	xvii
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xviii
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 THÉORIE ASSOCIÉE AUX ÉCOULEMENTS MÉCANIQUES ET THERMIQUES	5
2.1 Principe de base de la méthode de Boltzmann sur réseau	5
2.2 Équation de transport de Boltzmann et ses simplifications	6
2.2.1 Équation de transport de Boltzmann	6
2.2.2 Opérateur de collision $Q(f)$	8
2.2.3 H théorème de Boltzmann et les distributions à l'équilibre	10
2.2.4 Modèle BGK pour la collision	13
2.3 L'équation de Boltzmann sur réseau	13
2.3.1 Discrétisation de l'équation continue de Boltzmann	14
2.3.2 Les modèles des vitesses	16
2.3.3 Approximation de la distribution à l'équilibre	17
2.3.4 Discrétisation du type D2Q9 de l'équation de Boltzmann	19
2.4 Méthode de Boltzmann sur réseau BGK	21
2.4.1 Principe de la méthode de Boltzmann sur réseau D2Q9	21
2.4.2 Développement de Chapman-Enskog	23
2.4.3 Propriétés numériques de la méthode de Boltzmann sur réseau	25

2.5	Le modèle thermique de Boltzmann sur réseaux.	28
2.6	Approche thermique basée sur modèle de Boussinesq	29
2.6.1	Les équations de mouvement	30
2.6.2	Formulation adimensionnelle.	31
2.7	Implémentation d'une force externe ou un élément source.	33
2.8	Les conditions aux frontières	35
2.8.1	Frontières de type noeud humide	35
2.8.2	Frontière de rebondissement	37
2.9	Les nano-fluides.	38
2.9.1	Paramètres des équations hydrodynamiques	39
2.9.2	La viscosité des nanofluides	40
2.9.3	La conductivité thermique des nanofluides : les modèles classiques . .	42
CHAPITRE 3 DESCRIPTION DES ALGORITHMES DE LA MÉTHODE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU.		50
3.1	Simulation avec une double fonction de distribution	50
3.1.1	Adimensionalisation et passages au système d'unités de réseau	50
3.1.2	Le terme source	53
3.1.3	Concepts de collision et de propagation : réseau D2Q9	55
3.1.4	Algorithme thermique de la méthode de Boltzmann sur réseau	60
3.2	Conditions initiales et aux frontières appliquées aux modèles <i>D2Q9</i> et <i>D2Q4</i> .	62
3.2.1	Conditions frontières de Zou et He pour le modèle <i>D2Q9</i>	62
3.2.2	Conditions frontière thermiques pour modèle <i>D2Q4</i>	64
3.2.3	Conditions des frontières de Guo	66
3.2.4	L'implémentation avec nanoparticules	68
CHAPITRE 4 SIMULATIONS NUMÉRIQUES DE LA CONVECTION NATURELLE DE NANOFUIDE PAR LA MÉTHODE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAUX . . .		71
4.1	Modèle de convection naturelle dans une cavité carré	71
4.1.1	Description du problème	72
4.1.2	Résultats et discussion	72
4.2	Cavité carrée avec une source de chaleur horizontale	77
4.2.1	Description du problème	77
4.2.2	Résultats et discussion	77
4.3	Cavité allongée chauffée verticalement, avec des nanofluides	81
4.3.1	Description du problème	81
4.3.2	Résultats et discussion	83

4.4	Cavité allongée chauffée par le bas, avec des nanofluides	85
4.4.1	Description du problème	85
4.4.2	Résultats et discussion	87
4.5	Analyse du transfert de chaleur dans une cavité remplie avec des nanofluides .	89
4.5.1	Description du problème	89
4.5.2	Résultats et discussion	91
4.5.3	Formation de 1 et 2 cellules de convection	91
4.5.4	Comparaison des modèles thermiques des nanofluides avec formation de 1 et 2 cellules.	95
4.5.5	Bifurcation supercritique de type fourche et bifurcation de Hops	95
4.5.6	Analyse du régime oscillatoire	100
4.5.7	Étude de la variation de la concentration	104
4.6	Transfert de chaleur dans une cavité inclinée remplie avec nanofluide.	108
4.6.1	Description du problème.	109
4.6.2	Résultats et discussion.	110
CHAPITRE 5 CONCLUSION		124
5.1	Synthèse des travaux	124
5.2	Limitations de la solution proposée	126
5.3	Améliorations futures	126
RÉFÉRENCES		127
ANNEXES		133

LISTE DES TABLEAUX

Table 2.1	Φ pour le citrate de Au , le citrate de Ag , le CuO et le Al_2O_3	46
Table 3.1	Variables physiques sur réseau	56
Table 3.2	Paramètres adimensionnels du nanofluide. L'indice nf représente le nanofluide en unités physiques, c représente <i>coefficient</i> , et le symbole - le terme sans dimensions.	69
Table 4.1	Comparaison des résultats pour les Nusselt moyens, le Nusselt maximum et sa position sur l'axe $\bar{y} = 1$ et le Nusselt minimum et sa position sur l'axe $\bar{y} = 1$	73
Table 4.2	Comparaison des résultats pour les composantes maximales des vitesses u_x sur l'axe $\bar{y} = 0.5$ et v_y sur l'axe $\bar{x} = 0.5$	74
Table 4.3	Maximun et minimum de la fonction de courant. (a) Résultats obtenus par Alamiri et al. (b) Résultats obtenus dans ce travail.	78
Table 4.4	Propriétés thermophysique de l'eau et du cuivre	81
Table 4.5	Cavité verticale avec un rapport de forme $\bar{A} = 6$. La concentration est de $\Phi = 0.2$ pour les trois modèles avec nanoparticules. [1] résultats de ce travail, et [2] résultats de Alloui et al.	85
Table 4.6	Propriétés thermophysiques de l'eau et le cuivre.	86
Table 4.7	Cavité horizontale avec une géometrie $A = 6$	87
Table 4.8	Propriétés thermophysiques de l'eau et le CuO	89
Table 4.9	Maximun de la fonction de courants et de nombre de Nusselt pour différentes niveaux de concentrations : (K) Modèle de Koo-Kleinstreuer et (M) Modèle de Maxwell-Garnett. $Ra = 1 \times 10^5$. Écoulement unicellulaire	108
Table 4.10	Maximun de la fonction de courants et de nombre de Nusselt pour différentes niveaux de concentrations : (K) Modèle de Koo-Kleinstreuer et (M) Modèle de Maxwell-Garnett. $Ra = 1 \times 10^5$. Écoulement bicellulaire	108
Table 4.11	Comparaison des modèles de la conductivité thermique de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide- CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^3$	111
Table 4.12	Comparaison des modèles de la conductivité thermique de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide- CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^4$	112

Table 4.13	Comparaison des modèles de la conductivité thermique de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^5$	113
Table 4.14	Comparaison des modèles thermiques de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$	113
Table 4.15	Comparaison des modèles thermiques de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^7$	114
Table 4.16	Maximun de la fonction de courant pour l'eau pure	115
Table 4.17	Maximun de la fonction de courant avec nanofluide. $\Phi = 0.04$	115
Table A.1	Profilage du code parallélise avec OpenMP	136
Table A.2	Temps pour calculer 100 itérations	137
Table A.3	Calcul de l'accélération (t_n/t_1) pour différents types de maillage	137
Table A.4	Comparaison de trois types d'optimisation. Maillage 40x40	140
Table A.5	Comparaison de trois types d'optimisation. Maillage 100x100	140
Table A.6	Comparaison de trois types d'optimisation. Maillage 200x200	140
Table A.7	Comparaison de trois types d'optimisation. Maillage 400x400	141

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Représentation dans le plan de deux particules pré collision et post collision.	10
Figure 2.2	Quelques exemples de discrétisation de l'espace de phase	18
Figure 2.3	Maille élémentaire du réseau D2Q9 : Vitesses verticales ou horizontales de norme c . Vitesses transversales de norme $\sqrt{2}c$ et Vitesses nulle pour les particules immobiles.	19
Figure 2.4	Maille élémentaire du réseau D2Q4 utilisée pour les modèles thermiques	29
Figure 3.1	Discrétisations d'un domaine fluide par un réseau D2Q9 adimensionalisé	56
Figure 3.2	Collision sur une cellule $[i, j]$	57
Figure 3.3	Propagation des distributions après la collision depuis une cellule $[i, j]$	58
Figure 3.4	Propagation des distributions postcollision vers une cellule $[i, j]$	58
Figure 3.5	Propagation des distributions après la collision depuis une cellule $[i, j]$	59
Figure 3.6	Propagation des distributions post-collision vers une cellule $[i, j]$	60
Figure 3.7	Les 3 distributions manquantes sur la frontière	63
Figure 3.8	La distribution manquante sur la frontière sud peut être détermine par la condition de frontière.	65
Figure 3.9	La partie de non-équilibre de la frontière est extrapolée du noeud voisin.	67
Figure 4.1	Schéma d'une cavité chauffé à température constante sur les côtés . . .	72
Figure 4.2	Lignes de courant pour une cavité carrée avec températures isothermes sur les parois verticales.	75
Figure 4.3	Les Isothermes pour la cavité carrée.	76
Figure 4.4	Schéma d'une cavité thermique avec une source de chaleur horizontale .	78
Figure 4.5	Lignes de courant pour une cavité carrée avec température sur les parois verticales.	79
Figure 4.6	Lignes de courant pour une cavité carrée avec températures isothermes sur les parois	80
Figure 4.7	La cavité est remplie avec une suspension de nanoparticules de cuivre dans l'eau.	82
Figure 4.8	Lignes de courant. Modèles de viscosite : (a) Eau (b) Modèle de Brinkman (c) Modèle de Maiga et (d) Modèle de Pak et Cho	84
Figure 4.9	Isolignes. Modèles de viscosité : (a) Eau (b) Modèle de Brinkman (c) Modèle de Maiga et (d) Modèle de Pak et Cho	84

Figure 4.10	La cavité est remplie avec une suspension de nanoparticules de cuivre dans l'eau.	86
Figure 4.11	Lignes de courant pour différentes concentrations de Φ	88
Figure 4.12	Isothermes pour différentes concentrations Φ	88
Figure 4.13	Schéma d'une cavité thermique avec température différentielle aux côtés	90
Figure 4.14	Lignes de courant et isothermes. $Ra = 5 \times 10^4$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules	93
Figure 4.15	Lignes de courant et isothermes. $Ra = 1 \times 10^5$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules	94
Figure 4.16	Lignes de courant et isothermes $Ra = 1 \times 10^5$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules.	96
Figure 4.17	Lignes de courant et isothermes $Ra = 1 \times 10^5$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules.	97
Figure 4.18	Points de bifurcation supercritique et de Hops pour l'eau	98
Figure 4.19	Points de bifurcation supercritique et de Hops pour le modèle thermique de (a) Maxwell-Garnett, et de (b) Koo-Kleinstreuer	99
Figure 4.20	Formation Oscillatoire pour un nombre de Rayleigh $Ra = 1 \times 10^5$. Modèles : (a) Eau, (b) Modèle de Maxwell-Garnett, (c) Modèle de Koo-Kleinstreuer	101
Figure 4.21	Un cycle oscillatoire	102
Figure 4.22	Lignes de courant du processus oscillatoire	103
Figure 4.23	Isothermes du processus oscillatoire	104
Figure 4.24	Variation de nombre de Nusselt normalisée par rapport à la concentration des nanoparticules	106
Figure 4.25	Variation de la valeur maximale de la fonction de courant normalisée par rapport à la concentration des nanoparticules	107
Figure 4.26	Schéma d'une cavité thermique avec température différentielle aux côtés	109
Figure 4.27	Variation de Nusselt Moyen selon la rotation de la cavité.	116
Figure 4.28	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^3$	117
Figure 4.29	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^4$	118
Figure 4.30	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^4$	119
Figure 4.31	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^5$	120
Figure 4.32	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^5$	121
Figure 4.33	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$	122
Figure 4.34	Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^7$	123
Figure A.1	Découpage du domaine pour l'implémentation de MPI	138

Figure A.2	Couche fantôme du domaine B.	139
Figure A.3	Découpage du domaine pour l'implémentation de MPI	139

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Les méthodes Paralleles	133
----------	-------------------------	-----

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Liste des abréviations

- BGK Bhatnagar, Gross et Krook.
 DnQm Cellule élémentaire en n dimensions, à m vitesses.

Caractères usuels

$f(x, c, t)$	fonction distribution de probabilité
$\mathbf{a} = (a_x, a_y)$	vecteur accélération
$\mathbf{g} = (0, g_0)$	vecteur des forces volumiques
$\mathbf{F} = (F_x, F_y)$	vecteur force
c_s	vitesse du son sur le réseau
$\mathbf{c}_i = (c_{x,i}, c_{y,i})$	vecteur vitesse associé à une distribution
H	distance caractéristique
k_B	constante de Boltzmann
l_t	unité de temps de réseau
l_u	unité de longueur de réseau
L	longueur caractéristique
m	masse moléculaire
Ma	nombre de Mach
P	pression
q	source interne de chaleur
Q	opérateur de collision
Re	nombre de Reynolds
Ra	nombre de Rayleigh
Pr	nombre de Prandtl
Nu	nombre de Nusselt
t	temps
T	température
e	énergie interne
$\mathbf{u} = (u_x, u_y)$	vecteur vitesse
ω_i	poids des distributions d'équilibre
ω'_i	poids des distributions d'équilibre thermique
$\mathbf{x} = (x, y)$	coordonnées cartésiennes bidimensionnelle
Δt	pas de temps

Δx pas géométrique

Lettres grecques

α	coefficient de diffusion thermique
β	coefficient de dilatation thermique
C	coefficient de capacité thermique
η_i	fonction du nombre de molecules dans une sous-domaine
κ	conductivité thermique
μ	viscosité dynamique
ν	viscosité cinématique
ρ	densité massique
τ	temps caractéristique de relaxation adimensionnalisé
τ^*	temps caractéristique de relaxation
ε	erreur relative
Φ	concentration des nanoparticules
Ψ	Fonction de courant

domaine de simulation

Ω	domaine de simulation
Ω_k	sous-domaine de simulation
A	rapport géométrique
eq	valeur à l'équilibre
i,j,k	indice de la valeur discrétisée dans l'espace des vitesses
f	indice d'un paramètre du fluide
p	indice d'un paramètre d'une nanoparticule
np	indice d'un paramètre du nanofluide
lim	valeur limite
\sim	indique une quantité post collision
$-$	indique une quantité adimensionnelle
\circ	mesure d'angle
0	indice de une valeur reference
max	indice de une valeur maximun
min	indice de une valeur minimun

Symboles

∇	opérateur gradient
$\nabla \cdot$	opérateur divergence
Δ	opérateur de Laplace
$\frac{\partial}{\partial t}$	dérivée partielle du temps
$\frac{\partial}{\partial x}$	dérivée partielle par x

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

La mécanique de fluide numérique.

Les calculs numériques en mécanique des fluides (CFD - acronyme anglais “computational fluid dynamic”) se sont considérablement développés au cours de ces dernières décennies. Ceci est du aux ressources informatiques qui sont de plus en plus puissantes et qui permettent ainsi la résolution numérique des équations aux dérivées partielles avec une grande précision. Grâce à ces développements, nous avons la possibilité de résoudre une grande quantité de problèmes complexes tels que les problèmes d’écoulements multiphasiques et les problèmes d’écoulements impliquant des effets thermiques.

La convection naturelle a été particulièrement considérablement étudiée ces dernières années a cause des ses nombreuses applications tant au niveau technologique que théorétique. En particulier, le besoin d’améliorer les transferts thermiques des fluides a donné naissance au développement des nanofluides . Ces derniers sont des solutions contenant des nanoparticules en suspension dans un fluide base quelconque. Grâce à leurs propriétés améliorées de transfert thermique, les nanofluides peuvent être utilisés dans une multitude d’applications en ingénierie : l’industrie automotrice, le génie biomédical, le refroidissement des électroniques, etc.

Dans ce contexte nous avons choisi d’aborder la simulation de certains problèmes de convection naturelle de nanofluides confinés dans des enceintes. La méthode numérique que nous utiliserons sera la méthode de Boltzmann sur réseau qui a prouvé son efficacité dans la solution des problèmes de mécanique de fluides tels que la mécanique de milieu poreux, les écoulements multiphasiques, des problèmes à échelle microscopique, entre autres. Parmi les avantages de cette méthode on note que l’on n’a pas de besoin de résoudre une équation pour la pression dans le cas des écoulements incompressibles. De plus, elle est hautement parallélisable, elle est très appropriée pour les problèmes multiphasiques avec de géométries complexes. Ces dernières années un nombre croissant d’articles qui mettent en évidence l’importance de la méthode de Boltzmann sur réseau ont été publiés.(documentation project, 2010).

La méthode de Boltzmann sur réseau

La méthode de Boltzmann sur réseau, couramment appelé LBM (Lattice-Boltzmann méthode), est une nouvelle alternative pour la simulation numérique de phénomènes physiques qui permet d'aborder un grand nombre de problèmes à diverses échelles. Il s'agit d'une méthode relativement récente qui se distingue des méthodes traditionnelles en adoptant une approche de "bas niveau" par la modélisation des écoulements. À cet effet, elle décrit le mouvement d'un fluide à un niveau mesoscopique ou intermédiaire et élabore des modèles pour l'interaction entre les molécules. La physique complète du fluide à un niveau du continu se trouve implicitement d'écrite par le modèle, et le travail conceptuel qu'on doit effectuer se trouve à l'opposé de ce qu'on ferait dans l'approche de "haut niveau" classique. En se basant sur ces considérations, le modèle de collision entre particules est largement simplifié pour les besoins du traitement numérique. En tant que tel, la méthode de Boltzmann sur réseau est une méthode bien adaptée à la simulation des fluides complexes, étant donné que les propriétés physiques sont prises en charge très naturellement par la méthode (Latt, 2007).

En se basant sur l'équation de transport de Boltzmann, une équation intégro-différentielle qui décrit l'évolution de la fonction de distribution de probabilité définie dans un espace des positions et des vitesses, la méthode de Boltzmann sur réseau réduit cette fonction de distribution de probabilité vers un nombre discret d'états et, à partir d'elle nous obtenons les variables macroscopiques du fluide : la vitesse, la pression et la température. Le modèle de Boltzmann classique utilise le modèle proposé par Bhatnagar, Gross et Krook BGK (Bhatnagar *et al.*, 1954) qui permet de simplifier l'opérateur de collision de l'équation de transport de Boltzmann . En réalité, le succès de la méthode de Boltzman sur réseaux existe, dans une certaine mesure, grâce au modèle BGK et il reste un modèle intéressant dans de nombreuses situations à cause de sa simplicité. Le modèle BGK a été modifié de nombreuses fois en vue de l'amélioration numérique de la stabilité, de l'exactitude ou pour la représentation de phénomènes physiques particuliers. Il faut toutefois observer que ces extensions introduisent également de nouveaux problèmes (documentation project, 2010).

Dans ce travail dont le but est la résolution de problèmes thermiques, nous utiliserons le modèle qui utilise la technique de deux fonctions de distribution, une première pour la vitesse, et une deuxième pour la température. Par la suite, nous ajouterons un modèle pour les nanofluides : la viscosité dynamique suivra le modèle de Brinkman, (Brinkman, 1952), les propriétés des nanofluides seront celles de Maxwell-Garnett (Maxwell, 1873) et de Koo-

Kleinstreuer (Koo et Kleinstreuer, 2004), les autres paramètres (le coefficient de capacité thermique, le coefficient de dilatation thermique,etc.) seront obtenus en pondérant les paramètres du fluide de base et des nanoparticules.

Contenu de la mémoire.

Dans une première étape de ce travail, une revue bibliographique permettra de connaitre les fondements théoriques de la méthode de Boltzmann sur réseau purement mécanique ainsi que l'implémentation d'un modèle thermique. Nous présenterons la dérivation de l'équation de Boltzmann discrète à partir de l'équation de transport de Boltzmann ainsi que les modèles *D2Q9* et *D2Q4* qui génèrent la structure du réseau. Nous expliquerons le noyau de la méthode de Boltzmann en décrivant les processus de collision et propagation. Nous étudierons l'implémentation du modèle thermique basé sur l'approximation de Boussinesq et également l'un des modèles des nanofluides. Le chapitre 3 présente le schéma numérique d'implémentation de la méthode de Boltzmann sur réseau ainsi que les types des conditions aux frontières utilisées pour les parties mécaniques et thermiques. Au chapitre 4, nous validerons et analyserons les résultats de notre code de calcul. Tout d'abord, nous validerons le programme en le comparant aux résultats classiques obtenus par De Vhal Davis pour une cavité chauffée latéralement et pour une cavité chauffée avec une source en forme d'aile à l'intérieur du domaine. Après ces premières étapes de validation, nous implémenterons le modèle avec des nanoparticules pour des cavités allongées : une horizontale et l'autre verticale. Nous confronterons nos résultats avec ceux obtenus numériquement et analytiquement par d'autres études. Enfin, pour une cavité carrée chauffée sur la paroi inférieure, nous démontrerons la formation possible de deux types d'écoulements : unicellulaire et bicellulaire en fonction des conditions initiales choisies. Pour l'eau pure et pour deux types de modèles nanofluides nous déterminerons la valeur des points de bifurcation (Rayleigh critiques) de type fourche et de type bifurcation de Hops. Nous présentons les lignes de courant et les isothermes obtenus pour différents nombres de Rayleigh et différentes concentrations des nanoparticules. Ensuite, nous analyserons l'effet de l'augmentation de la concentration sur le transfert de chaleur ainsi que l'apparition de régimes oscillatoires à nombres de Rayleigh élevé. L'effet de l'inclinaison de la cavité sur le transfert de chaleur est ensuite étudié. Enfin, nous conclurons en discutant des résultats obtenus et les perspectives d'études futures seront discutés.

Implementation du programme

Dans ce travail, nous développerons un programme original en C++ orienté à objet. Le

code en C++ permet l'implémentation des techniques d'optimisation en calcul parallèle tandis que l'approche orientée à objet permet son évolutivité. Un survol rapide sur l'optimisation en parallèle utilisant les techniques à mémoire partagée et les techniques à mémoire distribué est donné à l'annexe A. Les technologies respectives OpenMP et MPI sont expliquées brièvement. La technique de découpage du domaine est aussi ébauchée dans le cadre de l'implémentation MPI.

CHAPITRE 2

THÉORIE ASSOCIÉE AUX ÉCOULEMENTS MÉCANIQUES ET THERMIQUES

La méthode de Boltzmann sur réseau a été développée pour modéliser l'écoulement de fluides en se basant sur des théorèmes de la physique statistique et de la cinétique des gaz. L'équation fondamentale de ce développement est l'équation de transport de Boltzmann.

Les références (Succi, 2001; Wolf-Gladrow, 2000; Sukop et Thorne, 2005; documentation project, 2010; Bhatnagar *et al.*, 1954; Chapman et Cowling, 1970; Mazzocco *et al.*, 2000; Latt et Chopard, 2006; Latt, 2007; Filippova et Hanel, 2000) présentent de manière éclairée les divers aspects de la méthode de Boltzmann sur réseau. Dans celles-ci le lecteur pourra trouver d'excellents éléments pour compléter ses connaissances sur le sujet. Dans la suite, on trouvera d'abord des passages empruntés du mémoire de Jérôme Guiet (Guiet, 2009) dans lesquels la base de la méthode pour le cas purement mécanique est expliquée. À la sous-section 2.5, nous allons enchaîner avec l'objet de ce mémoire, soit le modèle thermique.

2.1 Principe de base de la méthode de Boltzmann sur réseau

Le comportement macroscopique d'un fluide dépend directement de son comportement microscopique. Dans un espace à trois dimensions, pour définir le comportement global exacte de ce fluide sur un domaine on pourra donc considérer la position $\mathbf{x} = (x, y, z)$, et la vitesse $\mathbf{c} = (c_x, c_y, c_z)$, de chaque particule ainsi que l'influence qu'elles exercent les unes sur les autres. Déterminer l'évolution temporelle de l'écoulement sur un domaine Ω composé de n particules revient donc à observer n points dans un espace à six dimensions (position et vitesse), et d'en évaluer l'évolution en considérant les interactions entre chaque particule. Une approche, pour éviter un grand nombre de variables, consiste donc à étudier les molécules non pas individuellement mais par groupes sur des sous domaines indépendants Ω_k tels que $\Omega = \bigcup_k \Omega_k$. Ces sous domaines Ω_k pouvant être appelés cellules, regroupent chacun, à un instant donné, un nombre de molécules $\eta_k < \eta$ qui est amené à varier au cours du temps. Ces variations dépendent de l'activité microscopique du fluide sur la cellule, à savoir des vitesses de chaque particules ainsi que des interactions qu'elles exercent les unes sur les autres à l'intérieur de Ω_k . Pour réduire le nombre d'inconnues il est possible au sein de ces cellules

de regrouper les $\eta_{k,i}$ molécules de vitesse identique $\mathbf{c}_i = (c_{i,x}, c_{i,y}, c_{i,z})$ de manière à ce que $\sum_i \eta_{k,i} = \eta_k$. Sur un sous domaine ces paquets de particules interagissent alors les unes avec les autres, l'interaction la plus importante étant la collision entre particules de vitesse ou trajectoire différentes. Il peut également s'agir de l'action de forces extérieures. Entre deux instants consécutifs t et $t + \Delta t$ ces interactions s'expriment par une variation du nombre de molécules $\eta_{k,i}$ des groupes de molécules de même vitesse. En exprimant ces variations par une fonction $\Delta_{k,i}$ il est possible de résumer le raisonnement qui vient d'être suivi par l'équation 2.1 :

$$\eta_{k,i}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = \eta_{k,i}(\mathbf{x}, t) + \Delta_{k,i} \quad (2.1)$$

avec à un même instant t

$$\eta = \sum_k (\sum_i \eta_{k,i}) \quad (2.2)$$

Le problème initial à l'échelle microscopique a donc été simplifié et allégé en considérant des groupes de particules de vitesses similaires à un niveau mésoscopique interagissant les uns avec les autres.

2.2 Équation de transport de Boltzmann et ses simplifications

A partir du concept de groupes de particules de caractéristiques communes précédemment évoqué, on va voir comment le comportement mésoscopique d'un écoulement peut être formulé et simplifié en considérant les mécanismes liant les particules les unes aux autres.

2.2.1 Équation de transport de Boltzmann

Dans un cadre plus général pour ce regroupement nous exprimons les $\eta_{k,i}$ particules du sous domaine Ω_k de vitesse c_i par une quantité $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t)$ (Buick, 2006; Ngo et Ngo, 2001; Wolf-Gladrow, 2000) appelée fonction densité de probabilité, telle que $\eta_{k,i} = \eta_0 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t) d\mathbf{x} d\mathbf{c}$ correspond au nombre de particules se trouvant dans un petit domaine $\Sigma_k = x_k + dx_k$ autour de la position \mathbf{x} , possédant une petite gamme de vitesses $\mathbf{c}_i + d\mathbf{c}$ autour de la vitesse \mathbf{c}_i , le

tout à un instant précis t .

Cette variation s'exprime par l'équation 2.3 correspondant à 2.1 avec l'utilisation des fonctions de distributions pour une vitesse \mathbf{c} .

$$f(\mathbf{x} + \mathbf{c}dt, \mathbf{c}, t + dt)d\mathbf{x}d\mathbf{c} = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)d\mathbf{x}d\mathbf{c} + Q(f)d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt \quad (2.3)$$

Le terme $Q(f)d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt$ illustre la variation du nombre de molécules par collision. $Q(f)$ est appelé opérateur de collision.

En divisant l'équation 2.3 par $d\mathbf{x}d\mathbf{c}dt$ et en faisant tendre dt vers 0 on obtient une formulation plus générale de la relation entre les fonctions de distribution, c'est l'équation de transport de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla_x f = Q(f) \quad (2.4)$$

Il est important de remarquer que dans ce cas nous avons uniquement pris en compte l'influence des collisions entre particules sans l'effet d'une force externe pour la variation du nombre de molécules d'un même groupe. Si cela était le cas il faudrait rajouter un terme à l'équation. Ainsi, pour l'influence d'une force quelconque \mathbf{F} , l'équation deviendrait :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla_x f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \nabla_x f = Q(f) \quad (2.5)$$

A partir des fonctions de distributions de l'équation (2.4), et puisque la formule $\eta_{k,i} = \eta_0 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t)d\mathbf{x}d\mathbf{c}$ correspond à un nombre de particules autour de \mathbf{x} et \mathbf{c} , il est possible de déduire les grandeurs macroscopiques sur un volume unitaire en intégrant f sur l'ensemble des vitesses \mathbf{c} que prennent les différentes particules en \mathbf{x} . Ainsi en connaissant m , la masse moléculaire d'une particule et $\mathbf{u}_{rel} = \mathbf{c} - \mathbf{u}$ sa vitesse relative par rapport à un fluide de vitesse \mathbf{u} , l'expression :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \int m f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (2.6)$$

définit la densité massique du fluide , tandis que :

$$\rho(\mathbf{x}, t) u(\mathbf{x}, t) = \int m \mathbf{c} f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (2.7)$$

définit la vitesse du fluide \mathbf{u} , et finalement :

$$\rho(\mathbf{x}, t) e(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \int m \mathbf{u}_{rel}^2 f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) d\mathbf{c} \quad (2.8)$$

définit l'énergie interne e . Il est possible d'exprimer cette énergie interne par $e = \frac{3}{2} k_B T$, où k_B est la constante de Boltzmann et T la température en Kelvin.

À partir d'une considération sur des paquets de molécules aux caractéristiques de vitesse précises, par la théorie cinétique des gaz et l'équation de Boltzmann il est donc possible de déduire le comportement macroscopique d'un fluide. Il manque cependant un élément important, l'opérateur de collision $Q(f)$, qui décrit comment les distributions interagissent les unes avec les autres suite à des interactions entre les particules.

2.2.2 Opérateur de collision $Q(f)$

L'opérateur de collision illustre la variation au cours du temps des distributions $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$, c'est à dire qu'il est directement lié à la nature du gaz ou fluide considéré. Il est également lié à l'activité microscopique de ce dernier. La détermination de $Q(f)$ (Buick, 2006; Ngo et Ngo, 2001; Wolf-Gladrow, 2000) se résume à évaluer le nombre de molécules entrant en collision et changeant de trajectoire ou de vitesse à un endroit précis, entre deux pas de temps, entre deux états donnés.

Pour le développement de l'équation de Boltzmann sur réseau nous considérons une définition simplifiée de cet opérateur, les approximations choisies sont les suivantes :

– L'opérateur de collision est déterminé pour le cas d'un gaz dilué où seul les collisions entre

deux particules sont considérées.

- Les particules sont supposées indépendantes avant et après la collision. C'est à dire que l'influence des molécules les unes sur les autres est négligée hormis lorsqu'il y a collision.
- La collision est supposée ponctuelle et instantanée et elle n'est pas influencée par des forces extérieures.

Ces simplifications sont restrictives car en théorie les particules s'influencent les unes sur les autres en permanence. Il est cependant supposé que ce domaine d'influence est restreint au proche voisinage de ces dernières et ainsi la collision correspond à l'interaction de ces domaines d'influence. En résumé avec de telles simplification la collision de deux particules ressemble à la collision de deux boules d'un jeu de billard. La physique de ce phénomène et le lien entre les états pré et post-collision pour déduire une distribution f_a se résument par l'équation suivante :

$$Q(f_a) = \int \int (f'_a f'_b - f_a f_b) c_{rel} \sigma(c_{rel}, \theta) d\omega d\mathbf{c}_b \quad (2.9)$$

Cette équation fait le lien entre les vitesses de groupes de particules a et b avant la collision \mathbf{c}' et après \mathbf{c} tel que $f'_a = f(x, \mathbf{c}'_a, t)$, $f'_b = f(x, \mathbf{c}'_b, t)$, $f_a = f(x, \mathbf{c}_a, t)$, $f_b = f(x, \mathbf{c}_b, t)$. D'autre part $c_{rel} = |\mathbf{c}_a - \mathbf{c}_b| = |\mathbf{c}'_a - \mathbf{c}'_b|$ est la vitesse relative entre les particules avant et après la collision et σ représente la section efficace différentielle, elle exprime d'une certaine façon l'interaction entre les particules des groupes a et b. Cette dernière se définit en fonction d'un paramètre B et d'un angle θ tel que :

$$\sigma(c_{rel}, \theta) = \frac{B(c_{rel}, \theta) dB}{\sin(\theta) d\theta} \quad (2.10)$$

Les paramètres B et θ ainsi que la collision entre deux particules sont illustrés sur la Figure 2.1. Enfin $d\omega = \sin(\theta) d\theta d\phi$ est l'angle solide sur lequel on intègre σ avec ϕ l'angle azimutal afin de déterminer la collision en considérant toutes les directions.

Pour résumer, l'équation 2.9 exprime donc le lien entre une distribution $f_a = f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_a, t)$ et les autres distributions en un point. Cet opérateur de collision représente un cas très par-

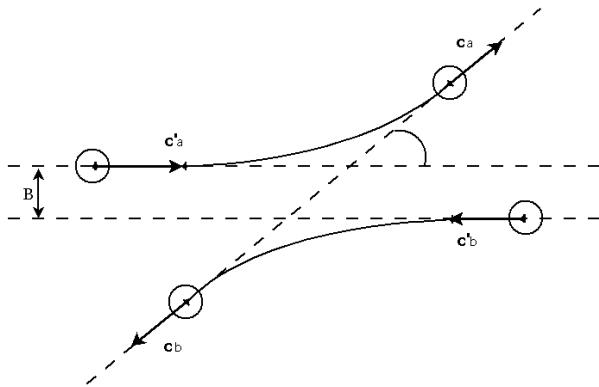


Figure 2.1 Représentation dans le plan de deux particules pré collision et post collision.

ticulier de collision, cependant la formulation mathématique obtenue reste assez compliquée et la résolution exacte d'un tel opérateur de collision est difficilement envisageable pour une simulation pratique d'écoulements. On va donc voir qu'un modèle encore plus simpliste, introduit par Bhatnagar *et al.* (1954), communément appelé modèle BGK, a été retenu pour la méthode de Boltzmann sur réseau. Maintenant il est nécessaire de définir une quantité importante, déduite de 2.9 et des considérations sur l'entropie d'un système, c'est à dire la distribution à l'équilibre f_{eq} :

2.2.3 H théorème de Boltzmann et les distributions à l'équilibre

L'équation de Boltzmann 2.4, couplée avec l'opérateur de collision exprimé par l'équation 2.9, décrit la variation de distributions f de molécules d'un gaz dilué.

Dans le but d'alléger une telle formulation de la collision nous allons définir une distribution de probabilité particulière, la distribution à l'équilibre notée f_{eq} .

Il est tout d'abord nécessaire de considérer la fonction $H(t)$ (Ngo et Ngo, 2001; Wolf-Gladrow, 2000).

$$H(t) = \int f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) \ln(f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)) d\mathbf{x} d\mathbf{c} \quad (2.11)$$

Cette quantité varie en sens inverse de l'entropie et représente à une constante près l'in-

verse de celle-ci (Bhatnagar *et al.*, 1954).

En dérivant cette équation par rapport au temps et en remplaçant le terme $\frac{\partial f}{\partial t}$ qu'il en résulte en utilisant l'équation de Boltzmann 2.4 , ainsi que l'opérateur de collision précédemment évoquée 2.9), et après diverses considérations physiques et mathématiques (Buick, 2006; Ngo et Ngo, 2001), il s'avère que seul le terme de collision contribue à $\frac{\partial f}{\partial t}$ et devient :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{4} \int (f'_a f'_b - f_a f_b) \sigma \ln\left(\frac{f_a f_b}{f'_a f'_b}\right) d\mathbf{x} d\omega d\mathbf{c}_a d\mathbf{c}_b \quad (2.12)$$

Enfin, à partir de cette formule une étude du signe des différents termes la constituant (Buick, 2006; Ngo et Ngo, 2001) permet de déduire la relation suivante très simple :

$$\frac{\partial f}{\partial t} \leq 0 \quad (2.13)$$

Cette formule constitue le théorème H de Boltzmann qui stipule par opposition à H que l'entropie d'un gaz sans corrélation qui satisfait à l'équation de Boltzmann ne peut qu'augmenter au cours du temps (Ngo et Ngo, 2001). Il s'avère que cette augmentation converge vers un état d'équilibre, comme celui évoqué précédemment. À cet équilibre l'entropie ne varie plus, cet état correspond au cas particulier où $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$ et dans ce cas :

$$f'_a f'_b = f_a f_b \quad \text{ou} \quad \ln f'_a + \ln f'_b = \ln f_a + \ln f_b \quad (2.14)$$

Ceci revient donc à dire que $\ln(f)$ est une quantité conservée avec la collision de deux particules. Étant donné que les quantités conservées entre l'état initial et l'état final d'une collision sont la masse, la quantité de mouvement et l'énergie, $\ln(f)$ ne peut être qu'une combinaison linéaire de ces invariants (Ngo et Ngo, 2001).

$$\ln f = A'' + \mathbf{B} m \mathbf{c} - D \frac{1}{2} m \mathbf{c}^2 \quad (2.15)$$

qui se reformule :

$$f = A' \exp[\mathbf{B}m\mathbf{c}] - D \frac{1}{2} m \mathbf{c}^2 = A \exp\left[-\frac{mD}{2} \left(\mathbf{c} - \frac{\mathbf{B}}{D}\right)\right] \quad (2.16)$$

avec A'' et A', A et D des scalaires et \mathbf{B} un vecteur. Il est possible de déduire ces constantes pour compléter la formule. Il suffit d'utiliser la définition de la densité ρ , de la vitesse \mathbf{u} et l'énergie e par unité de volume :

$$e = \frac{3}{2}k_B T :$$

$$\rho = \int m f d\mathbf{c},$$

$$\mathbf{u} = \frac{\int m \mathbf{c} f d\mathbf{c}}{\rho},$$

$$\frac{3}{2}k_B T = \frac{\frac{1}{2} \int m \mathbf{u}_{rel}^2 f d\mathbf{c}}{\rho}$$

Après le calcul des constantes l'équation (2.16) devient :

$$f = f_{eq} = \frac{\rho}{m} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{c} - \mathbf{u})^2}{2k_B T}\right) \quad (2.17)$$

Cette distribution particulière est la distribution de Maxwell (Buick, 2006; Chapman et Cowling, 1970; Ngo et Ngo, 2001). Présentée ici comme la solution à l'équilibre de l'équation de Boltzmann 2.4 avec la collision 2.9, elle est d'après le théorème H la distribution particulière vers laquelle une distribution f quelconque doit tendre.

La distribution à l'équilibre 2.17 est un élément clef de la méthode de Boltzmann sur réseau. Elle constitue un moyen de déduire un état mésoscopique associé à un état macroscopique donné et elle permet de définir un opérateur de collision Q plus simple que celui présenté par l'équation 2.9.

2.2.4 Modèle BGK pour la collision

L'opérateur de collision proposé par Bhatnagar, Gross et Krook (Bhatnagar *et al.*, 1954; Succi, 2001) exprime la collision comme une relaxation des distributions f vers l'équilibre donné par f_{eq} 2.17. Celui-ci est exprimé en fonction de la densité, vitesse, et température du fluide considéré au point d'évaluation de la collision. Cette relaxation est pondérée par un temps τ^* de l'ordre du temps moyen entre deux collisions pour une particule.

Ce temps exprime en quelque sorte la viscosité du fluide auquel se rapportent les distributions, nous reviendrons sur sa détermination ultérieurement. Cette vision simplifiée de la collision sera retenue pour la suite de ce mémoire. Elle s'avère suffisante pour exprimer les caractéristiques d'un fluide ou gaz quelconque et garantir la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

$$Q(f) = -\frac{f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t) - f_{eq}(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)}{\tau^*} \quad (2.18)$$

Pour terminer, quoique le modèle BGK est devenu un classique du modèle de Boltzmann sur réseau, il y a d'autres alternatives tel que discuté dans l'annexe A

2.3 L'équation de Boltzmann sur réseau

Les formulations générales évoquées dans la section précédente sont des équations continues (la équation continue de Boltzmann, les équations continues de la masse volumique et de la quantité de mouvement). Pour l'application numérique il est maintenant nécessaire de simplifier ces équations pour pouvoir traiter un nombre fini de variables tout en conservant la fiabilité des résultats. On va donc regarder la détermination de l'équation de Boltzmann sur réseau, à vitesses discrètes, à partir de l'équation continue de Boltzmann.

Pour alléger la notation nous allons désormais utiliser les abréviations $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}_i, t) = f_i(t)$, $f(\mathbf{x} + \Delta t \mathbf{c}_i, \mathbf{c}, t + \Delta t) = f_i(t + \Delta t)$ avec \mathbf{c}_i une vitesse précise, nous noterons f_i^{eq} de même.

Comme définit précédemment nous retenons l'équation de Boltzmann 2.4 avec l'opérateur de collision simplifié BGK 2.18 :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla_x f = -\frac{f - f_{eq}}{\tau*} \quad (2.19)$$

où f est la fonction de distribution au temps t , à la position \mathbf{x} pour la vitesse microscopique \mathbf{c} . Le paramètre $\tau*$ représente le temps de relaxation pour la collision déterminé en fonction du fluide considéré et f_{eq} correspond à la distribution de Maxwell 2.17.

Les propriétés hydrodynamiques du fluide telles que la densité et la vitesse \mathbf{u} peuvent être calculées à partir des moments de f définis par les équations 2.6 et 2.7. Comme on l'a évoqué, la fonction de distribution à l'équilibre pour un état donné est déduite de ces propriétés. Pour pouvoir utiliser ces équations pour des simulations d'un point de vue numérique il est nécessaire de les discréteriser.

2.3.1 Discrétisation de l'équation continue de Boltzmann

L'équation simplifiée 2.19 permet d'évaluer la variation des distributions dépendant de l'espace, de leur vitesse et du temps. Pour une résolution numérique cette équation se discréteise selon chaque paramètre (Escobar *et al.*, 1997; Succi, 2001; Wolf-Gladrow, 2000).

Tout d'abord le spectre infini des vitesses \mathbf{c} associées aux distributions en un point doit être discréterisé pour ne considérer qu'un nombre fini de vitesses, $\mathbf{c}_i = (\mathbf{c}_{i,x}, \mathbf{c}_{i,y}, \mathbf{c}_{i,z})$ en trois dimensions avec l'indice i représentant la discréterisation. Cette discréterisation est un élément clef de la méthode de Boltzmann sur réseau car elle doit s'effectuer de façon à conserver les quantités globales de l'écoulement.

De l'équation continue de Boltzmann nous obtenons alors l'équation discrète de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{c}_i \cdot \nabla_x f_i = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau*} \quad (2.20)$$

Pour déterminer l'équation de Boltzmann sur réseau les dérivées temporelles et spatiales sont discrétisées à leur tour pour une vitesse \mathbf{c}_i :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} \quad (2.21)$$

pour le temps avec Δt le pas de temps.

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} = \frac{f_i(x_\alpha + \Delta x_\alpha, t + \Delta t) - f_i(x_\alpha, t + \Delta t)}{\Delta x_\alpha} \quad (2.22)$$

pour l'espace avec Δx_α le pas géométrique dans la direction d'un repère cartésien.

