

Rapport de stage de Master 2
MACS

Réalisé au sein de l'université de Gustave Eiffel, Laboratoire GPEM du Département MAST

Codage de la méthode de Lattice-Boltzmann en 3D et couplage avec un code d'éléments discrets

Lucie CHAILLOU

Sous la direction de Yannick DESCANTES

Du 3 avril au 29 septembre 2023

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Introduction | 2 |
| 1 Méthode de Lattice Boltzmann | 3 |
| 1.1 Equation de Boltzmann | 3 |
| 1.2 Lattice Boltzmann | 3 |
| 1.3 Conditions limites | 5 |
| 1.4 Fonction de distribution à l'équilibre | 7 |
| 1.5 Terme de collision | 8 |
| 1.6 De Lattice Boltzmann à Navier-Stokes | 8 |
| 2 Implémentation numérique et validation de la méthode LBM | 11 |
| 2.1 Algorithme | 11 |
| 2.2 Cas test 2D | 12 |
| 2.3 Cas test 3D | 16 |
| 3 Couplage LBM/obstacle solide | 19 |
| 3.1 Les principales méthodes | 19 |
| 3.2 Implémentation numérique | 22 |
| 3.3 Résultats numériques 2D | 24 |
| 3.4 Résultats numériques 3D | 27 |
| 3.5 Discussion | 29 |
| 4 Couplage DEM/LBM | 35 |
| 4.1 LBM | 36 |
| 4.2 La méthode de différences finies | 36 |
| 5 Conclusion et perspectives | 38 |

Introduction

La méthode de Lattice Boltzmann (LBM) est une méthode numérique utilisée pour la simulation de problèmes complexes de la dynamique des fluides. Elle propose une approche différente des méthodes classiques de type volumes finis ou éléments finis pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Contrairement à ces méthodes qui se placent à l'échelle macroscopique, la LBM se concentre sur les particules de fluide à l'échelle mésoscopique. On est capable de retrouver les caractéristiques macroscopiques du fluide à partir de la physique des particules. Avec cette méthode on peut donc modéliser le comportement d'un fluide dans diverses situations. Les principaux avantages de la LBM sont qu'elle est relativement simple à implémenter et surtout très adaptée à la parallélisation. Grâce à ces avantages, cette méthode pourrait à l'avenir, devenir un outil majeur de la mécanique des fluides numérique.

L'objectif de ce stage consiste, dans un premier temps, à implémenter la méthode de Lattice Boltzmann en 2 puis 3 dimensions, puis à la coupler avec une méthode d'éléments discrets (DEM). La DEM permet de simuler le comportement de grains solides soumis à des forces à distance ainsi qu'à des forces de contact avec d'autres grains. Le couplage de ces deux méthodes permettrait alors de simuler le comportement de particules dans un fluide.

On commencera par décrire dans la première section la méthode de Lattice Boltzmann pour un modèle fixé à 2 dimensions (modèle D2Q9) et on montrera que cette approche permet de décrire le comportement d'un fluide en retrouvant les équations de Navier Stokes. On présentera ensuite dans la section 2 l'implémentation numérique de la méthode en 2D (modèle D2Q9) et en 3D (modèle D3Q15), que l'on validera sur des cas tests où l'on comparera les résultats obtenus avec une solution analytique. Dans la section 3, on présentera deux méthodes de couplage LBM/DEM et on procédera à des tests de couplage de la LBM avec un obstacle solide, d'abord à 2 dimensions puis à 3 dimensions. Enfin, dans la section 4, on présentera un problème d'un couplage LBM/DEM et on donnera les premiers résultats obtenus.

1 Méthode de Lattice Boltzmann

La méthode de Lattice Boltzmann est utilisée pour modéliser l'écoulement d'un fluide représenté comme un ensemble discret de particules qui interagissent entre elles. Cette méthode cherche à approcher la solution de l'équation continue de Boltzmann qui permet de décrire le comportement d'un fluide à l'échelle mésoscopique. Sous certaines conditions la LBM permet de simuler le comportement d'un liquide décrit à l'échelle macroscopique par les équations de Navier-Stokes.