En substituant les équation 2.21 et 2.22 en trois dimensions dans l'équation de Boltzmann discrète 2.20 nous déduisons :

$$\frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + \sum_{j=1}^3 \frac{f_i(x_j + \Delta x_j, t + \Delta t) - f_i(x_j, t + \Delta t)}{\Delta x_j} = - \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau*} \quad (2.23)$$

Pour lier les différents paramètres entre eux et pour pouvoir en quelque sorte suivre les groupes de particules (héritage des automates de gaz sur réseau) le pas géométrique et le pas de temps sont choisis de façon à définir la vitesse $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{c}_i \Delta t$. Cette relation implique que pendant un pas de temps Δt les groupes de particules représentés par les distributions se déplaceront de exactement un pas de discrétisation géométrique. L'équation (2.23) peut alors s'écrire :

$$\frac{f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + \frac{f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t)}{\Delta t} = - \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau*} \quad (2.24)$$

$$= \frac{f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} = - \frac{f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)}{\tau*}$$

La discréttisation mène donc à une relation très simple entre les fonctions densité de probabilité pour une même vitesse \mathbf{c}_i . C'est l'équation de Boltzmann BGK sur réseau, ainsi :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau_*} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.25)$$

Cette formulation explicite est divisée en deux parties représentant l'interprétation physique de la théorie. D'abord un transport des distributions le long des vitesses de discréttisation (membre de gauche de l'équation) ou d'un point de vue plus qualitatif, un déplacement des paquets de particules de vitesse similaire de maille en maille de la discréttisation géométrique, c'est la propagation. Ensuite cette propagation est pondérée par une variation du nombre d'individus du fait des interactions entre particules (membre de droite de l'équation), c'est la collision.

On vient donc de déduire l'équation de Boltzmann BGK sur réseau par discréttisation de l'équation de Boltzmann continue. Cependant cette formulation s'applique pour une vitesse particulière après discréttisation du spectre infini des vitesses que peuvent prendre les distributions, et que il est maintenant nécessaire de discréttiser.

2.3.2 Les modèles des vitesses

L'équation de Boltzmann sur réseau 2.25 s'applique pour des fonctions de distribution f de même vitesse \mathbf{c}_i . Il y a théoriquement une infinité de groupes de particules de vitesses \mathbf{c} différentes. Sur un domaine de simulation, il faut donc discréttiser cet ensemble de vitesses en considérant des ensembles moyens de façon à ce que le maillage (ou réseau) associé à ces vitesses puisse assurer le déplacement des distributions à chaque pas de temps, le tout en garantissant la conservation des quantités de base sur le domaine.

Contrairement à la discréttisation spatiale temporelle qui peut être adaptée de façon à avoir moins d'influence sur l'écoulement à des échelles élevées devant celle du raffinement, la discréttisation de l'espace des vitesses doit pouvoir moyenner l'ensemble du spectre de vitesse par quelques valeurs. Cette discréttisation s'effectue selon divers critères (Succi, 2001) :

- L’isotropie de la discréétisation. Cette dernière se vérifie par diverses considérations mathématiques (Wolf-Gladrow, 2000) et permet de définir si un ensemble de vitesses est suffisamment invariant par rotation.
- La conservation de la masse de la méthode de Boltzmann associée à une discréétisation.
- La conservation de la quantité de mouvement de la méthode de Boltzmann associée à une discréétisation.
- La conservation de la quantité d’énergie de la méthode de Boltzmann associée à une discréétisation.

Plusieurs types de discréétisations permettent de garantir ces propriétés de façon satisfaisante, des exemples couramment employés en 1, 2 et 3D sont respectivement la discréétisation D1Q3 (1D et 3 vitesses de discréétisation), D2Q9 (2D et 9 vitesses de discréétisation), D2Q4 (2D et 4 vitesses de discréétisation), et D3Q19 (3D et 19 vitesses de discréétisation). La re-présentation de ces discréétisations peut être visualisée à la Figure 2.2. Dans le cadre de ce mémoire nous allons uniquement nous pencher sur les modèles D2Q9 pour la partie mécanique et D2Q4 pour la partie thermique.

Maintenant, on va voir la simplification de la distribution à l’équilibre.

2.3.3 Approximation de la distribution à l’équilibre

La formulation de la distribution à l’équilibre comme nous l’avons présenté correspond pour le modèle BGK à celle de la distribution de Maxwell 2.17. Pour la méthode de Boltzmann cette formule peut être simplifiée en fonction des vitesses discréétisées par un développement en série de Taylor de l’exponentielle par rapport à \mathbf{u} (Succi, 2001; Thurey, 2003; Wolf-Gladrow, 2000) :

$$\begin{aligned}
 f^{eq}(0 + \mathbf{u}) &= \beta \exp \left[\frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} - \frac{\mathbf{u}^2}{2k_B T} \right] = \\
 &= f^{eq}(0) + \mathbf{u} f^{eq\prime}(0) + \frac{\mathbf{u}^2}{2} f^{eq\prime\prime}(0) + \mathbf{O}(\mathbf{u}^3) = \\
 &= \beta \left(1 + \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{2(k_B T)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2k_B T} \right) + \mathbf{O}(\mathbf{u}^3)
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

avec $\beta = \frac{\rho}{(2\pi k_B T)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{-c^2}{2k_B T}\right]$. Une telle approximation est applicable pour des écoulements quasi-incompressibles à faible nombre de Mach. Pour ce cas, la formulation générale de la distribution à l'équilibre devient donc :

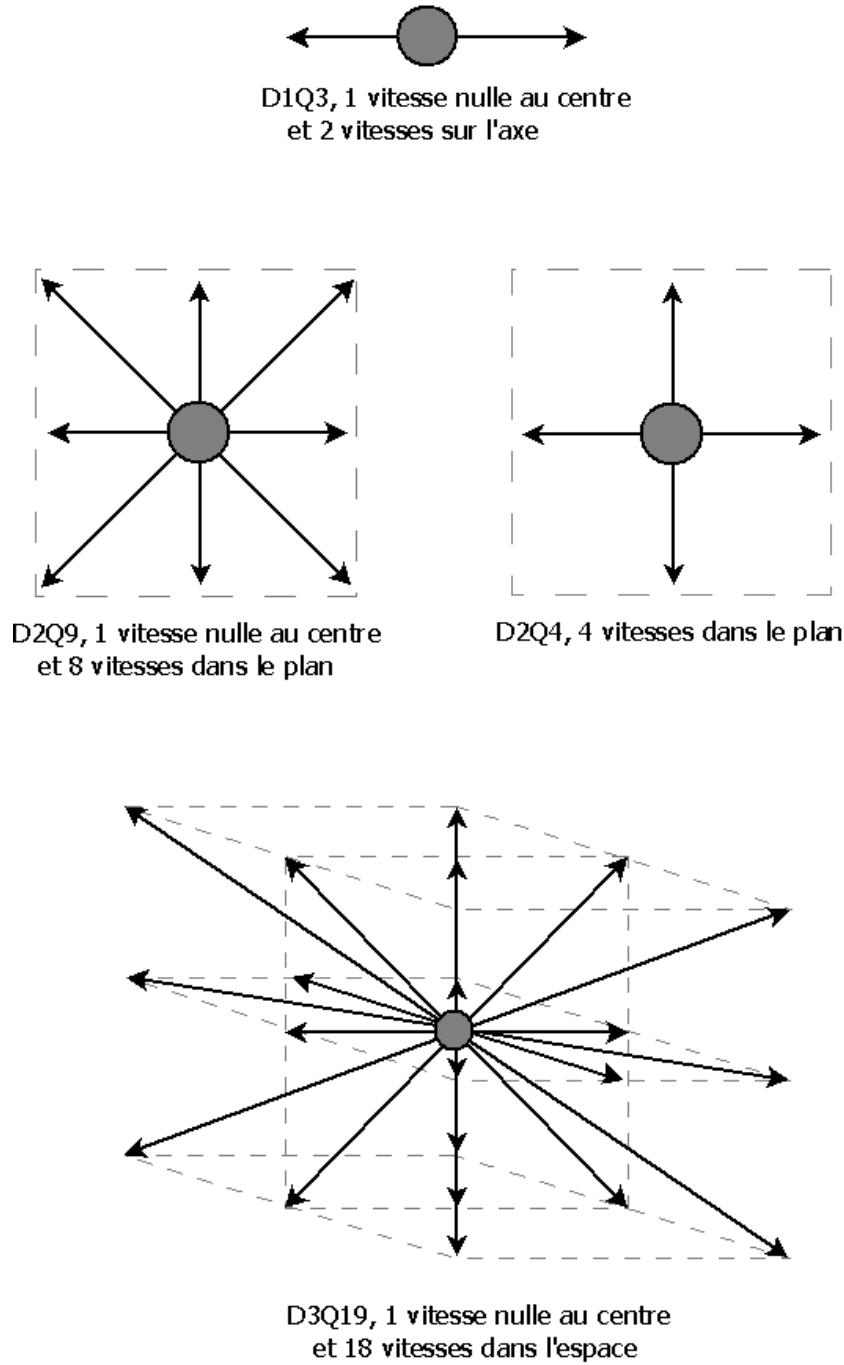


Figure 2.2 Quelques exemples de discrétisation de l'espace de phase

$$f^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi k_B T)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{-\mathbf{c}^2}{2k_B T}\right] \left(1 + \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{2(k_B T)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2k_B T}\right) \quad (2.27)$$

Il est notable que la partie correspondant à β dans cette équation équivaut à la distribution de Maxwell pour une vitesse \mathbf{u} nulle. Ainsi la distribution f_{eq} pour une vitesse \mathbf{u} quelconque est exprimée comme proportionnelle à une distribution à l'équilibre où $\mathbf{u} = 0$, où les distributions exprimeraient un état où le fluide serait statique.

Cette formulation simplifiée va maintenant nous permettre d'adapter intégralement l'équation de Boltzmann à une discrétisation particulière de l'espace des vitesses, la discrétisation D2Q9.

2.3.4 Discrétisation du type D2Q9 de l'équation de Boltzmann

Nous avons vu que pour des applications numériques l'équation de Boltzmann a été discrétisée dans l'espace, le temps et l'espace des vitesses. Ces différentes discrétisations sont liées les unes aux autres par une dépendance du pas géométrique au pas de temps en fonction de la vitesse de discrétisation $\Delta x = \mathbf{c}_i \Delta t$.

Connaissant les discrétisation du modèle D2Q9 (2 dimensions et 9 vitesses représentées à la Figure 2.3 il est maintenant possible d'expliciter diverses formulations générales abordées précédemment pour les adapter à ce réseau (Succi, 2001; Wolf-Gladrow, 2000).

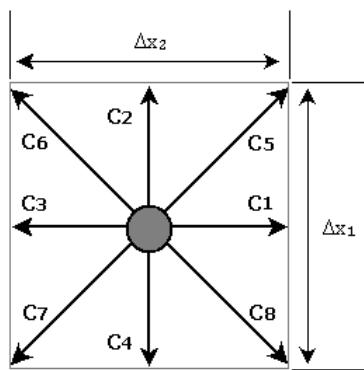


Figure 2.3 Maille élémentaire du réseau D2Q9 : Vitesses verticales ou horizontales de norme c . Vitesses transversales de norme $\sqrt{2}c$ et Vitesses nulle pour les particules immobiles.

Tout d'abord, les grandeurs macroscopiques sont liées aux distributions par les intégrales 2.6 et 2.7. Ainsi pour un réseau D2Q9 à 9 vitesses, l'intégrale devrait pouvoir être réduite à une somme finie sur les i vitesses de discréétisation en un point à un instant donné, c'est à dire :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t) = \int f(\mathbf{c}) d\mathbf{c} \quad (2.28)$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{c} f(\mathbf{c}) d\mathbf{c} \quad (2.29)$$

pour déterminer respectivement la densité et la vitesse sur un volume unitaire. Il faut noter que la masse m des particules est considérée unitaire dans ces formules.

Un autre élément important, déjà largement évoqué, est la distribution à l'équilibre f_{eq} . Sa définition a précédemment été précisée et simplifiée pour aboutir à l'équation 2.27 pour le modèle BGK déduite des distributions de Maxwell 2.17.

Avec la discréétisation des vitesses il est possible d'associer des distributions f_{eqi} à chaque vitesse \mathbf{c}_i . Ceci permet de déduire une formulation discrète des distributions à l'équilibre sous la forme suivante :

$$f_i^{eq}(\rho, \mathbf{x}) = \rho \frac{w_i}{\rho_0} \left(1 + \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{k_B T} + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{2(k_B T)^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2k_B T} \right) \quad (2.30)$$

Ces distributions locales sont formulées comme une variation par rapport à un équilibre où l'écoulement est statique au niveau macroscopique. Pour chaque vitesse \mathbf{c}_i l'équilibre est exprimé par des poids ω_i .

La détermination de ces poids ω_i dépend de la discréétisation des vitesses utilisées et donc du type de réseau utilisé. Pour les obtenir il suffit d'appliquer à ces distributions ω_i , traduisant un écoulement stagnant, les contraintes d'isotropie, conservation de masse, quantité de mouvement et énergie, utilisées pour le choix de la discréétisation de vitesse. Avec les vitesses

\mathbf{c}_i correspondant à celles du réseau D2Q9 (Figure 2.3) il est possible d'obtenir (Wolf-Gladrow, 2000). :

$$\begin{aligned}\frac{\omega_{1,2,3,4}}{\rho_0} &= \frac{1}{9} \\ \frac{\omega_{5,6,7,8}}{\rho_0} &= \frac{1}{36} \\ \frac{\omega_9}{\rho_0} &= \frac{4}{9} \\ \frac{k_B T}{m} &= \frac{\mathbf{c}^2}{3} = \mathbf{c}_s^2\end{aligned}\tag{2.31}$$

où \mathbf{c}_s^2 exprime la vitesse du son sur le réseau.

Nous allons maintenant résumer les différents éléments de la méthode BGK de Boltzmann sur réseau D2Q9 et apporter quelques compléments sur ses caractéristiques numériques.

2.4 Méthode de Boltzmann sur réseau BGK

A partir de la discrétisation de l'équation de Boltzmann, nous avons présenté un modèle pouvant être utilisé pour effectuer des simulations sur un domaine fluide en se basant sur le transport de distributions de probabilité f sur un réseau associé.

2.4.1 Principe de la méthode de Boltzmann sur réseau D2Q9

On a présenté un ensemble de relations permettant d'effectuer la simulation d'un écoulement de fluide par déplacement de distributions de probabilité de cellule en cellule dans l'esprit des automates de gaz sur réseau.

A partir d'un état connu des distributions f_i au temps t , il est possible de déduire les grandeurs macroscopiques de l'écoulement :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 f_i(\mathbf{x}, t)\tag{2.32}$$

$$\rho(\mathbf{x}, t)\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^8 \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.33)$$

Ces grandeurs macroscopiques permettent de définir un équilibre idéal vers lequel les distributions devraient tendre. Les distributions à l'équilibre idéal $f_i^e q$ sont exprimées de façon discrète pour chaque vitesse c_i du réseau en \mathbf{x} à t :

$$\begin{aligned} f_{i=1,2,3,4}^{eq}(\rho, \mathbf{x}) &= \frac{\rho}{9} \left(1 + 3 \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{\mathbf{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{\mathbf{c}^4} - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{u}^2}{\mathbf{c}^2} \right) \\ f_{i=5,6,7,8}^{eq}(\rho, \mathbf{x}) &= \frac{\rho}{36} \left(1 + 3 \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{\mathbf{c}^2} + \frac{9}{2} \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{u})^2}{\mathbf{c}^4} - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{u}^2}{\mathbf{c}^2} \right) \\ f_{i=0}^{eq}(\rho, \mathbf{x}) &= \frac{4\rho}{9} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{\mathbf{u}^2}{\mathbf{c}^2} \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Tel que déjà exprimé, les distributions $f_i(t)$ devraient tendre vers ces équilibres $f_i^e q(t)$ pendant Δt . Cette propriété est caractérisée par une relaxation en fonction d'un temps caractéristique τ^* qui illustre la variation des distributions entre $f_i(t)$ et $f_i(t + \Delta t)$. Cette étape, appelée collision, est représentée par le membre de droite de l'équation de Boltzmann discrétisée (2.35).

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau^*} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.35)$$

Enfin, en plus d'une variation des populations associées à chaque distribution f_i pendant Δt , celles-ci se déplacent selon chaque vitesse c_i et passent d'une position \mathbf{x} à $\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t$. Cette dernière étape, la propagation, apparaît également dans l'équation (2.35) et correspond au transport des groupes de particules le long de c_i .

À la fin de ce raisonnement, un nouvel état de la fonction f est connu à $t + \Delta t$. A partir de

celui-ci un nouvel état macroscopique peut être déduit, puis un nouvel équilibre idéal, et ainsi l'état $t + 2\Delta t$, et les suivants. Cette procédure constitue la méthode de Boltzmann sur réseau.

Maintenant, il est important de vérifier que ces quelques équations très simples puissent bel et bien être utilisées pour des simulations d'écoulements fluides, comme le sont les équations de Navier-Stokes. De plus, il faut encore expliciter un paramètre important, le temps de relaxation. Ces étapes du développement de l'équation de Boltzmann sur réseau vont s'effectuer par une rapide étude du développement de Chapman-Enskog.

2.4.2 Développement de Chapman-Enskog

L'expansion de Chapman-Enskog, présenté dans la référence (Wolf-Gladrow, 2000), également appelée analyse multi-échelle, est un développement qui permet de lier l'équation de transport de Boltzmann aux équations de Navier-Stokes. A partir de ce développement il est possible d'expliciter certains termes non directement présents dans l'équation de Boltzmann discrétisée, à savoir le temps de relaxation τ^* et la pression P .

Le principe de ce développement est de considérer que l'écoulement macroscopique correspond à la vision moyenne d'un écoulement mésoscopique perturbé. Ces perturbations s'expriment en fonction du nombre de Knudsen ϵ :

$$\epsilon = \frac{\lambda}{L_c} \quad (2.36)$$

Il correspond au ratio entre la distance moyenne entre deux collision de particules et la longueur macroscopique caractéristique du système simulé. Le terme λ définit la distance parcourue par une particule entre deux collisions avec d'autres particules. Il caractérise en quelque sorte la densité de particules et indirectement la viscosité du fluide. L_c de son côté précise les dimensions du domaine macroscopique, elle peut par exemple définir la taille d'un obstacle. Notons que pour considérer comme continu le fluide entourant un obstacle il faut $\epsilon \ll 1$.

Avec ces éléments, les différents paramètres de l'équation de Boltzmann sur réseau (2.35), soit t , \mathbf{x} et f_i , sont segmentés en différentes contributions pour différentes échelles de l'écoulement.

lement plus ou moins petites les unes par rapport aux autres, se rapportant à différents phénomènes représentés comme l'advection ou la diffusion.

Les différentes variables sont de la forme :

$$v = \sum_n v_n \epsilon^n \quad (2.37)$$

Suite à un développement de Taylor au second ordre de l'équation de Boltzmann sur réseau 2.35 avec la formulation 2.37 pour les différents paramètres, en observant séparément les contributions des différentes composantes en n , il est possible de déduire les équations caractéristiques de l'écoulement au niveau macroscopique.

Ainsi il est possible de déduire l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.38)$$

et l'équation du mouvement sans force extérieure :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad (2.39)$$

Ces équations s'obtiennent avec un développement de Taylor au premier ordre de l'équation de Boltzmann sur réseau après changement des variables selon l'équation 2.37. Dans ce premier développement la pression P a été définie telle que :

$$P = \frac{k_B T}{m} \rho \quad (2.40)$$

ou encore comme :

$$P = \frac{\mathbf{c}^2}{3}\rho = \mathbf{c}_s^2\rho \quad (2.41)$$

d'après les relations 2.31. Ensuite, en étudiant le second ordre du développement de l'équation de Boltzmann sur réseau les relations précédentes sont précisées et les équations de Navier-Stokes en régime incompressible et sans considération de forces extérieures sont retrouvées :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.43)$$

De cette dernière, le lien entre le temps de relaxation τ^* et sa formulation adimensionnelle $\tau = \frac{\tau^*}{\Delta t}$ avec la viscosité cinématique ν est obtenu par analogie lors du développement :

$$\nu = \frac{c^2}{3} \left(\tau^* - \frac{\Delta t}{2} \right) = \frac{c^2 \Delta t}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (2.44)$$

On viens donc d'aborder le principe de l'analyse multi-échelle (Thurey, 2003). Cette dernière permet de souligner le lien entre les équations de Navier-Stokes incompressibles (2.42,2.43) et l'équation de Boltzmann BGK. Cette étude permet de compléter le lien entre les mondes macroscopiques et microscopiques en explicitant le lien entre viscosité cinématique ν et temps caractéristique de relaxation τ^* .

2.4.3 Propriétés numériques de la méthode de Boltzmann sur réseau

La méthode de Boltzmann sur réseau par une discréétisation judicieuse de l'équation de Boltzmann se réduit à quelques équations simples et un réseau associé. Maintenant il est bon d'aborder quelques une des propriétés numériques liées à un tel développement (Succi, 2001; Wolf-Gladrow, 2000).

Précision

Le terme précision fait référence à l'erreur introduite par le remplacement des opérateurs différentiels de l'équation de Boltzmann par des différences finies. D'un point de vue spatial aussi bien que temporel, la formulation de la méthode par l'association des distributions à des vitesses de discréétisation opposées implique une précision d'ordre deux en espace et en temps (Succi, 2001). Cependant une telle précision concerne la méthode au coeur du fluide, avec l'imposition des conditions frontières le non respect de la symétrie des cellules sur les bord peut affecter cette précision, notamment spatialement.

Stabilité

Cette propriété doit être considérée en permanence pour la réalisation de simulations numériques par la méthode de Boltzmann sur réseau comme avec toute autre méthode de simulation numérique. La première condition de stabilité concerne la capacité que possède la méthode à transporter l'information et elle s'exprime par la condition de Courant-Friedrichs-Lowy (CFL), dont le nombre de Courant est :

$$C = \frac{u\Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (2.45)$$

Étant donné le lien entre le pas de temps et le pas géométrique $\Delta \mathbf{x} = \mathbf{c}_i \Delta t$, imposé lors de la définition du réseau, la condition CFL se réduit à $C = M < 1$, M représentant le nombre de Mach. D'après la définition de la méthode et notamment des distributions d'équilibre cette condition de stabilité devrait être automatiquement remplie si la condition d'incompressibilité $M \ll 1$ de la définition des distributions d'équilibre a bien été respectée. Nous verrons qu'en pratique la vitesse \mathbf{c}_i est normalisée à 1, ainsi la condition CFL et d'incompressibilité se réduisent à une condition sur la vitesse $u \ll 1$.

Une autre condition de stabilité bien plus problématique à appliquer concerne la limitation sur le temps de relaxation et indirectement la viscosité. Selon le type de fluide représenté et le pas de discréétisation utilisé le temps caractéristique de la collision varie entre la limite inférieure $\frac{1}{2}$, représentant une viscosité quasi nulle, et la limite supérieure +1 pour une vis-

cosité quasi infinie. Au voisinage de ces bornes la méthode de Boltzmann sur réseau devient fortement instable, ces instabilités pouvant se former initialement à proximité des zones de discontinuités comme les frontières solides ou fluide du domaine ou à proximité de vortex dans l'écoulement. Cette contrainte sur la viscosité constitue une limitation pour les simulations d'écoulements à haut nombre de Reynolds et turbulents, certaines méthodes de prise en compte de la turbulence (Succi, 2001; Dong *et al.*, 2008; Mazzocco *et al.*, 2000; Yu *et al.*, 2005) peuvent cependant palier ce problème dans une certaine mesure.

Ces quelques considérations sur la stabilité sont à retenir pour la mise en application de la méthode de Boltzmann sur réseau car elles représentent les principales sources d'instabilité d'une simulation.

Lien entre précision, stabilité et temps simulé

Pour conclure notre étude sur la méthode de Boltzmann sur réseau présenté au cours de ce chapitre et avant de voir comment cette dernière est utilisée pour la simulation d'écoulements, nous allons rapidement nous pencher sur quelques considérations générales. Afin d'employer la méthode de Boltzmann sur réseau de façon efficace il est important d'avoir à l'esprit les considérations suivantes.

Les différents paramètres caractéristiques du réseau, à savoir le pas géométrique Δx , le pas de temps Δt et le temps de relaxation τ sont liés les uns aux autres par les relations $\Delta x = c_i \Delta t$ et $\nu = \frac{c^2 \Delta t}{3} (\tau - \frac{1}{2})$. Ainsi, pour une simulation sur un domaine quelconque, plus le pas Δx est petit, plus la simulation sera précise mais plus le pas Δt sera court, plus l'évolution temporelle de la simulation sera longue. Inversement un pas géométrique grand impliquera un pas de temps grand, la simulation évoluera alors plus rapidement mais sera moins précise. Il faut également souligner la stabilité de la simulation. On note que la diminution de τ génère inversement une augmentation du temps de relaxation. Ainsi, lorsque une simulation est caractérisée par un temps de relaxation trop petit la limite de stabilité $\tau = 1/2$ est approchée. Inversement, une simulation stable peut devenir instable si les pas Δx et Δt sont trop grands.

Ces quelques notions sur les liens entre les paramètres du réseau sont importantes pour le bon emploi du modèle de Boltzmann sur réseau lors de son utilisation pour la simulation d'écoulements. Maintenant que le modèle mécanique a été expliqué, il faut décrire le modèle thermique qui utilise une deuxième fonction de distribution avec le modèle D2Q4.

2.5 Le modèle thermique de Boltzmann sur réseaux.

Contrairement au succès du modèle d'écoulement athermique, l'établissement d'un modèle prenant en compte le transfert de chaleur n'est pas direct. En effet, un effort constant a été fait pour construire un bon modèle thermique de Boltzmann. Les modèles actuels de Boltzmann sur réseaux peuvent être divisés en trois catégories : les modèles à plusieurs vitesses (Pavlo *et al.*, 1998; Alexander *et al.*, 1993; Chen *et al.*, 1994), les modèles à deux fonctions de distributions (Eggels et Somers, 1995; Shang, 1997; He *et al.*, 1998) et les schémas hybrides (Filippova et Hanel, 2000; Lallemand et Luo, 2003). Les modèles à plusieurs vitesses calculent différentes fonctions de distribution d'équilibre d'ordre supérieur qui permettent de calculer un grand ensemble de vitesses discrétisées. Cependant, ces modèles souffrent d'instabilité numérique et un temps de relaxation unique conduit à un nombre de Prandl fixe et dépourvu d'interprétation physique.

Les schémas hybrides (Zhang *et al.*, 2008) emploient d'autres méthodes telles qu'un schéma aux différences finies pour résoudre l'équation de la température pendant que le champ de vitesse est déterminé par la méthode de Boltzmann sur réseaux. Évidemment, cette approche ne bénéficie pas des avantages des caractéristiques mesoscopique de la méthode de Boltzmann sur réseaux.

Les méthodes basées sur une deuxième fonction de distribution g_i ont un temps de relaxation différent pour chacune des fonctions. Une fonction régule les collisions et les déplacement de la partie mécanique, pendant qu'une deuxième détermine l'évolution de la fonction de température (ou de l'énergie, ou d'entropie selon le modèle choisi) .

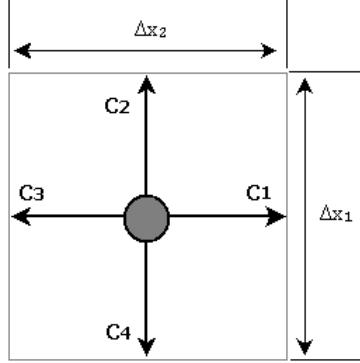
Dans le cas d'une deuxième fonction de distribution, le modèle D2Q4 pour la discrétisation de la fonction de température est suffisant (Figure 2.4). La température et la nouvelle fonction de distribution, g_i , sont maintenant liées par la formule (2.46) qui complémente les formules 2.28 et 2.29.

$$T(\mathbf{x}, t) = T_0 \sum_{i=1}^4 g_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.46)$$

L'évolution dans le temps et dans l'espace de la fonction de distribution, ci-dessous, est :

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau_{1*}}(g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (2.47)$$

où τ_{1*} est le temps de relaxation thermique.



Vitesses verticales ou horizontales de norme c .

Figure 2.4 Maille élémentaire du réseau D2Q4 utilisée pour les modèles thermiques

La fonction de distribution d'équilibre est déterminée par :

$$g_{i=1,2,3,4}^{eq}(\rho, \mathbf{x}) = \rho \omega'_i T_0 \left(1 + \frac{\mathbf{c} \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right) \quad (2.48)$$

où T_0 est la température caractéristique avec des poids : ω'_i :

$$\frac{\omega'_{1,2,3,4}}{\rho_0} = \frac{1}{4} \quad (2.49)$$

2.6 Approche thermique basée sur modèle de Boussinesq

Le modèle de Boussinesq pour la modélisation d'un fluide avec transport de chaleur ajoute un terme source sur l'équation qui dépend de la variation de la température. Tous les autres paramètres physiques sont considérés constants par rapport à la température. Dans cette section, on regardera la formulation adimensionnelle du modèle de Boussinesq, telle que pré-

sentée par Latt (2008).

2.6.1 Les équations de mouvement

Dans un contexte macroscopique, un écoulement thermique se modélise en résolvant l'équation de la température à travers des équations d'advection-diffusion. Avec l'approximation de Boussinesq l'interaction entre l'écoulement et la température est représentée par un terme linéaire de flottabilité qui agit comme une force sur le volume du fluide.

On regardera les équations macroscopiques en unités physiques :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \beta(T - T_i) \mathbf{g} \quad (2.50)$$

où $\mathbf{g} = \{0, g_0\}$ et

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \alpha \nabla^2 T \quad (2.51)$$

Ici, l'équation de continuité est omise, et ρ_0 est pris égal à 1 sans perte de généralité. Le paramètre β est le coefficient de dilatation volumétrique, α la diffusion thermique, \mathbf{g} le vecteur de l'accélération gravitationnelle. La constante T_i détermine le décalage absolu du champ de température. On détermine la valeur de T_i à travers les conditions initiales, en la choisissant par exemple égal à la température moyenne du départ.

Dans la convection de Rayleigh-Bénard, par exemple, les conditions aux frontières de température(condition de Dirichlet) sur les deux frontières opposées sont définies comme :

$$T_h = T_i + \frac{1}{2} \Delta T \quad (2.52)$$

$$T_c = T_i - \frac{1}{2} \Delta T \quad (2.53)$$

où T_h est la température de côté chaud, T_c la température de côté froid, et ΔT la différence de température entre les deux frontières. Étant donné les conditions initiales et les conditions aux frontières, la constante T_i peut être choisie arbitrairement et n'affecte pas l'évolution des flux, puisque le terme de la poussée d'Archimède ne dépend que de la différence $T - T_i$.

2.6.2 Formulation adimensionnelle.

La formulation sans dimension se fait en introduisant une longueur de référence H et un temps de référence t_0 . Une valeur de référence de T_0 est aussi utilisée pour rendre la température adimensionnelle. En fait, ce système ne possède que deux degrés de liberté au lieu de trois à cause de choix des unités de référence. Ceci est dû à l'occurrence de la constante de l'accélération gravitationnelle dans l'équation qui introduit un cadre de référence naturel.

La valeur de t_0 est, maintenant, dérivée en fonction de l'accélération g_0 . Une tentative simple serait de définir une relation de type $g_0 = \frac{l_0}{t_0^2}$, mais le choix suivant est préférable pour se débarrasser du coefficient de dilatation volumétrique en même temps :

$$g_0 = \frac{H}{t_0^2 \alpha T_0} \Rightarrow t_0 = \sqrt{\frac{l_0}{g_0^2 \beta T_0}} \quad (2.54)$$

Finalement, les différentes variables dimensionnelles et sans dimensions sont liées par les relations :

$$T = T_0 \bar{T} + T_i \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{1}{t_0} \frac{\partial}{\partial \bar{t}_0} \quad (2.56)$$

$$\nabla = \frac{1}{H} \bar{\nabla} \quad (2.57)$$

$$\mathbf{u} = \frac{H}{t_0} \bar{\mathbf{u}} \quad (2.58)$$

$$P = \frac{H^2}{t_0^2} \bar{P} \quad (2.59)$$

En remplaçant 2.55 - 2.59 dans les équations du mouvement 2.50 - 2.51 on obtient les équations adimensionnelles du mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \bar{t}} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla}) \bar{\mathbf{u}} = -\bar{\nabla} \bar{P} + \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \bar{\nabla}^2 \bar{\mathbf{u}} + \bar{T} \mathbf{i} \quad (2.60)$$

où $\mathbf{i} = \{0, 1\}$, et

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{t}} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\nabla}) \bar{T} = \sqrt{\frac{1}{Pr \cdot Ra}} \bar{\nabla}^2 \bar{T} \quad (2.61)$$

pour la température, où les nombres adimensionnels de Prandtl Pr et de Rayleigh Ra ont été définis comme :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \quad (2.62)$$

$$Ra = \frac{g_0 \beta \Delta T H^3}{\nu \alpha} \quad (2.63)$$

En utilisant les éqs. 2.52 et 2.53, les conditions de frontière pour la température deviennent :

$$\bar{T}_h = \frac{1}{2}\bar{\Delta T} \quad (2.64)$$

$$\bar{T}_c = -\frac{1}{2}\bar{\Delta T} \quad (2.65)$$

À ce stade, il est important de donner une définition appropriée de T_0 . Tel qu'il a été indiqué précédemment, la constante T_i n'est pas admissible à titre de référence, puisque sa valeur n'a aucune influence sur l'évolution temporelle d'écoulement. Si par contre, on utilise $T_0 = \Delta T$, on obtient $\bar{\Delta T} = 1$.

Dans la section suivante, on regardera quelques façons d'ajouter un terme source à la fonction de distribution. Ceci dans le but de satisfaire le modèle de Boussinesq.

2.7 Implémentation d'une force externe ou un élément source.

Lors de la modélisation de la convection naturelle, basée sur l'approximation de Boussinesq un terme force \mathbf{F} apparaît :

$$\mathbf{F} = \rho \mathbf{g} \beta \Delta T \quad (2.66)$$

où ρ est la masse volumique, β le coefficient de dilatation thermique, ΔT la différence de température et \mathbf{g} la force gravitationnelle.

Dans la littérature on trouve quelques méthodes pour ajouter une force ou un terme source dans l'équation de Boltzmann sur réseau. Mohamad et Kuzmin (2010) ont présenté un résumé des schémas les plus courants :

- i) Le terme forcé est ajouté au processus de collision mécanique :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{\Delta t}{\tau_*} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) + \Delta t F_i \quad (2.67)$$

où

$$F_i = \omega_i \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{c}_i}{c_s^2} \quad (2.68)$$

avec ω_i les poids de la composante f_i de la fonction de distribution, c_i la composante de la vitesse microscopique (Figure 2.3) et c_s^2 la vitesse du son dans la réseaux de Boltzmann. Dans ce cas, le champ de vitesse n'est pas altéré.

ii) Le champ de vitesse est modifié de la façon suivante :

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_i \mathbf{c}_i f_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\mathbf{F} \tau}{\rho} \quad (2.69)$$

avec, à nouveau, c_i les composantes de la vitesse microscopique, f_i la fonction de distribution du réseaux de Boltzmann, ρ la masse volumique et τ le temps de relaxation. Il faut noter que cette formule est basée sur la deuxième loi de Newton. Dans ce cas, aucun terme de force n'est ajouté à la collision. Il est à noter que la vitesse $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{eq}$.

iii) Le schéma de Guo *et al.* (2002c) :

$$F_i = \omega_i \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \left[\frac{\mathbf{c}_i - \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{\mathbf{c}_i(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}{c_s^4} \right] \cdot \mathbf{F} \quad (2.70)$$

Dans ce cas, le terme F_i doit être ajouté à la collision et de plus la vitesse doit être modifiée :

$$\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_i \mathbf{c}_i f_i + \frac{\mathbf{F} \Delta t}{2\rho} \quad (2.71)$$

où $\mathbf{u}^{eq} = \mathbf{u}$, c_i le composant de la vitesse microscopique, f_i la fonctions de distribution, ρ la densité et Δt le pas de temps.

Nous ferons maintenant un survol descriptif pour rapport à l'implémentation des conditions aux frontières, sans détailler pour l'instant les algorithmes. Naturellement, l'implémentation des conditions des frontières a une grande influence sur la précision des résultats.

2.8 Les conditions aux frontières

Les conditions aux frontières constituent un problème complexe pour la méthode de Boltzmann sur réseaux. Les difficultés proviennent du fait qu'il n'existe aucune information physique sur le comportement de la fonction de distribution sur les frontières. Habituellement, nous ne disposons que d'informations macroscopiques (par exemple, le non-glissement sur les frontières). On doit donc traduire cette information macroscopique aux fonctions de distribution à l'échelle mesoscopiques. Il n'existe pas un moyen unique de faire cette traduction et différents auteurs ont proposé leurs propres solutions. On rappelle que le choix des conditions aux limites est d'une importance primordiale, car celles-ci affectent considérablement la précision de la simulation numérique ainsi que la stabilité (documentation project, 2010).

Dans la suite, on verra deux catégories principales de conditions aux frontières : noeud humide et rebondissement. Dans le cas des noeuds humides, ceux-ci font partie du fluide avec la fonction de distribution conforme aux résultats de l'expansion de Chapman-Enskog. Celle-ci peut être divisée en deux : une partie d'équilibre plus une perturbation de la partie d'équilibre $f_i - f_i^{eq}$ (une partie de non-équilibre) qui est associée aux variables macroscopiques d'écoulement. Dans le cas de rebondissement, les noeuds sont situés en dehors des limites du fluide.

2.8.1 Frontières de type noeud humide

Les principaux types de frontières humide sont les suivants :

Les conditions frontières de Inamuro

Dans cette méthode, seulement les composantes inconnues de la fonction de distribution sont remplacées. Elles sont initialisées avec une distribution d'équilibre ayant une densité

désirée, et avec une vitesse qui est décalée de la vitesse de glissement parallèle à la paroi. Bien qu'il soit facile à mettre en oeuvre en 2D, la version 3D est plus délicat. La méthode de Inamuro est extrêmement précise dans la plupart de cas bidimensionnels, mais sa stabilité numérique est souvent déficiente pour les Reynolds élevés (Inamuro et Yoshina, 1995).

La condition frontière de Zou/He

De façon similaire à la méthode d'Inamuro, l'approche de Zou-He ne remplace que les composantes inconnues de la fonction de distribution. Le point fort est la précision numérique, en particulier en 2D, tandis que le point faible est le manque de stabilité numérique pour les nombres de Reynolds plus élevés. Dans la méthode de Zou-He, le rebondissement est appliqué sur la partie non-équilibre de la fonction de distribution. L'avantage de cette condition de frontière est la facilité de sa mise en oeuvre en 2D et 3D (Filippova et Hanel, 2000).

La condition frontière de type régularisé

Dans cette méthode, toutes les composantes de la fonction de distribution sont remplacées, indépendamment du fait qu'elles soient connues ou inconnues. Dans une première étape, la valeur locale du tenseur des contraintes (Latt, 2007) se déduisent des valeurs de la fonction de distributions connues. Cette information est ensuite utilisée pour attribuer les valeurs régularisées à tous les composants de la fonction de distributions. Cette approche semble moins précise que les précédentes à des faibles nombres de Reynolds. La valeur des conditions aux frontières régularisées apparaît à des nombres de Reynolds plus élevés, ou sa stabilité numérique n'est dépassée que par les conditions des frontières non locales (Latt, 2007).

L'approximation en différences finies pour les gradients de vitesse

La partie non-équilibre de la fonction de distribution dépend des gradients de la vitesse. Au lieu de récupérer cette information des composantes connue de la fonction de distribution d'un noeud connu, on peut l'obtenir en accédant aux noeuds voisins et en appliquant un schéma aux différences finies. Plusieurs approches sont proposées dans la littérature. En général, toutes les composantes de la fonction de distribution, sur un noeud frontière, sont remplacées par cette méthode. Souvent les approximations en différences finies sont suffisantes et d'une stabilité exceptionnelle et, de plus, elles sont faciles à mettre en oeuvre dans

un contexte général. Malheureusement, elles violent la localité de la collision, un des avantages de base de la méthode de Boltzmann sur réseau (Lallemand et Luo, 2003).

La méthode d'extrapolation de Guo

Dans cette méthode, un schéma d'extrapolation est utilisé pour affiner l'emplacement de la frontière, qui peut être situé à une position quelconque entre deux noeuds. On attribue cette méthode à la catégorie de noeud humide, car les noeuds de la frontière exécutent une étape normale de collision. Les noeuds de frontière, i.e., ceux qui reçoivent un traitement spécial, sont cependant situés au-delà de la limite physique. Ils se retrouvent donc dans une région qui ne fait pas partie du fluide. Les décisions suivantes sont prises pour reconstituer la partie en équilibre et la partie de non-équilibre de la fonction de distributions sur ces noeuds. La densité est extrapolée à partir d'un voisin qui est situé dans le volume du fluide. La vitesse est extrapolée aussi à partir d'un voisin dans le volume du fluide et de la valeur de la vitesse calculée sur la frontière. Toutes les composantes de la partie non équilibrée sont extrapolée à partir d'un voisin dans le volume de fluide (Guo *et al.*, 2002b).

2.8.2 Frontière de rebondissement

Les principaux types de frontières de rebondissement sont les suivantes :

Rebondissement complet

Dans un noeud de rebondissement complet, les composantes entrantes de la fonction de distribution sont traitées comme suit : chaque composante est remplacée par la valeur de la composante du vecteur vitesse pointant dans la direction opposée. Ceci termine l'étape de collision et l'étape de propagation est exécutée directement après. Cette opération est bien définie, parce que toutes les composantes inconnues quittent le domaine de calcul. Elles sont retournées d'où elles venaient. Le rebondissement complet est utilisé pour mettre en oeuvre les frontières sans glissement (vitesse nulle). Dans ce modèle, la frontière est située à mi-chemin entre le noeud de rebondissement et le noeud voisin du fluide. Le rebondissement complet est extrêmement facile à implémenter, car l'algorithme est indépendant de l'orientation de la paroi. Ainsi, l'implémentation se fait de la même manière.

Rebondissement à mi-chemin avec correction de vitesse

Dans l'approche à mi-chemin, seulement les composantes de la distribution inconnue sont remplacées. À un instant t , les composantes inconnues de la distribution sont affectés par la valeur post collision dans la direction opposée au temps $t - 1$. Par la suite, une étape de collision régulière est faite. Ceci signifie que les composantes de la fonction de distribution qui lors de l'étape de propagation sortent du domaine, se conservent sur le noeud et à l'étape suivante elles reviennent dans la direction opposée.

Pour cette raison on dit que le régime de rebondissement à mi-chemin maintient l'étape de collision habituelle, mais modifie l'étape de propagation, par opposition au rebondissement complet qui maintient l'étape habituelle de propagation, mais utilise une étape de collision qui est modifiée. Tel que dans le cas de rebondissement complet, le rebondissement à mi-chemin est une condition de non-glissement (le non-glissement est situé maintenant à mi-chemin entre deux noeuds). Cependant, la frontière peut être manipulée afin d'obtenir une condition de Dirichlet avec une vitesse arbitraire. Pour ce faire un certain moment est ajouté aux éléments de la fonction de distribution, juste après qu'ils ont pris les valeurs après collisions, en temps ($t - 1$), de la "direction opposée" (documentation project, 2010).

Maintenant, on doit adapter la formulation de la méthode de Boltzmann sur réseau au traitement des nanofluides. On regardera d'abord comment obtenir les paramètres mécaniques et thermiques des nanofluides à partir du fluide de base et des nanoparticules. Un court résumé sera effectué sur les modèles thermiques les plus représentatifs permettant la définition de la conductivité thermique et la viscosité.