1.1 Equation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann peut être introduite comme suit [Succi_2001]. On isole par la pensée un volume V fixé contenant N molécules identiques de masse m d'un gaz et on suppose qu'elles interagissent via une force \vec{F} qui dépend de la distance qui les sépare. On peut considérer ces particules comme ponctuelles, car la distance moyenne entre elles vaut $d = (\frac{V}{N})^{\frac{1}{3}}$ et est donc très grande comparée à la taille des molécules. L'équation de Boltzmann s'exprime donc au travers d'une fonction $f(\vec{x}, \vec{c}, t)$ qui représente la densité de probabilité qu'une particule se trouve proche de \vec{x} , au temps t et avec une vitesse proche de \vec{c} . $f(\vec{x}, \vec{c}, t)d\vec{x}d\vec{v}$ représente donc le nombre de ces particules. On cherche alors à déterminer f à l'instant $t + dt$.

En l'absence de collision entre particules, à l'instant $t + dt$ les particules initialement à la position \vec{x} se retrouvent à la position $\vec{x} + \vec{c} dt$ avec une vitesse $\vec{c} + \frac{\vec{F}}{m}dt$. De là, comme $\vec{c} = \frac{d\vec{x}}{dt}$ et $\frac{d\vec{c}}{dt} = \frac{\vec{F}}{m}$, alors $f(\vec{x} + \vec{c} dt, \vec{c} + \frac{\vec{F}}{m}dt, t + dt) = f(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{c} + d\vec{c}, t + dt)$. Dans le cas contraire, certaines particules initialement situées à la position \vec{x} avec une vitesse \vec{c} à l'instant t n'atteindront pas $(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{c} + d\vec{c}, t + dt)$ à cause de collisions avec d'autres particules. De même, certaines particules se retrouveront en $(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{c} + d\vec{c}, t + dt)$ après collision sans s'être trouvées initialement en (\vec{x}, \vec{c}, t) . On peut alors écrire l'équation de Boltzmann comme :

$$f(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{c} + d\vec{c}, t + dt) = f(\vec{x}, \vec{c}, t) + \Omega(\vec{x}, \vec{c}, t) \quad (1)$$

Où Ω représente la fonction choc.

Par la suite on négligera les forces \vec{F} . On peut donc réécrire l'équation de Boltzmann comme suit :

$$\boxed{f(\vec{x} + \vec{c}dt, t + dt) = f(\vec{x}, t) + \Omega(\vec{x}, t)} \quad (2)$$

On peut remarquer que comme on a une infinité de directions de propagation possibles pour chacune des particules et qu'elles sont toutes équiprobables, on a alors un champ de vitesse isotrope.

1.2 Lattice Boltzmann

Pour construire la méthode de Lattice Boltzmann, on discrétise en temps et en espace l'équation de Boltzmann et pour la résolution numérique, on se donne un nombre fini $M+1$ de directions de propagations possibles des particules (Figure 1). On ne peut pas choisir les directions aléatoirement, il faut les choisir de façon à ce que le champ des vitesses reste isotrope. Le passage de l'équation continue de Boltzmann à l'équation discrétisée de Lattice Boltzmann est détaillé dans la thèse de [Cao_2019]. L'idée est de développer la fonction de distribution $f(\vec{x}, \vec{c}, t)$ à l'aide des polynômes d'Hermite.

L'équation de Lattice Boltzmann peut alors s'écrire comme :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + \Omega_i(f(\vec{x}, t)), \quad i = 0, \dots, M \quad (3)$$

Avec \vec{c}_i la vitesse locale dans la direction i de la particule, $f_i(\vec{x}, t)$ la densité de probabilité dans la direction i et Ω_i le terme de collision.

On peut faire le lien entre les échelles mésoscopique et macroscopique du fluide à l'aide des moments de vitesse d'ordre 0 à 2 :

$$\begin{cases} \rho &= \sum_{i=0}^M f_i(\vec{x}, t) \\ \rho \vec{u} &= \sum_{i=0}^M \vec{c}_i f_i(\vec{x}, t) \\ \rho e + \frac{1}{2} \rho |\vec{u}|^2 &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^M |\vec{c}_i|^2 f_i(\vec{x}, t) \end{cases} \quad (4)$$

Où ρ correspond à la masse volumique du fluide et \vec{u} à sa vitesse macroscopique. e représente la densité massique d'énergie du fluide. Dans le cas d'un gaz, on a : $e = \frac{D}{2} r T$ avec D le nombre de degrés de liberté des particules, T la température et r la constante réduite du gaz.