2.9 Les nano-fluides.

Avec les progrès récents en nanotechnologies, des particules de la taille des nanomètres peuvent être obtenues. Cet avancement technologique a donné l'idée de suspendre ces particules dans un liquide de base pour obtenir une amélioration de la conductivité thermique. Une suspension de nanoparticules dans un fluide de base est appelée nanofluide. Ce terme pour décrire le mélange était introduit par Choi (1995) en ouvrant la porte à une nouvelle technologie qui présente des propriétés thermiques supérieures en ce qui concerne la transmission de chaleur. En effet, ce nouveau concept a été proposé comme une technique pour améliorer la performance de la transmission thermique des fluides actuels. Une petite quantité de nanoparticules, lorsqu'elles sont dispersées de façon uniforme et en formant une suspen-

sion stable dans un fluide de base, peut améliorer de façon impressionnante ses propriétés thermiques. Plusieurs travaux ont révélé que la conductivité thermique des fluides contenant des nanofluides pourrait augmenter de plus de 20% dans le cas d'une concentration très faible de nanoparticules. En raison de leurs petites tailles, les nanofluides s'écoulent facilement, et en conséquence, l'obstruction de canaux et l'érosion des parois n'est plus un problème. Il est même possible d'utiliser les nanofluides dans les microcanaux (Masuda *et al.*, 1993; Choi, 1995). Lorsqu'il s'agit de la stabilité de la suspension, il a été démontré que la sédimentation peut être prévenue en utilisant des dispersants appropriés. Cependant, plusieurs facteurs importants, tels que la taille et forme des particules affectent la tendance des particules à se regrouper. L'importance de la température du fluide, et autres, n'ont pas été étudiés de façon adéquate. À partir de ses applications dans le domaine de transfert de chaleur, les nanoparticules sont intéressantes pour des applications magnétiques, électriques, chimiques et biologiques. Grâce à leurs propriétés améliorées de transfert thermique, les nanofluides peuvent être utilisés dans une multitude des applications d'ingénierie (dans l'industrie automobile, dans le génie biomédical, le refroidissement des composantes microélectronique, etc.).

Des particules de matériaux différents sont utilisées pour la préparation de nanofluides. Les nanoparticules de Al_2O_3 , CuO , TiO_2 , SiC , TiC , Ag , Au , Cu , et Fe sont utilisées en la recherche de nanofluides. Les fluides de base communément utilisés dans la préparation de nanofluides sont ceux d'usage commun dans les applications de transfert de chaleur tels que l'eau, l'éthylène, le glycol, et l'huile de moteurs. Afin d'améliorer la stabilité des nanoparticules à l'intérieur du fluide de base, certains additifs sont ajoutés au mélange en petites quantités. Les nanoparticules utilisées dans la préparation des nanofluides ont généralement un diamètre inférieur à 100 nm. Des particules de 10 nm ont été utilisées dans la recherche des nanofluides (Eastman *et al.*, 2001). Lorsque les particules ne sont pas sphériques, mais en forme de barre ou de tube, le diamètre est encore en dessous de 100 nm, mais la longueur des particules peut être de l'ordre du micromètre. Il convient également de noter qu'en raison du phénomène de la formation en grappes, des particules peuvent former des grappes avec des tailles de l'ordre du micromètre.

2.9.1 Paramètres des équations hydrodynamiques

Le changement des paramètres physiques, dû à l'ajout de nanoparticules dans le fluide de base, tel que la densité, la viscosité et les paramètres thermiques est prédict avec une pondération statistique ou à l'aide des méthodes expérimentales. En utilisant une pondération déterminée par le pourcentage de nanoparticules dans le fluide de base, on peut obtenir les

paramètres suivants :

La densité effective d'un nanofluide est définie :

$$\rho_{nf} = (1 - \Phi)\rho_f + \Phi\rho_{np} \quad (2.72)$$

où Φ est le pourcentage de nanoparticules dans le fluide de base et les index np et p indiquent le nanofluide et la particule respectivement.

La diffusion thermique du nanofluide est :

$$\alpha_{nf} = \frac{k_{nf}}{(\rho C_p)_{nf}} \quad (2.73)$$

et la capacité calorifique du nanofluide est définie par :

$$(\rho C_p)_{nf} = (1 - \Phi)(\rho C_p)_f + \Phi(\rho C_p)_{np} \quad (2.74)$$

Le coefficient d'expansion thermique du nanofluide peut être déterminé comme :

$$(\rho\beta_p)_{nf} = (1 - \Phi)(\rho\beta_p)_f + \Phi(\rho\beta_p)_{np} \quad (2.75)$$

2.9.2 La viscosité des nanofluides

Il existe plusieurs modèles proposés dans la littérature pour la modélisation de la conductivité thermique et la modélisation de la viscosité des nanofluides. Dans ce qui suit, on discute de quelques modèles parmi les plus représentatifs (Nguyen *et al.*, 2008). Différentes formules théoriques peuvent être utilisées pour la détermination de la viscosité de particules en suspension dans un fluide. Il est important de mentionner que presque toutes les formules

existantes sont dérivées du travail fondamental de Einstein (1906). Basé sur l'hypothèse que l'énergie a une dépendance linéaire avec la viscosité, Einstein a déterminé l'énergie dissipée autour d'une seule particule dans un fluide en associant son énergie avec le travail réalisé pour la faire avancer relativement au fluide. À partir de ce résultat, il a déterminé l'expression qui permet d'obtenir la viscosité d'un fluide avec des particules :

$$\mu_{nf} = \mu_f (1 + 2.5\Phi) \quad (2.76)$$

où Φ est la concentration des nanoparticules et μ la viscosité dynamique.

Cette célèbre formule est valide pour une concentration faible de nanoparticules, de 2% approximativement (Drew et Passman, 1999). Depuis la publication d'Einstein, plusieurs travaux théoriques ont été consacrés à l'obtention d'une correction à la formule d'Einstein. Un bref survol est donné par la suite :

Brinkman (1952) a amélioré la formule d'Einstein pour arriver à une concentration d'à peu près 4%. Sa formule est la suivante :

$$\mu_{nf} = \frac{\mu_f}{(1 - \Phi)^{2.5}} \quad (2.77)$$

Frankel et Acrivos (1967) ont proposé :

$$\mu_{nf} = \mu_f \frac{9}{8} \left[\frac{\left(\frac{\Phi}{\Phi_m} \right)^{\frac{1}{3}}}{1 - \left(\frac{\Phi}{\Phi_m} \right)^{\frac{1}{3}}} \right] \quad (2.78)$$

où Φ_m est la concentration maximale qui doit être déterminée expérimentalement.

Lundgren (1972) a proposé une expression basée sur une série de Taylor sur la concentration Φ :

$$\mu_{nf} = \mu_f \left[1 + 2.5\Phi + \frac{25}{4}\Phi^2 + \mathbf{O}(\Phi^3) \right] \quad (2.79)$$

Il est évident qu'une approximation jusqu'au terme de deuxième degré conduit à la formule d'Einstein. Batchelor (1997) a considéré l'effet du mouvement brownien des particules sphériques en suspension isotropique de particules en proposant :

$$\mu_{nf} = \mu_f (1 + 2.5\Phi + 6.5\Phi^2) \quad (2.80)$$

Graham (1981) a proposé une généralisation de la formule (2.76). Sa formule, qui s'accorde bien avec la formule d'Einstein pour les valeurs faibles de concentration de Φ , est :

$$\mu_{nf} = \mu_f (1 + 2.5\Phi + 4.5\Phi^2) \left[\frac{1}{\left(\frac{h}{d_p} \right) \left(2 + \frac{h}{d_p} \right) \left(1 + \frac{h}{d_p} \right)^2} \right] \quad (2.81)$$

où h_p et h sont respectivement le rayon de la particule et la distance entre particules.

À partir des formules ci-dessus, il est évident que la viscosité effective d'un fluide visqueux qui contient des particules en suspension est fonction de la viscosité du fluide de base et du volume de la fraction des particules. En principe, toutes ces formules peuvent être utilisées pour la détermination de la viscosité du nanofluide en assumant que la dépendance de la viscosité est linéaire. La limitation de l'applicabilité d'une telle supposition n'a pas été déterminée.

Dans la suite, on expliquera différents modèles de conductivité thermique des nanofluides. Une revision plus complète peut être trouvé dans la thèse de Ozerinc (2010).

2.9.3 La conductivité thermique des nanofluides : les modèles classiques

Il y a déjà plus d'un siècle, Maxwell a dérivé une formule pour calculer la conductivité thermique effective de mixture solide liquide avec des particules sphériques (Maxwell, 1873) :

$$k_{nf} = k_f \frac{k_p + 2k_f + 2(k_p - k_f)\Phi}{k_p + 2k_f - (k_p - k_f)} \quad (2.82)$$

où k_{nf} , k_p et k_f indiquent la conductivité thermique des nanofluide, des nanoparticules et du fluide de base et Φ la fraction volumétrique de nanoparticules dans le fluide de base, respectivement.

Tel qu'illustre par l'expression 2.82, l'effet de la taille et la forme des particules n'a pas été inclus dans l'analyse. Il convient aussi de noter que l'interaction entre les particules a été également négligée dans le calcul.

Hamilton et Crosser (1962) ont amélioré le modèle de Maxwell afin de tenir compte des formes des particules. Le modèle est le suivant :

$$k_{nf} = k_f \frac{k_p + (n-1)k_f - (n-1)(k_p - k_f)\Phi}{k_p + (n-1)k_f + (k_p - k_f)\Phi} \quad (2.83)$$

où n est le facteur de forme empirique qui est défini comme :

$$n = \frac{3}{\Psi} \quad (2.84)$$

où Ψ est la sphéricité. La sphéricité est le rapport de la surface d'une sphère avec un volume égal à celui de la particule à la surface de la particule. Pour $n = 3$ le modèle de Hamilton et Crosser est équivalent au modèle de Maxwell.

Modèles basées sur le mouvement brownien.

Le mouvement brownien est une description mathématique du mouvement aléatoire d'une particule de taille importante qui est immergée dans un fluide et qui n'est soumise à aucune autre interaction qu'avec les petites molécules du fluide environnant. Lorsqu'on considère un nanofluide, on a un transport d'énergie directement par les nanoparticules ainsi que de la microconvection due au mélange du fluide autour des nanoparticules.

Plusieurs modèles ont été développés pour la détermination de la conductivité thermique des nanofluides basée sur le mouvement brownien des particules. Deux d'entre eux sont expliqués ci-dessous.

Choi et Jang (2004) ont modélisé la conductivité thermique des nanofluides tenant en compte d'effet du mouvement brownien des particules. Le modèle proposé ne dépend pas seulement de la conductivité des nanofluides, mais aussi de la taille et la température des nanoparticules. Le transport d'énergie a été considéré comme étant composée de quatre types de transport : conduction thermique du fluide de base, conduction de chaleur dans les nanoparticules, collisions entre les nanoparticules (du au mouvement brownien), et microconvection causée par le mouvement aléatoire des nanoparticules. Parmi eux, les collisions entre les particules ont été jugés négligeables par rapport aux autres formes de transport. Selon cette étude l'expression suivante a été proposée :

$$k_{nf} = k_f(1 - \Phi) + k_p^* \Phi + 3C_l \frac{d_f}{d_p} k_f Re_d^2 Pr_f \Phi \quad (2.85)$$

où C_l est un constante de proportionnalité, d_f le diamètre de la molécule de fluide, d_p le diamètre des nanoparticules, Pr_f le nombre de Prandtl du fluide de base, k_p^* est définie :

$$k_p^* = \beta k_p \quad (2.86)$$

où β est une constante, le nombre de Reynolds est défini comme :

$$Re_d = \frac{\overline{C_{R.M.}} d_p}{\nu_f} \quad (2.87)$$

où $\overline{C_{R.M.}}$ est la vitesse du mouvement aléatoire des nanoparticules et ν_f la viscosité cinétique du mouvement aléatoire du fluide de base. $\overline{C_{R.M.}}$ peut être déterminée de la façon suivante :

$$\overline{C_{R.M.}} = \frac{D_0}{\lambda_f} \quad (2.88)$$

où λ_f est le parcours moyen libre des molécules de fluide de base. D_0 est le coefficient de diffusion de la particule qui peut être calculé utilisant l'expression suivante (Einstein, 1956) :

$$D_0 = \frac{\kappa_B T}{3\pi\mu_f d_p} \quad (2.89)$$

où κ_B est la constante de Boltzmann avec T en Kelvins, et μ_f la viscosité dynamique du fluide de base. Lorsque la dépendance du modèle avec la taille de particules est considérée, on trouve que la conductivité thermique du fluide augmente à mesure que la taille de la particule diminue. Pour la dérivation de ce modèle, l'épaisseur de la couche limite thermique autour de la nanoparticule est prise égale à 2 et $\frac{3d_f}{Pr}$, où d_p est le diamètre de la molécule du fluide de base. De plus, la fraction volumétrique de la couche de fluide autour des nanoparticules est supposée d'être égale à la fraction volumétrique de nanoparticules. Ces hypothèses ont été critiquées par Prasher *et al.* (2006), car elles n'ont pas été vérifiées de façon détaillée.

Koo et Kleinstreuer (2004) ont considéré que la conductivité thermique des nanofluides est composé de deux parties :

$$k_{nf} = k_{statistique} + k_{brownien} \quad (2.90)$$

où $k_{statistique}$ représente l'augmentation de la conductivité thermique en raison d'une conductivité thermique plus élevée due aux nanoparticules et $k_{brownien}$ tient compte l'effet due au mouvement brownien. Pour la partie statique on a la formule de Maxwell et $k_{brownien}$ pour la partie du mouvement brownien qui considère l'effet des particules des fluides se déplaçant avec des nanoparticules qui l'entourent. En conséquence, l'expression suivante a été proposée :

$$k_{brownian} = 5 \cdot 10^4 \tilde{B} \phi \rho_f C_{p,f} \sqrt{\frac{\kappa_B T}{\rho_p d_p}} \tilde{F}(\phi, T) \quad (2.91)$$

où ρ_p et ρ_f sont la densité de la particule et du nanofluide respectivement et T la température en Kelvin. $C_{p,f}$ c'est la capacité calorifique du fluide de base. Un élément additionnel \tilde{B} a été introduit pour tenir en compte l'effet du mouvement des particules. En général, puisque \tilde{B} est

lié au mouvement des particules, il dépend pas seulement de la fraction volumétrique, mais aussi de la température et de la forme et des propriétés de matériaux (Koo et Kleinstreuer, 2004).

Koo et Kleinstreuer ont supposé que \tilde{B} dépend seulement de la concentration volumétrique et que tout autre dépendance est incluse dans les paramètre \tilde{F} ; cela signifie que le terme \tilde{B} devient plus effectif avec l'augmentation de la fraction volumétrique. Le paramètre \tilde{F} , qui a été obtenu en utilisant les résultats de Das *et al.* (2003) pour le CuO -nanofluide, a été introduit afin d'inclure les autres dépendances du modèle. Les deux paramètres doivent être déterminés expérimentalement. Dans le travail de Koo et Kleinstreuer \tilde{f} a la forme :

$$\tilde{F} = (-134.63 + 1722.3\Phi) + (0.4705 - 6.04\Phi)T \quad (2.92)$$

Les valeurs de \tilde{B} pour le CuO et le Al_2O_3 sont montrés sur la Table 2.1. Il est difficile d'obtenir les expressions théorétiques de \tilde{F} et \tilde{B} en raison des complexités impliquées, ce qu'est un inconvénient du modèle (Ozerinc *et al.*, 2010).

Type de nanofluide	\tilde{B}	Φ
Citrate de : Au et Ag	$0.0137(100\Phi)^{-0.8229}$	$\Phi < 1\%$
CuO	$0.0011(100\Phi)^{-0.7272}$	$\Phi > 1\%$
Al_2O_3	$0.0017(100\Phi)^{-0.0841}$	$\Phi > 1\%$

Table 2.1 Φ pour le citrate de Au , le citrate de Ag , le CuO et le Al_2O_3

Modèles basées sur des grappes.

Les nanoparticules sont connues pour leurs tendance à former des grappes (Prasher *et al.*, 2006; He *et al.*, 2007). Une approche pour modéliser ces grappes est donnée par la théorie des fractals (Wang *et al.*, 2003). Evans *et al.* (2008) ont proposé que la formation des grappes puisse être due au transport rapide de la chaleur sur une distance (relativement grande) puisque la chaleur est conduite plus rapidement par des particules solides en comparaison avec le liquide.

Les paragraphes suivants expliquent un modèle théorétique qui est fondé sur les grappes de nanoparticules. Le modèle considère également l'effet du mouvement brownien.

Xuan *et al.* (2003) ont étudié la conductivité thermique en considérant le mouvement brownien et les grappes des nanoparticules. L'expression suivante a été proposée pour décrire la conductivité thermique des nanoparticules.

$$k_{nf} = k_f \frac{k_p + 2k_f + 2(k_p - k_f)\Phi}{k_p + 2k_f - (k_p - k_f)\Phi} + \frac{\rho_p \Phi C_{p,p}}{2k_f} \sqrt{\frac{\kappa_B T}{3\pi r_{cl} \mu_f}} \quad (2.93)$$

Ici, r_{cl} est le rayon apparent des grappes de nanoparticules, qui doit être déterminée expérimentalement, T la température en Kelvin, μ_f la viscosité dynamique du fluide de base, qui peut être calculée par l'étude de Li et Xuan (2000). Le premier terme de l'expression de droite correspond à la formule 2.82 de Maxwell pour la conductivité thermique. Le deuxième terme ajoute l'effet du mouvement aléatoire des nanoparticules. Pour regarder la contribution de ce terme, les valeurs suivantes ont été présentées pour les nanoparticules de Cu de 50 nm. Avec $\Phi = 0.03$ la contribution du deuxième terme est de 11% lorsque les grappes se forment et 17% quand les grappes ne se forment pas. Dans le cas de $\Phi = 0.04$ les contributions est de 14% et 24% respectivement. Il a été indiqué que le mouvement brownien des nanoparticules devient plus efficace avec l'amélioration de la température. D'autre part, au fur et mesure que les nanoparticules et les grappes deviennent plus grandes, le mouvement aléatoire devient plus lent et cela diminue l'amélioration de la conductivité thermique (Ozerinc *et al.*, 2010).

Un autre modèle qui considère l'effet des grappes est le modèle proposé par Chen *et al.* (2009). La formule suivante est une modification de la formule de Hamilton et Crosser (1962) qui est proposée pour calculer la conductivité thermique :

$$k_{nf} = k_f \frac{k_{cl} + (n-1)k_f - (n-1)(k_f - k_{cl})\Phi_{cl}}{k_{cl} + (n-1)k_f + (k_f - k_{cl})\Phi_{cl}} \quad (2.94)$$

où k_{cl} et Φ_{cl} sont la conductivité thermique et la fraction volumétrique des grappes, respectivement. Dans ce travail $n = 3$ pour les particules sphériques et $n = 5$ pour les particules cylindriques.

$$\Phi_{cl} = \Phi \left(\frac{r_{cl}}{r_p} \right)^{3-D} \quad (2.95)$$

où r_{cl} et r_p sont les rayons des grappes et des nanoparticules respectivement. D correspond à l'indice fractal, qui a été pris égal à 1.8. La valeur r_{cl}/r_p est pris égal à 2.75 et 3.34 pour le TiO_2 -eau (sphérique) et TiO_2 -éthylène glycol (sphérique). L'estimation de k_{cl} est plus complexe puisqu'il dépend de la forme géométrique des particules. Bruggeman (1935) a calculé l'expression pour les particules sphériques pendant que Nan *et al.* (2003) l'ont calculé pour les particules cylindriques.

Modèles basées sur des nanocouches.

Des études récentes ont montré que les molécules des liquides forment des structures en forme de couches autour de la surface solide d'une nanoparticule (Keblinski et Prasher, 2008) et il est prévu que ces nanocouches aient une conductivité thermique effective plus grande que le fluide de base (Yu et Choi, 2003).

Plusieurs modèles ont été développés, tenant en compte les nanocouches autour des nanoparticules. Certains tiennent compte de l'effet du mouvement brownien ainsi que des formations de grappes. Yu et Choi (2003) ont présenté un modèle pour la détermination de la conductivité thermique effective des nanofluides en modifiant le modèle de Maxwell (1873). Dans la modification ils considèrent les nanocouches formées autour des nanoparticules. La nanoparticule et la couche autour d'elle ont été considérées comme une seule particule pour laquelle la conductivité thermique est calculée en utilisant la théorie du milieu effective (Schwartz *et al.*, 1995). Le résultat a été substitué dans l'équation de Maxwell, obtenant :

$$k_{nf} = k_f \frac{k_{pe} + 2k_f + 2(k_{pe} - k_f)(1 + \beta)^3 \Phi}{k_{pe} + 2k_f - (k_{pe} - k_f)(1 + \beta)^3 \Phi} \quad (2.96)$$

où k_{pe} es la conductivité thermique de la nanoparticule équivalente ;

$$k_{nf} = k_p \frac{[2(1 - \gamma) + (1 + \beta)^3(1 + 2\gamma)]\gamma}{-(1 - \gamma) + (1 + \beta)^3(1 + 2\gamma)} \quad (2.97)$$

où $\gamma = \frac{k_l}{k_p}$ et k_l est la conductivité de la nanocouche. β est définie comme :

$$\beta = \frac{t}{r_p} \quad (2.98)$$

où t est le grosseur de la nano-couche et r_p est le rayon de la nanoparticule.

D'autres modèles, qui tiennent en compte l'effet de la formation de microcouches, sont les modèles de Bruggeman (1935), Xie *et al.* (2005), Yu et Choi (2003), Xue et Xu (2005), entre autres.

CHAPITRE 3

DESCRIPTION DES ALGORITHMES DE LA MÉTHODE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU.

Dans ce chapitre on verra comment les équations obtenues peuvent être programmées pour simuler des écoulements. La description de l'algorithme thermique de Boltzmann sur réseau (voir 3.1) se fait sur la base du cas purement mécanique décrit par Guiet (2009)

3.1 Simulation avec une double fonction de distribution

Dans le cadre de ce mémoire, on utilisera un schéma avec une double fonction de distribution (voir 2.5). Nous allons reprendre les équations du modèle de Boltzmann sur réseau *D2Q9* pour la partie concernant la simulation mécanique et le modèle *D2Q4* pour la partie correspondant à la simulation thermique (2.4.1 et 2.5). Le modèle thermique est basé sur l'approximation de Boussinesq. À la section (2.6) on a regardé l'idée de base de ce modèle ainsi que l'adimensionalisation des équations macroscopiques. Il faut maintenant remarquer qu'au niveau du modèle thermique, l'implémentation du modèle de Boussinesq se fait en ajoutant un terme source à la fonction de distribution mécanique. Différentes façons d'introduire un élément source sur l'équation de Boltzmann discrétisée ont été décrites à la section 2.7. Dans la suite nous allons décrire comment on ajoute un terme source directement sur la collision mécanique.

3.1.1 Adimensionalisation et passages au système d'unités de réseau

Jusqu'à présent, nous avons présenté l'équation de Boltzmann sur réseau dans un système d'unités physiques. Cependant, pour des raisons de simplification dans son implémentation, elle est généralement employée de façon adimensionnelle en utilisant un système d'unités basé sur le réseau de Boltzmann.

Les distributions de probabilité f_i et g_i ainsi que le temps de relaxation mécanique τ_* et thermique τ_1* sont, de par leur définition, déjà des quantités en unités de réseau, ces dernières demeurent donc les mêmes pour le reste de notre étude. Le reste des variables et paramètres seront pris également de façon adimensionnelle. Elles seront désormais formulées avec une

barre '-' au-dessus de la variable.

La base de l'adimensionalisation se réduit au fait que les pas géométrique $\Delta\bar{x}$ et temporel $\Delta\bar{t}$ ne sont plus utilisés dans le plan physique, mais en terme d'unités de réseau. Nous avons donc les quantités $\Delta\bar{x} = 1$ et $\Delta\bar{t} = 1$ définissant le réseau. Les vitesses de discréétisation du réseau D2Q9 sont alors basées sur la vitesse $\bar{c} = \frac{\Delta x}{\Delta t} = 1$. Ces variables de réseau permettent également de définir la coordonnée \bar{x} et le temps \bar{t} , adimensionnels.

La masse volumique du fluide est également normalisée en fonction de la masse volumique physique du fluide ρ_0 tel que $\bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0} = 1$. On a vu que la méthode est pour un fluide quasi incompressible, de sorte que la masse volumique du fluide $\bar{\rho}$ devrait rester constante et unitaire. Cependant, l'incompressibilité n'est pas parfaite et une légère variation par rapport à l'unité est en permanence observée.

Ainsi, à partir de ces différentes considérations d'adimensionalisation les équations de base du modèle de Boltzmann sur réseau D2Q9 (Eqs. 2.32 - 2.35) deviennent :

$$\bar{\rho}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = \sum_{i=0,8} f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) \quad (3.1)$$

$$\bar{\rho}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) \bar{\mathbf{u}}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = \sum_{i=0,8} \mathbf{e}_i f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} f_{i=1,2,3,4}^{eq}(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{x}}) &= \frac{\bar{\rho}}{9} \left(1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \bar{\mathbf{u}})^2 - \frac{3}{2}\bar{\mathbf{u}}^2 \right) \\ f_{i=5,6,7,8}^{eq}(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{x}}) &= \frac{\bar{\rho}}{36} \left(1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \bar{\mathbf{u}}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \bar{\mathbf{u}})^2 - \frac{3}{2}\bar{\mathbf{u}}^2 \right) \\ f_{i=0}^{eq}(\bar{\rho}, \bar{\mathbf{x}}) &= \frac{4\bar{\rho}}{9} \left(1 - \frac{3}{2}\bar{\mathbf{u}}^2 \right) \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$f_i(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{e}_i \Delta \bar{t}, \bar{t} + \Delta \bar{t}) - f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) - f_i^{eq}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) \quad (3.4)$$

où les \mathbf{e}_i représentent les vecteurs de discréétisation \mathbf{c}_i normalisés.

À la section 2.5 on a expliquée que dans le cas thermique, le modèle D2Q4 pour la dis-

crétisation de la fonction de température serait suffisant. L'équation discrète de la fonction de distribution thermique est la suivante :

$$g_i(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{e}_i \Delta \bar{t}, \bar{t} + \Delta \bar{t}) - g_i(\bar{x}, \bar{t}) = -\frac{\Delta t}{\tau} (g_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) - g_i^{eq}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) \quad (3.5)$$

La température et la fonction de distribution thermique, g_i , sont liées par l'Éq. 2.46 qui complémente les Éqs. 2.32 et 2.35. La forme adimensionnelle est maintenant :

$$\bar{T}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = \sum_{i=1}^4 g_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) \quad (3.6)$$

tandis que la fonction d'équilibre thermique est :

$$g_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = \frac{\bar{T}}{4} (1 + 2\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) \quad (3.7)$$

où T est la valeur de la température.

La pression et la viscosité s'expriment à leur tour à partir des Éqs. 2.41 et 2.44 :

$$\bar{P} = \frac{\bar{\rho}}{3} \quad (3.8)$$

$$\bar{\nu} = \frac{1}{3} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3.9)$$

Le coefficient de diffusion thermique, lié à la viscosité à travers le nombre de Prandtl selon l'Éq. 2.62, s'exprime à partir de l'équation :

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{2} \left(\tau_1 - \frac{1}{2} \right) \quad (3.10)$$

3.1.2 Le terme source

Maintenant on ajoutera un terme source à l'Éq. 3.4 pour tenir compte du modèle de Bousinesq. Le terme source adimensionnel est donné par l'Éq. 2.68 qu'on écrira sur une forme couramment utilisée (par exemple, voir Kuznik et Rusaouen (2007)) :

$$F_i = \frac{3.0(\bar{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{c}_i)}{c^2} f_i^{eq} \quad (3.11)$$

Ici, par rapport à l'Éq. 2.68, on exprime la vitesse du son c_s par la vitesse microscopique c ($c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$) et les poids de distribution de la force ω_i par la fonction de distribution d'équilibre. Dans l'expression 3.11, c est la vitesse microscopique et c_i les composantes discrétisées. $\bar{\mathbf{F}}$ est le terme source adimensionnel défini par l'Éq. 2.66. Maintenant on peut ajouter le terme source à l'Éq. 3.4 et, d'une façon plus générale, on le fera pour le cas où la force extérieur forme un angle avec l'axe y :

$$f_i(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{e}_i \Delta \bar{t}, \bar{t} + \Delta \bar{t}) - f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) - f_i^{eq}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) + \Delta t (F_i \cdot \mathbf{r}) \quad (3.12)$$

où $\mathbf{r} = \{\cos(\theta), \sin(\theta)\}$ avec θ l'angle entre la force extérieure et la paroi verticale de la cavité. Dorénavant, nous réprésenterons $(F_i \cdot \mathbf{r})$ par F'_i :

$$f_i(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{e}_i \Delta \bar{t}, \bar{t} + \Delta \bar{t}) - f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) - f_i^{eq}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) + \Delta t F'_i \quad (3.13)$$

La forme adimensionnelle de $\bar{\mathbf{F}}$ est :

$$\bar{\mathbf{F}} = \bar{\rho} \bar{\beta} \Delta \bar{T} \bar{\mathbf{g}} \quad (3.14)$$

À la section 3.1.1 on a noté que $\bar{\rho} = 1$. Également, le coefficient de dilatation thermique est normalisé en fonction de la dilatation thermique du fluide β_f tel que $\bar{\beta} = \frac{\beta}{\beta_f} = 1$. À la

section 2.6.2 on a indiqué qu'un bon choix de la température de référence conduit à $\bar{\Delta}T = 1$. Il faut maintenant déduire la gravité $\mathbf{g} = \{0, g_0\}$ en unités de réseau.

Dans le cadre de ce mémoire, on a fait le raisonnement suivant : à partir des expressions 2.63 pour le nombre de Rayleigh et 2.62 pour le nombre de Prandtl on peut facilement arriver à l'expression suivante :

$$Ra = \frac{g_0 \beta \Delta T H^3 Pr}{\nu^2} \quad (3.15)$$

À partir de cette équation on trouve directement, l'expression :

$$\nu = \sqrt{\frac{g_0 \beta \Delta T H^3 Pr}{Ra}} = \sqrt{g_0 \beta \Delta T H^3} \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \quad (3.16)$$

Les équations adimensionnelles, pour les formules 2.60 et 2.61, conduisent aux les expressions adimensionnelles pour la viscosité la conductivité thermique :

$$\bar{\nu} = \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \quad (3.17)$$

$$\bar{\alpha} = \sqrt{\frac{1}{Pr \cdot Ra}} \quad (3.18)$$

Maintenant, d'une part nous avons que la formule 3.16 est valable dans un système dimensionnel quelconque (et aussi dans le système d'unités de réseau) et d'autre part que la formule 3.17 est valable dans le système de réseau de Boltzmann. Alors pour satisfaire le passage d'un système à l'autre, il faut que $\sqrt{g_0 \beta \Delta T H^3} = 1$. Nous remarquons qu'avec ce choix la formulation est générale et nous ne devons pas fixée la valeur de la gravité ou d'autres paramètres, par exemple, le temps de relaxation (D'Orazio *et al.*, 2004; Buick et Greated, 1999).

Nous avons ainsi un moyen pour obtenir l'expression g_0 en unités de réseau :

$$\bar{g}_{0,u} = \frac{1}{\bar{\beta} \Delta \bar{T} \bar{H}_u^3} = \frac{1}{\bar{H}_u^3} \quad (3.19)$$

puisque $\bar{\beta} = 1$ et $\Delta \bar{T} = 1$. L'indice u est employé pour indiquer qu'il s'agit d'unités de réseau.

De cette manière, nous avons toutes les variables et paramètres pour appliquer les formules 3.6 et 3.13. Ajouter un terme source sur la fonction de distribution mécanique, peut être justifiée par le fait que sur la base de la méthode de Boussinesq le seul paramètre physique qui est affecté par la température est la force externe (Guo *et al.*, 2002b; Kuznik et Rusaouen, 2007; Latt, 2008; Sukop et Thorne, 2005).

Ces équations simplifiées sont celles que nous allons programmer afin de simuler des écoulements fluides. Le Tableau 3.1 résume l'adimensionalisation, le lien entre chaque grandeur physique et, la grandeur associée en dimensions du réseau. À partir de ces formules simplifiées, nous allons reprendre les explications sur le fonctionnement de la méthode de Boltzmann sur réseau. En particulier, nous verrons la mise en oeuvre et le principe algorithmique de collision, propagation.

3.1.3 Concepts de collision et de propagation : réseau D2Q9

Ce modèle se résume à un nombre fini de cellules où l'activité microscopique du fluide est considérée par l'utilisation de 9 distributions associées à 9 vitesses de discréétisation (Figure 3.1). L'évaluation de l'évolution de ces distributions suit le raisonnement de collision et de propagation. Dans les équations sans dimension, la collision illustre la variation des distributions entre deux pas de temps consécutifs \bar{t} et $\bar{t} + 1$; c'est le terme de droite de l'équation 3.4. Cette étape permet de définir un état post-collision \tilde{f}_i à $\bar{t} + 1$, associé à une distribution particulière f_i à \bar{t} . La Figure 3.2 illustre cette modification sur la cellule de coordonnées $[i, j]$. L'Éq. 3.13 permet de représenter la fonction de distribution postcollision de la façon suivante :

$$\tilde{f}_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1) - f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = -\frac{1}{\tau} (f_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) - f_i^{eq}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) + F'_i \quad (3.20)$$

où, le symbole F'_i indique le terme source dans la direction i du modèle D2Q9.

Variables	Physiques	Sur réseau	Relation
Densité	ρ	$\bar{\rho}$	$\rho = \rho_0 \bar{\rho}$
Temperature	T	\bar{T}	$T = T_0 \bar{T}$
Distribution	f_i	f_i	
Temps de relaxation	τ^*	τ	$\tau^* = \Delta t \tau$
Relaxation Thermique	τ_1^*	τ_1	$\tau_1 = 2\bar{\alpha} + 0.5$
Pas géométrique	Δx	$\bar{\Delta}x = 1$	-
Pas de temps	Δt	$\bar{\Delta}t = 1$	-
Vitesse sur réseau	$c = \Delta x / \Delta t$	$\bar{c} = \bar{\Delta}x / \bar{\Delta}t$	$c = 1$
Viscosité	$\nu = (c^2 \Delta t / 3)(\tau - \frac{1}{2})$	$\bar{\nu} = (c^2 \bar{\Delta}t / 3)(\tau - \frac{1}{2})$	$\nu = c^2 \Delta t \bar{\nu}$
Viscosité Thermique	$\alpha = \nu / Pr$	$\bar{\alpha} = \bar{\nu} / Pr$	-
Coordonnées	\mathbf{x}	$\bar{\mathbf{x}}$	$\mathbf{x} = \Delta x \bar{\mathbf{x}}$
Temps	t	\bar{t}	$t = \Delta t \bar{t}$
Vitesse	\mathbf{u}	$\bar{\mathbf{u}}$	$\mathbf{u} = c \bar{\mathbf{u}}$
Accélération	\mathbf{a}	$\bar{\mathbf{a}}$	$\mathbf{a} = c / \Delta t (\bar{\mathbf{a}})$, $\mathbf{g} = c / \Delta t (\bar{\mathbf{g}})$
Masse	m	\bar{m}	$m = \rho_0 \Delta x^2 \bar{m}$

Table 3.1 Variables physiques sur réseau

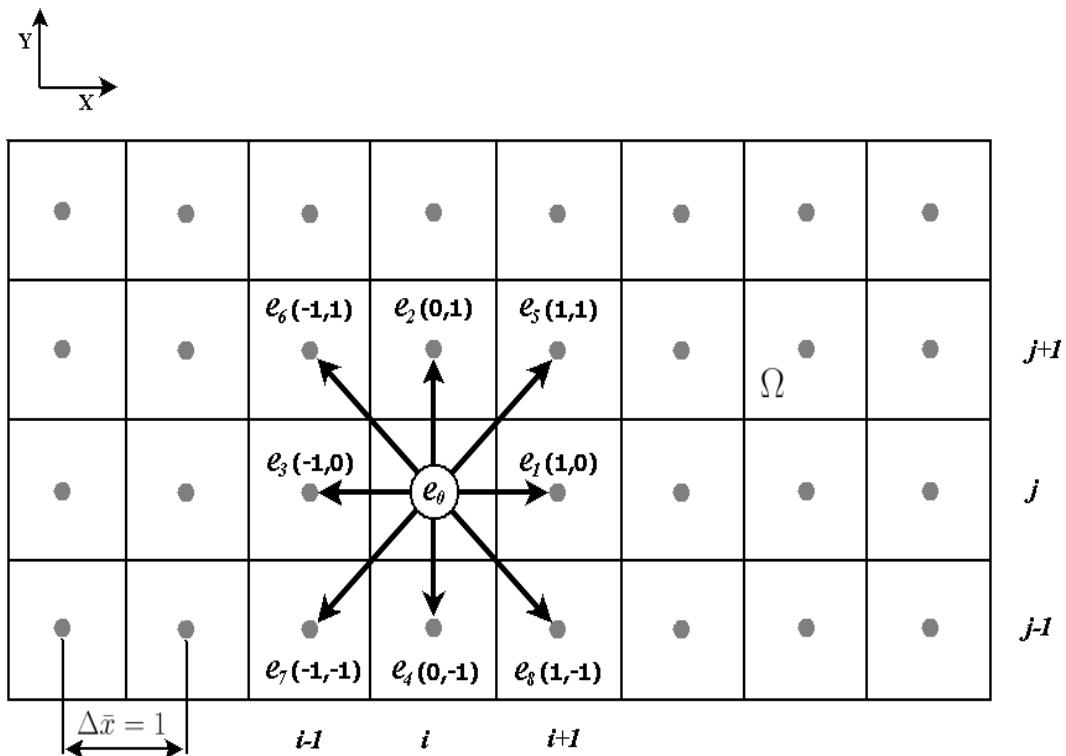


Figure 3.1 Discrétisations d'un domaine fluide par un réseau D2Q9 adimensionalisé

Par la collision, les 9 distributions sur une cellule sont modifiées. Nous remarquons à la Figure 3.2, que les distributions dans chaque direction sont représentées par des flèches de tailles différentes. Cette image est seulement employée dans le but de noter leur grandeur et ne doit pas être confondu avec leurs vitesses de propagation qui ont été fixées lors de la détermination du réseau D2Q9.

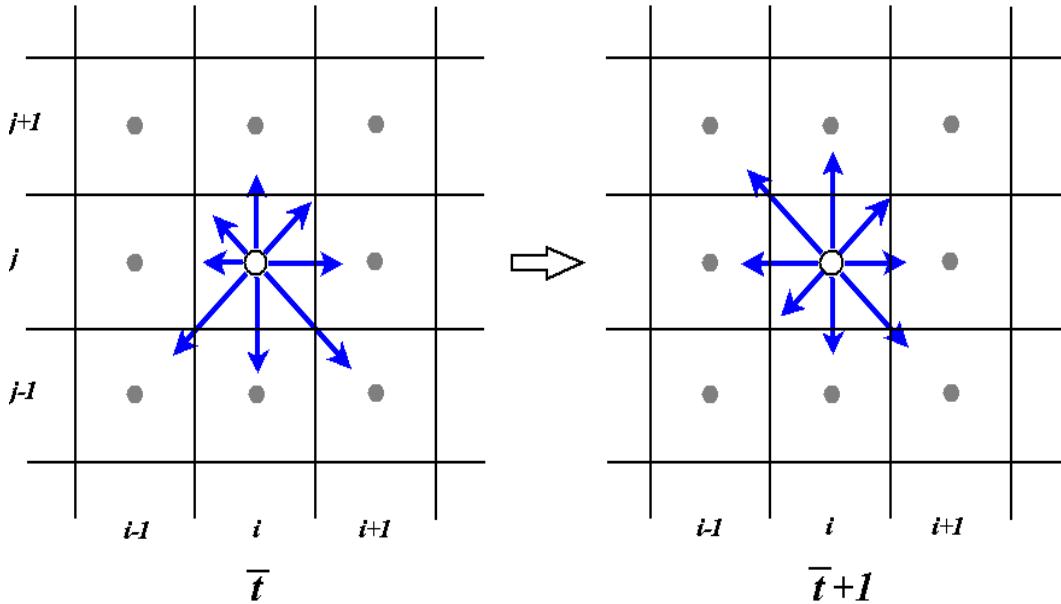


Figure 3.2 Collision sur une cellule $[i, j]$.

La propagation des distributions entre deux pas de temps consécutifs est illustrée à la Figure 3.3. Pour chaque cellule, les 8 distributions ($i=1, \dots, 8$) sont copiées sur la cellule adjacente dans la direction des vecteurs de discrétisation du réseau et le 9^{me} groupe ($i=0$), correspondant aux particules statiques, n'est pas propagé. La propagation peut être interprétée comme des valeurs de la fonction de distribution qui se propagent vers les cellules adjacentes, mais de la même façon on peut le interpréter comme des valeurs de la fonction de distribution qui arrivent à une cellule des cellules adjacentes (Figure 3.4).

$$f_i(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{e}_i, \bar{t} + 1) = \tilde{f}_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1) \quad (3.21)$$

Une fois cette propagation appliquée à toutes les cellules du domaine, un nouvel état à $\bar{t} + 1$ sera défini pour chaque cellule par la propagation des composants de la fonction de dis-

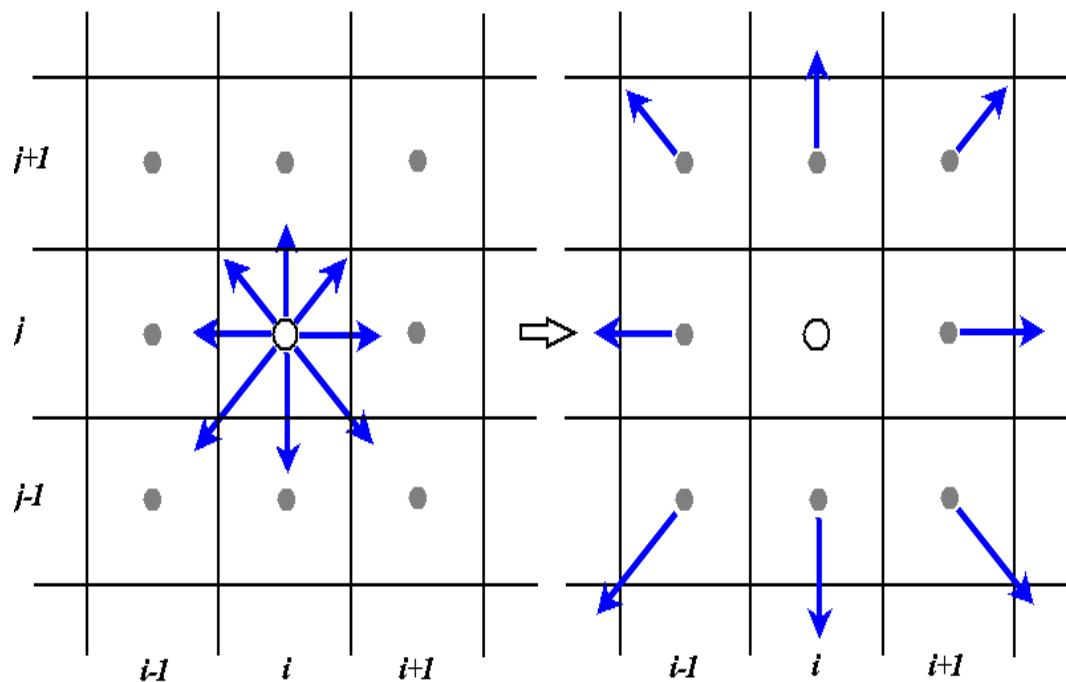


Figure 3.3 Propagation des distributions après la collision depuis une cellule $[i, j]$.