Le réseau est construit tel qu'entre les instants t et $t + \Delta t$, chaque densité de probabilité directionnelle f_i se déplace sur le nœud voisin dans la direction de \vec{c}_i . On appellera cette étape, l'étape de diffusion (Figure 2). On a alors $c = |\vec{c}_i| = \frac{\Delta \vec{x}_i}{\Delta t}$, où $\Delta \vec{x}_i$ désigne la distance entre les deux nœuds. De plus, on a la vitesse du son c_s qui vaut $\frac{c}{\sqrt{3}}$. D'après [Succi_2001], la méthode de Lattice Boltzmann peut alors simuler l'hydrodynamique uniquement sous l'hypothèse d'un faible nombre Mach ($M = \frac{\|\vec{u}\|}{c_s}$), ce qui implique que la vitesse $\|\vec{u}\|$ doit rester petite devant cette vitesse du son c_s .

On peut prendre pour exemple le schéma $D2Q9$, à 2 dimensions et 9 directions de propagations, explicité par [Zou&He_1997]. Avec $|\vec{c}_i| = c$ pour $i = 1$ à 8, on a :

$$\begin{aligned} \vec{c}_0 &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \vec{c}_i &= c \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\pi}{2}(i-1)\right) \\ \sin\left(\frac{\pi}{2}(i-1)\right) \end{pmatrix} \quad \text{pour } i = 1, 2, 3, 4 \\ \vec{c}_i &= c \begin{pmatrix} \sqrt{2}\cos\left(\frac{\pi}{2}(i-4-\frac{1}{2})\right) \\ \sqrt{2}\sin\left(\frac{\pi}{2}(i-4-\frac{1}{2})\right) \end{pmatrix} \quad \text{pour } i = 5, 6, 7, 8 \end{aligned}$$

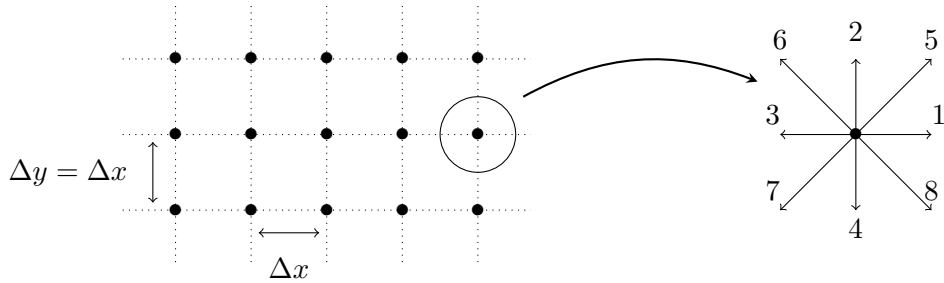


FIGURE 1: Réseaux de Boltzmann et zoom sur les directions de propagations possibles pour le schéma à maille carrée D2Q9

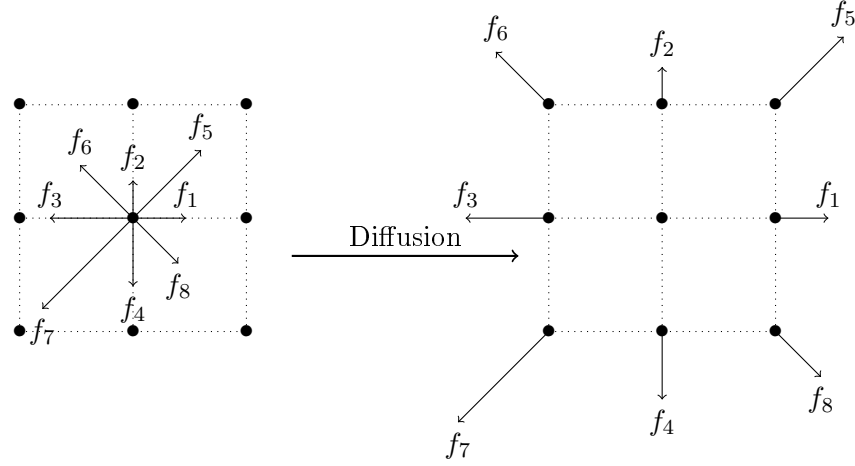


FIGURE 2: Étape de diffusion sur un nœuds pour le schéma D2Q9

1.3 Conditions limites

Comme dans toute méthode numérique, pour pouvoir modéliser correctement un problème physique, on a besoin de conditions aux limites. Dans la LBM on a un manque d'information au niveau des fonctions de distributions sur les bords du domaine. En effet, lors de l'étape de diffusion (Figure 2), les nœuds des bords ne peuvent pas recevoir toutes leurs nouvelles fonctions de distributions dû à l'absence de nœuds voisins au delà des limites du domaine. Ainsi, ils reçoivent celles venant de l'intérieur du domaine uniquement.

La Figure 3, illustre les fonctions de distributions manquantes venant de l'extérieur du domaine, représentées en pointillés, après l'étape de diffusion pour un nœud situé sur le bord Ouest du domaine.

On va alors présenter les différentes conditions aux limites utilisées dans cette étude pour palier à ce problème.

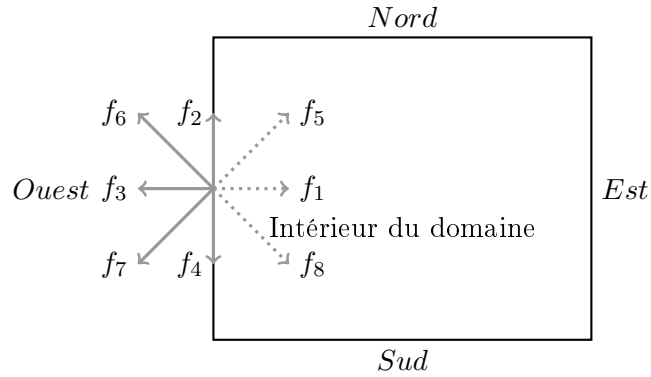


FIGURE 3: Informations manquantes (en pointillés) sur les nœuds des bords du domaine après étape de diffusion

1.3.1 Condition périodique

On commence par la condition de périodicité. Lorsqu'on applique cette condition limite, si une fonction de distribution sort du domaine, elle rentre ensuite par son bord opposé en gardant la même direction. Ainsi, tout ce qui sort d'un côté rentre de l'autre. Les nœuds situés sur les bords du domaine sont alors voisins des nœuds du bord opposé, ce qui permet donc de transmettre les fonctions de distributions initialement manquantes. Cette condition limite est principalement utilisée pour simuler l'écoulement d'un fluide en régime permanent dans un domaine semi-infini. On l'utilisera par exemple, dans le cas d'un écoulement de Poiseuille.

1.3.2 Condition de rebond (bounce-back)

La condition de rebond permet de simuler des bords solides du domaine. Lorsque l'on applique cette condition sur un bord, les fonctions de distributions qui arrivent du fluide sur ce bord sont redirigées dans le sens opposé, vers l'intérieur du domaine, pour simuler un rebond sur cette paroi solide.

On applique le rebond en copiant les fonctions de distributions connues venant du fluide et en les pointant dans la direction opposée de sorte qu'elles retournent bien dans le fluide. Par exemple, si l'on reprend la Figure 3, on échange f_1 et f_3 , f_5 et f_7 , f_8 et f_6 .

On peut distinguer 2 types de conditions de rebond.

Rebond complet

Dans le cas du rebond complet (ou on-grid bounceback en anglais), la paroi solide est située sur les nœuds qui représentent donc une interface fluide/solide.

Rebond à mi chemin

Dans le cas du rebond à mi chemin (ou half-way wall bounceback en anglais), la paroi solide se trouve au milieu de deux rangées de nœuds. Les nœuds sont alors soit complètement solide soit complètement fluide, il n'existe pas de nœud à l'interface fluide/solide. D'après [Zou&He_1997], ce rebond permet d'obtenir une meilleure précision sur la vitesse obtenue après convergence que pour le Rebond complet, c'est pourquoi on l'utilisera pour nos simulations.

À l'implémentation, la collision sera différente en fonction du type de rebond choisi. Si l'on choisi le rebond complet la collision a lieu sur l'ensemble des nœuds y compris les nœuds à l'interface fluide/solide. Mais si l'on choisi le rebond à mi chemin, la collision aura lieu uniquement sur les nœuds fluides, il faudra donc faire la distinction entre nœuds fluides et nœuds solides.