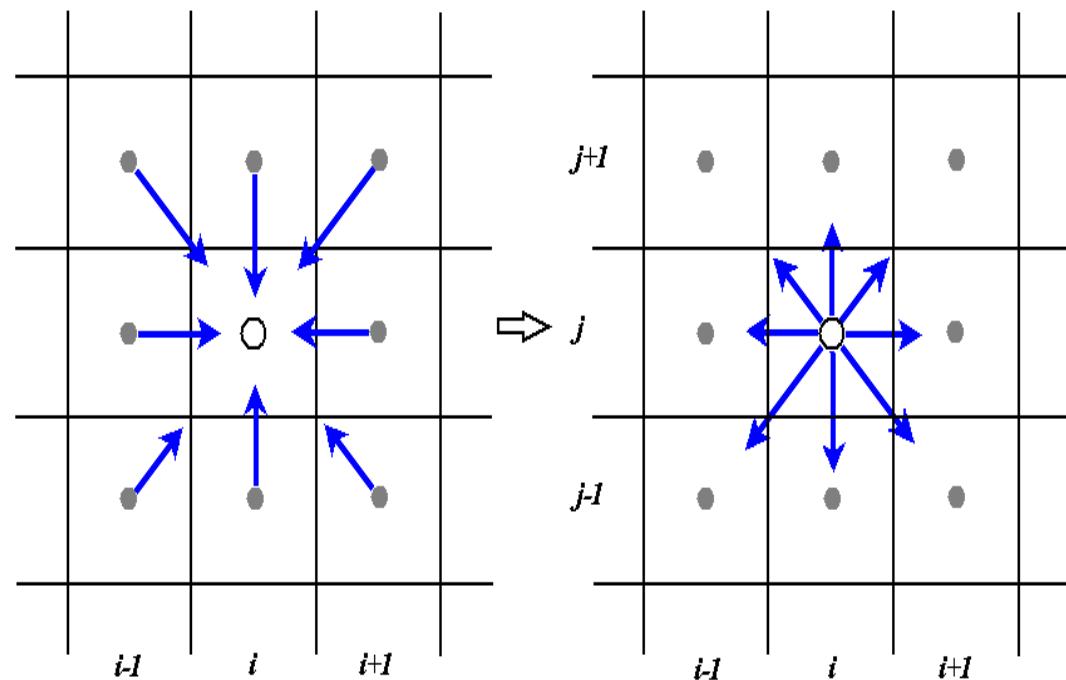


Figure 3.4 Propagation des distributions postcollision vers une cellule $[i, j]$

tribution depuis ses 8 cellules adjacentes. Sur la Figure 3.3, après la propagation, les cellules adjacentes ont chacune contribuées à définir l'état $\bar{t} + 1$ sur la cellule $[i, j]$. Ce processus de collision et de propagation représente l'évolution de l'écoulement sur le domaine entre deux pas de temps \bar{t} et $\bar{t} + 1$ en séparant l'équation 3.4 en deux étapes. Pour effectuer une simulation il suffit de recommencer ces étapes pour le nombre de pas de temps à simuler.

Avec les concepts de collision et de propagation nous avons résumé la base de la méthode de Boltzmann sur réseau pour le cas du modèle D2Q9.

Quoiqu'on a expliqué les concepts de collision et propagation pour le modèle D2Q9, ils s'appliquent aussi au modèle D2Q4 pour le cas thermique. Dans ce cas, la discrétisation génère quatre composantes \mathbf{e}_i (nous le représenterons avec le même caractère \mathbf{e}_i). La formule 3.22 permet de définir l'état postcollision \tilde{g}_i à $\bar{t} + 1$ et il est été illustré à la Figure 3.5. À nouveau il faut remarquer que les tailles des flèches illustrent l'évolution des valeurs de poids sur chacun des directions.

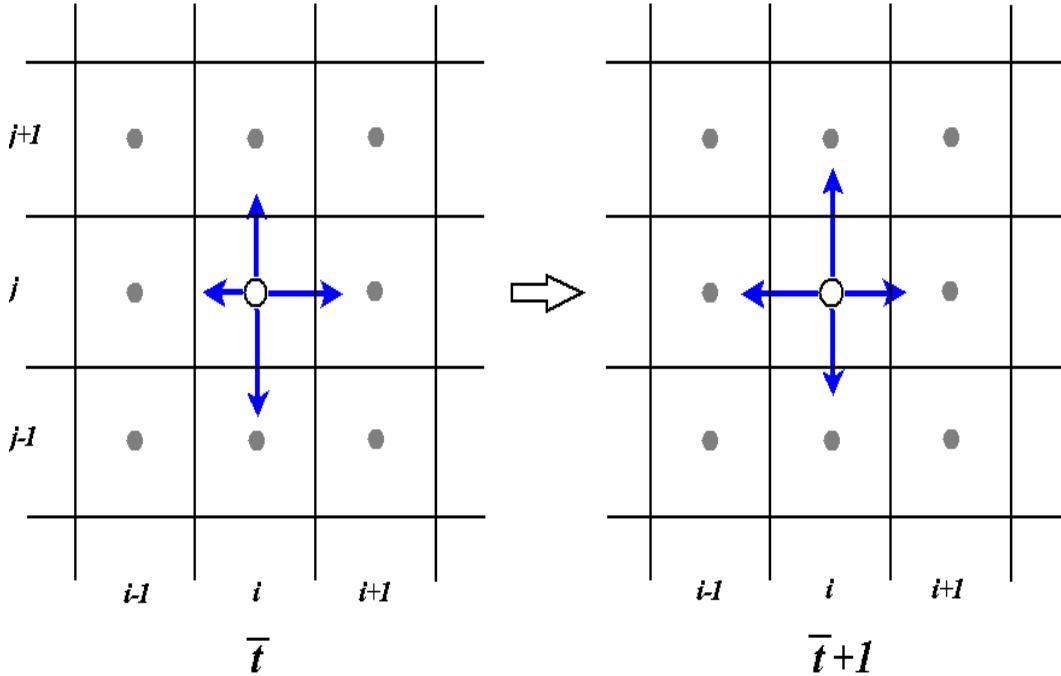


Figure 3.5 Propagation des distributions après la collision depuis une cellule $[i, j]$.

La formule 3.23 montre les valeurs postcollision \tilde{g}_i qui se propagent pour compléter la collision thermique telle qu'illustrée à la Figure 3.6.

$$\tilde{g}_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1) - g_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) = -\frac{1}{\tau_1}(g_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t}) - g_i^{eq}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})) \quad (3.22)$$

$$g_i(\bar{\mathbf{x}} + \mathbf{e}_i, \bar{t} + 1) = \tilde{g}_i(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1) \quad (3.23)$$

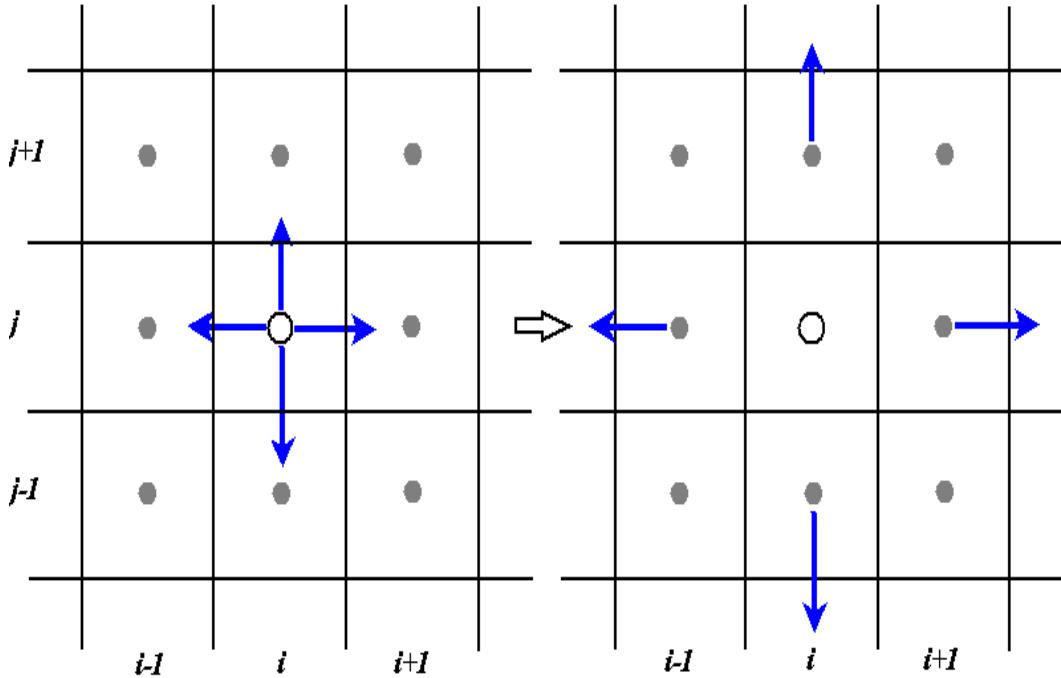


Figure 3.6 Propagation des distributions post-collision vers une cellule $[i, j]$

3.1.4 Algorithme thermique de la méthode de Boltzmann sur réseau

Maintenant, on résumera les différentes étapes et concepts présentés jusqu'à maintenant se succèdent lors d'une simulation (Sukop et Thorne, 2005; Wolf-Gladrow, 2000).

- **Discrétisation du domaine de simulation et adimensionalisation des paramètres.** (sections 3.1.1 et 3.1.3)

- **Section mécanique :**

– **Détermination de l'état macroscopique mécanique à \bar{t} .** Au début de l'algorithme l'état macroscopique est celui de l'état initial. Cet état macroscopique se détermine en fonction de la masse volumique $\bar{\rho}_0 = \bar{\rho}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} = 0)$ et des vitesses macroscopiques $\bar{\mathbf{u}}_0 = \bar{\mathbf{u}}((\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} = 0)$

sur le domaine.

- **Étape de collision** (section 3.1.3). Passage de \bar{t} à $\tilde{f}_i(\bar{t} + 1)$.
- **Étape de propagation** (section 3.1.3). Déplacement de $\tilde{f}_i(\bar{t} + 1)$ à $f_i(\bar{t} + 1)$.
- **Prise en compte des conditions aux frontières hydrodynamiques.**

Les $f_i(\bar{t} + 1)$ connus désormais sur tout le domaine permettent de déduire la masse volumique $\bar{\rho}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1)$ et les composantes de la vitesse $\bar{\mathbf{u}}((\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1))$ par sommation des distributions selon les équations ((3.1) et (3.2)). Avec la masse volumique $\bar{\rho}$ et la vitesse $\bar{\mathbf{u}}$ on peut maintenant calculer la fonction de distribution d'équilibre g_i^{eq} (Éq. 3.5).

- **Section thermique :**

- **Détermination de l'état macroscopique thermique à \bar{t}** (section 3.1.3). On détermine le champ de température \bar{T} .
- **Étape de collision des composantes thermiques** (section 3.1.3). Passage de \bar{t} à $\tilde{g}_i(\bar{t} + 1)$.
- **Étape de propagation des composantes thermiques.** $\tilde{g}_i(\bar{t} + 1)$ à $g_i(\bar{t} + 1)$.
- **Prise en compte des conditions aux frontières thermiques.**

Une fois que les $g_i(\bar{t} + 1)$ sont connus sur tout le domaine on calcule le champ de température $\bar{T}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t} + 1)$ avec l'expression 3.6.

- **Nouvelle itération en temps** $\bar{t} = \bar{t} + 1$.

À partir de cette étape, à $\bar{t} + 1$ les variables sur le domaine sont complètement définies, aussi bien à un niveau mesoscopique que macroscopiques. Pour passer au cycle suivant, il suffit de reprendre le raisonnement et de déterminer à nouveau les variables macroscopiques. La simulation se terminera lorsque le nombre souhaité d'itérations sera effectué ou qu'un critère d'arrêt sera atteint. Cet algorithme de calcul représente l'essentiel de la méthode de Boltzmann sur réseau. Pour compléter cette dernière on doit spécifier l'imposition des conditions aux limites. Les conditions aux frontières considérés dans ce mémoire seront les frontières de type d'extrapolation de Guo *et al.* (2002b). Cependant, une technique employée par Zou et He (1997) pour le calcul des composantes manquantes sur la frontière sera utilisée. Ainsi, nous ferons d'abord un survol sur les frontières de Zou et He.

3.2 Conditions initiales et aux frontières appliquées aux modèles $D2Q9$ et $D2Q4$

Les deux aspects qui déterminent l'évolution temporelle du système de particules sont les conditions initiales et les conditions aux frontières. Pour le premier cas, le seul état qui peut être défini, pour un champ de vitesse donné et un champ de pression sans autres informations, est la distribution à l'équilibre définie par les équations 3.3 (Succi, 2001; Wolf-Gladrow, 2000). Cet état macroscopique initial peut être le cas d'un fluide stagnant ou bien possédant un champ de vitesse, ou une solution obtenu par d'autres méthodes.

Une fois que l'évolution des fonctions de distributions (mécanique et thermique) est établie, l'étape suivante porte sur les conditions aux frontières des types humides et de rebon-dissement (voir conditions aux frontières 2.8) .

Dans le cadre de ce mémoire, les conditions frontières de Guo seront appliquées pour les frontières de type mécanique ainsi que pour la frontière de types thermique. Cependant, pour le calcul de la distribution d'équilibre, nous aurons besoin des certaines idées sur l'implémentation des frontières proposées par Zou et He (1997).

3.2.1 Conditions frontières de Zou et He pour le modèle $D2Q9$

La méthode proposée par Zou et He (1997) s'applique aux parois droites. Elle permet de compléter les trois distributions manquantes en fonction de l'état macroscopique souhaité à la paroi et en fonction des six distributions déjà obtenues des cellules adjacentes. Pour expliquer le principe de fonctionnement de la méthode nous considérons le cas particulier d'un canal pour lequel nous voulons imposer une entrée de fluide à la vitesse $\mathbf{u}_0 = [u_{x,0}, u_{y,0}]$ sur la face latérale droite. Après la propagation sur le domaine, de façon similaire à ce qui est illustré à la Figure 3.7 , les distributions f_2, f_3, f_4, f_6, f_7 et f_9 sont connues, les distributions f_1, f_5 et f_8 sont à déterminer.

Pour la résolution on utilise la définition de l'état macroscopique donnée par les équations 3.1 et 3.2. Sur les noeuds de la frontière on a donc les relations :

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho - (f_2 + f_3 + f_4 + f_6 + f_7 + f_9) \quad (3.24)$$

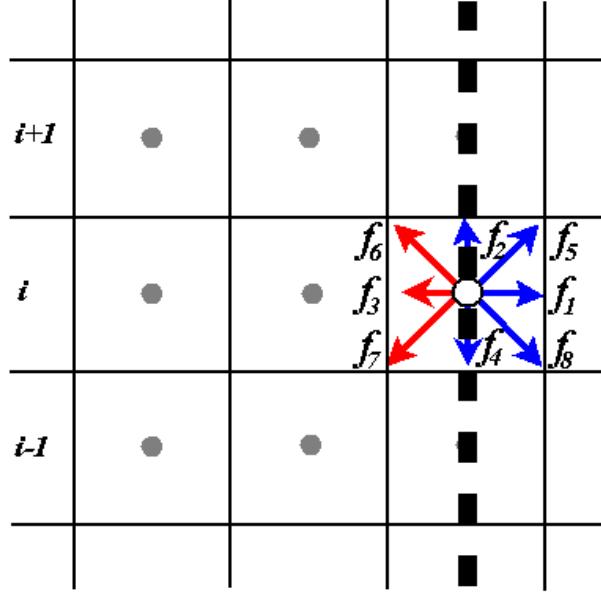


Figure 3.7 Les 3 distributions manquantes sur la frontière

$$f_1 + f_5 + f_8 = \rho u_{x,0} + (f_3 + f_6 + f_7) \quad (3.25)$$

$$f_5 - f_8 = \rho u_{y,0} - (f_2 - f_4 + f_6 - f_7) \quad (3.26)$$

La masse volumique ρ sur chaque noeud de la paroi, donc indirectement la pression sur chaque cellule, découle de ces relations et est explicitée par la formule :

$$f_5 - f_8 = \rho u_{y,0} - (f_2 - f_4 + f_6 - f_7) \quad (3.27)$$

$$\rho = \frac{1}{1 - u_{x,0}} [f_9 + f_2 + f_4 + 2(f_3 + f_6 + f_7)] \quad (3.28)$$

Maintenant que l'état macroscopique à obtenir est complètement déterminé, une superposition permet d'expliciter les distributions correspondantes, à savoir que la variation par

rapport à l'équilibre des distributions normales à la paroi soit constante.

$$f_1 - f_1^{eq} = f_3 - f_3^{eq} \quad (3.29)$$

Cette contrainte permet de choisir un état mesoscopique particulier pour compléter les distributions manquantes en fonction d'un état macroscopique voulu. De la définition des distributions à l'équilibre, (Éqs. 3.3), la distribution normale à la paroi f_1 s'exprime en fonction de f_3 :

$$f_1 = f_3 + \frac{2}{3} \rho u_{x,0} \quad (3.30)$$

À partir des relations 3.14 et 3.15, on a déduit les deux distributions encore manquantes :

$$f_5 = f_7 + \frac{1}{2}(f_4 - f_2) + \frac{1}{6} \rho u_{x,0} + \frac{1}{2} \rho u_{y,0} \quad (3.31)$$

$$f_8 = f_6 + \frac{1}{2}(f_2 - f_4) + \frac{1}{6} \rho u_{x,0} - \frac{1}{2} \rho u_{y,0} \quad (3.32)$$

Si, par exemple, si on connaît la vitesse en entrée nous avons donc un mécanisme pour compléter les distributions manquantes de façon à définir un état macroscopique voulu en entrée. Un raisonnement similaire peut s'appliquer sur les autres frontières si l'on souhaite imposer une vitesse à la frontière qu'elle soit nulle, normale, tangentielle ou avec un angle d'entrée.

3.2.2 Conditions frontière thermiques pour modèle $D2Q4$

Dans le cadre du modèle $D2Q4$ les conditions aux frontières thermiques les conditions de type Dirichlet s'implémentent de façon simple puisque seulement une composante de la fonction de distribution est inconnue. Après la propagation sur le domaine, de façon similaire à ce qui est illustré à la Figure 3.8, les distributions f_1, f_3 et f_4 sont connues, la distribution

f_2 est à déterminer. La solution directe pour la composante manquante se fait à partir de l'équation suivante :

$$g_1 + g_2 + g_3 + g_4 = \bar{T}_0 \quad (3.33)$$

où \bar{T}_0 est habituellement prise égal à 0 ou égal à 1.

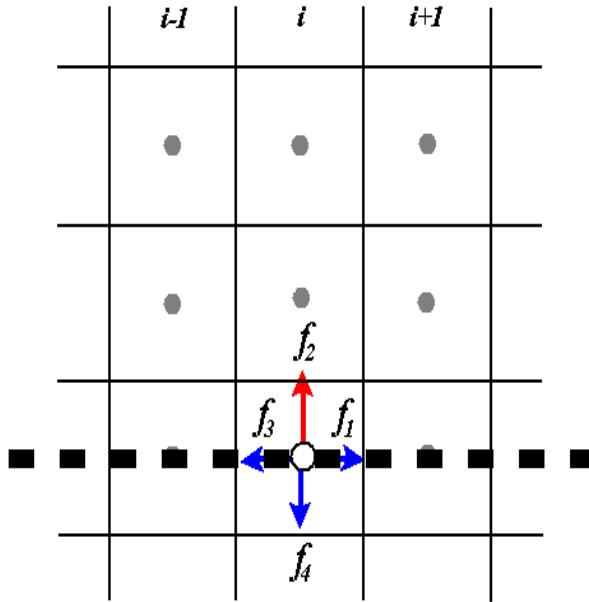


Figure 3.8 La distribution manquante sur la frontière sud peut être déterminée par la condition de frontière.

Les conditions de Neumann (de flux) peuvent s'implémenter de façon simple, par exemple, à travers d'une extrapolation. Avec cette procédure, le flux dans la direction à la normale interne du domaine, sur l'unité de réseau ($\Delta\bar{x} = 1$), à la frontière du sud du domaine, avec une approximation de deuxième degré, permet de calculer la composante manquante g_2 :

$$g_2^1 = \frac{4g_2^2 - g_2^3 + 2\bar{q}\Delta\bar{x}}{3} \quad (3.34)$$

où l'indice inférieur 2 indique le deuxième composant de la fonction de distribution, les indices supérieurs 1,2,3 représentent le premier, le deuxième et la troisième couche du domaine numéroté vers le haut. \bar{q} est habituellement pris à 1 pour un flux unitaire ou à 0 à l'absence de flux.

Avec cette approximation, la composante manquante g_2^1 sur la frontière sud du domaine peut être déterminée en fonction du flux \bar{q} dans la direction normale interne (Éq. 3.34)

3.2.3 Conditions des frontières de Guo

L'idée de base des conditions aux frontières de Guo *et al.* (2002a) est de décomposer la fonction de distribution f_i sur les nœuds du frontière en une partie d'équilibre et une autre de non-équilibre :

$$f_i(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{(eq)}(\mathbf{x}_b, t) + f_i^{(neq)}(\mathbf{x}_b, t) \quad (3.35)$$

où $f_i^{(eq)}$ est la partie d'équilibre, $f_i^{(neq)}$ est la partie de non-équilibre et l'indice b indique que \mathbf{x}_b est pris à la frontière.

Dans une première publication, Guo *et al.* (2000) ont montré que des conditions de frontières, extrapolées au deuxième degré, ont une bonne stabilité. Dans un deuxième article de Guo *et al.* (2002b), sur la base de l'hypothèse $|f_i^{(neq)}| \ll |f_i^{(eq)}|$, ont montré que la partie hors équilibre sur la frontière peut être extrapolée selon :

$$f_i^{(neq)}(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{(neq)}(\mathbf{x}_f, t) + \mathbf{O}(\Delta t^2) = f_i(\mathbf{x}_f, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}_b, t) + \mathbf{O}(\Delta t^2) \quad (3.36)$$

où \mathbf{x}_f est le nœud voisin de fluide le plus proche de \mathbf{x}_b .

En conclusion, avec un deuxième degré de précision, pour le cas où la vitesse et la masse volumique (ou pression) sont connues aux frontières, l'approximation suivante peut s'appliquer :

$$f_i(\mathbf{x}_b, t) = f_i^{(eq)}(\mathbf{x}_b, t) + f_i(\mathbf{x}_f, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}_f, t) \quad (3.37)$$

La Figure 3.9 illustre l'idée de l'extrapolation de Guo.

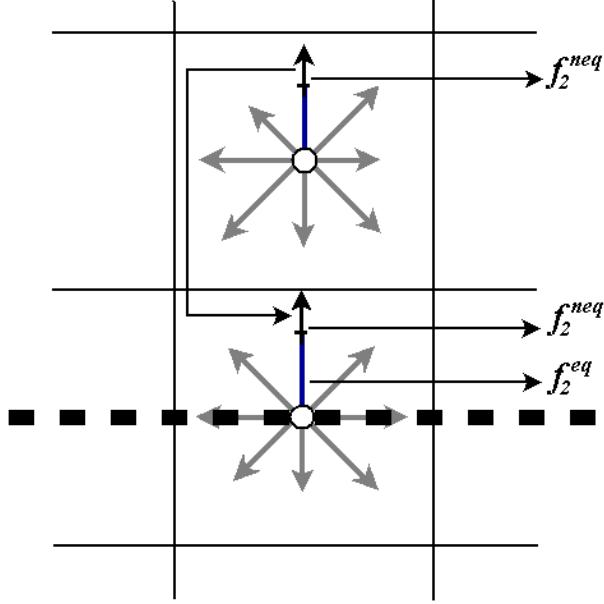


Figure 3.9 La partie de non-équilibre de la frontière est extrapolée du noeud voisin.

Guo *et al.* (2002b) ont implémenté la frontière de type extrapolée pour le cas des frontières mécaniques ainsi que pour les frontières de types thermiques. La Figure 3.9 montre l'extrapolation d'un noeud voisin à la frontière sud. Pour les composantes de la fonction de distribution thermique g_i nous avons :

$$g_i(\mathbf{x}_b, t) = g_i^{(eq)}(\mathbf{x}_b, t) + g_i(\mathbf{x}_f, t) - g_i^{(eq)}(\mathbf{x}_f, t) \quad (3.38)$$

Pour calculer la fonction de distribution d'équilibre à la frontière $g_i(\mathbf{x}_b, t)$ on a deux possibilités : si on connaît la température aux frontières (condition de Dirichlet), les composantes de la fonction de distribution d'équilibre g_i^{eq} sont calculée selon la Éq. 3.6. Si on connaît le flux de chaleur aux frontières (condition de Neumann) les composantes de la fonction d'équilibre g_i sont alors :

$$g_i^{(eq)}(\mathbf{x}_b, t) = \frac{T(\mathbf{x}_f, t) - (\mathbf{x}_f - \mathbf{x}_b) \cdot \nabla T(\mathbf{x}_b, t)}{4} \left(1 + 2 \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}_b, t)}{c} \right) \quad (3.39)$$

Il faut maintenant remarquer que pour calculer les composantes de la fonction de distribution d'équilibre f_i^{eq} aux frontières (section 3.3), nous avons besoin de la vitesse, que nous supposons nulle à la frontière et aussi de la masse volumique adimensionnelle $\bar{\rho}$ qui est égale à 1 selon le modèle de Boltzmann sur réseau. Cependant, une amélioration de la précision des calculs et de la stabilité est observée si nous prenons la valeur de la densité calculée selon l'équation 3.1 (qui oscille légèrement autour de 1 jusqu'à la convergence de la simulation).

Sur toute la frontière, pour pouvoir calculer la masse volumique, il manque les 3 composantes de la fonction de distribution qui arrivent de la couche fantôme (la couche fantôme est une couche à l'extérieur de la frontière qui peut être implémentée pour faciliter la programmation de la propagation). Pour calculer les trois composantes manquantes on peut se servir de la technique proposée par Zou et He (1997) qui a été expliquée à la section précédente 3.2.1. Les deux composantes de vitesse sont nulles sur toute la frontière.

3.2.4 L'implémentation avec nanoparticules

Une fois que les schémas pour le mouvement (Éq.3.4) et l'énergie (Éq.3.5) ont été développés, l'incorporation des nanofluides se réduit à introduire les paramètres thermomécaniques adimensionnels. À la section 2.9 on a expliqué comment obtenir ces paramètres à partir des paramètres correspondants du fluide de base et des nanoparticules. Les Éqs. 2.72 - 2.75 montrent comment calculer la masse volumique, le coefficient de diffusion thermique, le coefficient de la capacité thermique et les expressions pour calculer le coefficient d'expansion thermique respectivement. Ensuite, les Éqs. 2.76-2.81 montrent différents modèles pour obtenir la viscosité mécanique, pendant que les Éqs. 2.82, 2.83, 2.85 et 2.93 donnent le moyen pour calculer la conductivité thermique. Tout d'abord, nous avons besoin de trouver les coefficients qui permettent de calculer les nouveaux paramètres pour le nanofluide. L'obtention des coefficients adimensionnels pour le nanofluide se fait en divisant le paramètre du nanofluide par rapport au même paramètre du fluide de base. À la table 3.2 on trouvera les relations des nouveaux coefficients adimensionnels :

Variable	Fluide de Base	Nanofluide	Parametre adimensionalise
Densité	ρ	ρ_{nf}	$\bar{\rho}_{nf} = \rho_{nf}/\rho$
Diffusion thermique	α	α_{nf}	$\bar{\alpha}_c = \alpha_{nf}/\alpha$
Expansion thermique	$\rho\beta$	$(\rho\beta)_{nf}$	$(\bar{\rho}\bar{\beta})_c = (\rho\beta)_{nf}/\rho\beta$
Conductivité thermique	κ_f	κ_{nf}	κ_{nf}/κ_f

Table 3.2 Paramètres adimensionnels du nanofluide. L'indice nf représente le nanofluide en unités physiques, c représente *coefficient*, et le symbole - le terme sans dimensions.

Le modèle de Brinkman (voir 2.76) permet d'obtenir le coefficient de la viscosité cinématique du nanofluide :

$$\frac{\mu_{nf}}{\rho_{nf}} = \frac{\mu_f}{\rho_f} \frac{\rho_f}{\rho_{nf}} \frac{1}{(1 - \Phi)^{2.5}} \quad (3.40)$$

alors :

$$\bar{\nu}_c = \frac{\nu_{nf}}{\nu_f} = \frac{\rho_f}{\rho_{nf}} \frac{1}{(1 - \Phi)^{2.5}} \quad (3.41)$$

En conséquence, la viscosité cinématique et la diffusion thermique pour le nanofluide sont (voir 3.17 et 3.18 pour le fluide conventionnelle) :

$$\bar{\nu}_{nf} = \bar{\nu}_c \sqrt{\frac{Pr}{Ra}} \quad (3.42)$$

$$\bar{\alpha}_{nf} = \bar{\alpha}_c \sqrt{\frac{1}{Pr \cdot Ra}} \quad (3.43)$$

Le coefficient de diffusion thermique permet d'obtenir le temps de relaxation thermique (voir 3.10) :

$$\tau_1 = 2.0\bar{\alpha}_{nf} + 0.5 \quad (3.44)$$

pendant que le coefficient de diffusion thermique permet d'obtenir le temps de relaxation thermique (voir 3.8) :

$$\tau = 3.0\bar{\nu}_{nf} + 0.5 \quad (3.45)$$

Le coefficient d'expansion thermique $(\rho\beta)_{nf}/(\rho\beta)$ affectera la masse volumique ainsi que le coefficient d'expansion thermique du fluid ($\bar{\beta}_f = 1$ et $\bar{\rho}_f = 1$). Alors, l'équation 3.14 devient :

$$\bar{\mathbf{F}} = \frac{(\rho\beta)_{nf}}{\rho\beta} \Delta\bar{T} \mathbf{g} \quad (3.46)$$

Le coefficient de conductivité thermique affectera le flux de chaleur sur la frontière :

$$\frac{\partial T}{\partial \eta} = -\frac{\bar{q}}{\frac{\kappa_{nf}}{\kappa_f}} \quad (3.47)$$

CHAPITRE 4

SIMULATIONS NUMÉRIQUES DE LA CONVECTION NATURELLE DE NANOFLUIDE PAR LA MÉTHODE DE BOLTZMANN SUR RÉSEAUX

Dans ce chapitre on implémentera le modèle thermique basé sur l'approximation de Boussinesq, qui a été décrite au chapitre précédent. On étudiera certains cas tests sur une cavité avec différents types de conditions aux frontières et différents types de géométries. Le problème de base est le cas d'une cavité carrée chauffée sur la paroi inférieure. Nous déterminerons les critères de bifurcation ainsi que la mécanique de la formation des cellules de convection. Pour finaliser, on regardera l'effet produit par l'inclinaison de la cavité. Les simulations numériques sont faites dans un système de coordonnées adimensionnelles.

Tout d'abord, on regardera un cas classique, une cavité chauffé à température constante sur les côtés. De façon générale pour tous les cas tests que nous étudierons dans ce chapitre, les conditions de frontières mécaniques sont nulles sur les frontière ($\bar{u} = 0$ et $\bar{v} = 0$), alors que les conditions de frontières thermiques et la géométrie sont variées pour chacun de cas à traiter. Cependant, pour certains cas spécifiques, que nous préciseront, les conditions initiales sont une vitesse et une température nulles à l'intérieur du domaine de calcul. Tous les paramètres sont considérés constants sauf la variation de la masse volumique qui est déterminée par l'approximation de Boussinesq. De plus, pour les simulations avec des nanoparticules, il est supposé que le fluide de base et les nanoparticules sont en équilibre thermique et qu'il n'y a pas de glissement entre les deux.

4.1 Modèle de convection naturelle dans une cavité carré

La convection naturelle dans une cavité carrée a été étudiée numériquement par de nombreux auteurs. Dans ce premier test, on considérera la cavité carrée classique qui est chauffé latéralement sur les cotés. La Figure 4.1 décrit les caractéristiques géométriques ainsi que les conditions sur les frontières. De nombreux auteurs ont obtenu de résultats numériques sur cette configuration. Le but de ce premier test est de vérifier l'implémentation du modèle thermique de Boltzmann sur réseau en comparant nos résultats par rapport à la référence classique de De Vahl Davis (1983).

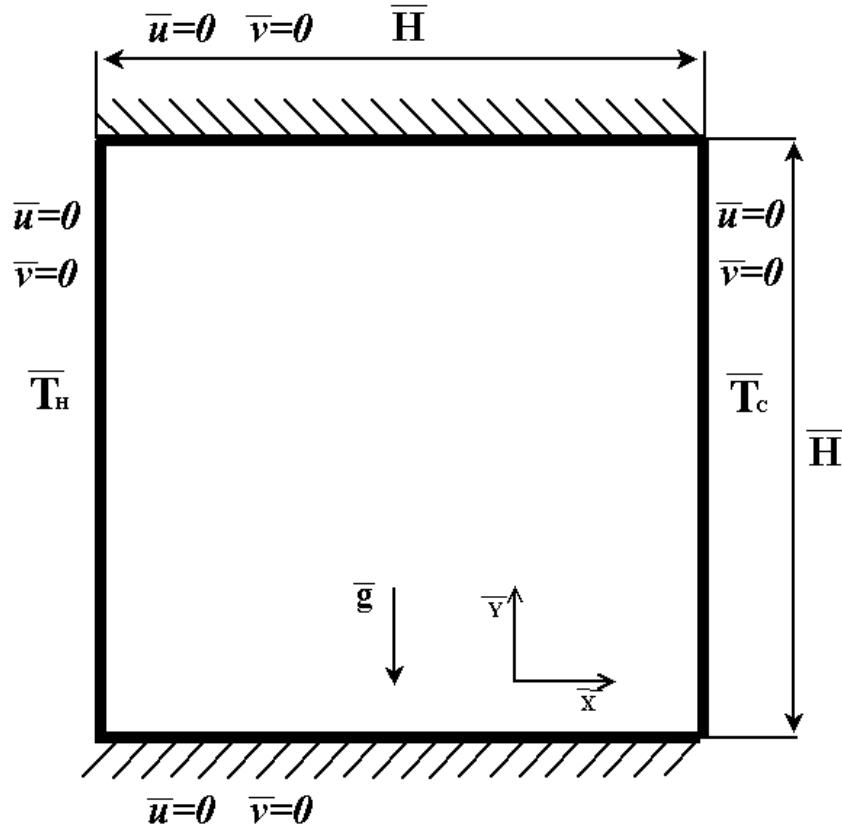


Figure 4.1 Schéma d'une cavité chauffé à température constante sur les côtés

4.1.1 Description du problème

Le cas étudié est une cavité carrée bidimensionnelle avec une paroi chaude à gauche et une paroi froide sur le côté droit. Sur la Figure 4.1 $\bar{T}_H = 1$ et $\bar{T}_C = 0$, sont les températures chaude et froide respectivement. Les parois supérieures et inférieures sont adiabatiques. \bar{H} est la hauteur et la largeur de la cavité. Un réseau de 129x129 est utilisé. Le nombre de Prandtl Pr est fixé à 0.71 (air), et le nombre de Rayleigh Ra , défini par l'Éq. 2.63, varie de 10^3 à 10^6 .

4.1.2 Résultats et discussion

Une solution de référence publiée par De Vahl Davis (1983), qui a utilisé la méthode des différences finies avec un maillage de 81x81 noeuds, et autres résultats obtenus par Barakos *et al.* (1994) (avec la méthode des volumes finis) et par D'Orazio *et al.* (2004) (avec la méthode de Boltzmann sur réseau) ont été utilisés pour fin de comparaison avec nos résultats.

tats. Un maillage de 129x129 a été choisi pour les simulations dans ce travail. Les nombres de Rayleigh considérés sont $Ra = 10^3, 10^4, 10^5$ et 10^6 respectivement. Au Tableau 4.1 on rapporte le nombre de Nusselt moyen calculé à la paroi inférieure, ainsi que le Nusselt maximal et minimal. Les chiffres entre parenthèses indiquent les coordonnées où ces valeurs sont calculées. Au Tableau 4.2 on montre les valeurs de la vitesse horizontale maximale dans la position $\bar{y} = 0.5$ ainsi que les valeurs de la vitesse verticale maximale dans la position $\bar{x} = 0.5$.

Les lignes de courants et les isothermes prédictes à différents nombres de Rayleigh sont présentées aux Figures 4.2 et 4.2 respectivement.

	Ra	Nu	Nu_{Max}	Nu_{min}
10^3	Ce travail	1.118	1.519 (0.086)	0.691 (1.000)
	D’Orazio et al.	1.117	1.501 (0.086)	0.698 (0.953)
	Barakos et al.	1.114	1.581 (0.099)	0.670 (0.994)
	De Vahl Davis	1.118	1.505 (0.092)	0.692 (1.000)
10^4	Ce travail	2.244	3.554 (0.141)	0.587 (1.000)
	D’Orazio et al.	2.235	3.507 (0.148)	0.584 (0.984)
	Barakos et al.	2.245	3.539 (0.143)	0.583 (0.994)
	De Vahl Davis	2.243	3.528 (0.143)	0.586 (1.000)
10^5	Ce travail	4.507	7.712 (0.086)	0.715 (1.000)
	D’Orazio et al.	4.504	7.658 (0.088)	0.728 (0.990)
	Barakos et al.	4.510	7.636 (0.085)	0.773 (0.999)
	De Vahl Davis	4.519	7.717 (0.081)	0.729 (1.000)
10^6	Ce travail	8.715	17.014 (0.039)	0.894 (1.000)
	D’Orazio et al.	8.767	17.288 (0.044)	0.998 (0.990)
	Barakos et al.	8.806	17.442 (0.037)	1.001 (0.999)
	De Vahl Davis	8.800	17.925 (0.038)	0.989 (1.000)

Table 4.1 Comparaison des résultats pour les Nusselt moyens, le Nusselt maximum et sa position sur l’axe $\bar{y} = 1$ et le Nusselt minimum et sa position sur l’axe $\bar{y} = 1$

Ra		u_{max}	v_{min}
10^3	Ce travail	3.6479 (0.8062)	3.6820 (0.1705)
	D'Orazio et al.	3.6532 (0.8125)	3.7006 (0.17970)
	Barakos et al.	4.0768 (0.8060)	4.1301 (0.1810)
	De Vahl Davis	3.6490 (0.8130)	3.6970 (0.1780)
10^4	Ce travail	16.1602 (0.8139)	19.6211 (0.1163)
	D'Orazio et al.	16.2370 (0.8202)	19.6803 (0.1172)
	Barakos et al.	16.2625 (0.8180)	19.7172 (0.1190)
	De Vahl Davis	16.1780 (0.8230)	19.6170 (0.1170)
10^5	Ce travail	34.4240 (0.8450)	68.1663 (0.0620)
	D'Orazio et al.	34.8225 (0.8529)	68.7122 (0.0637)
	Barakos et al.	35.1725 (0.8590)	68.7462 (0.0660)
	De Vahl Davis	34.7300 (0.8550)	68.5900 (0.0660)
10^6	Ce travail	63.3621 (0.8450)	212.2845 (0.0388)
	A D'Orazio et al.	64.8679 (0.8529)	221.1869 (0.0392)
	Barakos et al.	64.8813 (0.8590)	220.7651 (0.0390)
	De Vahl Davis	64.6300 (0.8500)	219.3600 (0.0390)

Table 4.2 Comparaison des resultats pour les composantes maximales des vitesses u_x sur l'axe $\bar{y} = 0.5$ et v_y sur l'axe $\bar{x} = 0.5$

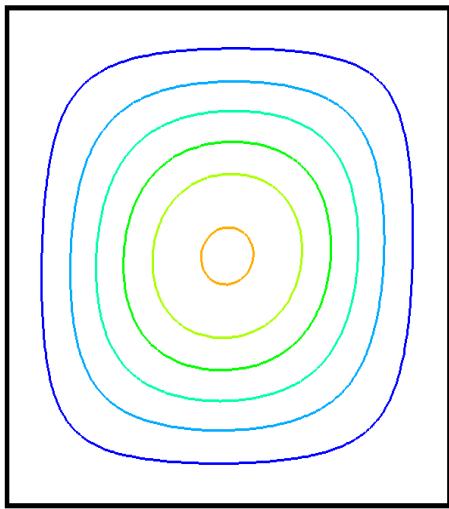
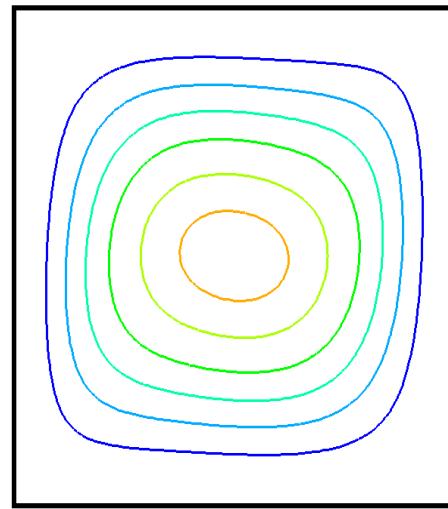
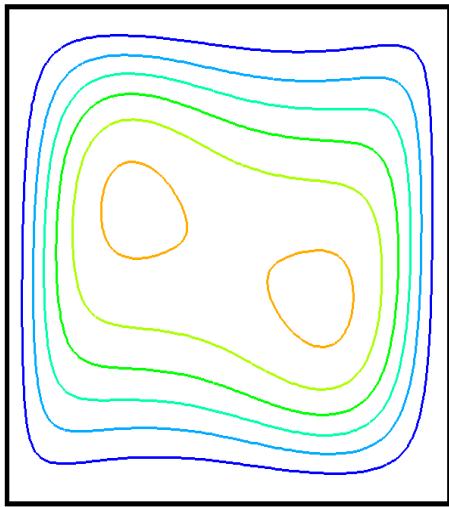
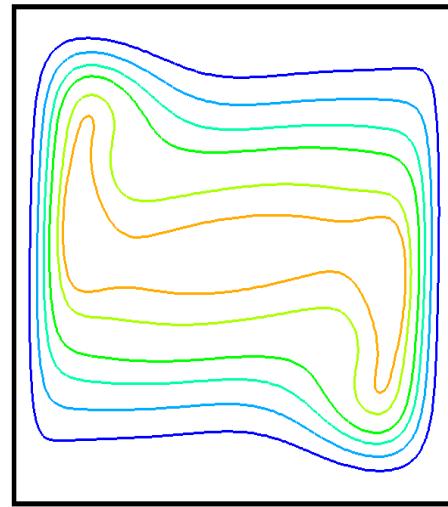
(a) $Ra = 10^3$ (b) $Ra = 10^4$ (c) $Ra = 10^5$ (d) $Ra = 10^6$

Figure 4.2 Lignes de courant pour une cavité carrée avec températures isothermes sur les parois verticales.

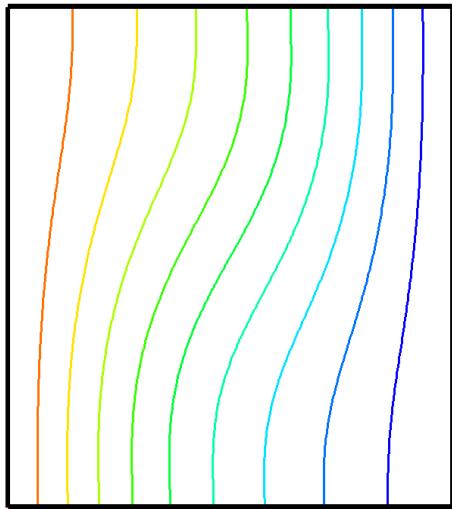
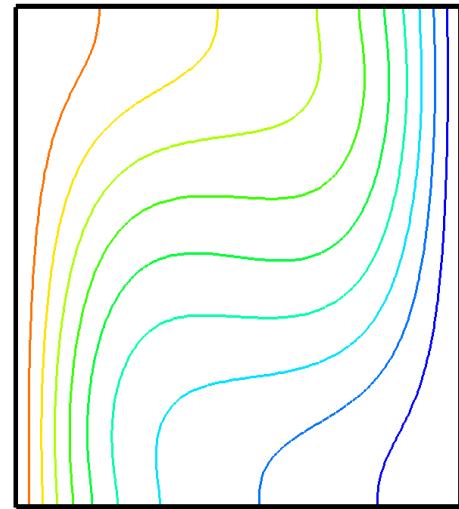
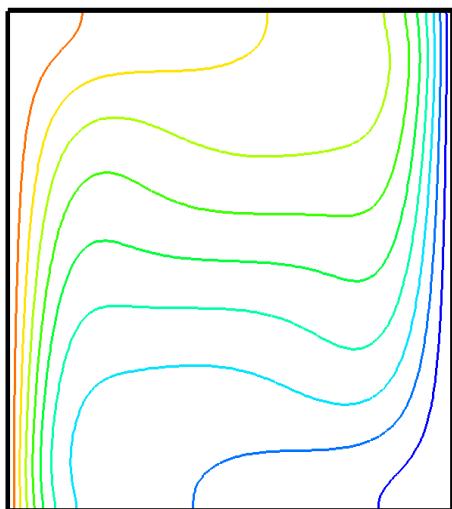
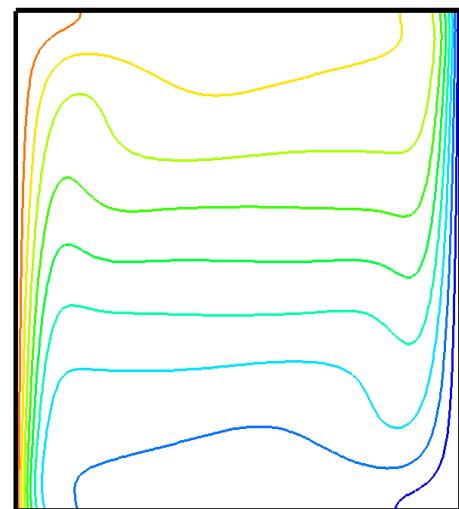
(a) $Ra = 10^3$ (b) $Ra = 10^4$ (c) $Ra = 10^5$ (d) $Ra = 10^6$

Figure 4.3 Les Isothermes pour la cavité carrée.

4.2 Cavité carrée avec une source de chaleur horizontale

Le deuxième problème étudié est une cavité carrée, telle qu'illustrée à la Figure 4.4. La cavité est chauffée sur le côté gauche par une source de chaleur (une aile) qui penètre dans le domaine. Pour ce cas, Alamiri *et al.* (2009) ont obtenus des résultats en faisant varier les caractéristiques géométriques ainsi que l'emplacement de la source de chaleur.

4.2.1 Description du problème

Sur la Figure 4.4 \bar{T}_H et \bar{T}_C indiquent les températures chaude et froide respectivement. La paroi supérieure et la paroi inférieure sont à la température $\bar{T}_C = 0$, pendant que l'aile à la paroi à gauche est à la température $\bar{T}_H = 1$. Le côté droit et le côté gauche sont adiabatiques (sauf l'aile de chaleur). Le nombre de Prandtl Pr est fixé à 0.71 (air) pendant que les nombres de Rayleigh considérés sont $Ra = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 . $\bar{H} = 1$ est la distance caractéristique et les paramètres géométriques de la source de chaleur sont $\bar{w} = 0.2$ et $\bar{d} = 0.25$ respectivement. La taille du réseau utilisé est de 120x120. Nous avons testé quelques uns des cas de Alamiri et al. et des résultats satisfaisants ont été obtenus. Cependant, pour fin d'illustration, nous allons présenter un seul de ces cas.

Pour ce cas test on a choisi la direction de la force de gravitationnelle comme étant horizontale (Figure 4.4) ainsi qu'est celui d'une source de chaleur donnant naissance à une force de flottaison en direction opposée à la force gravitationnelle. Le but du deuxième cas de test est de vérifier la validité du modèle de Boltzmann sur réseau avec une frontière non triviale.

4.2.2 Résultats et discussion

Le modèle a été appliqué pour fin de comparaison avec certains des cas d'Alamiri *et al.* (2009). Le Tableau 4.3 donne une comparaison des résultats avec différents nombres de Rayleigh $Ra = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 pour la fonction de courant ; les valeurs maximums et minimums sont antisymétriques. L'erreur ε des résultats (colonne à droite) est calculée par rapport aux valeurs d'Alamiri qui a utilisé la méthode de Galerkin des éléments finis. Celle-ci est petite, même pour des grands nombres de Rayleigh, $Ra = 10^6, 10^7$, ce qui indique que les deux méthodes mènent substantiellement à la même solution.

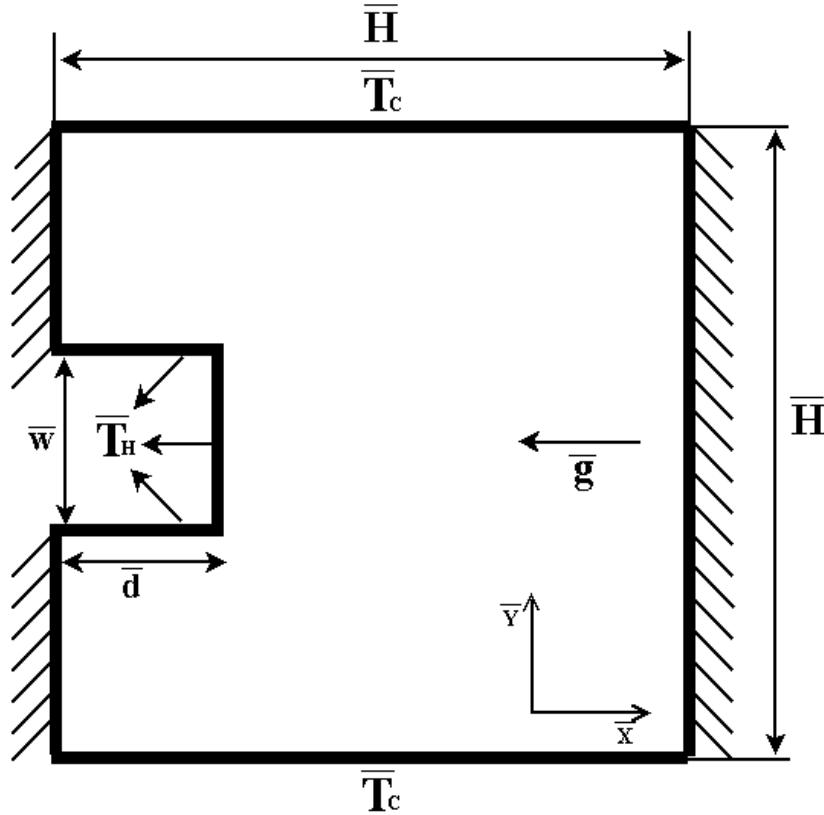


Figure 4.4 Schéma d'une cavité thermique avec une source de chaleur horizontale

	$\Psi_{(min,max)}$ (a)	$\Psi_{(min,max)}$ (b)	ε
$Ra = 10^3$	–	(-0.0081,0.0081)	–
$Ra = 10^4$	(-0.0333,0.0333)	(-0.0331,0.0331)	0.60%
$Ra = 10^5$	(-0.0459,0.0459)	(-0.0455,0.0455)	0.87%
$Ra = 10^6$	(-0.0290,0.0290)	(-0.0287,0.0287)	1.03%
$Ra = 10^7$	(-0.0174,0.0174)	(-0.0171,0.0171)	1.72%

Table 4.3 Maximun et minimum de la fonction de courant. (a) Résultats obtenus par Alamiri et al. (b) Résultats obtenus dans ce travail.

Les Figures 4.11 montrent les lignes de courant alors que les Figures 4.6 montrent les lignes isothermes.

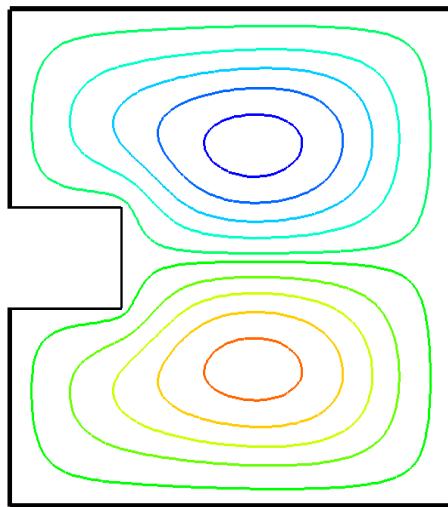
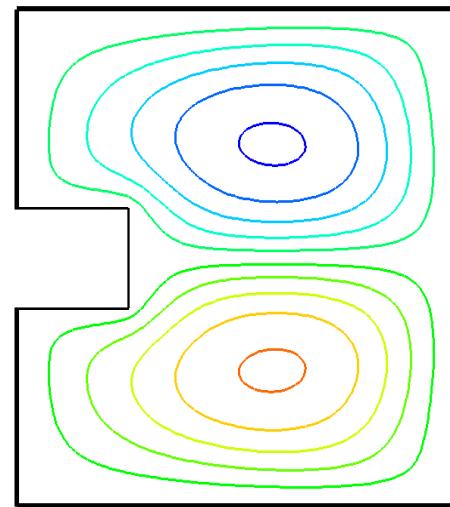
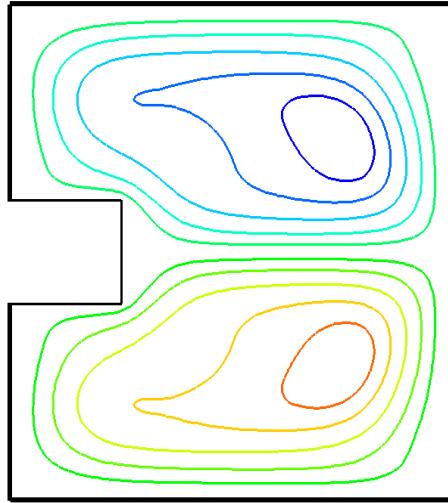
(a) $Ra = 10^4$ (b) $Ra = 10^5$ (c) $Ra = 10^6$ (d) $Ra = 10^7$

Figure 4.5 Lignes de courant pour une cavité carrée avec température sur les parois verticales.

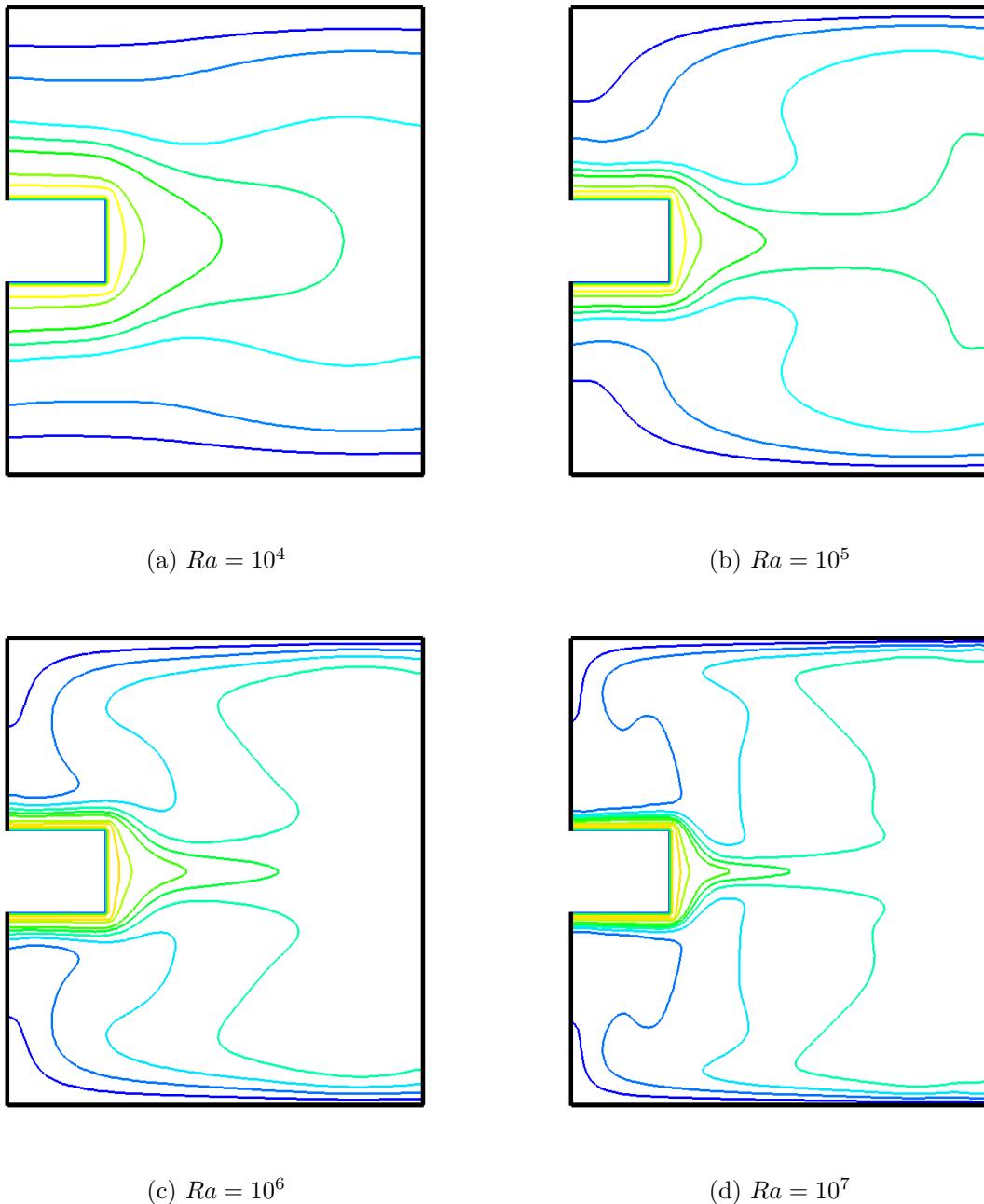


Figure 4.6 Lignes de courant pour une cavité carrée avec températures isothermes sur les parois

Deux cas tests, avec des nanoparticules, seront maintenant examinés. Le premier cas est une cavité allongée verticalement, avec un flux de chaleurs à gauche tandis que le deuxième cas représente une cavité allongée horizontalement avec un flux de chaleur imposé sur la paroi horizontale inférieure.

4.3 Cavité allongée chauffée verticalement, avec des nanofluides

Plusieurs travaux ont été publiés récemment sur de cavités thermiques remplies de nanofluides, avec différents types de géométries et de conditions aux frontières. Alloui *et al.* (2010) ont présenté une étude numérique sur le cas d'une cavité allongée remplie avec nanoparticules. La cavité est chauffée avec un flux de chaleur constant sur les parois verticales. Le but de ce cas est de vérifier l'implémentation du modèle avec nanofluides et de vérifier l'implémentation des frontières avec flux constant utilisant la méthode de Boltzmann sur réseau.

4.3.1 Description du problème

Une cavité bidimensionnelle, remplie de nanofluides est maintenant considérée. La Figure 4.7 illustre les paramètres physiques et géométriques de la configuration de l'enceinte. La cavité est allongée ($\bar{H} \ll \bar{L}$) avec un rapport de forme de $A = \frac{\bar{L}}{\bar{H}} = 6$. Les côtés longs de la cavité sont soumis à des flux de chaleur uniformes $\bar{q} = \pm 1$, tandis que les côtés courts sont adiabatiques. Les propriétés thermophysiques du fluide sont données à la Table 4.4. La concentration des nanoparticules est fixe à 20% ($\Phi = 0.2$). Le nombre de Prandtl Pr est fixé à 7 (eau) pendant que le nombre de Rayleigh est fixé à $Ra = 10^4$.

Propriété	Eau	Cuivre
C_p	4179	383
ρ	997.1	8954
κ	0.6	400
β	$2.1 \cdot 10^4$	$1.67 \cdot 10^5$

Table 4.4 Propriétés thermophysique de l'eau et du cuivre

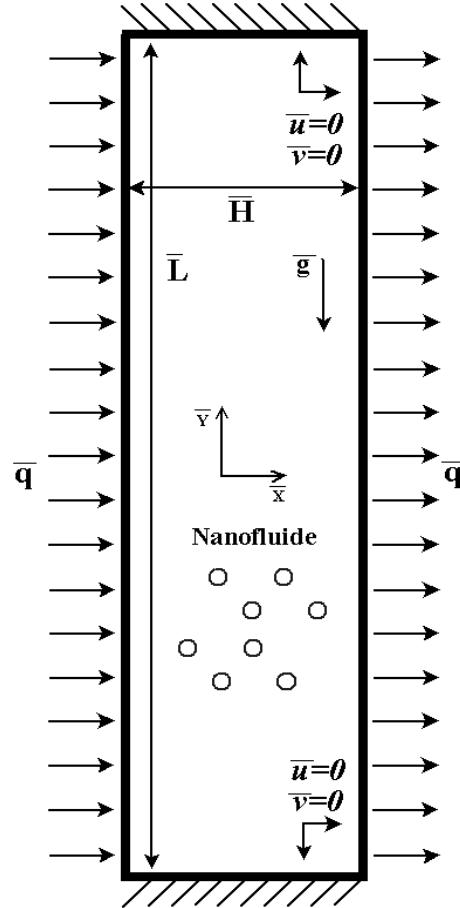


Figure 4.7 La cavité est remplie avec une suspension de nanoparticules de cuivre dans l'eau.

Pour la simulation du nanofluide le modèle de Maxwell (équation 2.82) est choisi comme modèle de conductivité thermique, pendant que pour la viscosité dynamique les trois modèles suivantes sont utilisés :

-Le modèle de Brinkman (équation 2.77, (Brinkman, 1952)) :

$$\mu_{nf} = \frac{\mu_f}{(1 - \Phi)^{2.5}} \quad (4.1)$$

où Φ est la concentration de nanoparticules.

-Le modèle de Maiga *et al.* (2004) :

$$\mu_{nf} = \mu_f (1 + 7.3\Phi + 123\Phi^2) \quad (4.2)$$

-Le modèle de Pak et Cho (1998) :

$$\mu_{nf} = \mu_f(1 + 39.11\Phi + 533.9\Phi^2) \quad (4.3)$$

La masse volumique, le coefficient de diffusion thermique et le coefficient d'expansion thermique sont calculés à partir des formules à la Table 3.2.

4.3.2 Résultats et discussion

Pour la résolution numérique, un maillage de 50x300 a été choisi. Des résultats sont comparés avec le travail d' Alloui *et al.* (2010), qui a utilisé la méthode des volumes finies, à la Table 4.5. Les calculs ont été faits pour l'eau et pour trois modèles thermiques de convection (Brinkman, 1952; Maiga *et al.*, 2004; Pak et Cho, 1998). Tenant compte des conditions géométriques du problème ($(\bar{H} \ll \bar{L})$), le Nusselt moyen sur la paroi verticale gauche peut être pris au milieu de la cavité ($\bar{N}u_{0.5}$). L'erreur relative du maximum de la fonction de courant ainsi que les valeurs de la température maximale et minimale sur la paroi gauche sont présentées et comparées avec les valeurs obtenues par Alloui *et al.* (2010). Les lignes de courant sont montrées à la Figure 4.8 et les isothermes à la Figure 4.9.

Les isothermes obtenus avec les trois modèles de viscosité montrent un comportement différent (Figures 4.8-(b),(c),(d)) par rapport aux isothermes pour l'eau pure (Figure 4.8-(a)). Tenant compte des coefficients qui multiplient la viscosité de l'eau pour les trois modèles (Eqs. 4.1 - 4.3) : $1/(1 - \Phi)^{2.5}$, $1 + 7.3\Phi + 123\Phi^2$ et $1 + 39.11\Phi + 533.9\Phi^2$, nous pouvons observer que les coefficients augmentent la viscosité dynamique du fluide de façon différente. Par exemple, pour une valeur de $\Phi = 0.2$ nous obtenons les valeurs suivantes pour les trois coefficients : 1.75, 7.38 et 30.18, pour les modèles de Brinkman, Maiga et al. et Pak et Cho, respectivement. Avec ces trois valeurs différentes pour les coefficients, nous obtenons différentes valeurs de la viscosité dynamique pour les trois modèles proposés et en conséquence, la convection se comporte de façon différente pour les trois modèles. Ceci est à l' origine du comportement différent des isothermes.

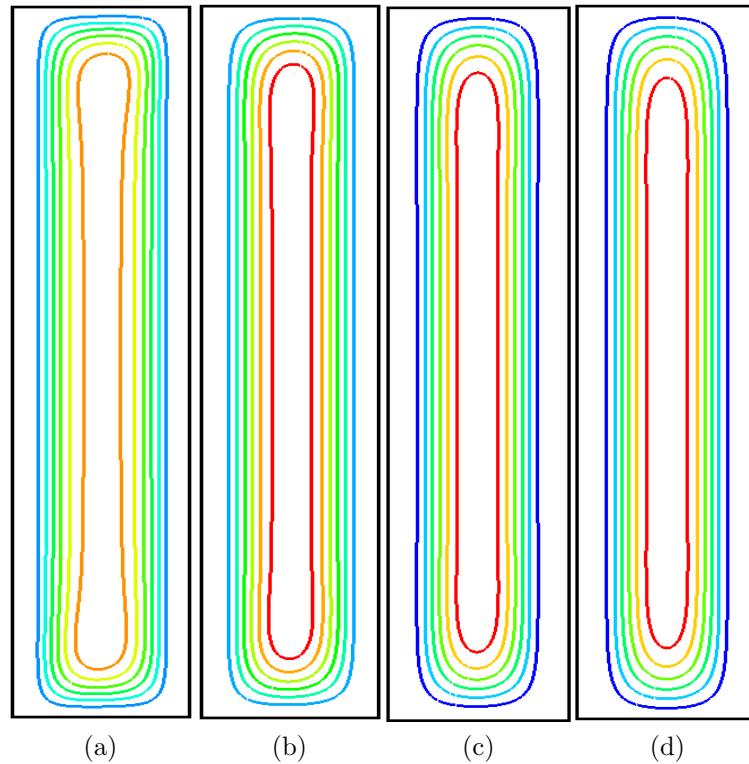


Figure 4.8 Lignes de courant. Modèles de viscosité : (a) Eau (b) Modèle de Brinkman (c) Modèle de Maiga et (d) Modèle de Pak et Cho

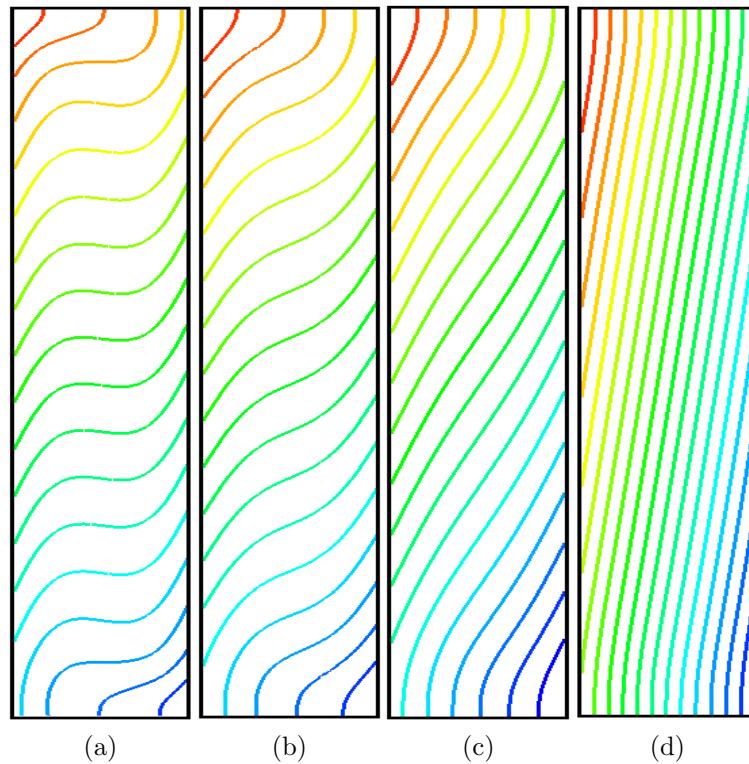


Figure 4.9 Isolines. Modèles de viscosité : (a) Eau (b) Modèle de Brinkman (c) Modèle de Maiga et (d) Modèle de Pak et Cho

Modèle		$Nu_{0.5}$	Ψ_{max}	erreur	T_{min}	T_{max}
Eau	[1]	2.7175	3.3553	3.58%	-1.2639	1.2715
	[2]	2.6700	3.4800		-1.2600	1.2000
Brinkman	[1]	2.9706	3.2473	3.92%	-0.8924	0.9010
	[2]	2.9800	3.3800		-0.9300	0.8700
Maiga	[1]	2.0761	1.4275	4.83%	-0.7787	0.7874
	[2]	2.0600	1.5000		-0.8300	0.7700
Pak et Cho	[1]	1.8054	0.4310	4.22%	-0.4430	0.4515
	[2]	1.7700	0.4500		-0.5200	0.4500

Table 4.5 Cavité verticale avec un rapport de forme $\bar{A} = 6$. La concentration est de $\Phi = 0.2$ pour les trois modèles avec nanoparticules. [1] résultats de ce travail, et [2] résultats de Alloui et al.

4.4 Cavité allongée chauffée par le bas, avec des nanofluides

Un deuxième cas de cavité allongé sera maintenant étudié. Alloui *et al.* (2011) ont effectués une deuxième étude numérique sur une cavité allongée remplie avec des nanofluides, et chauffée par le bas par un flux de chaleur constant. Pour ce cas la convergence vers la solution finale est plus lente.

4.4.1 Description du problème

Une cavité bidimensionnelle allongée, remplie de nanofluides est considérée. La Figure 4.10 illustre les paramètres de la configuration. Le rapport géométrique est $A = \frac{\bar{L}}{\bar{H}} = 6$ ($\bar{H} \ll \bar{L}$). Les côtés longs de la cavité, qui maintenant sont en horizontales, sont soumis à des flux de chaleur uniforme $\bar{q} = \pm 1$, tandis que les côtés courts, sont adiabatiques. Les propriétés thermophysiques du fluide sont données à la Table 4.6. Le nombre de Prandtl Pr est fixé à 7 (eau), tandis que le nombre de Rayleigh est $Ra = 5 \times 10^4$. La concentration des nanoparticules est $\Phi = 0.0, 0.1, 0.2$ respectivement. Maintenant, au lieu de faire des simulations en comparant les différents modèles thermiques (comme dans le cas précédent), nous ferons des simulations à différents niveaux de concentration des nanoparticules.

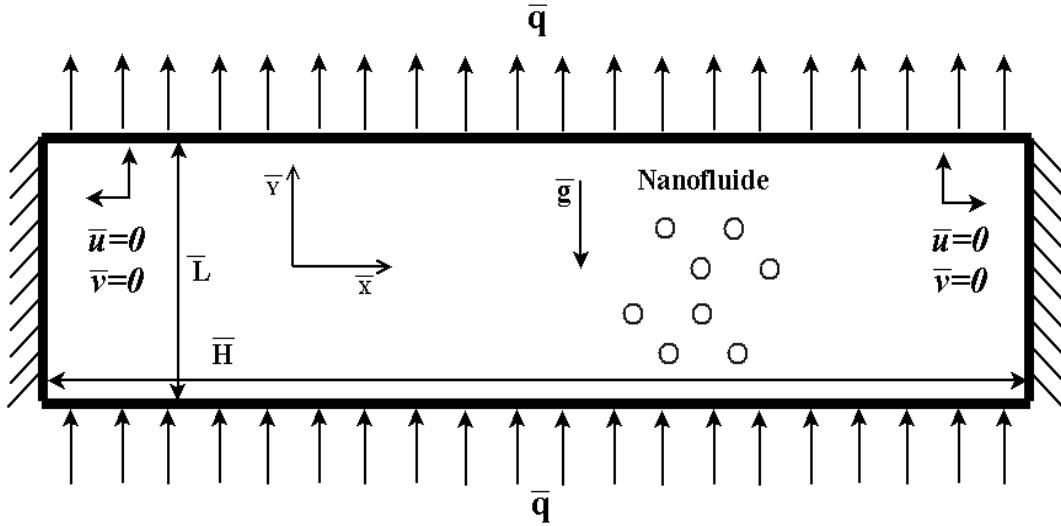


Figure 4.10 La cavité est remplie avec une suspension de nanoparticules de cuivre dans l'eau.

Propriété	Eau	Cuivre
C_p	4179	383
ρ	997.1	8954
κ	0.6	400
β	2.110^4	1.6710^5

Table 4.6 Propriétés thermophysiques de l'eau et le cuivre.

Pour la modélisation du nanofluide l'équation de Maxwell (Eq. 2.82) est choisi pour prédirer la conductivité thermique, tandis que pour la viscosité dynamique seulement le modèle de Brinkman (equation 2.77) est utilisé, soit :

$$\mu_{nf} = \frac{\mu_f}{(1 - \Phi)^{2.5}} \quad (4.4)$$

où Φ est la concentration de nanoparticules.

La masse volumique, le coefficient de diffusion thermique et le coefficient d'expansion thermique sont variés selon les formules présentées au Tableau 3.2.

4.4.2 Résultats et discussion

Pour la résolution numérique, un maillage de 240x40 est considéré. Pour ce cas, les comparaisons des résultats se font par rapport à une autre étude de Alloui *et al.* (2011) (utilisant la méthode des volumes finis). Les calculs ont été faits pour l'eau et pour des solutions de nanofluides ayant des concentrations de $\Phi = 0.1$ et de $\Phi = 0.2$. Le nombre de Nusselt moyen sur les parois horizontales est pris au milieu de la cavité ($Nu_{0.5}$). L'erreur relative du maximum de la fonction de courant entre les résultats de ce travail et ceux obtenus par Alloui *et al.* (2011) sont présentés au Tableau 4.7. On y trouve également les valeurs de la température maximale et minimale sur la paroi inférieure. Les lignes de courant sont montrées sur les Figures 4.11 et les isothermes sur les Figures 4.12.

Φ	$Nu_{0.5}$	Ψ_{max}	Erreur	T_{min}	T_{max}
0.0	3.2280	12.6612	1.69%	-0.5408	0.5199
	3.2300	12.8800			
0.1	4.1182	10.8711	2.85%	-0.5532	0.5253
	4.1100	11.1900			
0.2	4.8594	9.2132	4.22%	-0.5786	0.5491
	4.8600	9.6200			

Table 4.7 Cavité horizontale avec une géométrie $A = 6$

Tel qu'indiqué par la Table 4.7 pour le nombre de Nusselt (et que nous pouvons constater en examinant les lignes de courant et les isothermes), il existe une augmentation du transfert de chaleur au fur et mesure que l'on augmente la concentration des nanoparticules. Ce résultat est prévisible avec modèle de conductivité de Maxwell-Garnett qui augmente de façon linéaire conductivité de la solution tel que le nombre de Nusselt s'accroît au fur et mesure que l'on augmente la concentration. Des résultats supplémentaires avec ce modèle seront présentés dans la section suivante.

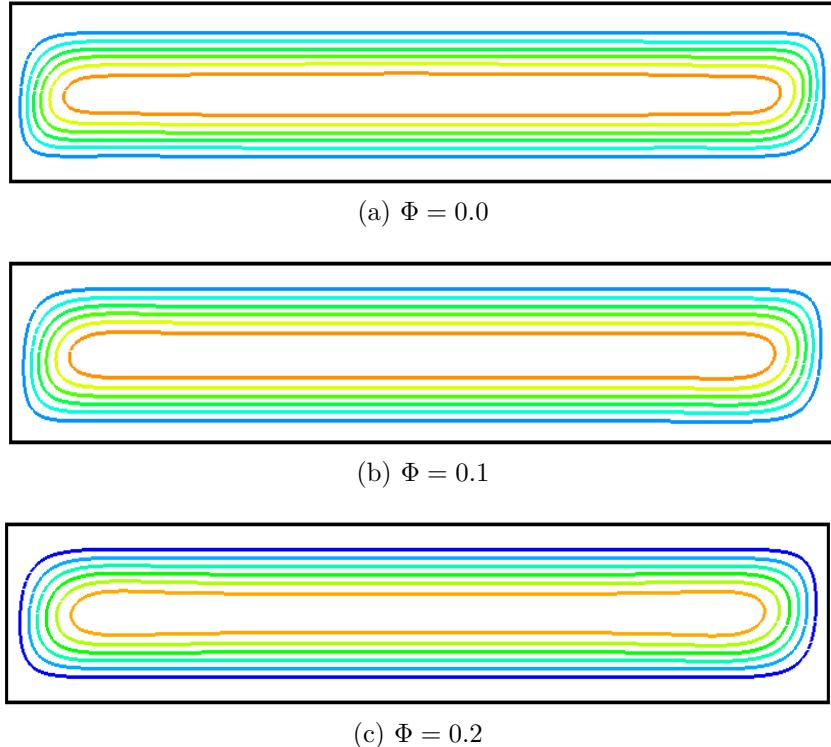


Figure 4.11 Lignes de courant pour différentes concentrations de Φ .

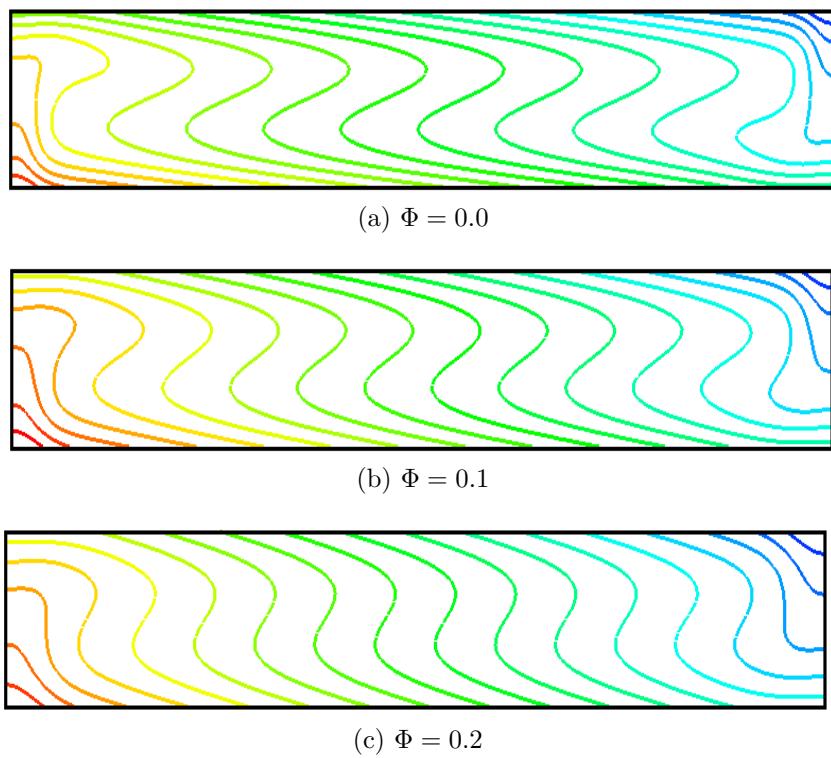


Figure 4.12 Isothermes pour différentes concentrations Φ .

4.5 Analyse du transfert de chaleur dans une cavité remplie avec des nanofluides

Un problème de fort intérêt dans le cadre de ce mémoire est le transfert de chaleur dans une cavité carrée remplie avec des nanofluides à base de CuO. Nous analyserons le transfert de chaleur, la formation des cellules de convection, la détermination des bifurcations super-critiques et les bifurcation de type Hopf , à un grand nombre de Rayleigh. La conductivité thermique du nanofluide est modélisée selon Maxwell (1873) et selon Koo et Kleinstreuer (2004), respectivement. L'influence des deux modèles sur les lignes de courants et isothermes est illustrée.

4.5.1 Description du problème

La Figure 4.13 illustre les caractéristiques physiques et géométriques. La partie inférieure et la partie supérieure de la cavité sont chauffées et refroidies de façon isotherme. $\bar{T}_H = 1$ et $\bar{T}_C = 0$ indiquant les températures chaudes et froides respectivement. Les côtés droit et gauche sont adiabatiques. La cavité est remplie de nanofluides (CuO). La concentration des nanoparticules est variée de façon à analyser l'influence de ce facteur sur la convection. Les propriétés thermophysiques du fluide considéré sont données au Tableau 4.8. Le nombre de Prandtl est fixé à 7 (eau).

Propriété	Eau	CuO
C_p	4179	531.8
ρ	997.1	6320
κ	0.6	76.5
β	2.110^4	1.810^5

Table 4.8 Propriétés thermophysiques de l'eau et le CuO

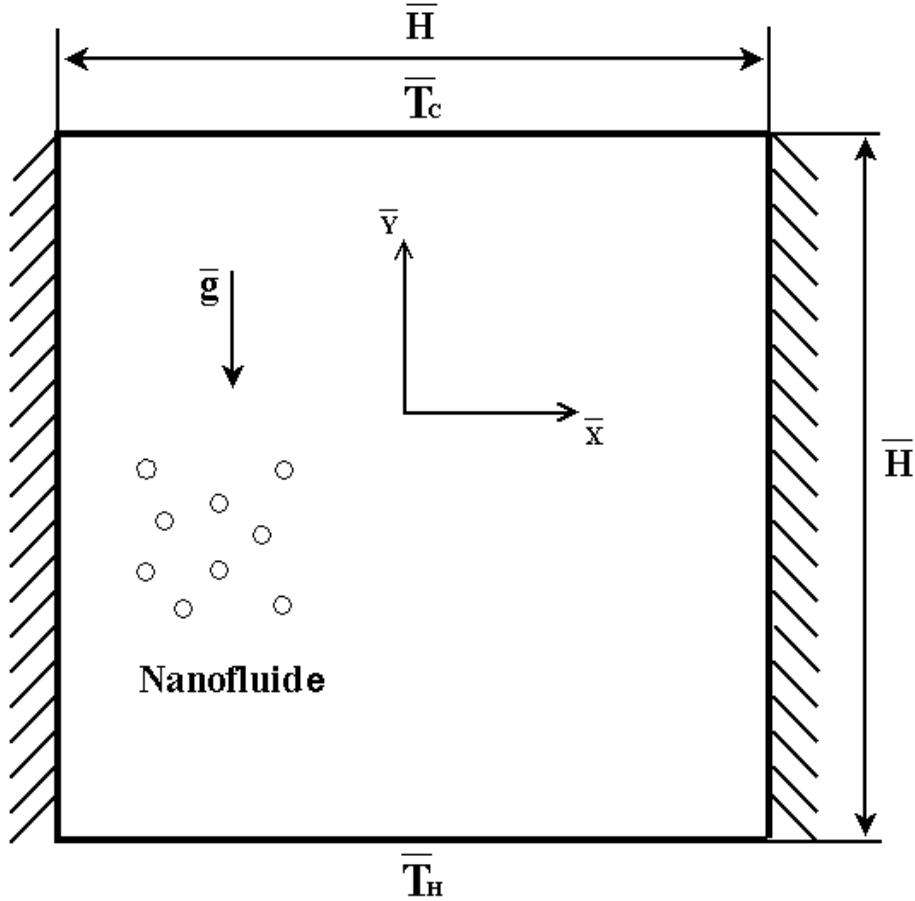


Figure 4.13 Schème d'une cavité thermique avec température différentielle aux côtés

Pour la simulation du nanofluide le modèle de Brinkman (Éq. 2.77, (Brinkman, 1952)) est choisi comme modèle de la viscosité dynamique :

$$\mu_{nf} = \frac{\mu_f}{(1 - \Phi)^{2.5}} \quad (4.5)$$

où Φ est la concentration des nanoparticules

Les deux modèles thermiques considérée sont (voir 2.9.2) : le modèle de Maxwell (Éq. 2.82) :

$$k_{nf} = k_f \frac{k_p + 2k_f + 2(k_p - k_f)\Phi}{k_p + 2k_f - (k_p - k_f)} \quad (4.6)$$

et le modèle de Koo-KleinStreuer (Éq. 2.90) :

$$k_{nf} = k_f \left(\frac{k_p + 2k_f + 2(k_p - k_f)\Phi}{k_p + 2k_f - (k_p - k_f)} + 5 \cdot 10^4 \tilde{B} \phi \rho_f C_{p,f} \sqrt{\frac{\kappa_B T}{\rho_p d_p}} \tilde{F}(\phi, T) \right) \quad (4.7)$$

où ρ_p et ρ_f sont la densité de la particule et du nanofluide respectivement et T la température en Kelvin. $C_{p,f}$ est la capacité calorifique du fluide de base. \tilde{B} a été introduit pour tenir compte de l'effet du mouvement des particules. Pour le CuO $\tilde{B} = 0.0011(100\Phi)^{-0.7272}$ (Koo et Kleinstreuer, 2004).

Koo et Kleinstreuer (2004) ont supposé que \tilde{B} dépend seulement de la concentration volumétrique alors que toute autres dépendances sont incluses dans le paramètre \tilde{F} . Cela signifie que le terme \tilde{B} devient plus important avec l'augmentation de la fraction volumétrique. Le paramètre \tilde{F} , qui est obtenu utilisant les résultats des Das *et al.* (2003) pour le nanofluide, a été introduit afin d'inclure les autres dépendances du modèle :

$$\tilde{F} = (-134.63 + 1722.3\Phi) + (0.4705 - 6.04\Phi)\bar{T} \quad (4.8)$$

La masse volumique, le coefficient de diffusion thermique et le coefficient d'expansion thermique sont calculés à partir des formules données au Tableau 3.2.

4.5.2 Resultats et discussion

On analyse ensuite les différents types d'écoulement obtenus en faisant varier le nombre de Rayleigh et la concentration. Les résultats sont présentés sous la forme de lignes de courant et d'isothermes. Le nombre de Nusselt moyen calculé sur la paroi inférieure est aussi obtenu. Pour la résolution numérique un maillage de 81x81 est considéré.

4.5.3 Formation de 1 et 2 cellules de convection

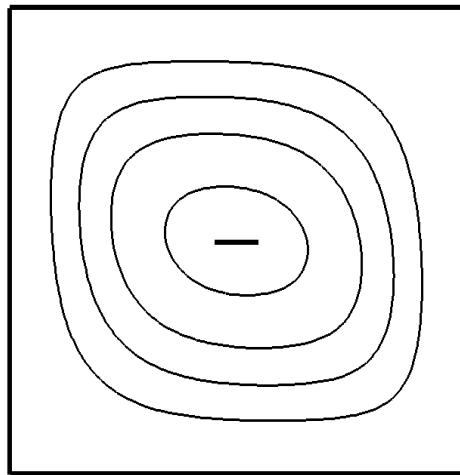
D'abord, nous examinerons la formation des cellules de Bernard. Selon les conditions initiales imposées, une ou deux cellules de convection existent au sein de la cavité carrée. Une augmentation graduelle de Rayleigh (qui peut être obtenue par une augmentation graduelle

de la température) conduit à l'apparition d'une cellule de convection. Par exemple, pour un nombre de Rayleigh de 5×10^4 , nous pouvons prendre comme conditions initiales les champs de température et de vitesse obtenus pour le cas d'un écoulement unicellulaire obtenu à $Ra = 10^4$. Au contraire, si nous partons de conditions initiales de vitesse et température nulles dans le domaine, on obtiendra un écoulement bicellulaire. Pour ce cas, les cellules circulent en sens contraire l'une de l'autre. Le sens de la circulation est prévisible, l'écoulement étant vers le haut au centre de la cavité. Pour une cavité écrasée la quantité de cellules dépend naturellement du rapport de forme de la cavité.

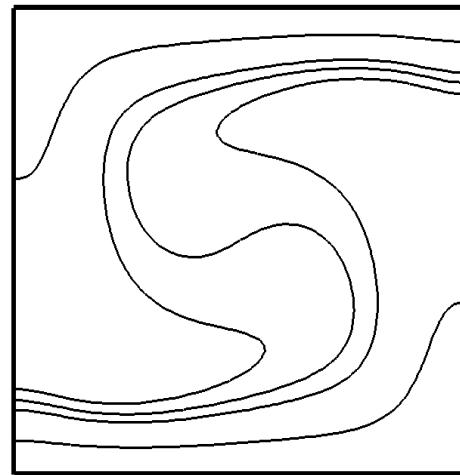
Les figures 4.14 (a-b) montrent la formation d'une cellule de convection et les isothermes respectives, pour un nombre de Rayleigh $Ra = 5 \times 10^4$ (à partir de une solution convergée pour le nombre de Rayleigh $Ra = 1 \times 10^4$). Les figures 4.14 (c-d) montrent les résultats obtenus.