On peut également appliquer des conditions limites sur la vitesse ou la pression du fluide. Par exemple, la condition de VonNeumann de [Zou&He_1997] qui impose une vitesse sur la frontière du domaine et la condition de Dirichlet de [Zou&He_1997] qui impose une pression sur le bord du domaine choisi. Nous ne détaillerons pas ces conditions limites qui ne seront pas utilisés dans cette étude.

Dans la suite on introduit et on explicite la fonction de distribution à l'équilibre, puis la fonction collision, enfin on montre les grandes lignes de la démarche permettant de retrouver les équations de Navier-Stokes à partir de l'équation de Lattice Boltzmann.

1.4 Fonction de distribution à l'équilibre

On définit la fonction de distribution à l'équilibre pour l'équation de Boltzmann $f^e(\vec{x}, \vec{c}, t)$ comme étant la fonction de distribution qui annule le terme de collision de l'équation (2) [Succi_2001]. On suppose que les collisions sont uniquement binaires (on peut négliger les collisions à plus de deux particules étant donnée leur rareté liée au très faible ratio entre la taille des particules et leur distance moyenne de séparation d). On pose $f_{1'2'}^e$ la densité de probabilité de trouver en $(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{c} + d\vec{c}, t + dt)$ une molécule ne provenant pas de (\vec{x}, \vec{c}, t) et f_{12}^e celle de trouver ailleurs qu'en $(\vec{x} + d\vec{x}, \vec{c} + d\vec{c}, t + dt)$ une molécule provenant de (\vec{x}, \vec{c}, t) . Par l'isotropie du champ des vitesses, on peut faire l'hypothèse de chaos moléculaire, c'est à dire qu'il n'y a pas de corrélation entre les vitesses des particules avant ou après un choc. Cette hypothèse reste valide dans le cas d'un gaz s'écoulant à une vitesse moyenne \vec{u} seulement si on considère la vitesse relative $\vec{c} - \vec{u}$ des particules. On a alors :

$$\begin{cases} f_{12}^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) &= f_1^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) f_2^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) \\ f_{1'2'}^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) &= f_{1'}^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) f_{2'}^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) \end{cases} \quad (5)$$

Par passage au logarithme, on obtient que $\ln(f^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t))$ est un invariant de collision, on peut donc l'exprimer comme une combinaison linéaire des invariants de collision (masse, quantité de mouvement et énergie) :

$$\ln(f^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t)) = \alpha + \beta\vec{u} + \gamma\vec{u}^2 \Rightarrow f^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) = \exp(\alpha + \beta\vec{u} + \gamma\vec{u}^2) \quad (6)$$

Pour calculer les coefficients, on exprime chaque invariant de collision comme un moment d'ordre n de f^e (ordre 0 pour la masse, ordre 1 pour la vitesse et ordre 2 pour l'énergie) en intégrant sur l'espace des phases.

On peut alors identifier f^e comme étant la distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) = \rho(2\pi v_T^2)^{-\frac{D}{2}} \exp\left(-\frac{(\vec{c} - \vec{u})^2}{2v_T^2}\right) \quad (7)$$

Où D correspond à la dimension du domaine fluide et $v_T = \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$ avec k_B la constante de Boltzmann et T la température absolue.

On suppose que la vitesse du fluide $||\vec{u}||$ est petite devant la vitesse des particules $||\vec{c}||$. On peut donc faire un développement de Taylor d'ordre 2 en \vec{u} de la distribution de Maxwell-Boltzmann (7), et on obtient :

$$f^e(\vec{x}, \vec{c} - \vec{u}, t) = \rho(2\pi v_T^2)^{-\frac{D}{2}} \exp\left(-\frac{\vec{c}^2}{2v_T^2}\right) \left(1 + \frac{\vec{c} \cdot \vec{u}}{v_T^2} + \frac{(\vec{c} \cdot \vec{u})^2}{2v_T^4} - \frac{\vec{u}^2}{2v_T^2}\right) \quad (8)$$

La forme discrète de la fonction de distribution à l'équilibre pour l'équation de Lattice Boltzmann, peut alors s'écrire [Chen_1998] :

$$f_i^e(\vec{x}, t) = \rho \omega_i \left(1 + \frac{3\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + \frac{9}{2c^4} (\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \vec{u}^2\right) \quad (9)$$

Avec $c = |\vec{c}_i|$ et où les coefficients ω_i dépendent du schéma choisi. Dans le cas du schéma D2Q9 (Figure 1), on a $\omega_0 = \frac{4}{9}$, $\omega_i = \frac{1}{9}$ pour $i = 1, \dots, 4$ et $\omega_i = \frac{1}{36}$ pour $i = 5, \dots, 8$.