De façon similaire, les Figures 4.15 (a-b) montrent la formation d'une cellule de convection et les isothermes obtenues pour un nombre de Rayleigh $Ra = 1 \times 10^5$ (à partir d'une solution obtenue pour un nombre de Rayleigh $Ra = 5 \times 10^4$). Les Figures 4.15 (c-d) montrent la formation de deux cellules de convection et les isothermes correspondantes obtenues à partir des conditions initiales de fluide au repos.

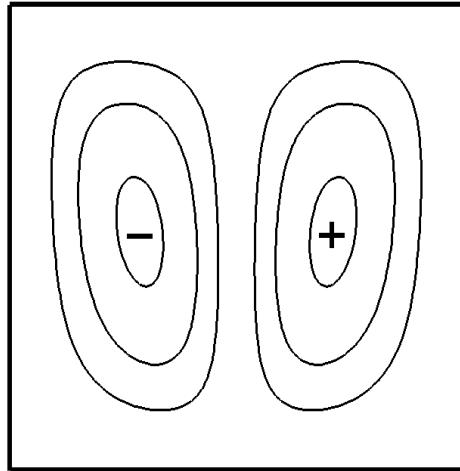
Les sens de rotation de l'écoulement (pour le nombre de Rayleigh de $Ra = 5 \times 10^4$ aussi que pour le nombre de Rayleigh de $Ra = 1 \times 10^5$) dans le cas d'une seule cellule de convection peut être déduit à partir des champs d'isothermes. Les isothermes de la partie inférieure sont déformées vers la droite pendant que les isothermes de la partie supérieure vers la gauche. Par conséquent, la circulation se fait en sens négatif.



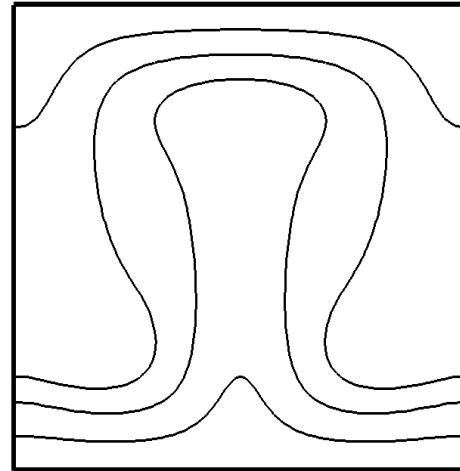
(a)



(b)

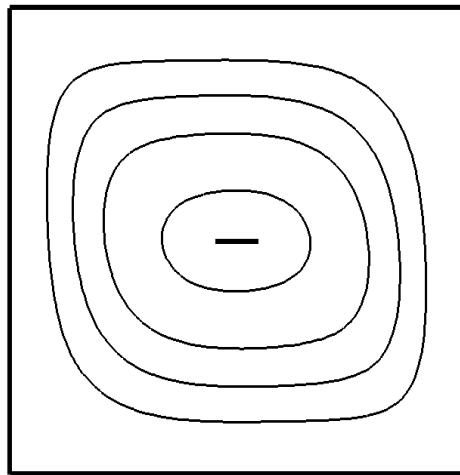


(c)

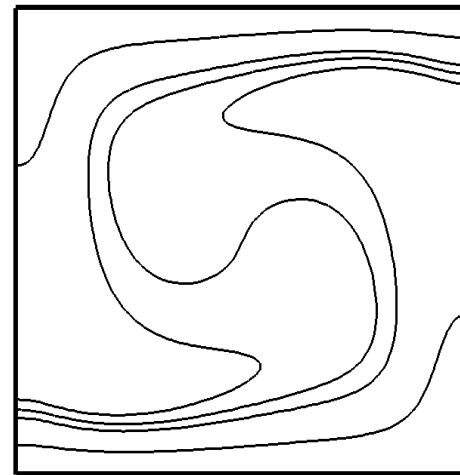


(d)

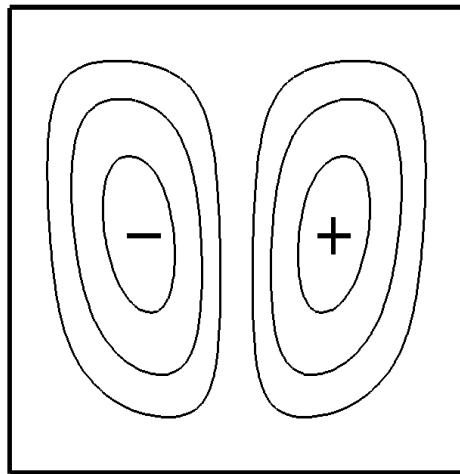
Figure 4.14 Lignes de courant et isothermes. $Ra = 5 \times 10^4$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules



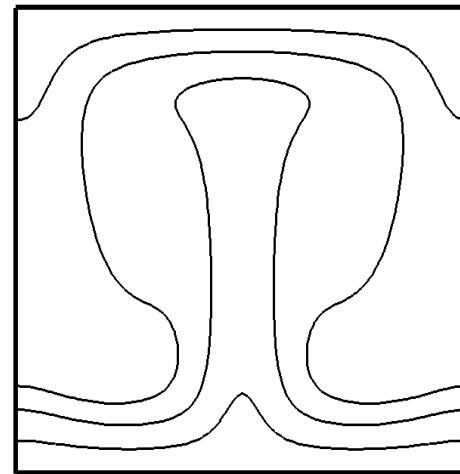
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 4.15 Lignes de courant et isothermes. $Ra = 1 \times 10^5$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules

4.5.4 Comparaison des modèles thermiques des nanofluides avec formation de 1 et 2 cellules.

Les résultats concernant la convection unicellulaire et bicellulaire avec des nanofluides sont maintenant considérés. Nous regarderons l'effet des nanoparticules sur les lignes de courants, les isothermes et le nombre de Nusselt moyen. La concentration du nanofluide considéré est de 2.5%.

Les Figures 4.16 (a-b) montrent les lignes de courant et les isothermes pour un écoulement unicellulaire pour $Ra = 5 \times 10^4$ alors que les Figures 4.17 (c-d) montrent la formation de deux cellules de convection et les isothermes correspondantes pour $Ra = 1 \times 10^5$. Dans les deux cas, nous avons obtenu les lignes de courant et isothermes à partir des modèles de conductivité de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer. Pour pouvoir différencier les lignes de courant et les isothermes nous utiliserons les trois types de lignes.

Les lignes de courants et isothermes qui correspondent au modèle de Maxwell-Garnett présentent un comportement similaire à celui des lignes de courants et isothermes de l'eau pure.

4.5.5 Bifurcation supercritique de type fourche et bifurcation de Hops

Au fur et à mesure que nous augmentons le nombre de Rayleigh, nous observons l'apparition de deux types de bifurcations. Le premier type de bifurcation marque le transfert de chaleur conductif au transfert convective. Cette bifurcation est une bifurcation de type supercritique (bifurcation fourche) qui a été étudiée par Platten et Legros (1984), entre autres auteurs. À l'aide de la théorie de la stabilité linéaire, ils ont prédit un nombre de Rayleigh critique de $Ra = 2.585 \times 10^3$ pour le cas d'une cavité carrée. Dans notre cas, nous avons obtenu une valeur de $Ra = 2.56 \times 10^3$. L'ajout des nanoparticules change la viscosité et la conductivité thermique du fluide et par conséquent le nombre de Rayleigh supercritique. En effet, avec le modèle de Maxwell-Garnett nous avons obtenu une valeur supercritique de $Ra = 2.86 \times 10^3$ alors qu'avec le modèle de Koo-Kleinstreuer on a obtenu $Ra = 3.8 \times 10^3$. La concentration des nanoparticules est de $\Phi = 0.02$ dans les deux cas. On peut constater alors une variation importante sur la valeur prédictive en fonction du modèle choisi.

Le deuxième type de bifurcation (bifurcation de Hops) marque le début des oscillations dans l'écoulement lorsque le nombre de Rayleigh est augmenté au-dessus d'une valeur critique.

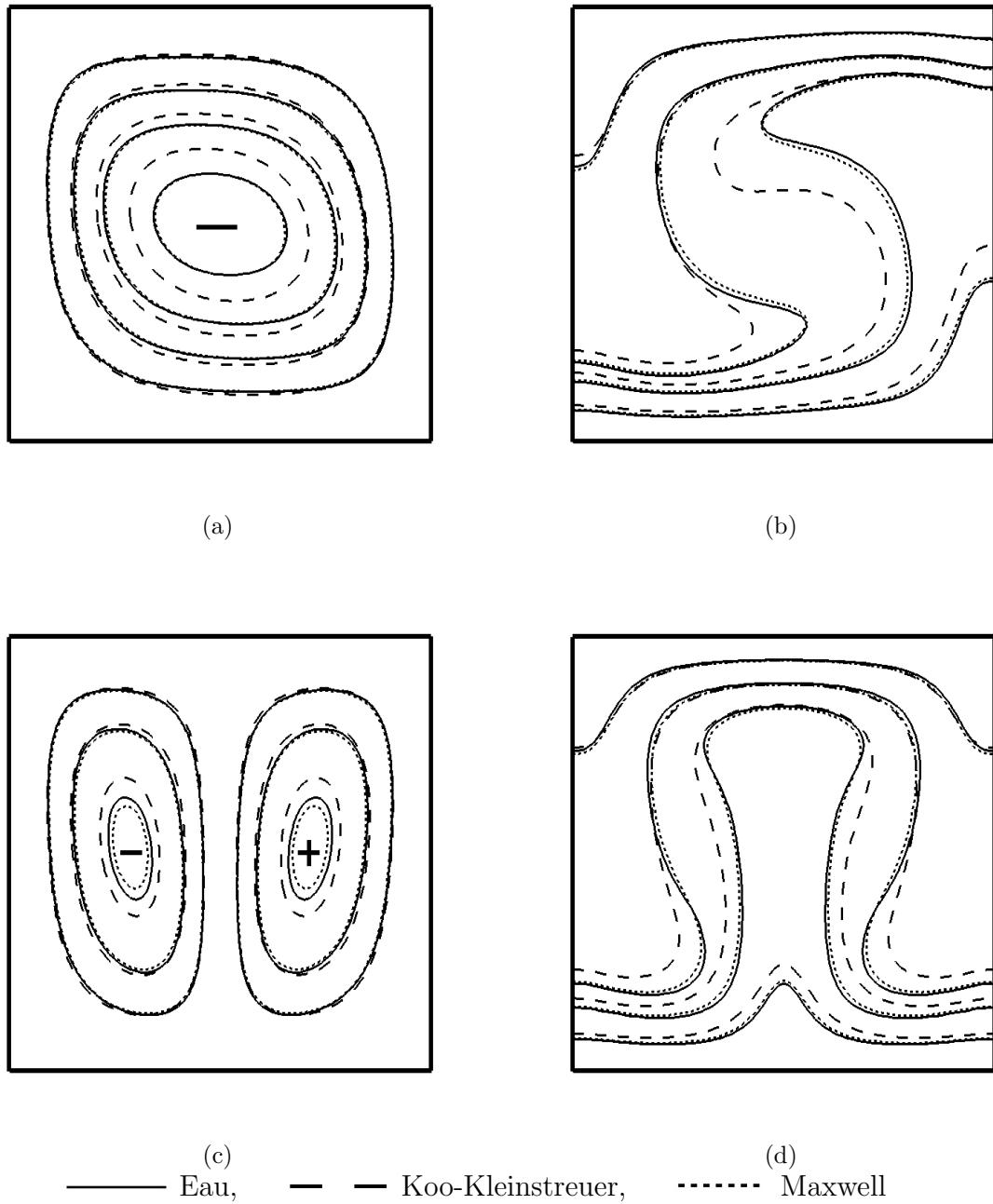


Figure 4.16 Lignes de courant et isothermes $Ra = 1 \times 10^5$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules.

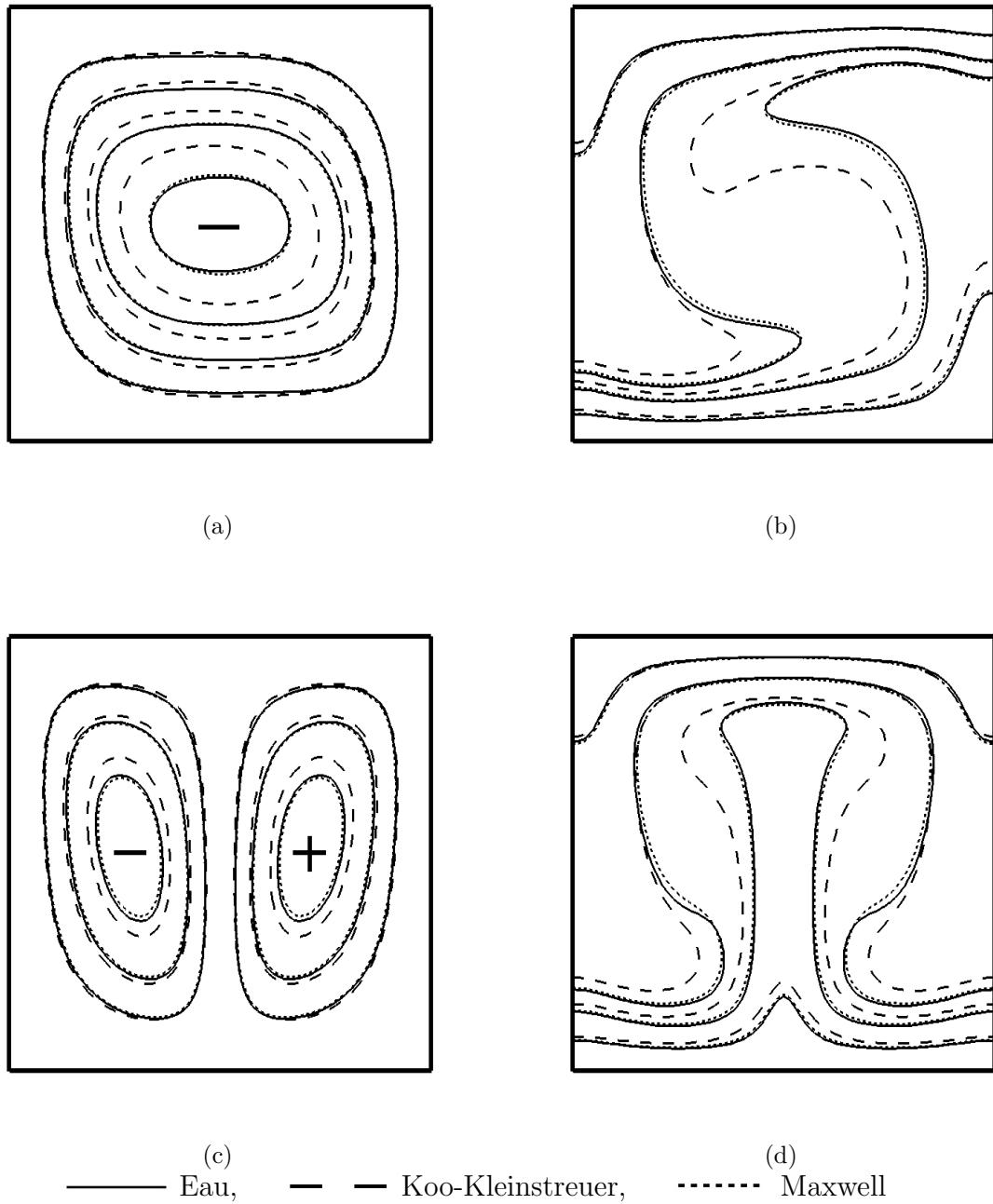


Figure 4.17 Lignes de courant et isothermes $Ra = 1 \times 10^5$. (a) 1-cellule, (b) 2-cellules, (c) 1-cellule, (d) 2-cellules.

Les calculs numériques montrent que le nombre de Rayleigh critique pour la bifurcation de Hops est approximativement de $Ra = 1.30 \times 10^5$ pour l'eau pure. Pour les CuO -nanofluides, le modèle de Maxwell-Garnett prédit une valeur de $Ra = 1.38 \times 10^5$ pour le début de l'écoulement oscillant. Avec le modèle de Koo-Kleinstreuer, la valeur obtenue est de $Ra = 1.6 \times 10^6$. La Figure 4.18 montre les points de bifurcation supercritiques et de Hops pour l'eau alors que la Figure 4.19 montre les points de bifurcation supercritique et de Hops pour le modèle thermique de Maxwell-Garnett (a), et de Koo-Kleinstreuer (b).

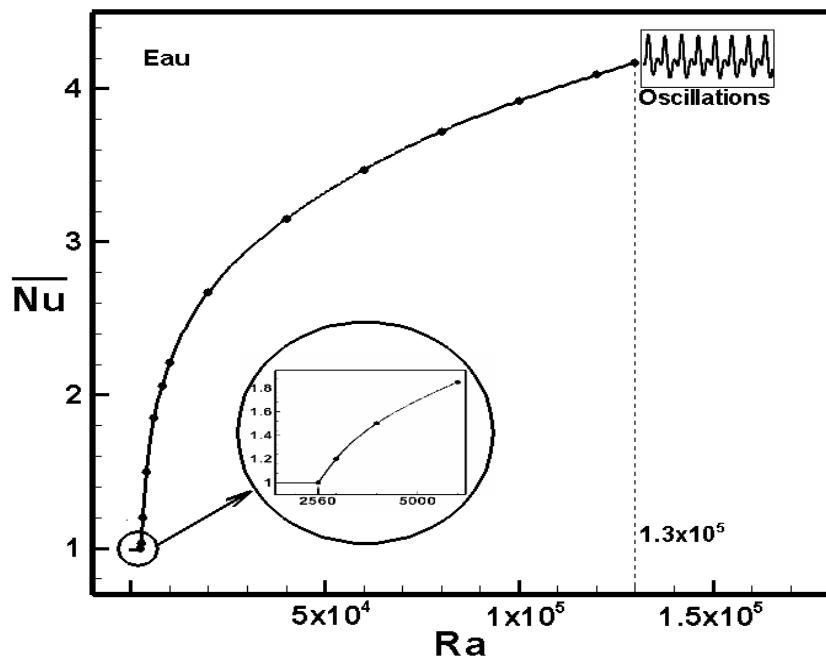
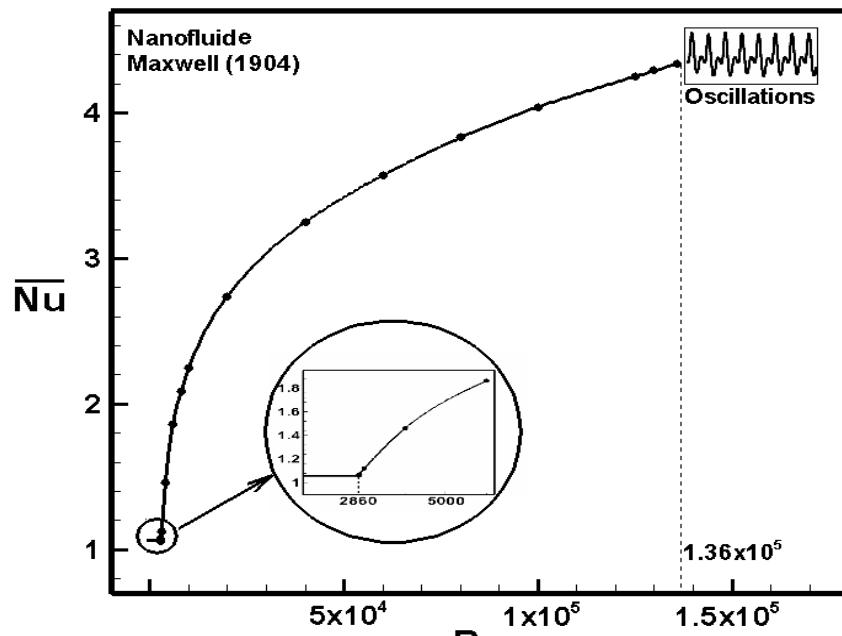
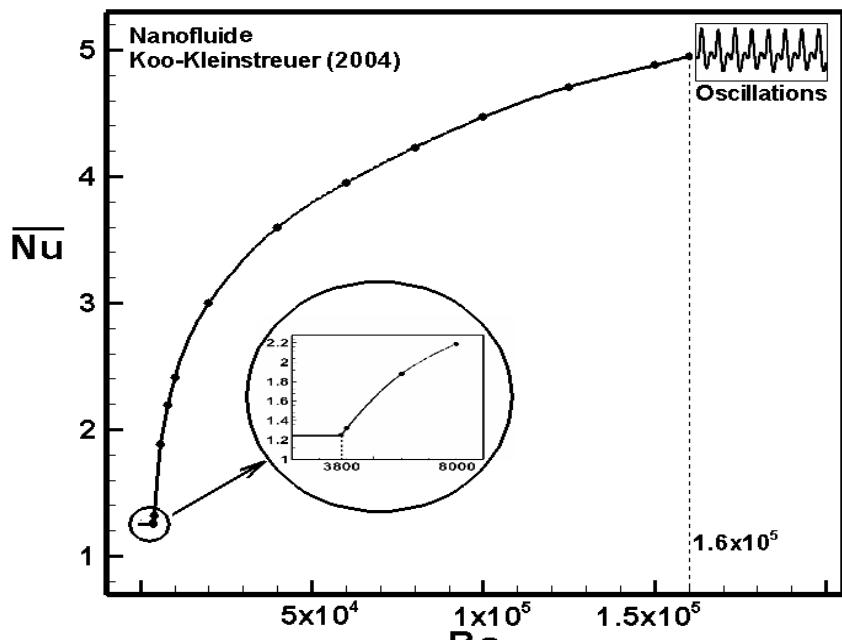


Figure 4.18 Points de bifurcation supercritique et de Hops pour l'eau



(a)



(b)

Figure 4.19 Points de bifurcation supercritique et de Hops pour le modèle thermique de (a) Maxwell-Garnett, et de (b) Koo-Kleinstreuer

4.5.6 Analyse du régime oscillatoire

À la section précédente nous avons obtenu les valeurs critiques pour la bifurcation de Hops, pour un fluide sans nanoparticules et pour un fluide avec des nanoparticules modélisé à partir du modèle de Maxwell-Garnett et à partir du modèle de Koo-Kleinstreuer. Ces valeurs indiquent qu'à partir d'une certaine limite, pour le nombre de Rayleigh, apparaissent des écoulements transitoires. L'écoulement devient plus instable et l'amplitude des oscillations plus grande au fur et mesure que nous augmentons le nombre de Rayleigh.

À la Figure 4.20 nous illustrons les oscillations du nombre de Nusselt moyen pour l'eau (4.20-(a) et pour les modèles de Maxwell-Garnett (4.20-(b) et de Koo-Kleinstreuer (4.20-(c)). Pour les simulations nous avons utilisé un nombre de Rayleigh de $Ra = 5 \times 10^5$ et une concentration de $\Phi = 0.02$.

Il faut mentionner que la formation des oscillations périodiques a été obtenue en démarrant les calculs avec des conditions initiales de repos. Si nous partons d'un état convectif (par exemple pour un nombre de Rayleigh de $Ra = 1 \times 10^5$), il se forme aussi des oscillations. L'amplitude des oscillations augmente avec le nombre de Rayleigh.

Dans le cas du modèle de Maxwell-Garnett, la valeur de l'amplitude des oscillations et du nombre de Nusselt maximum augmentent légèrement par rapport aux résultats obtenus pour l'eau (voir Figure 4.20). L'amplitude des oscillations ainsi que le Nusselt maximum dans le cas de modèle de Koo-Kleinstreuer augmentent de manière plus significative par rapport aux résultats obtenus pour l'eau. Tel qu'illustré sur la Figure 4.20, les oscillations du modèle de Maxwell-Garnett ont un comportement similaire aux oscillations de l'eau et les deux diffèrent des oscillations du modèle de Koo-Kleinstreuer.

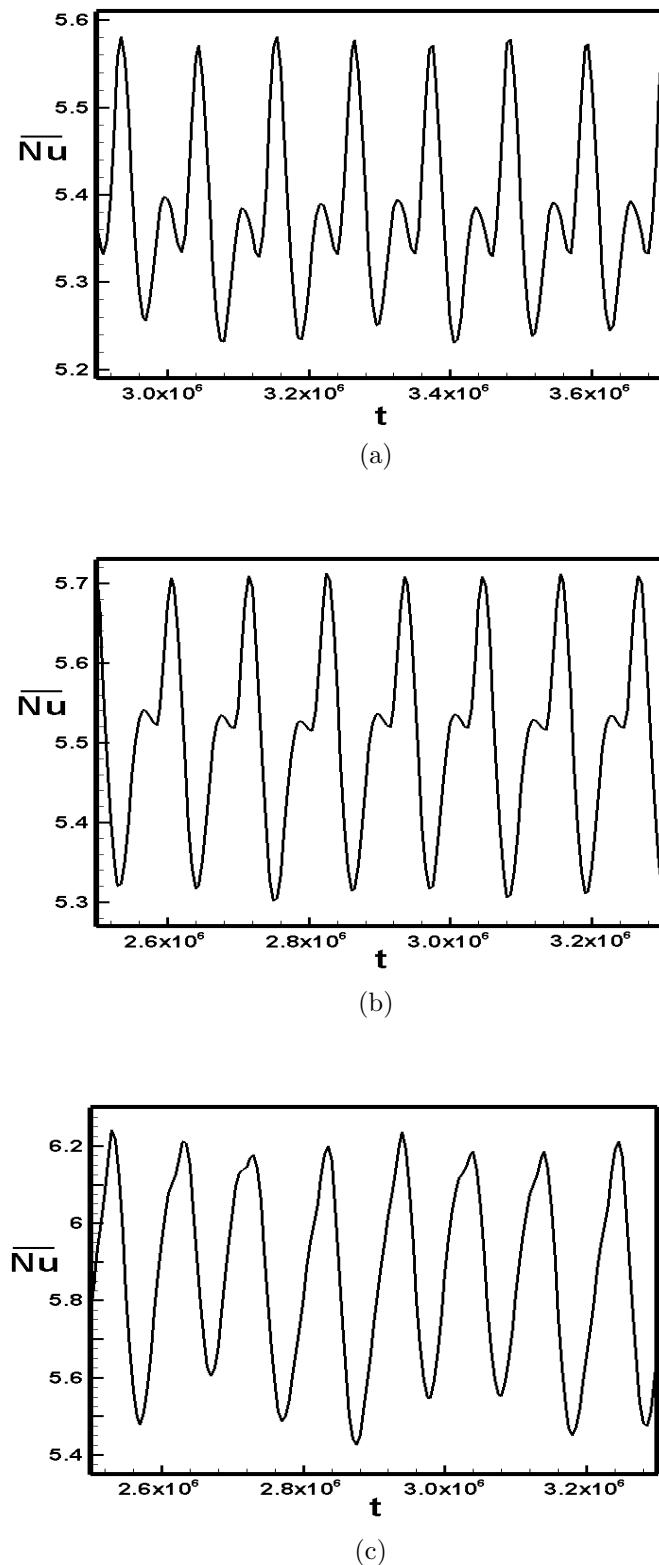


Figure 4.20 Formation Oscilatoire pour un nombre de Rayleigh $Ra = 1 \times 10^5$. Modèles : (a) Eau, (b) Modèle de Maxwell-Garnett, (c) Modèle de Koo-Kleinstreuer

Nous allons maintenant étudier l'évolution temporelle oscillatoire du nombre de Nusselt moyen pour le modèle de Koo-Kleinstreuer (pour une concentration de $\Phi = 0.02$). A cet effet, nous considérons les points : A,B,C et D dans un cycle de l'évolution temporelle (Figure 4.21). La Figure 4.22 illustre des lignes de courants pendant que la Figure 4.23 illustre celles des lignes isothermes. Les lignes de courants, sur la Figure 4.22-(a), montrent la formation de quatre cellules qui évoluent vers une formation de trois cellules à la Figure 4.22-(b). Ensuite la circulation se fait en sens inverse (Figure : 4.22-(c) et 4.22-(d)). Nous pouvons voir que la formation de quatre cellules correspond au minimum local de l'oscillation. (Figures : 4.22-(a),(c)). Le maximum local de la fonction (qui n'est pas illustré) correspond au cas d'une cellule centrale de convection de taille maximale. Les isothermes des points A,B,C, et D sont illustrées à la Figure 4.23.

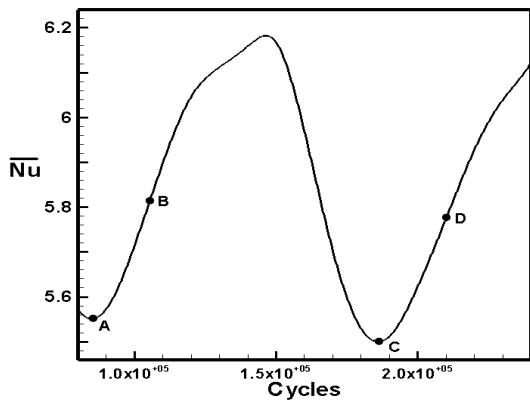
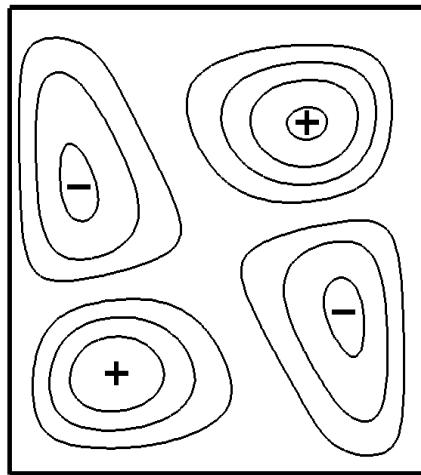
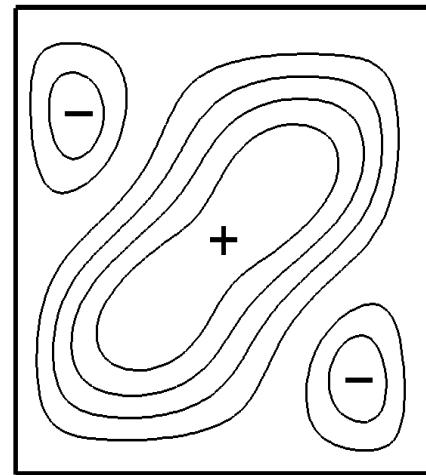


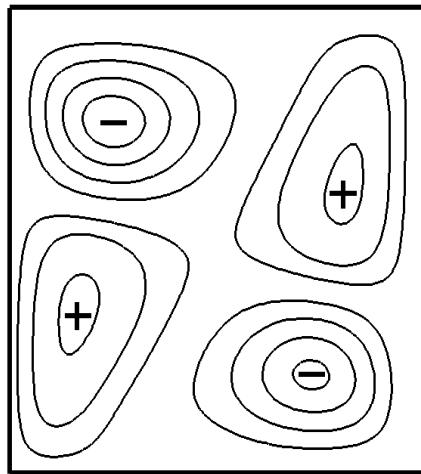
Figure 4.21 Un cycle oscillatoire



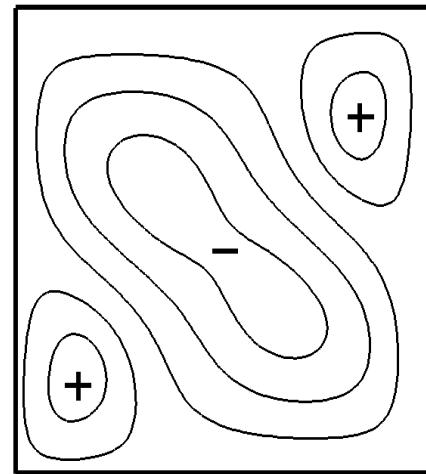
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 4.22 Lignes de courant du processus oscillatoire

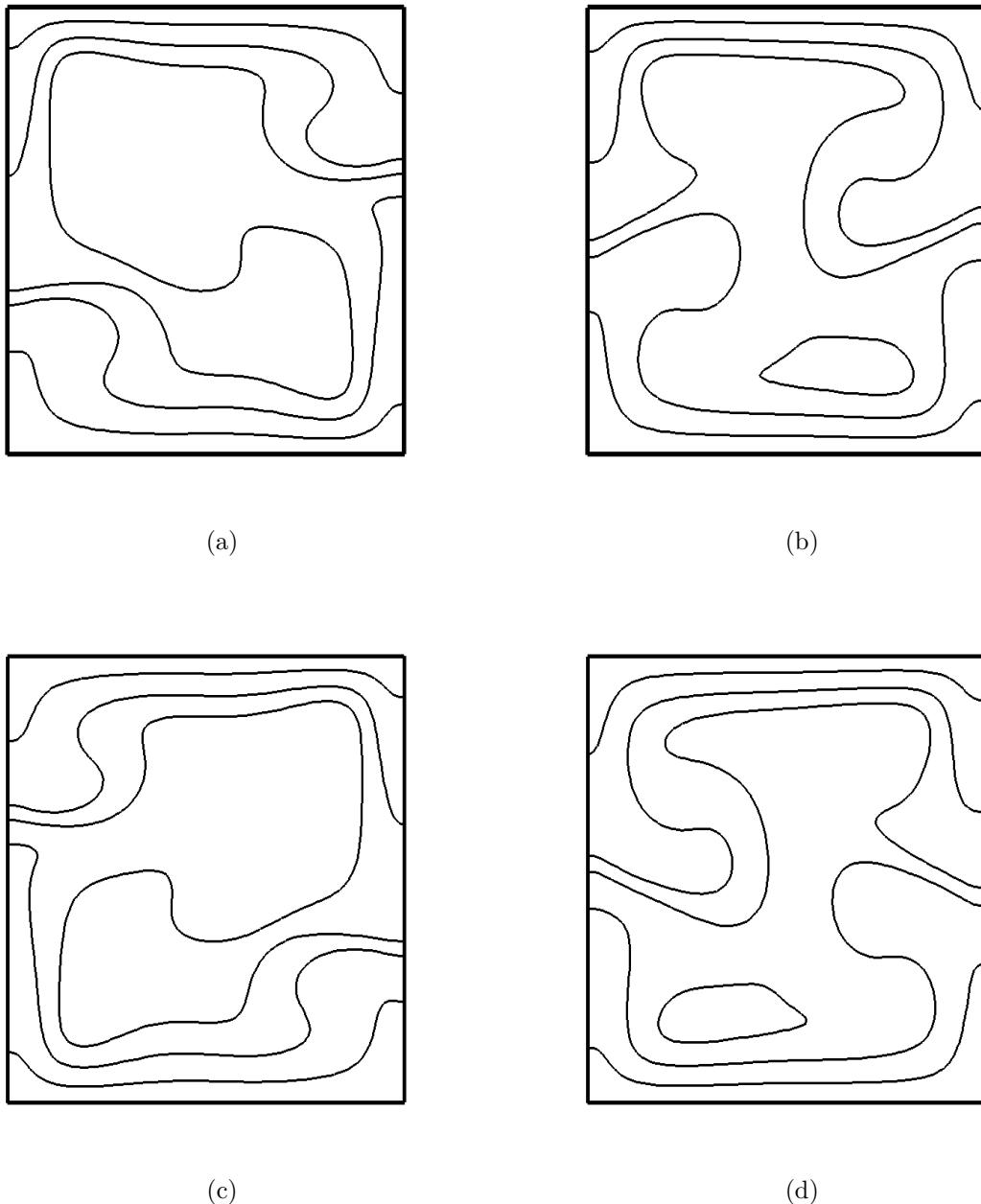


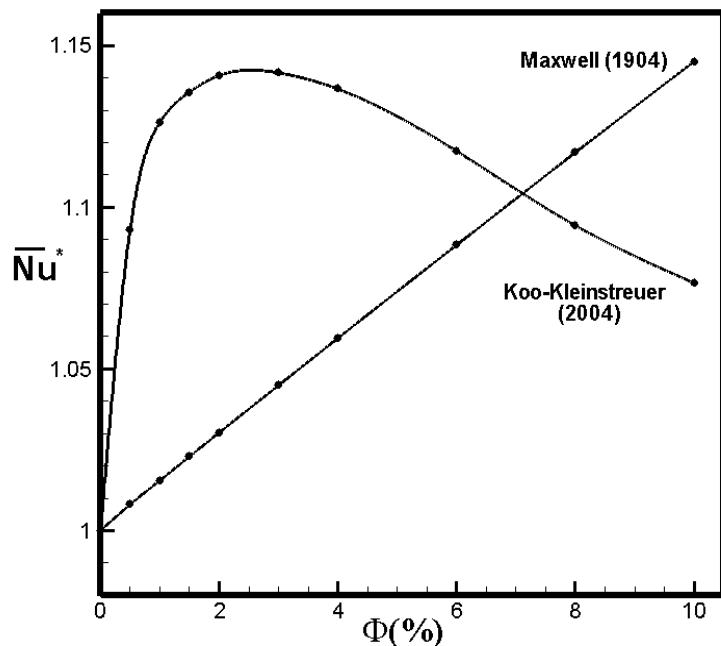
Figure 4.23 Isothermes du processus oscillatoire

4.5.7 Étude de la variation de la concentration

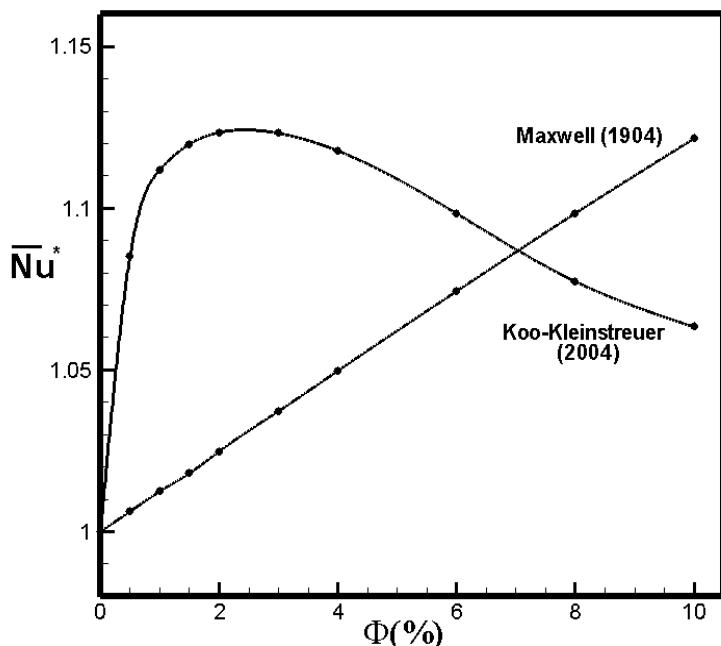
Pour finaliser cette section nous étudierons l'effet d'augmenter la concentration des nanoparticules sur le nombre Nusselt moyen et sur le maximum de la fonction de courant, c.-à-d., nous regarderons l'amélioration du transfert de chaleur au fur et à mesure que

nous augmentons la concentration des nanoparticules. Le nombre de Nusselt moyen et le maximum de la fonction de courant sont normalisés par rapport au Nusselt moyen et par rapport au maximum de la fonction de courant pour l'eau pure ($\Phi = 0$) respectivement. Le nombre de Rayleigh est fixé à $Ra = 1 \times 10^5$. Les concentrations considérée sont : $\Phi = 0.00, 0.01, 0.015, 0.02, 0.025, 0.03, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10$. La conductivité thermique du nano-fluide est calculée par les deux modèles considérés dans cette étude soit le modèle de Maxwell-Garnett et celui de Koo-Kleinstreuer.

En général, avec les résultats de la simulation numérique, on constate que toutes les valeurs sont supérieures à l'unité, de telle sorte qu'il existe une augmentation du transfert de chaleur grâce à l'ajout de nanoparticules par rapport au fluide de base. La Figure 4.24-(a) montre une augmentation linéaire du transfert de chaleur pour le modèle de Maxwell-Garnet dans le cas d'une convection unicellulaire. Ceci est également vrai dans les cas de convection bicellulaire (Figure 4.24-(b)). Une légère amélioration du transfert de chaleur est obtenue dans le cas unicellulaire grâce à une augmentation de l'intensité de l'écoulement. Cependant, une diminution du maximum de la fonction de courant est observée dans le cas où l'écoulement est formé de deux cellules (Figure 4.25) pour le modèle de Maxwell-Garnet. Ce résultat s'explique par le fait que l'ajout des nanoparticules augmente la force de viscosité (Santra *et al.* (2008)), cet effet étant particulièrement important pour les écoulements faibles (pour la convection bicellular dans notre cas). Pour le modèle de Koo-Kleinstreuer le transfert de chaleur passe par une valeur maximum à $\Phi = 0.015$ pour le cas de convection unicellulaire et par une valeur maximum à $\Phi = 0.02$ pour le cas de convection bicellulaire (Figure 4.24). Une amélioration de 14.5% et de 12.5% est observée respectivement pour ces deux cas. À partir de ces valeurs, une diminution du Nusselt moyen normalisé est observée. Pour les lignes de courant, le maximum se trouve à $\Phi = 0.015$ pour les deux cas, l'unicellulaire et le bicellulaire. Après le point maximum, la fonction décroît pour arriver à une valeur au dessous de 1. La Figure 4.25 illustre la fonction du maximum de la fonction de courant normalisée pour les deux modèles de conductivité pour le cas unicellulaire (4.25-(a)) ainsi que pour le cas bicellulaire (4.25-(b)).

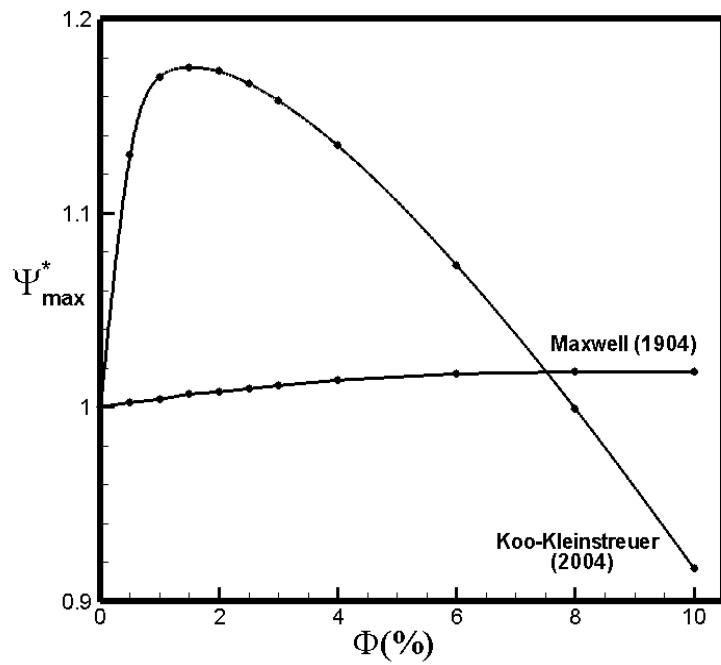


(a)

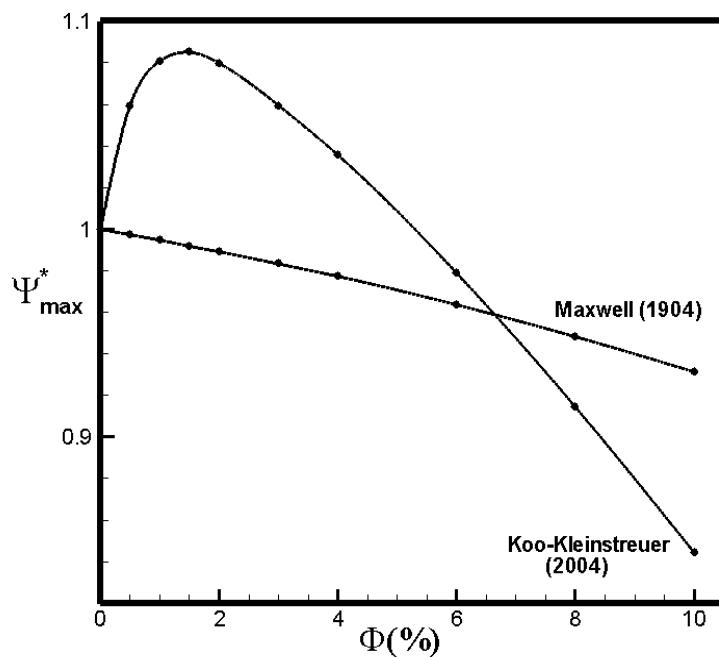


(b)

Figure 4.24 Variation de nombre de Nusselt normalisée par rapport à la concentration des nanoparticules



(a)



(b)

Figure 4.25 Variation de la valeur maximale de la fonction de courant normalisée par rapport à la concentration des nanoparticules

Le Tableau 4.9 présente les valeurs du maximum de la fonction de courant et du nombre de Nusselt pour le modèle de Koo-Kleinstreuer (K) et pour le modèle de Maxwell-Garnett (M) pour le cas d'un écoulement unicellulaire (avec une précision de deux décimales). Le Tableau 4.10 présente les mêmes résultats pour le cas d'un écoulement bicellulaire. Il faut noter que la valeur négative du cas unicellulaire est due au sens de rotation d'écoulement.

$\frac{\Phi}{Ra}$	0%	1%	2%	3%	4%	6%	8%	10%
K Ψ	-24.26	-28.42	-28.46	-28.10	-27.53	-26.04	-24.24	-22.25
M Ψ	-24.26	-24.37	-24.46	-24.53	-24.59	-24.68	-24.71	-24.71
K $\bar{N}u$	3.92	4.41	4.47	4.47	4.45	4.37	4.28	4.22
M $\bar{N}u$	3.92	3.98	4.04	4.09	4.15	4.26	4.37	4.48

Table 4.9 Maximun de la fonction de courants et de nombre de Nusselt pour différentes niveaux de concentrations : (K) Modèle de Koo-Kleinstreuer et (M) Modèle de Maxwell-Garnett. $Ra = 1 \times 10^5$. Écoulement unicellulaire

$\frac{\Phi}{Ra}$	0%	1%	2%	3%	4%	6%	8%	10%
K Ψ	14.38	15.94	15.85	15.58	15.23	14.39	13.45	12.42
M Ψ	14.38	14.30	14.22	14.14	14.05	13.85	13.63	13.39
K $\bar{N}u$	4.07	4.53	4.58	4.58	4.56	4.48	4.39	4.33
M $\bar{N}u$	4.07	4.13	4.18	4.23	4.28	4.38	4.48	4.57

Table 4.10 Maximun de la fonction de courants et de nombre de Nusselt pour différentes niveaux de concentrations : (K) Modèle de Koo-Kleinstreuer et (M) Modèle de Maxwell-Garnett. $Ra = 1 \times 10^5$. Écoulement bicellulaire

4.6 Transfert de chaleur dans une cavité inclinée remplie avec nanofluide.

Ce test porte sur une extension de la cavité carrée que nous avons étudiée à la section 4.5. Nous allons étudier l'effet de l'inclinaison de la cavité sur l'écoulement avec différentes concentrations de nanoparticules. Les résultats dans cette section peuvent être comparés avec ceux obtenus par Ghasemi et Aminossadati (2009). Cependant, il faut remarquer qu'ils ont

utilisé les équations de Navier-Stokes stationnaires, tandis que le modèle de Boltzmann sur réseau est non stationnaire et le type de solution dépend des conditions initiales.

4.6.1 Description du problème.

On considère une cavité carrée qui forme un angle ω avec l'horizontale. La Figure 4.26 illustre les caractéristiques physiques et géométriques. $\bar{T}_H = 1$ et $\bar{T}_C = 0$ indiquent les températures chaudes et froides respectivement. Les côtés droit et gauche sont adiabatiques. La cavité est remplie de nanoparticules de type CuO. La concentration des nanoparticules est $\Phi = 0.02, 0.04, 0.10$. Les propriétés thermophysiques du fluide sont données au Tableau 4.8. L'angle d'inclinaison de la cavité varie selon $\omega = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ afin d'obtenir l'angle qui donne le meilleur transfert de chaleur. Les résultats seront présentés sous la forme de lignes de courant, d'isothermes, et du nombre de Nusselt moyen calculé sur la paroi inférieure.

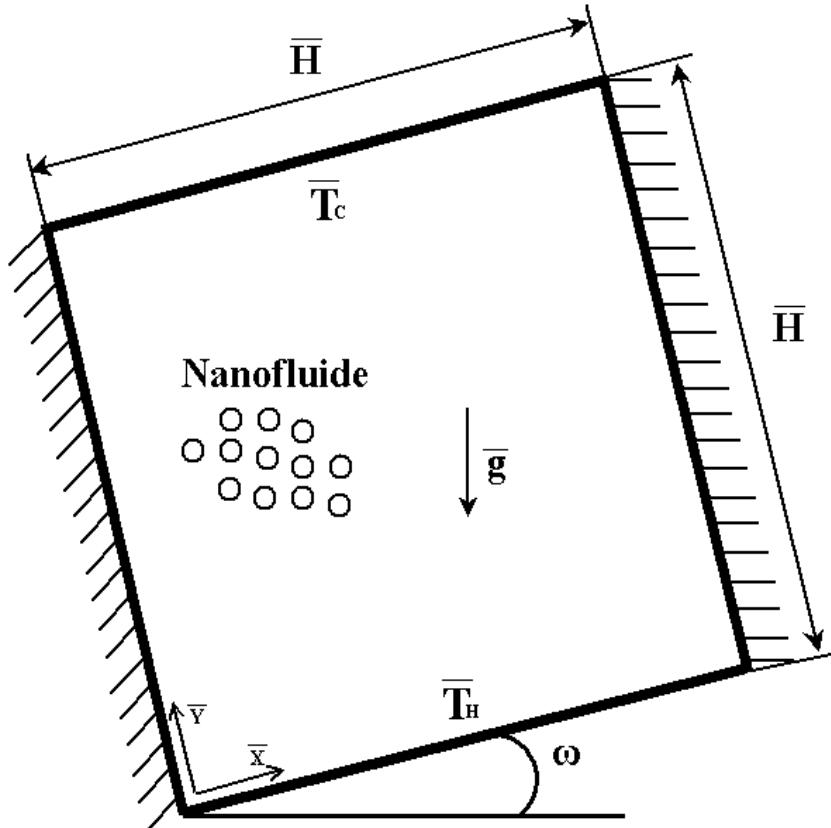


Figure 4.26 Schéma d'une cavité thermique avec température différentielle aux côtés

Pour les simulations, les deux modèles de conductivité thermique utilisée à la section précédente, i.e. : le modèle de Maxwell-Garnett et le modèle Koo et Kleinstreuer, sont pris en considération.

4.6.2 Résultats et discussion.

Un maillage de 81x81 est considéré. Le nombre de Prandtl Pr est fixé à 7 (eau), tandis que le nombre de Rayleigh est de $Ra = 10^3, 10^4, 10^5, 10^6$ et 10^7 .

Tel que remarqué à la section 4.5, pour un angle de $\omega = 0^\circ$ l'écoulement dépend des conditions initiales. Pour cette raison nous allons spécifier quel type de conditions initiales ont été choisi pour chacune des simulations. De façon générale, pour les angles de $30^\circ, 60^\circ$ et 90° et pour les nombres Rayleigh de $Ra = 10^3$, $Ra = 10^4$ et $Ra = 10^5$, si nous partons de l'état de repos ou d'une solution convergée, on arrive à une cellule de convection (qui est déformée à cause de l'inclinaison de la cavité).

Les Figures 4.28-4.34 montrent les lignes de courant et isothermes pour différents angles et pour une concentration de $\Phi = 0.02$. Cette valeur de concentration est le plus représentative pour le modèle de Koo-Kleinstreuer puisque le maximum de transfert de chaleur a lieu pour une concentration d'environ $\Phi = 0.02$.

Ensuite, nous regarderons les résultats numériques plus en détails pour les différents nombres de Rayleigh :

Simulations pour le nombre Rayleigh de $Ra = 10^3$.

Un premier calcul est fait pour un angle de 0° en utilisant l'état de repos comme condition initiale. Nous démarrons les simulations pour un angle de 30° à partir d'une solution convergée pour un angle de 0° . De la même manière, la solution pour l'angle de 30° est utilisée pour effectuer les calculs pour un angle de 60° et ainsi de suite pour un angle de 90° .

Pour l'angle de 0° , le transfert thermique est par conduction. Les isothermes sont des lignes droites et les isovaleurs ont une distribution linéaire $(1 - \bar{T})$ pour l'eau, où $\bar{T} \in [0, 1]$. $\bar{T} = 0$ correspond à la température à la paroi inférieure tandis que $\bar{T} = 1$, est la température à la paroi supérieure. Pour les angles de 30° , 60° et 90° , une cellule de convection se forme

dans le centre de la cavité. Les Figures 4.28 montrent les lignes de courant (*a, c, e*) et les isothermes (*b, d, f*) pour les angles de 30°, 60° et 90°. Le Tableau 4.11 présente les résultats numériques du nombre de Nusselt moyen avec différentes concentrations de nanoparticules.

$\frac{Angle}{\Phi}$		0°	30°	60°	90°
0.00	1.0026	1.0667	1.1310	1.1126	
0.02	1.0622	1.1121	1.1620	1.1569	
	1.2506	1.2796	1.3169	1.3180	
0.04	1.1224	1.1633	1.2071	1.2052	
	1.2634	1.2896	1.3238	1.3255	
0.10	1.3266	1.3453	1.3721	1.3749	
	1.1985	1.2257	1.2604	1.2615	

Table 4.11 Comparaison des modèles de la conductivité thermique de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^3$

Simulations pour le Rayleigh de $Ra = 10^4$

Pour un nombre Rayleigh de $Ra = 10^4$ nous considérons le cas d'un écoulement unicellulaire pour un angle de 0°. Cependant, pour obtenir un tel résultat, il faut bien choisir les conditions initiales. Si nous démarrons le calcul à de l'état de repos nous arriverons à deux cellules de convection. Si nous partons d'un résultat convergé pour le Rayleigh $Ra = 10^3$ la simulation passe pour un point de bifurcation et il n'est pas possible d'arriver à une cellule de convection. Pour arriver à un écoulement unicellulaire, nous sommes partis d'une simulation unicellulaire convergé pour un $Ra = 10^4$ avec un angle de 30°.

Les Figures 4.29 et 4.30 montrent les lignes de courant et isothermes pour les angles de 0°, 30°, 60° et 90°. Le Tableau 4.12 présente les résultats numériques du nombre de Nusselt moyen pour des simulations avec différentes concentrations de nanoparticules.

$\frac{Angle}{\Phi}$	0	30	60	90
0.00	2.2093	2.4851	2.5115	2.2519
0.02	2.2539	2.5342	2.5560	2.2919
	2.4069	2.7239	2.7412	2.4581
0.04	2.2609	2.5788	2.5977	2.3291
	2.3472	2.7027	2.7194	2.4398
0.10	2.2997	2.6787	2.6959	2.4240
	2.2529	2.5851	2.6005	2.3339

Table 4.12 Comparaison des modèles de la conductivité thermique de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^4$

Simulations pour le nombre Rayleigh de $Ra = 10^5$

Pour ce cas, les conditions initiales sont une vitesse et une température nulles à l'intérieur du domaine pour un angle de 0° . À partir de la solution convergé, pour l'angle de 0° , nous effectuons les simulations pour l'angle de 30° et de façon similaire en partant des données d'un angle précédent nous faisons les simulations pour les angles de 60° et 90° .

Pour les conditions initiales choisies, on retrouve deux cellules de convection. Les Figures 4.31 et 4.32 montrent les lignes de courant et isothermes pour les angles de 0° , 30° , 60° et 90° . Le Tableau 4.13 présente les résultats numériques de nombre de Nusselt moyen pour des simulations avec différentes concentrations de nanoparticules.

Simulations pour le nombre Rayleigh de $Ra = 10^6$

Tels comme nous l'avons étudié à la section précédente, à partir d'un nombre de Rayleigh critique entre $Ra = 1.3 \times 10^5$ et $Ra = 1.7 \times 10^5$ apparaissent des oscillations dans l'écoulement pour le cas de eau pure et pour le cas de nanoparticules pour une cavité avec un angle de 0° . De plus, nous avons obtenu des oscillations dans l'écoulement pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$ avec un angle de 30° à différentes concentrations de nanoparticules. Nous avons considéré également d'autres stratégies telles que l'utilisation de conditions initiales d'une

solution convergé à un nombre Rayleigh inférieur, cependant, la même solution oscillatoire a été obtenu. Le Tableau 4.14 montre les valeurs obtenues pour les angles de 60° et 90° . Les Figures 4.33 illustrent les lignes de courant et isothermes pour ces angles.

$\frac{Angle}{\Phi}$	0	30	60	90
0.00	4.0764	4.7007	5.0441	4.6932
0.02	4.1774	4.8190	5.1566	4.7973
	4.5795	5.2903	5.6242	5.2283
0.04	4.2789	4.9363	5.2658	4.8965
	4.5565	5.2656	5.5896	5.1936
0.10	4.5716	5.2772	5.5747	5.1680
	4.3343	4.9904	5.2925	4.9107

Table 4.13 Comparaison des modèles de la conductivité thermique de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^5$

$\frac{Angle}{\Phi}$	0	30	60	90
0.00	—	—	9.2707	8.8534
0.02	—	—	9.5097	9.0882
	—	—	10.5320	10.1022
0.04	—	—	9.7403	9.3107
	—	—	10.4570	10.0230
0.10	—	—	10.3991	9.9409
	—	—	9.7425	9.2875

Table 4.14 Comparaison des modèles thermiques de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$

Simulations pour le nombre Rayleigh de $Ra = 10^7$

Pour le nombre de Rayleigh de $Ra = 10^7$, tel que pour $Ra = 10^6$, la convergence a été possible seulement pour les angles de 60° et 90° . Le Tableau 4.15 montre les valeurs obtenues pour les angles de 60° et 90° . Les Figures 4.34 illustrent pour ces angles les lignes de courant et isothermes. Cependant, l'augmentation de Rayleigh de $Ra = 10^6$ à $Ra = 10^7$ augmente substantiellement l'amplitude des oscillations.

$\frac{Angle}{\Phi}$	0	30	60	90
0.00	—	—	16.2061	15.8250
0.02	—	—	16.6788	16.3174
	—	—	18.9238	18.7080
0.04	—	—	17.1359	16.7804
	—	—	18.7414	18.5077
0.10	—	—	18.4923	18.1535
	—	—	16.9708	16.5389

Table 4.15 Comparaison des modèles thermiques de Maxwell-Garnett et Koo-Kleinstreuer avec une concentration de nanofluide-CuO 0.02 - 0.10 et un nombre de Rayleigh $Ra = 10^7$

Influence de la rotation de la cavité sur le transfert de chaleur

Sur la base des résultats présentés dans les Tableaux 4.11 - 4.15, nous construisons les courbes qui permettent de visualiser l'influence de la rotation de la cavité (voir la Figure 4.27). Nous remarquons une augmentation du transfert de chaleur vers l'angle de 60° . À la Figure 4.27, on regarde les différents types de courbes qui montrent l'augmentation de nombre de Nusselt au fur et à mesure que la cavité tourne. Les calculs ont été faits pour l'eau pure et pour les modèles de Maxwell-Garnett et de Koo - Kleinstreuer, avec différentes concentrations de nanoparticules $\Phi = 0.02$ et $\Phi = 0.04$.

Les Tableaux 4.16 et 4.17 permettent de comparer les résultats obtenus par Ghasemi et Aminossadati (2009) (qui a utilisé la méthode des volumes finis) et les résultats obtenus dans le cadre de ce travail pour le maximum de la fonction de courant pour le cas de l'eau pure (Tableau 4.16) et pour le cas de un nanofluide avec une concentration de $\Phi = 0.04$ (Tableau

4.17). Le nombre de Rayleigh est fixé à $Ra = 10^5$ et l'angle varie de 0° à 30° . L'erreur montrée en chacune des tableaux est l'erreur relative entre les résultats de ce travail et les résultats obtenus par Ghasemi et al.

Angle	0°	30°	60°	90°
Ce travail	14.3773	23.0315	16.8614	10.8593
Ghasemi	14.4390	23.2870	17.1040	11.0770
Erreur	0.42%	1.09%	1.41%	1.96%

Table 4.16 Maximun de la fonction de courant pour l'eau pure

Angle	0°	30°	60°	90°
Ce travail	14.8892	26.1836	20.0555	13.0228
Ghasemi	14.7430	25.4680	19.2410	12.5160
Erreur	0.99%	2.80%	4.23%	4.04%

Table 4.17 Maximun de la fonction de courant avec nanofluide. $\Phi = 0.04$

Pour finaliser cette section, nous pouvons conclure d'après les Tableaux 4.11 - 4.13 qu'il existe une influence de la rotation sur le transfert de chaleur et que le maximum est vers l'angle de 60° . De plus, l'écoulement devient plus stable (i.e., il n'y a pas d'oscillations pour les nombres de Rayleigh élevés) pour les angles de 60° et 90° . De façon approximative, les résultats numériques des Tableaux 4.12 et 4.13 montrent une augmentation de nombre de Nusselt pour l'angle de 60° par rapport à l'angle de 0° . Par exemple, l'augmentation de la valeur de nombre de Nusselt due à la rotation est d'approximativement 20% pour un nombre de Rayleigh de $Ra = 10^5$ et une concentration de $\Phi = 0.02$.

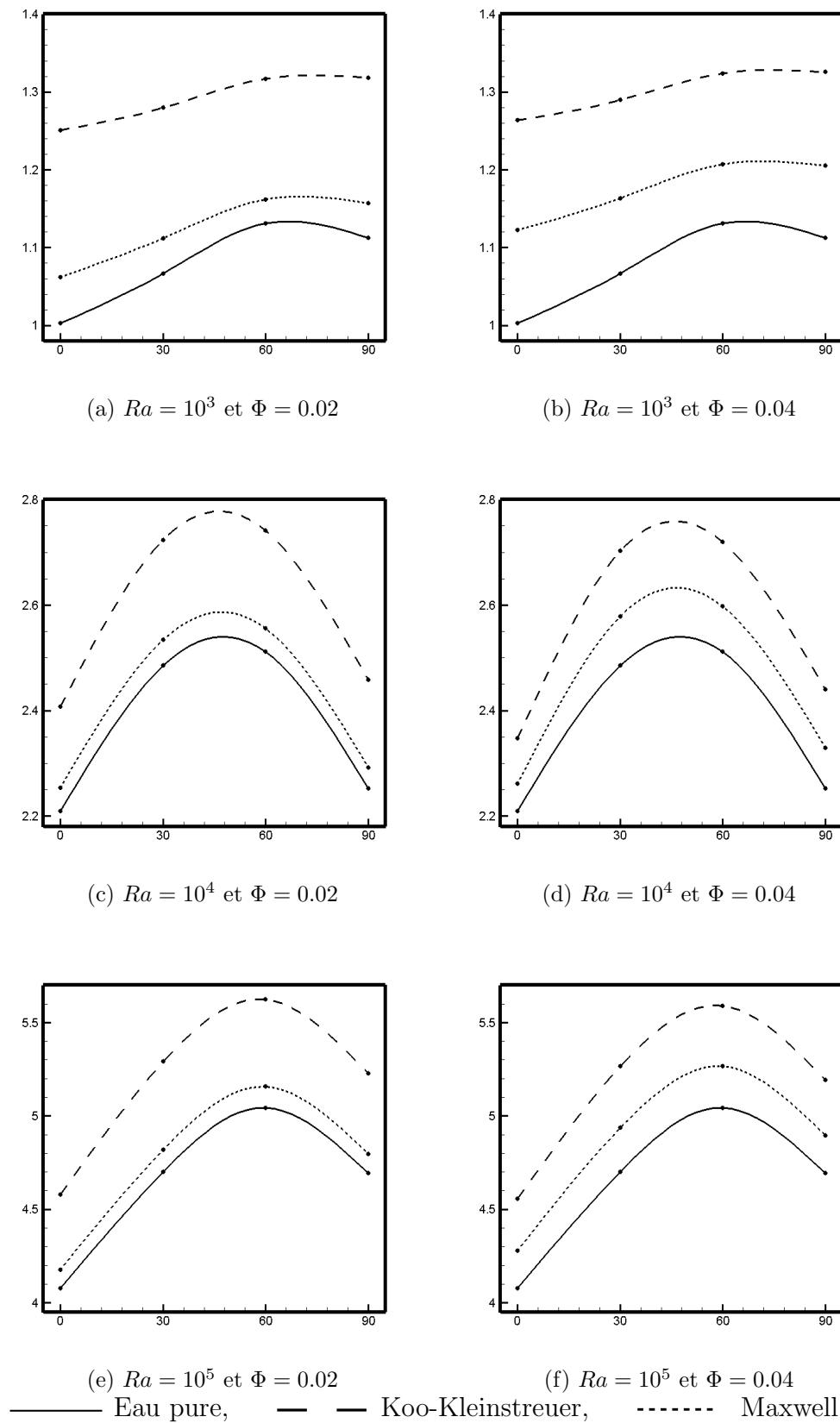
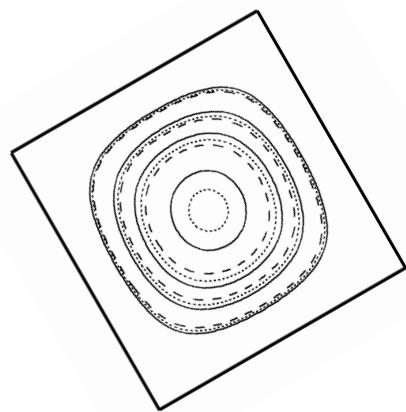
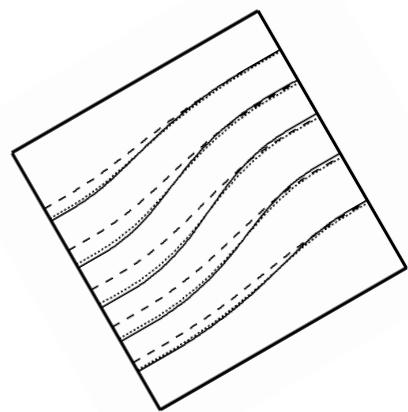
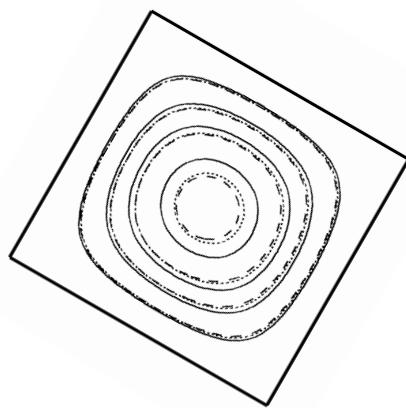
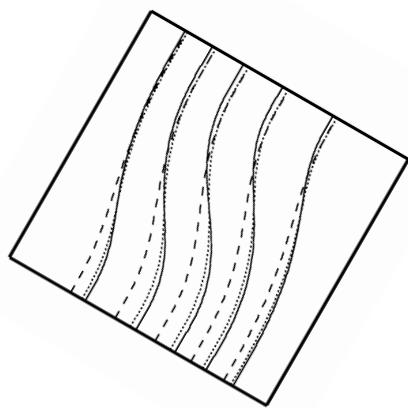
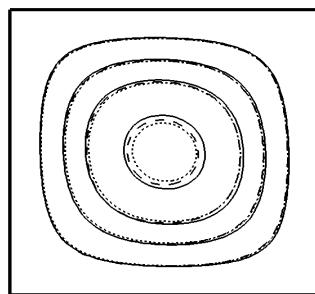
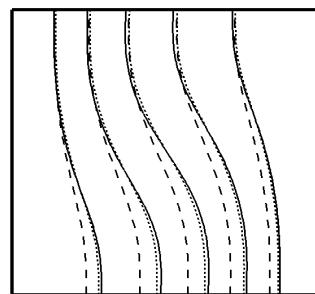


Figure 4.27 Variation de Nusselt Moyen selon la rotation de la cavité.

(a) Angle 30° (b) Angle 30° (c) Angle 60° (d) Angle 60° (e) Angle 90°

— Eau pure, — — Koo-Kleinstreuer, - - - - - Maxwell

(f) Angle 90° Figure 4.28 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^3$

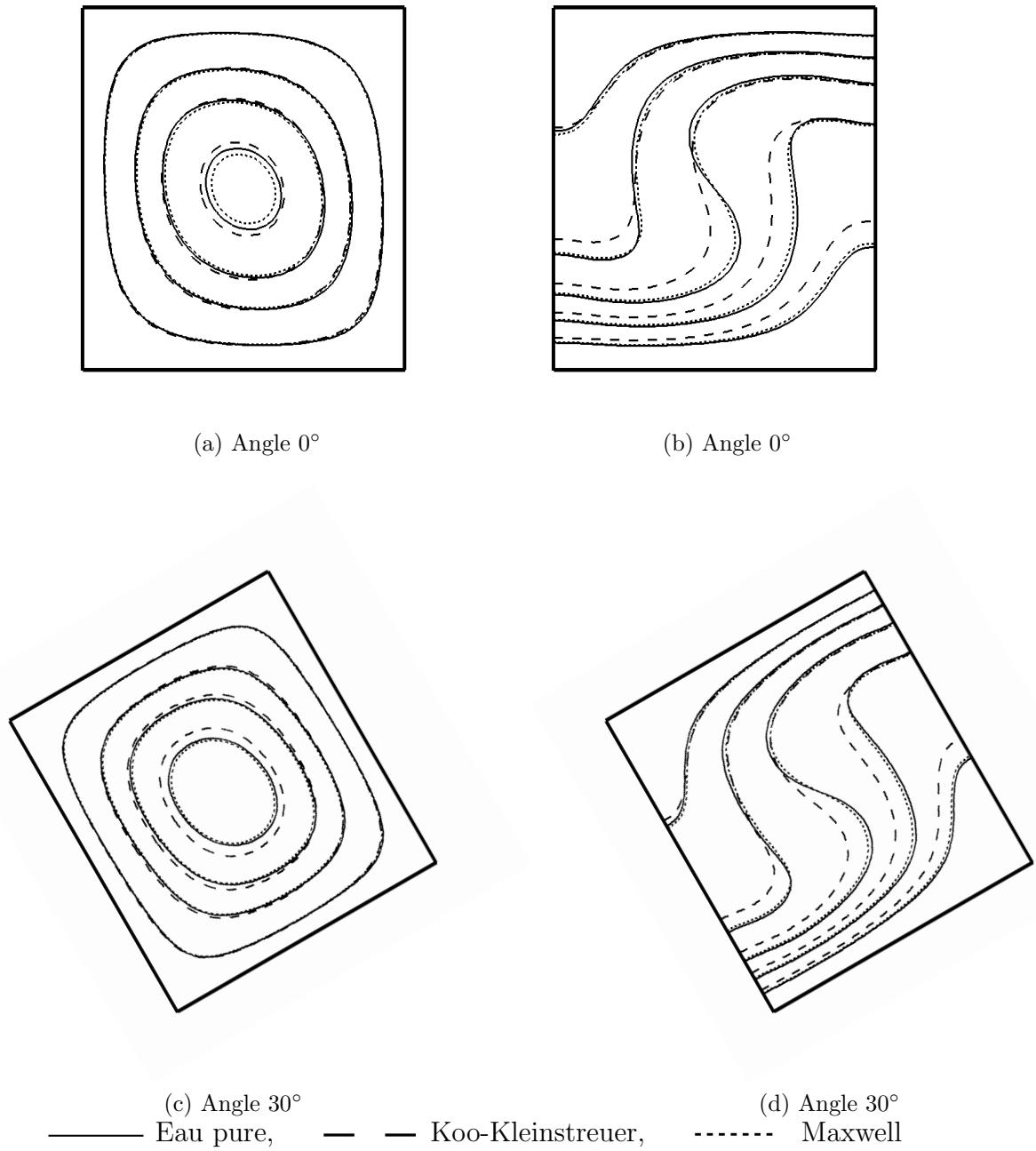


Figure 4.29 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^4$

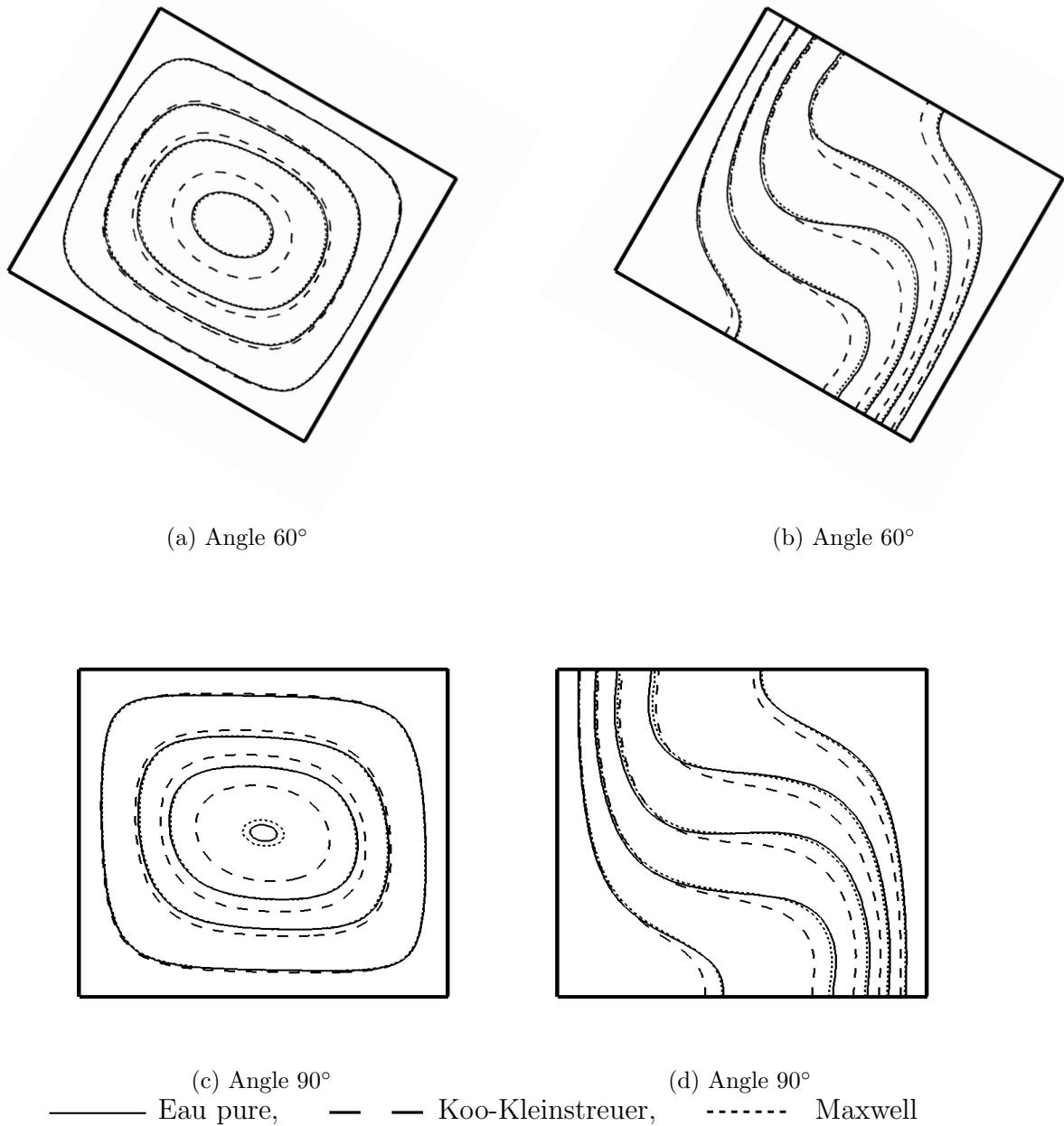
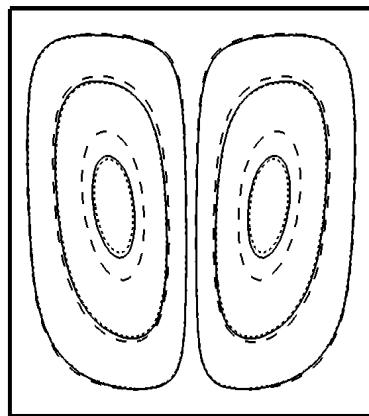
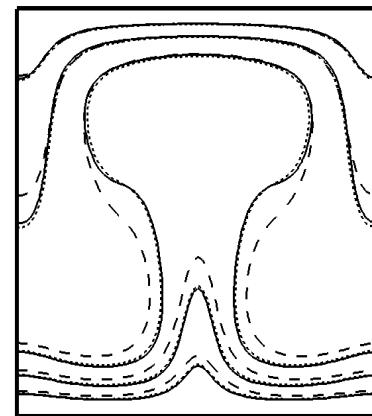


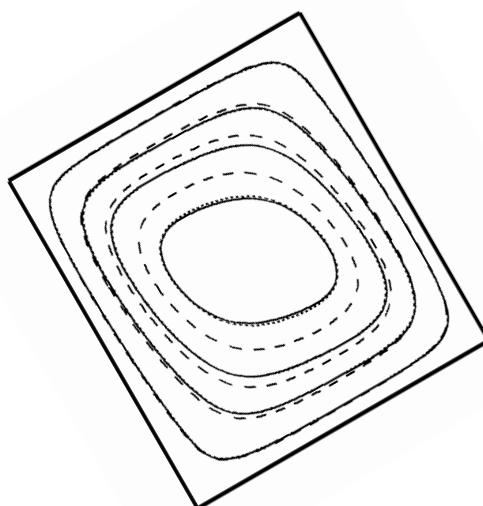
Figure 4.30 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^4$



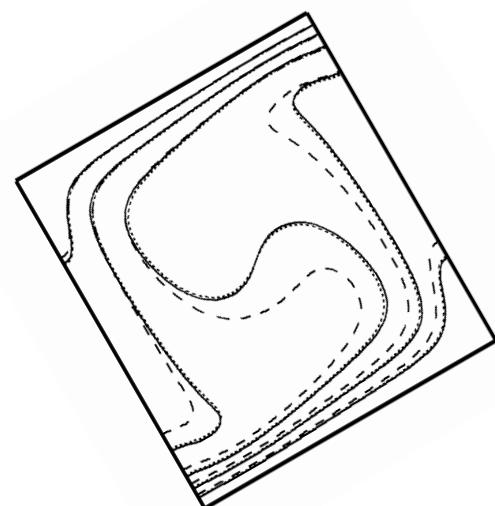
(a) Angle 0°



(b) Angle 0°



(c) Angle 30°
— Eau pure, — — Koo-Kleinstreuer, - - - - Maxwell



(d) Angle 30°
— Eau pure, — — Koo-Kleinstreuer, - - - - Maxwell

Figure 4.31 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^5$

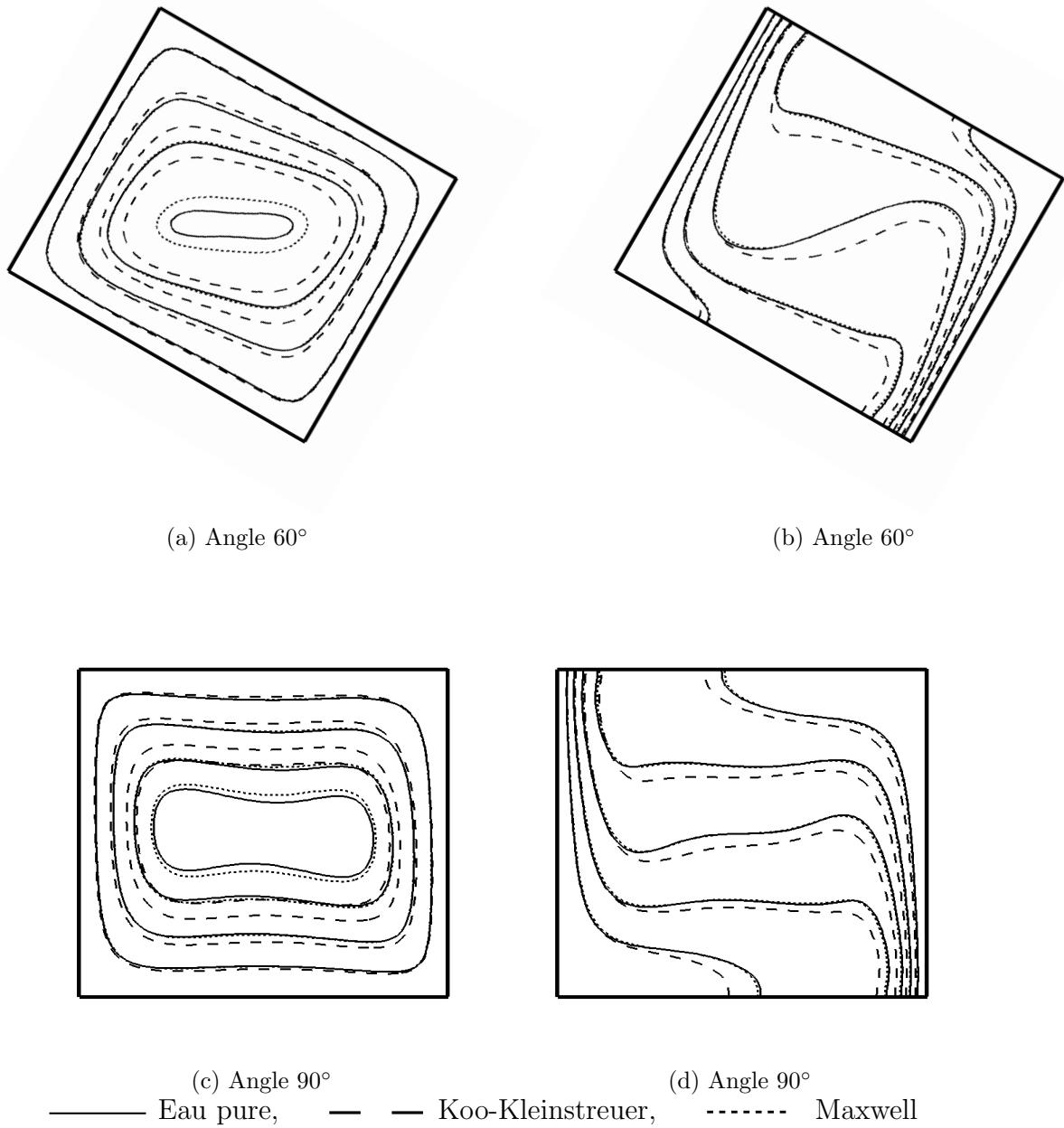


Figure 4.32 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^5$

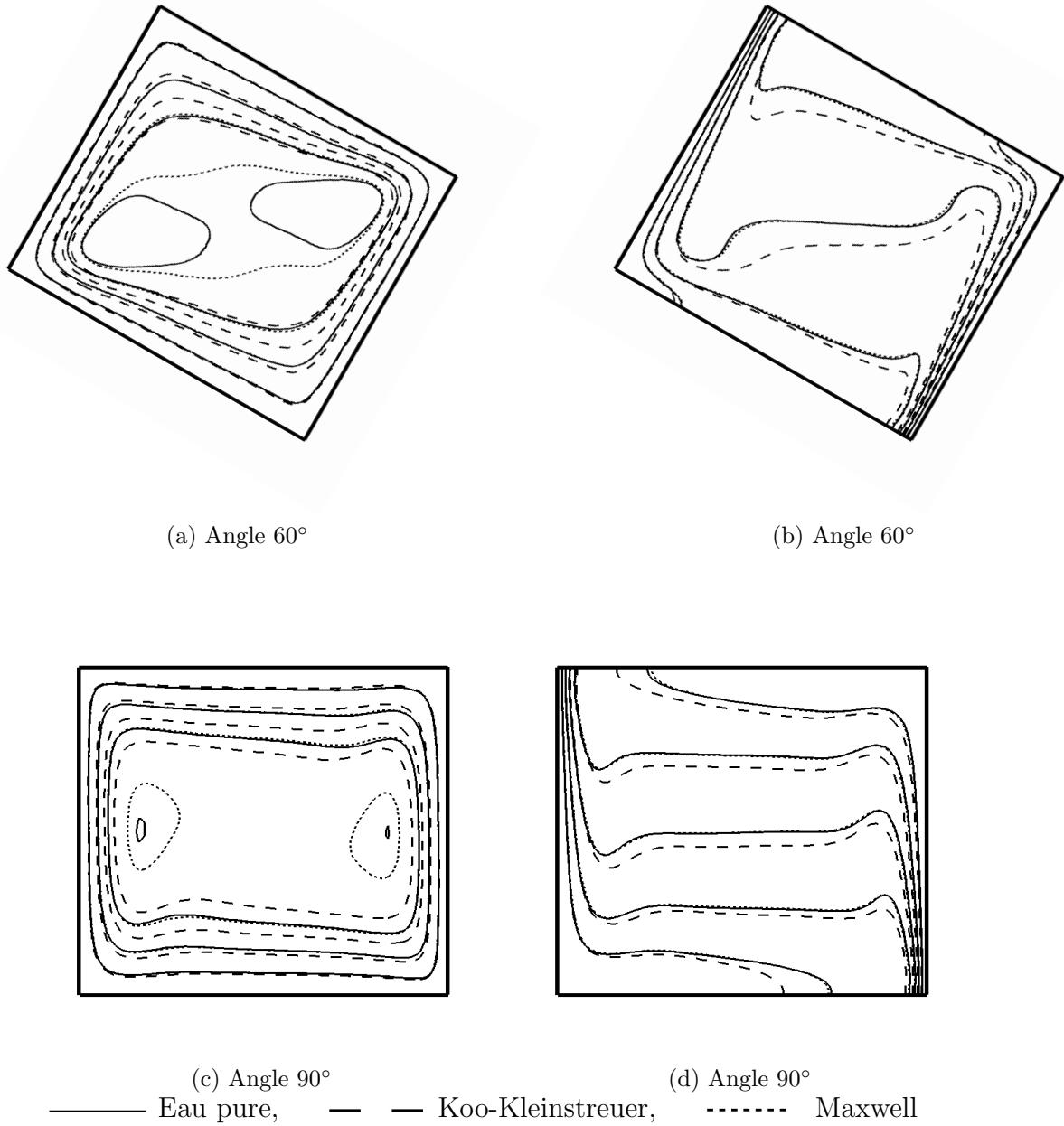


Figure 4.33 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^6$

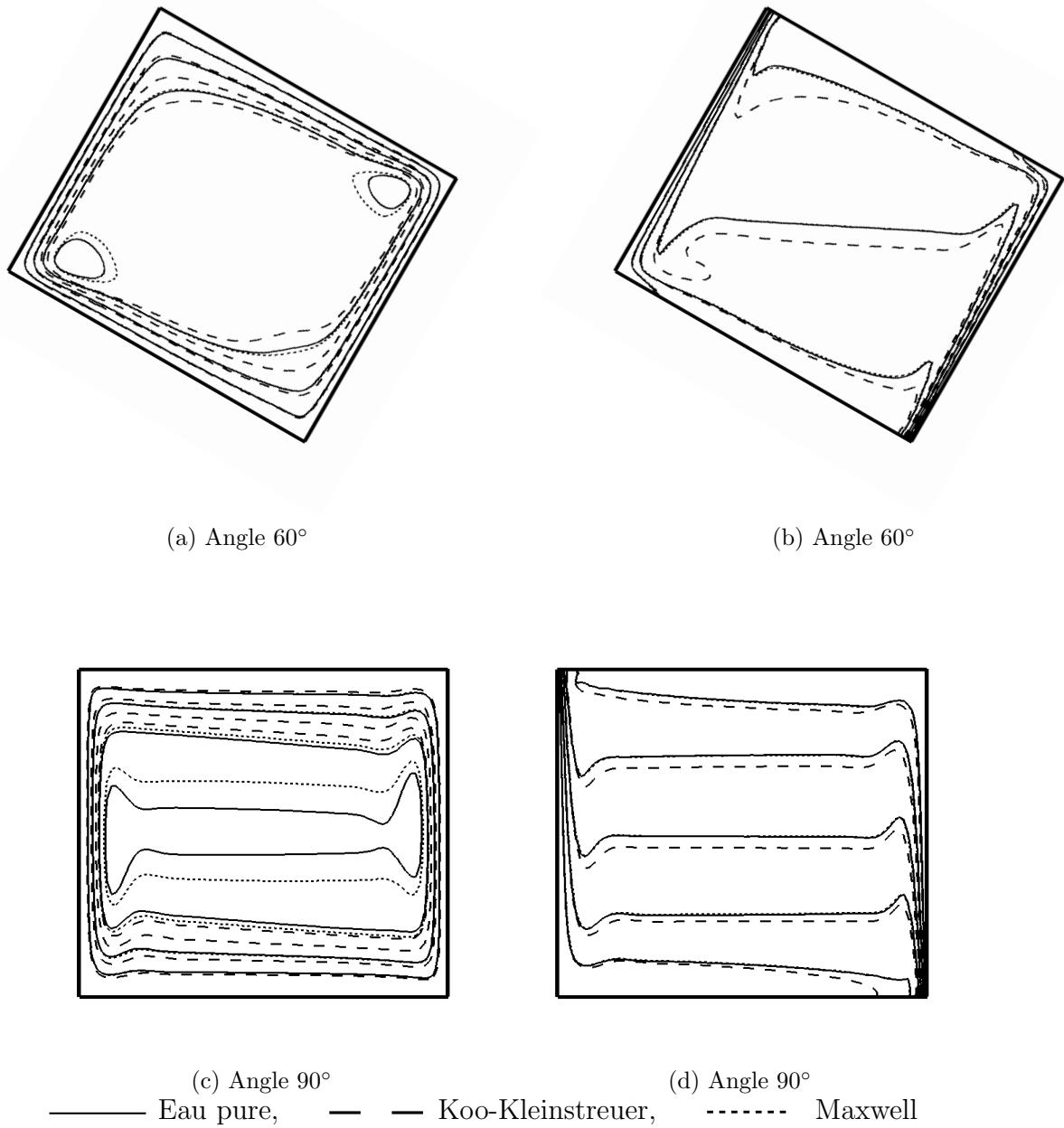


Figure 4.34 Lignes de courants et isothermes pour un nombre de Rayleigh $Ra = 10^7$

CHAPITRE 5

CONCLUSION

Le but de ce mémoire était de développer un algorithme basé sur la méthode de Boltzmann sur réseau qui permet la simulation de problèmes de convection naturelle de nanofluides. Pour le développement du modèle thermique l'hypothèse de Boussinesq a été utilisée et son implémentation a été faite en utilisant une double fonction de distribution. Pour la modélisation du nanofluide, nous avons utilisé le modèle de Brinkman pour la viscosité dynamique et les modèles de Maxwell-Garnett et de Koo-Kleinstreuer pour prédire la conduction thermique de la solution. Les autres paramètres ont été calculés comme une pondération des propriétés du fluide de base et de celles des nanoparticules. Bien que les résultats présentés dans ce mémoire aient été en fait en calcul séquentiel, le programme final en C++ possède les structures pour effectuer les calculs en parallèle. Ceci est du au fait que la méthode de Boltzmann sur réseau est hautement parallélisable. Pour une telle fin, nous avons utilisé la technique OpenMP à mémoire partagé et la technique MPI à mémoire distribué. Dans le cas de MPI nous avons été utilisées la méthodologie de découpage de domaine.