1.5 Terme de collision

On s'intéresse maintenant à l'expression du terme de collision. On commence par faire un développement de Taylor de $f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t)$, puis on le remplace dans l'équation de Lattice Boltzmann (3). On obtient alors :

$$\Delta t \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \nabla_{\vec{x}} f_i \right) (\vec{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\vec{c}_i^T \cdot \nabla_{\vec{x}}^2 f_i \cdot \vec{c}_i + 2 \vec{c}_i \cdot \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} \right) (\vec{x}, t) = \Omega_i(f(\vec{x}, t)) \quad (10)$$

En considérant que les densités de probabilité f_i fluctuent au voisinage de la fonction de distribution à l'équilibre f^e , on peut développer ces densités en puissance du nombre de Knudsen ε (un nombre adimensionnel utilisé pour déterminer le régime d'écoulement d'un fluide) :

$$f_i = f_i^e + \varepsilon f_i^{(1)} + O(\varepsilon^2) \quad (11)$$

On peut alors appliquer un développement de Taylor à $\Omega_i(f) = \Omega_i(f^e + \varepsilon f_i^{(1)})$:

$$\Omega_i(f) = \Omega_i(f^e) + \varepsilon f_j^{(1)} \frac{\partial \Omega_i(f^e)}{\partial f_j} + O(\varepsilon^2) \quad (12)$$

En utilisant (11), on peut réécrire l'équation (12) comme suit :

$$\Omega_i(f) = \Omega_i(f^e) + (f_j - f_j^e) \frac{\partial \Omega_i(f^e)}{\partial f_j} + O(\varepsilon^2) \quad (13)$$

De plus, par (10), on remarque que $\Omega_i(f^e) \rightarrow 0$ quand $\Delta t \rightarrow 0$. À l'ordre 1 en ε , l'opérateur de collision s'écrit donc :

$$\Omega_i(f) = M_{ij}(f_j - f_j^e) \quad (14)$$

Avec $M_{ij} = \frac{\partial \Omega_i(f^e)}{\partial f_j}$ qui correspond à la matrice de collision.

En assimilant les collisions à des perturbations avec retour à l'équilibre en un temps τ , [Chen_1998] propose d'écrire la matrice de collision :

$$M_{ij} = -\frac{1}{\tau} \delta_{ij} \quad (15)$$

Où δ_{ij} correspond au symbole delta de Kronecker. On obtient alors l'opérateur simplifié de collision BGK, proposé par [Bhatnagar_1954] :

$$\boxed{\Omega_i(f) = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^e)} \quad (16)$$

L'équation de Lattice Boltzmann avec l'opérateur de collision BGK devient alors :

$$\boxed{f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta \vec{x}, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^e(\vec{x}, t))} \quad (17)$$

1.6 De Lattice Boltzmann à Navier-Stokes

On cherche à retrouver les équations de Navier Stokes (18) à partir de l'équation de Lattice Boltzmann (17). Pour cela, on suit le raisonnement détaillé dans la thèse de [Cao_2019].

$$\begin{cases} \nabla \cdot \vec{u} &= 0 \\ \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} \vec{u}) &= -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (pI) + \nabla \cdot \left[\nu (\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T) \right] \end{cases} \quad (18)$$

On commence par faire un développement de Taylor à l'ordre 2 de $f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t)$ puis on l'injecte dans l'équation de Lattice Boltzmann (17), on obtient alors :

$$\Delta t \left(\frac{\partial f_i}{\partial t} + \vec{c}_i \cdot \nabla_{\vec{x}} f_i \right) (\vec{x}, t) + \frac{\Delta t^2}{2} \left(\vec{c}_i^T \cdot \nabla_{\vec{x}}^2 f_i \cdot \vec{c}_i + 2 \vec{c}_i \cdot \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} \right) (\vec{x}, t) + \frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^e(\vec{x}, t)) + O(\Delta t^3) = 0 \quad (19)$$