5.1 Synthèse des travaux

Plusieurs simulations ont été conduites avec l'algorithme développé. Tout d'abord, nous avons validé le programme utilisant les résultats classiques proposés par De Vhal Davis pour une cavité chauffée latéralement et pour les résultats obtenus pour une cavité chauffée avec une ailette à l'intérieur du domaine (voir les sections 4.1 et 4.2). Les résultats obtenus pour ces deux types de configurations sont satisfaisants et correspondent bien à ceux disponibles dans la littérature.

Nous avons validé le modèle avec des nanoparticules pour deux cavités allongées : l'une horizontale et l'autre verticale. Des tableaux comparatifs ont été dressés pour confronter nos résultats avec ceux obtenus par d'autres chercheurs. Des écarts de 4% en moyenne ont été obtenus pour la cavité verticale et de 3% en moyenne dans le cas de la cavité horizontale, sur la valeur maximale de la fonction de courant. Cependant, un écart de moins de 1% a été observé pour la valeur du nombre de Nusselt moyen dans les deux cas.

Notre étude principale a porté sur une cavité carrée chauffée sur la paroi inférieure. Dans ce cas, nous avons montré la formation de deux types d'écoulement : unicellulaire et bicellulaire, en fonction des conditions initiales utilisées pour initier les calculs numériques. Nous avons utilisé le modèle de Koo-Klainstreuer et le modèle de Maxwell-Garnett pour déterminer les points de bifurcation. Ces deux modèles ont montré une augmentation du nombre de Rayleigh critique pour les bifurcations de type fourche ainsi que celles de type Hops, par rapport aux valeurs correspondant à l'eau pure. Un accroissement linéaire du transfert de chaleur pour les écoulements unicellulaire et bicellulaire a été prédit par le modèle de Maxwell-Garnett au fur et à mesure que nous augmentons la concentration des nanoparticules. Le modèle de Koo-Klainstreuer indique une augmentation du transfert de chaleur qui atteint un maximum pour une concentration d'environ 2% pour les deux types d'écoulements, unicellulaires et bicellulaires.

Nous avons présenté les lignes de courant et les isothermes pour l'eau et pour deux modèles de convection des nanofluides à différents nombres de Rayleigh. Ceci nous permet de visualiser l'effet des nanoparticules sur la forme des lignes de courant et des isothermes. Les résultats indiquent une augmentation du transfert de chaleur avec l'ajout des nanoparticules. Un régime oscillant, pour un nombre de Rayleigh $Ra = 5 \times 10^5$ a été mis en évidence. Ce dernier est similaire pour l'eau et pour le modèle de Maxwell-Garnett, mais il est différent pour le modèle de Koo-Klainstreuer. Pour ce dernier, les cellules de convection du régime oscillatoire obtenues ont illustré la formation d'une cellule centrale prédominante et deux petites cellules dans les coins de la cavité qui se transforment en quatre cellules et cela de façon répétitive.

Pour le cas d'une cavité incliné, une augmentation du transfert de chaleur est notée comme conséquence de l'inclinaison de la cavité pour l'eau ainsi que pour les modèles de Koo-Klainstreuer et de Maxwell-Garnett (avec une concentration de 2%). Cette augmentation atteint une valeur maximale pour un angle de 60°.

L'implémentation des techniques de parallélisation (Annexe A) a permis d'obtenir une accélération de 2.5 pour la technique OpenMP et de plus de 10.0 fois pour la technique MPI. Une telle différence peut être expliquée parce que la technique OpenMP a été ciblée sur les tâches des cycles répétitives tandis que la technique MPI a utilisé un vrai découpage du domaine de calcul et de mémoire sur les différents noeuds.

5.2 Limitations de la solution proposée

Une première limitation est l'approximation de Boussinesq qui suppose que seule la masse volumique dépend de la température. Telle supposition d'une part simplifie le problème, mais d'autre part ne prend pas en compte l'effet de la température sur les autres paramètres de la solution.

En ce qui concerne les nanofluides les propriétés ont été approximées pour certains types de nanoparticules, pour un certain intervalle de la concentration des nanoparticules, ou pour un certain intervalle de température, etc. Par exemple, le modèle de Koo et Kleinstreuer (2004), que nous avons utilisé (voir Éq. 2.90) pour les simulations de la cavité chauffée à la paroi inférieure, utilise une fonction \tilde{F} (voir Éq. 4.8) qui a été obtenue par Das *et al.* (2003) pour les nanoparticules de CuO et de Al_2O_3 , et pour certains intervalles de concentration des nanoparticules. Plus encore, le modèle de Koo et Kleinstreuer est valide seulement pour un intervalle de température $300 < T < 325$ Kelvins.

5.3 Améliorations futures

Une première perspective pour des améliorations futures est de passer à l'implémentation du modèle convectif en 3D. Pour cette raison, nous avons modifié le code pour qu'il passe du cas séquentiel au cas parallèle. La méthode du passage des données a permis une accélération de 10 fois par rapport au code séquentiel. De tels résultats nous montrent la voie pour passer aux simulations plus lourdes requises en 3D.

L'analyse du transfert de chaleur peut être continuée en utilisant d'autres modèles pour les paramètres du modèle thermique. Nous avons décrit certains modèles basés sur le mouvement brownien et d'autres modèles basés en grappes. Il sera intéressant d'étudier l'impact de ces modèles sur le transfert thermique, mais il faudra de comparaisons avec de données expérimentales pour trouver le meilleur.

Une autre voie est de simuler les nanofluides comme un fluide multi-composant. En d'autres mots, au lieu de considérer un seul milieu continu ayant de nouvelles propriétés et dans lesquels les particules sont dissoutes, on considère le fluide de base et les particules solides comme des éléments séparés.

RÉFÉRENCES

- ALAMIRI, A., KHANAFER, K. et POP, I. (2009). Buoyancy-induced flow and heat transfer in a partially divided square enclosure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 52, pp. 3818–3828.
- ALEXANDER, F., CHEN, S. et STERLING, J. (1993). Lattice Boltzmann Thermohydrodynamics. *Physical Review E*, vol. 47, pp. 2249–2252.
- ALLOUI, Z., VASSEUR, P. et REGGIO, M. (2010). Analytical and Numerical study of buoyancy-driven convection in a vertical enclosure filled with nanofluids. *Under press*.
- ALLOUI, Z., VASSEUR, P. et REGGIO, M. (2011). Natural convection of nanofluids in a shallow cavity heated from below. *Int. J. Thermal Sciences*.
- BARAKOS, G., MITSOULIS, E. et ASSIMACOPOULOS, D. (1994). Natural convection flow in a square cavity revisited : laminar and turbulent models with wall functions. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 18, pp. 695–719.
- BATCHELOR, G. (1997). The effect of Brownian motion on the bulk stress in a suspension of spherical particles. *J. Fluid Mech.*, vol. 83, pp. 97–117.
- BHATNAGAR, P., GROSS, E. et KROOK, M. (1954). A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, vol. 94, pp. 511–525.
- BRINKMAN, H. (1952). The viscosity of concentrated suspensions and solution. *J. Chem. Phys.*, vol. 20, pp. 571–581.
- BRUGGEMAN, D. (1935). The Calculation of Various Physical Constants of Heterogeneous Substances. I. The Dielectric Constants and Conductivities of Mixtures Composed of Isotropic Substances. *Ann. Phys.*, vol. 416, pp. 636–664.
- BUICK, J. (2006). Lattice Boltzmann methods in interfacial wave modelling. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 49, pp. 97–107.
- BUICK, J. et GREATED, C. (1999). Gravity in a lattice Boltzmann model. *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 61, pp. 5307–5320.
- CHAPMAN, B., JOST, G. et VAN DER PAS, R. (2008). *Using OpenMP. Portable Shared Memory Parallel Programming*. The MIT Press.
- CHAPMAN, S. et COWLING, T. (1970). *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press.

- CHEN, H., WITHARANA, S., JIN, Y., KIM, C. et DING, Y. (2009). Predicting Thermal Conductivity of Liquid Suspensions of Nanoparticles (Nanofluids) Based on Rheology. *Particuology*, vol. 7, pp. 151–157.
- CHEN, Y., OHASHI, H. et AKIYAMA, M. (1994). Thermal Lattice Bhatnagar-Gross-Krook Model Without Nonlinear Deviations In Macrodynamic equations. *Physical Review E*, vol. 50, pp. 2776–2783.
- CHOI, S. (1995). Enhancing Thermal Conductivity of Fluids with Nanoparticles. *Developments and Applications of Non-Newtonian Flows, D. A. Siginer, and H. P. Wang, eds., The American Society of Mechanical Engineers, New York*, vol. 231, pp. 99–105.
- CHOI, S. et JANG, S. (2004). Role of Brownian Motion in the Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 84, pp. 4316–4318.
- DAS, S., PUTRA, N., THIESEN, P. et ROETZEL, W. (2003). Temperature Dependence of Thermal Conductivity Enhancement for Nanofluids. *J. Heat Transfer*, vol. 125, pp. 567–574.
- DE VAHL DAVIS, G. (1983). Natural convection of air in a square cavity : a benchmark numerical solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 3, pp. 249–264.
- DOCUMENTATION PROJECT, L. (2010).
- DONG, Y., SAGAUT, P. et MARIE, S. (2008). Inertial consistent subgrid model for large-eddy simulation based on the lattice Boltzmann method. *Physics of Fluids*, vol. 20, pp. 3–51.
- D'ORAZIO, A., CORCIONE, M. et CELATA, G. (2004). Application to natural convection enclosed flows of a lattice Boltzmann BGK model coupled with a general purpose thermal boundary condition. *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 43, pp. 575–586.
- DREW, D. et PASSMAN, S. (1999). *Theory of Multicomponent Fluids*. Springer Verlag.
- EASTMAN, J., CHOI, S., LI, S., YU, W. et THOMPSON, L. (2001). Anomalously Increased Effective Thermal Conductivities of Ethylene Glycol-Based Nanofluids Containing Copper Nanoparticles. *Appl. Phys. Lett.*, vol. 78, pp. 718–720.
- EGGELS, J. et SOMERS, J. (1995). Numerical Simulations Of Free Convective Flow Using The Lattice Boltzmann Scheme. *International Journal of Heat and Fluid Flows*, vol. 16, pp. 357–364.
- EINSTEIN, A. (1906). Eine neue Bestimmung der Moleküldimensionen. *Annalen der Physik*, vol. 19, pp. 289–306.
- EINSTEIN, A. (1956). *Investigation on the Theory of Brownian Movement*. Dover, New York.

- ESCOBAR, R., GHAI, S., JHON, M. et AMON, C. (1997). *Multi-length and time scale thermal transport using the lattice boltzmann method with application to electronics cooling.* *International Journal of Heat and Mass Transfer.* Thèse de doctorat, The University of Edinburgh.
- EVANS, W., PRASHER, R., FISH, J., MEAKIN, P., PHELAN, P. et KEBLINSKI, P. (2008). Effect of Aggregation and Interfacial Thermal Resistance on Thermal Conductivity of Nanocomposites and Colloidal Nanofluids. *Int. J. Heat Mass Tran.*, vol. 51, pp. 1431–1438.
- FILIPPOVA, O. et HANEL, D. (2000). A Novel Lattice BGK Approach For Low Mach Number Combustion. *Journal of Computational Physics*, vol. 158, pp. 139–160.
- FRANKEL, N. et ACRIVOS, A. (1967). On the viscosity of a concentrate suspension of solid spheres. *Chem. Engrg. Sci.*, vol. 22, pp. 847–853.
- GHASEMI, B. et AMINOUSSADATI, S. (2009). Natural Convection Heat Transfer in an inclined enclosure with a Water-CuO Nanofluid. *Numerical Heat Transfer*, vol. 55, pp. 807–823.
- GRAHAM, A. (1981). On the viscosity of suspensions of solid spheres. *Appl. Sci. Res.*, vol. 37, pp. 275–286.
- GUIET, J. (2009). *Développement d'un algorithme de simulation en dynamique des fluides basé sur la méthode de Boltzmann sur réseau.* Mémoire de maîtrise, Université de Montréal.
- GUO, Z., ZHENG, C. et SHI, B. (2000). An extrapolation method for pressure and velocity boundary conditions in lattice Boltzmann method. *Proceedings of the International Conference on Applied Computational Fluid Dynamics*, pp. 2198–202.
- GUO, Z., ZHENG, C. et SHI, B. (2002a). A coupled lattice BGK model for the Boussinesq equations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, pp. 325–342.
- GUO, Z., ZHENG, C. et SHI, B. (2002b). An extrapolation method for boundary conditions in lattice Boltzmann method . *Phys. Rev. E*, vol. 14, pp. 2007–2010.
- GUO, Z., ZHENG, C. et SHI, B. (2002c). Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann Method. *Phys. Rev. E.*, pp. 1–6.
- HAMILTON, R. et CROSSEY, O. (1962). Thermal Conductivity of Heterogeneous Two-Component Systems. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, vol. 1, pp. 187–191.
- HE, X., CHEN, X. et DOOLEN, G. (1998). A Novel Thermal Model For The Lattice Boltzmann Method In Incompressible Limit. *Journal of Computational Physics*, vol. 146, pp. 282–300.

- HE, Y., JIN, Y., CHEN, H., DING, Y., CANG, D. et LU, H. (2007). Heat Transfer and Flow Behaviour of Aqueous Suspensions of TiO_2 . Nanoparticles (Nanofluids) Flowing Upward through a Vertical Pipe. *Int. J. Heat Mass Tran*, vol. 50, pp. 2272–2281.
- INAMURO, T. et YOSHINA, M. OGINO, F. (1995). A non-slip boundary condition for lattice Boltzmann simulations. *Phys. Fluids*, vol. 7, pp. 2928–2930.
- KEBLINSKI, P. et PRASHER, R. (2008). Thermal Conductance of Nanofluids : Is the Controversy Over ? *J. Nanopart. Res.*, vol. 10, pp. 1089–1097.
- KOO, J. et KLEINSTREUER, C. (2004). A New Thermal Conductivity Model for Nanofluids. *J. Nanopart. Res.*, vol. 6, pp. 577–588.
- KUZNIK, F. et RUSAOUEN, G. (2007). Numerical Prediction of Natural Convection Occurring in Building Components : a double-population using Lattice Boltzmann Method. *Proceedings : Building Simulation 2007*, vol. 52, pp. 315–335.
- LALLEMAND, P. et LUO, S. (2003). Hybrid Finit-Difference Thermal Lattice Boltzmann Equation. *Journal of Computational Physics*, vol. 17, pp. 41–47.
- LATT, J. (2007). *Hydrodynamic limit of lattice Boltzmann equations*. Thèse de doctorat, Univ. Genève.
- LATT, J. (2008). Choice of units in lattice Boltzmann simulations. *LBMETHOD.org documentation project*.
- LATT, J. et CHOPARD, B. (2006). Lattice boltzmann method with regularized non-equilibrium distribution functions. *Math. Comp. Sim.*, vol. 72, pp. 165–168.
- LI, Q. et XUAN, Y. (2000). Experimental Investigation on Transport Properties of Nanofluids”. *Heat Transfer Science and Technology 2000*, pp. 757–762.
- LUNDGREN, T. (1972). Slow flow through stationary random beds and suspensions of spheres. *J. Fluid Mech.*, vol. 51, pp. 273–299.
- MAIGA, S., NGUYEN, C., GALANIS, N. et ROY, G. (2004). Heat Transfer enhancement in forced convention laminar tube flow by using nanofluid. *Proceeding of International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer III*, 24.
- MASUDA, H., EBATA, A., TERAMAE, K. et HISHINUMA, N. (1993). Alteration of Thermal Conductivity and Viscosity of Liquid by Dispersing Ultra-Fine Particles (Dispersion of $\gamma - Al_2O_3$, SiO_2 , and TiO_2 Ultra-Fine Particles) . *Netsu Bussei*, vol. 4, pp. 227–233.
- MAXWELL, J. (1873). *A Treatise on Electricity and Magnetism*. Clarendon Press, Oxford.
- MAZZOCCHI, F., ARRIGHETTI, C., BELLA, G., SPAGNOLI, L. et SUCCI, S. (2000). Multiscale lattice Boltzmann schemes. *International Journal of Modern Physics C*, vol. 11, pp. 233–245.

- MOHAMAD, A. et KUZMIN, A. (2010). A critical evaluation of force term in lattice Boltzmann method, natural convection problem. *International journal of Heat and Mass transfer*, vol. 53, pp. 990–996.
- NAN, C., SHI, Z. et LIN, Y. (2003). A Simple Model for Thermal Conductivity of Carbon Nanotube-Based Composites. *Chem. Phys. Lett.*, vol. 375, pp. 666–669.
- NGO, C. et NGO, H. (2001). *Physique statistique, introduction*. Dunod, 2-me Edition.
- NGUYEN, C., DESGRANGES, F., GALANIS, N., ROY, G., MARÉ, T., BOUCHER, S. et ANGUE, H. (2008). Viscosity data for Al_2O_3 –water nanofluid—hysteresis : is heat transfer enhancement using nanofluids reliable. *International Journal of Thermal Sciences* , vol. 47, pp. 103–111.
- OZERINC, S. (2010). *Heat Transfert enhancement with nanofluids*. Mémoire de maîtrise, Middle east technical university.
- OZERINC, S., KAKAS, S. et YAZCIOGLO, C. (2010). Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids : A State-of-the-Art Review. *Microfluid. Nanofluid.*, vol. 8, pp. 145–170.
- PAK, B. et CHO, Y. (1998). Hydrodynamic and heat transfer study of dispersed fluids with submicron metallic oxide particle. *Exp. Heat Transfer*, vol. 1, pp. 151–170.
- PAVLO, P., VAHALA, G. et VAHALA, L. (1998). Higher Order Isotropic Velocity Grids In Lattice Methods. *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 3960–3963.
- PLATTEN, J. K. et LEGROS, J. C. (1984). *Convection in Liquids*. Springer, Berlin.
- PRASHER, R., PHELAN, P. et BHATTACHARYA, P. (2006). Effect of Aggregation Kinetics on the Thermal Conductivity of Nanoscale Colloidal Solutions (Nanofluid). *Nano Lett.*, vol. 6, pp. 1529–1534.
- SANTRA, A., SEN, S. et CHAKRABORTY, N. (2008). Study of heat transfer augmentation in a differentially heated square cavity cavity using copper–water nanofluid. *Int. J. of thermal science*, vol. 47, 1113–1122.
- SCHWARTZ, L., GARBOCZI, E. et BENTZ, D. (1995). Interfacial Transport in Porous Media : Application to DC Electrical Conductivity of Mortars. *J. Appl. Phys.*, vol. 78, pp. 5898–5908.
- SHANG, X. (1997). Simulation of Rayleigh-Bernard Convection Using A Lattice Boltzmann Method. *Physical Review E*, vol. 16, pp. 2780–2788.
- SUCCI, S. (2001). *The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond*. Oxford University Press.
- SUKOP, M. et THORNE, D. (2005). *Lattice Boltzmann Modeling : An introduction for geoscientist and engineers*. Springer, Berlin.

- THUREY, N. (2003). *A single-phase free-surface lattice boltzmann method*. Mémoire de maîtrise, IMMD10 University of Erlangen-Nuremberg.
- WANG, B., ZHOU, L. et PENG, L. (2003). A Fractal Model for Predicting the Effective Thermal Conductivity of Liquid with Suspension of Nanoparticles. *Int. J. Heat Mass Tran.*, vol. 46, pp. 2665–2672.
- WIKIPEDIA (2011a). Message passing interface. http://fr.wikipedia.org/wiki/Message_Passing_Interface.
- WIKIPEDIA (2011b). 'openmp. <http://fr.wikipedia.org/wiki/OpenMP>.
- WIKIPEDIA (2011c). Parallel computing. [http://fr.wikipedia.org/wiki/Parall%C3%A9lisme_\(informatique\)](http://fr.wikipedia.org/wiki/Parall%C3%A9lisme_(informatique)).
- WOLF-GLADROW, D. (2000). *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models : an introduction*. Springer Berlin.
- XIE, H., FUJII, M. et ZHANG, X. (2005). Effect of Interfacial Nanolayer on the Effective Thermal Conductivity of Nanoparticle-Fluid Mixture. *Int. J. Heat Mass Tran.*, vol. 48, pp. 2926–2932.
- XUAN, Y., LI, Q. et W., H. (2003). Aggregation Structure and Thermal Conductivity of Nanoparticle-Fluid Mixture on the Base Fluid. *J. Mater. Sci. Lett.*, vol. 21, pp. 1469–1471.
- XUE, Q. et XU, W. (2005). A Model of Thermal Conductivity of Nanofluids with Interfacial Shells. *Mater. Chem. Phys.*, vol. 90, pp. 298–301.
- YU, H., GIRIMAJI, S. et LUO, S. (2005). DNS and LES of decaying isotropic turbulence with and without frame rotation using lattice Boltzmann method. *International Journal of Modern Physics C*, vol. 209, pp. 599–616.
- YU, W. et CHOI, S. (2003). The Role of Interfacial Layers in the Enhanced Thermal Conductivity of Nanofluids : A Renovated Maxwell Model. *J. Nanopart. Res.*, vol. 5, pp. 167–171.
- ZHANG, Y., GU, X., BARBER, R. et EMERSON, D. (2008). Micro/nanoscale heat transfer international conference.
- ZOU, Q. et HE, X. (1997). On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK mode. *Phys. Fluids*, vol. 9, pp. 1592–1598.

ANNEXE A

Les méthodes Paralleles

Une brève introduction au Parallelisme

En informatique, le parallélisme consiste à implémenter des algorithmes permettant de traiter l'information de manière simultanée. Le but de ces techniques est d'effectuer le plus grand nombre d'opérations dans le plus petit temps possible. Pour ce faire, les opérations doivent être faites en parallèle. La tâche à effectuer est décomposée en sous-tâches qui sont exécutées en même temps (Wikipedia, 2011c).

Une variable qui mesure les caractéristiques de performance au fur et à mesure qu'on ajoute de processeurs est l'accélération $A(n)$:

$$A(n) = \frac{n}{1 + (n - 1)f} \quad (\text{A.1})$$

où n est le nombre de processeur et f la raison entre le temps employé par n processeur et le temps employé par un seul processeur ($\frac{t_n}{t_1}$). Il faut observer qu'à la limite : $\lim_{n \rightarrow \infty} A(n) = \frac{1}{f}$.

De façon idéale, l'accélération due à la parallélisation devrait être linéaire, i.e., en doublant le nombre d'unités de calcul on devrait réduire à la moitié le temps d'exécution. Malheureusement, très peu de programmes peuvent prétendre à de telles performances. Dans les années 1960, Gene Amdahl a formulé une loi empirique, la loi d'Amdahl. La loi d'Amdahl affirme que la partie du programme qui ne peut pas être parallélisée limite la vitesse globale du programme. Cette loi prévoit qu'une fois optimisée, il existe au sein du programme une relation entre le code parallélisé et la vitesse globale d'exécution du programme. Par exemple, si un programme peut être parallélisé à 90%, l'accélération maximale théorique sera de 10 fois, quel que soit le nombre de processeurs utilisés (Wikipedia, 2011c).

OpenMP et MPI

OpenMP (“Open Multi-Processing”) est une interface de programmation pour le calcul parallèle sur l’architecture à mémoire partagée. OpenMP est supportée sur de nombreuses plateformes incluant Unix et Windows et pour les langages de programmation C/C++ et Fortran. Elle se présente sous la forme d'un ensemble de directives, d'une bibliothèque logi-

cielle et de variables d'environnement et permet de développer rapidement des applications parallèles à petite granularité en restant proche du code séquentiel (Wikipedia, 2011b).

MPI (“The Message Passing Interface”), conçue en 1993-94, est une norme définissant une bibliothèque de fonctions utilisables avec les langages C/C++ et Fortran. Elle permet d'exploiter des ordinateurs distants ou multiprocesseurs par passage de messages. Elle est devenue de facto un standard de communication pour des noeuds exécutant des programmes parallèles sur des systèmes à mémoire distribuée. MPI a été écrite pour obtenir de bonnes performances aussi bien sur des machines massivement parallèles à mémoire partagée que sur des grappes d'ordinateurs hétérogènes à mémoire distribuée. Elle est disponible sur nombreux matériels et systèmes d'exploitation (Wikipedia, 2011a).

Le Profilage

Les outils de profilage permettent d'établir un profil de l'application, i.e., les statistiques de l'information pendant l'exécution : la quantité d'appels aux fonctions, le temps d'un appel, le temps total des appels, les statistiques concernant les matériels, etc. Plusieurs outils permettent d'obtenir cette information pour l'implémentation parallèle pour OpenMp ainsi que pour MPI.

Implementation en calcul parallèle

Tels que décrit précédemment, la méthode de Boltzmann sur réseau est déterminée par les étapes de collision, de propagation et de correction aux frontières. Les calculs des paramètres macroscopiques, de toutes les composantes de la fonction de distribution d'équilibres et de l'évolution temporelle, font que la méthode de Boltzmann sur réseau soit un peu lourde du point de vue informatique. Cependant, le calcul des paramètres macroscopiques ainsi que le calcul de la collision sont une opération locale. Cette particularité fait que la méthode de Boltzmann sur réseau soit hautement parallélisable. Il faut remarquer que, la parallélisation est un processus d'optimisation qui a comme but l'accélération des calculs et n'a aucune relation avec la physique du problème, mais qui peut augmenter la performance de façon considérable. Dans une première étape, on implémentera la technologie OpenMP et ensuite la technologie MPI.

Avant de montrer l'implémentation des techniques OpenMP et MPI, il faut remarquer que le but principal de cette section est d'illustrer comment l'algorithme de Boltzmann peut être parallélisé et de montrer les techniques qui permettent cette parallélisation. Les résultats numériques ne sont pas poussés puisque ils sont conditionnés aux limitations des ressources

telles comme la quantité de coeurs disponibles d'une station de travail ou le fait que les stations de travail peuvent être utilisées de façon concurrente par différents usagers.

Le problème choisi pour l'implémentation parallèle est la cavité carrée chauffée à la frontière inférieure décrite à la section précédente. Les paramètres physiques et géométriques sont présentés à la Figure 4.13. Pour la réalisation des calculs parallèles, les paramètres physiques sont : $Ra = 1 \times 10^5$, $Pr = 7$ et la concentration $\Phi = 0$ (eau).

Implementation OpenMP

La technologie OpenMP permet de développer rapidement des applications parallèles restant proches du code séquentiel. Cependant, il faut tout d'abord savoir quelles sont les parties du code parallélisables et qu'elles sont les parties séquentielles. Pour détecter la partie parallélisable, on sait que le calcul des variables macroscopiques et la collision sont des opérations lourdes et, par la suite, ils sont candidats à être parallélisés. Une autre alternative est d'analyser les outils informatiques qui montrent quelles sont les fonctions qui utilisent plus de temps pour calculer (ils sont habituellement connus comme outils de profilage). L'outil qui est utilisé pour faire le profilage du code avec les instructions OpenMP est *gprof*. La table A.1 montre les sorties de *gprof* pour une simulation avec un maillage de 201x201. Les statistiques de *gprof* présentent entre autres le temps utilisé, la quantité d'appels sur une fonction et le nom de la fonction (la méthode) concernée (pour des questions de simplification on se limite à ces trois).

Un résumé du profilage, basé sur 100 cycles, est présenté à la Table A.1. Les statistiques obtenues permettent de regarder les fonctions qui utilisent plus de temps (seulement les plus représentatives ont été affichées). Les *getters* et les *setters* (les fonctions `get()` et `set()`) seront exclues de l'analyse. Quoiqu'elles utilisent des temps représentatifs, c'est dû à une grosse quantité d'appels. Les fonctions de propagation mécanique (`propagate()`) et thermique (`propagateT()`) seront ciblées pour la parallélisation. Les fonctions de calcul des paramètres macroscopiques (`update()` pour la partie mécanique et `updateT()` pour la partie thermique) sont aussi candidates à la parallélisation.

Temps	Appels	Fonctions
13.01	100	D2Q9Lattice ::propagate()
11.03	44441100	Site ::getF()
10.92	28280700	Site ::getFT()
10.25	100	D2Q9Lattice ::propagateT()
9.04	774143	LBGKT ::LBGKT()
7.17	3960100	LBGKT ::update()
5.84	3960100	LBGKT ::collision()
5.84	3960100	LBGKT ::updateT()
4.52	37081300	Site ::setF()
4.19	20802505	Site ::setFT()

Table A.1 Profilage du code parallélisé avec OpenMP

Le pseudocode suivant montre comme paralléliser une instruction de type répétitif utilisant des instructions OpenMP sur un maillage de dimensions $N \times M$ (pour plus de détails sur les instructions OpenMP (voir Chapman *et al.* (2008)) :

```
#pragma omp parallel
{
    #pragma omp for schedule(dynamic)
    for(int x=1; x<=N; x++) {
        for(int y=1; y<=M; y++) {
            Calcul_variables_Macroscopiques();
            Collision();
        }
    }
}
```

On fera des cas de tests avec différents types de maillage (201x201, 401x401, 801x801 et 1201x1201) pour calculer l'accélération. On utilisera une station de travail Phenom avec 8 coeurs et 8 GB de mémoire vive. Les résultats de temps sont montrés à la Table suivante :

Analyse et discussion des résultats pour OpenMP

Les résultats de la Table A.2 montrent le temps employé pour faire 100 cycles. Nous constatons qu'au fur et à mesure que nous augmentons les nombres de processus (de processeur) le temps d'exécution diminue. Une autre caractéristique représentative est le calcul

de l'accélération calculée comme le rapport entre le temps employé par n processus sur le temps employé par une processus que nous présentons à la Table A.3. On remarque que l'accélération semble atteindre une limite aux environs de 2.5, cette limite peut s'expliquer par les étapes, nécessaires au calcul, où les processus doivent s'attendre les phases séquentielles qui s'appliquent à l'ensemble des données (par exemple, toutes les cases doivent avoir fini la phase des calculs des variables macroscopiques avant d'entrer dans la phase collision).

Nombre de Processeurs / Grille	1	2	4	6	8
201x201	13	9	7	6	5
401x401	52	36	26	22	22
801x801	202	143	111	89	84
1201x1201	453	319	235	200	188

Table A.2 Temps pour calculer 100 itérations

Nombre de Processeurs / Grille	1	2	4	6	8
201x201	1	1,4444	1,8571	2,1666	2,600
401x401	1	1,4444	2,000	2,3636	2,3636
801x801	1	1,4126	1,8198	2,2697	2,4048
1201x1201	1	1,4201	1,9277	2,2650	2,4096

Table A.3 Calcul de l'accélération (t_n/t_1) pour différents types de maillage

Implementation MPI

Les deux techniques, OpenMp et MPI, permettent la parallélisation de l'algorithme de Boltzmann sur réseau, mais il s'agit de deux façons conceptuellement différentes. OpenMP utilise le même espace de mémoire pour tous les processeurs (parallélisation à mémoire partagée), pendant que MPI permet un découpage de la charge de travail parmi différents ordinateurs, i.e, chacun des ordinateurs reçoit un sous-domaine et utilise sa propre mémoire (parallélisation à mémoire distribuée). Les différents sous-domaines se communiquent les uns aux autres à travers d'échange de messages.

Le découpage de domaine est l'idée de base pour la parallélisation d'algorithme de Boltzmann sur réseau dans le cadre de MPI. Le calcul des variables macroscopiques et la collision

sont de par leur nature des processus localisés et ils ne sont pas affectés par la séparation des sous-domaines. En supposant que la collision a fini, on montrera comme implémenter la propagation mécanique. On découpera un domaine en deux sous-domaines A et B (voir la Figure A.1). À la frontière entre les sous-domaines A et B, dans la dernière couche du sous-domaine A, seulement trois composantes de la fonction de distribution postcollision (les trois qui regardent vers l'haut) sont les valeurs qui vont se propager vers le sous-domaine B. Il faut copier (échange de messages) les trois composantes dans une couche fantôme du sous-domaine B (voir la Figure A.2). De façon analogue, dans la première couche du sous-domaine B, seulement les trois composantes qui regardent en bas sont les valeurs qui vont se propager vers le sous-domaine A et ils seront passés par message à sa couche fantôme. Le cas thermique est similaire, il faut passer seulement un composant par cellule d'un sous-domaine à la couche fantôme d'autre (voir la Figure A.3).

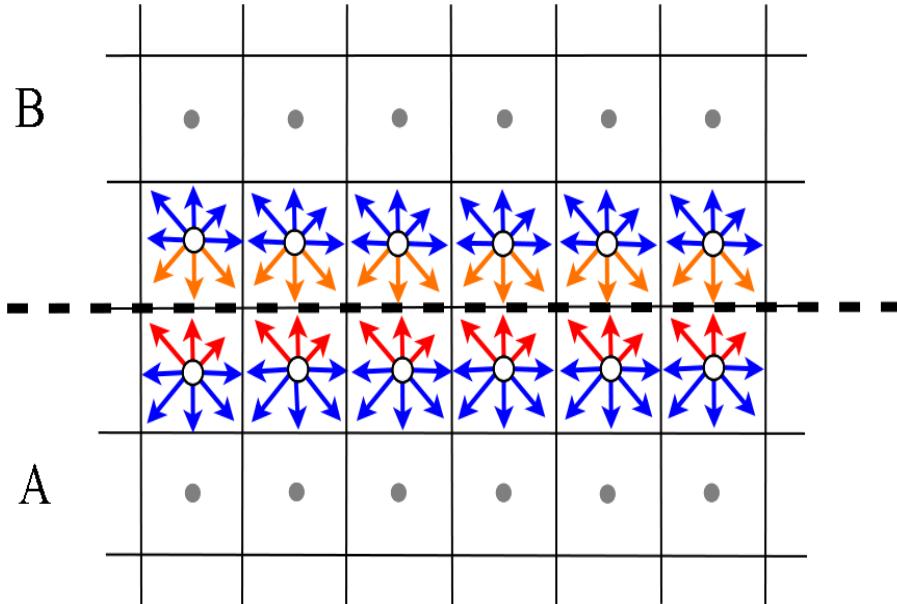


Figure A.1 Découpage du domaine pour l'implémentation de MPI

Analyse et discussion des résultats pour MPI

Dans ces cas on utilise 5000 cycles avec 3 types de maillages (101x101, 201x201 et 401x401). Pour le maillage de 101x101, l'accélération atteinte est d'environ 14, pendant que pour les maillages de 201x201 et 401x401 l'accélération atteint aux environs 10. On peut observer que l'accélération est bien meilleure qu'en mémoire partagée (il faut clarifier que pour faire les cas de tests, la lecture et l'écriture des données aux fichiers est enlevée pour souligner seulement sur les calculs).

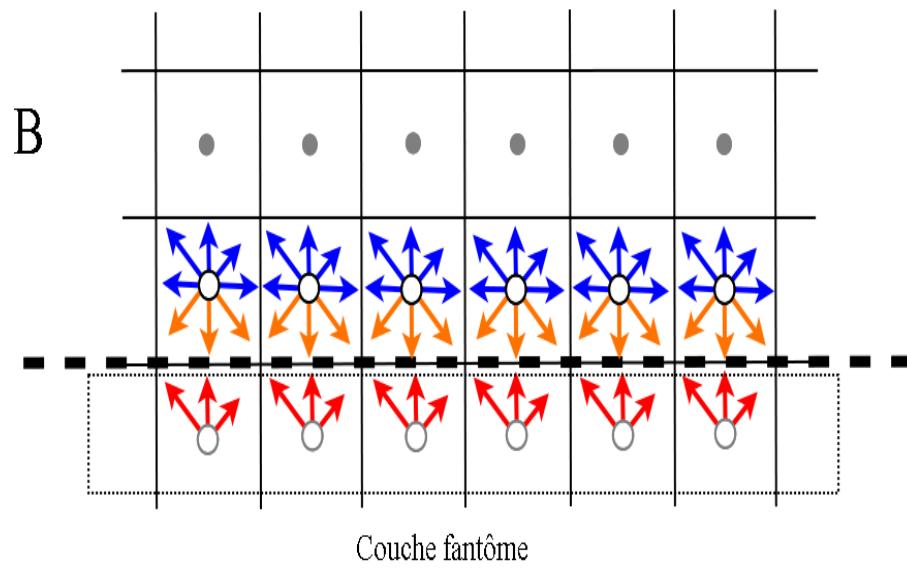


Figure A.2 Couche fantôme du domaine B.

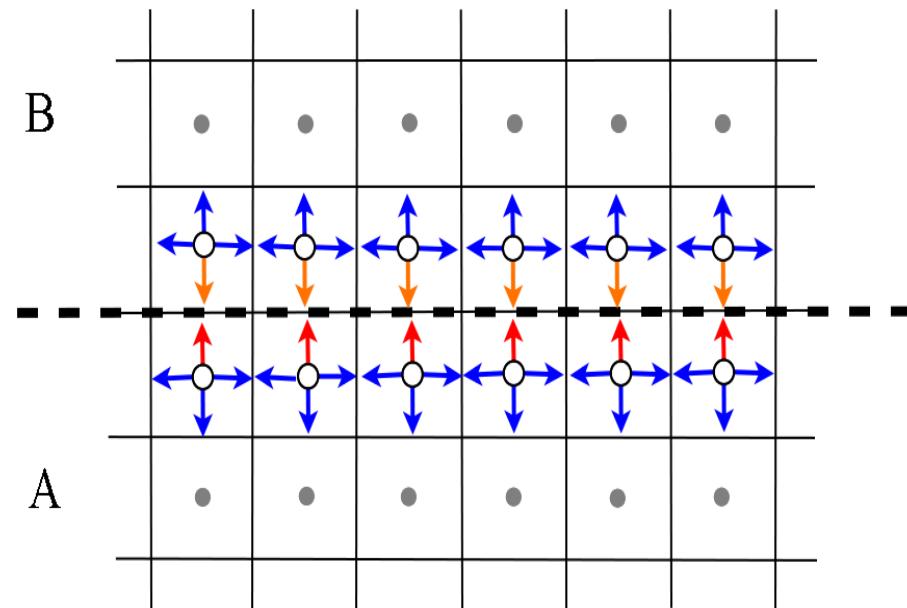


Figure A.3 Decoupage du domaine pour l'implémentation de MPI

Évolution de l'optimisation

Pour pouvoir faire des comparaisons, certaines simulations ont été faites sur une machine de processeur i5 avec 4 cœurs et 6 GB de mémoire RAM. Des résultats obtenus sont montrés aux Tables A.4, A.5, A.6 et A.7 avec des maillages de 40x40, 100x100, 200x200 et 400x400. La colonne “optimisation” montre les types d’optimisation : “-03” pour un seul cœur, OpenMP avec 4 coeurs et MPI dans un ordinateur. La colonne “erreur”, qui indique l’erreur relative de convergence, est montrée pour la vérification de la consistance des résultats (des données) et la colonne Temps représente le temps en secondes pour faire 10.000 cycles.

Optimisation	Erreur	Temps(sec)
-03	0.035758	9
OpenMP	0.035758	6
MPI	0.035758	5

Table A.4 Comparaison de trois types d’optimisation. Maillage 40x40

Optimisation	Erreur	Temps(sec)
03	0.035844	127
OpenMP	0.035844	67
MPI	0.035844	54

Table A.5 Comparaison de trois types d’optimisation. Maillage 100x100

Optimisation	Erreur	Temps(sec)
-03	0.0357	532
OpenMP	0.035843	287
MPI	0.035843	243

Table A.6 Comparaison de trois types d’optimisation. Maillage 200x200

Optimisation	Erreur	Temps(sec)
-03	0.035842	2036
OpenMP	0.035842	1058
MPI	0.035842	944

Table A.7 Comparaison de trois types d'optimisation. Maillage 400x400

Finalement, en partant du code initial séquentiel, nous observons une amélioration de temps de calcul au fur et à mesure que les techniques de parallélisation étaient appliquées. De plus, sur un même ordinateur (sur les coeurs d'un même ordinateur), on obtient plus d'efficacité avec l'implémentation MPI qu'avec OpenMP. En fait, l'idée de découper en sous-domaines conduit à une meilleure utilisation des ressources des machines parallèles.