Ensuite, on utilise le développement (11) autour de la valeur d'équilibre $f_i^{(0)}$. On peut différencier trois échelles de temps : la relaxation vers l'état d'équilibre (temps ε^0), la perturbation de la densité qui se propage à la vitesse du son (temps ε^1) et la diffusion (temps ε^2). On peut donc utiliser un développement multi-échelles de Chapman-Enskog :

$$\begin{aligned} \partial_t &= \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2} + O(\varepsilon^3) \\ \partial_{\vec{x}} &= \varepsilon \partial_{\vec{x}_1} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (20)$$

En réalisant alors un développement multi-échelles à l'ordre 2 en ε de l'équation de Lattice Boltzmann (17) puis en passant le terme de collision Ω_i dans le membre de gauche, on obtient un polynôme d'ordre 2 en ε dont chaque coefficient doit être nul :

$$\text{Ordre } \varepsilon^0 : \boxed{\frac{1}{\tau} (f_i^{(0)} - f_i^e)(\vec{x}, t) = 0} \quad (21)$$

$$\text{Ordre } \varepsilon^1 : \boxed{\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_1}(\vec{x}, t) + \vec{c}_i \cdot \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial \vec{x}_1}(\vec{x}, t) + \frac{1}{\tau} f_i^{(1)}(\vec{x}, t) = 0} \quad (22)$$

$$\text{Ordre } \varepsilon^2 : \boxed{\frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2}(\vec{x}, t) + \left(\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_1}(\vec{x}, t) + \vec{c}_i \cdot \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial \vec{x}_1}(\vec{x}, t) \right) \left(1 - \frac{1}{2\tau} \right) = 0} \quad (23)$$

Pour obtenir la forme du coefficient en ε^2 , on a d'abord pris la dérivée particulière par rapport à t_1 de l'équation obtenue à l'ordre ε^1 (22), puis on a remplacé dans l'équation obtenu initialement à l'ordre ε^2 pour finalement obtenir (23).

On cherche maintenant à passer de l'échelle mésoscopique à l'échelle macroscopique. Pour cela, on détermine les moments en vitesse d'ordre 0, 1 et 2 de la densité de probabilité qui s'écrivent comme (4).

Le moment d'ordre 1 appliqué au coefficient d'ordre ε^2 (23) s'écrit comme suit :

$$\boxed{\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t_2} - c_s^2 \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \left[\nabla_1 \cdot \left(\rho (\nabla_1 \cdot \vec{u} + (\nabla_1 \cdot \vec{u})^T) \right) \right] = 0} \quad (24)$$

Où $\nabla_1 = \frac{\partial}{\partial \vec{x}_1}$.

On repasse en échelle simple avec $\partial_t = \varepsilon \partial_{t_1} + \varepsilon^2 \partial_{t_2} + O(\varepsilon^3)$ et $\partial_{\vec{x}} = \varepsilon \partial_{\vec{x}_1} + O(\varepsilon^2)$.

Puis, par une combinaison linéaire entre l'équation du moment d'ordre 0 appliqué au coefficient d'ordre ε^1 et celle appliqué au coefficient d'ordre ε^2 , on obtient la première équation de Navier Stokes (18) :

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0} \quad (25)$$

De même, par une combinaison linéaire entre (24) et l'équation du moment d'ordre 1 appliqué au coefficient d'ordre ε^1 , on retrouve la deuxième équation de Navier Stokes (18) :

$$\boxed{\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\vec{u}) = -\nabla(\rho c_s^2 I) + c_s^2(\tau - \frac{1}{2})\nabla \cdot \left[\rho \left(\nabla \cdot \vec{u} + (\nabla \cdot \vec{u})^T \right) \right]} \quad (26)$$

On identifie $p = c_s^2 \rho$ la pression et $\mu = \rho c_s^2(\tau - \frac{1}{2})$ la viscosité dynamique.

On remarque que dans notre cas, contrairement à Navier-Stokes, ρ n'est pas complètement constante.

2 Implémentation numérique et validation de la méthode LBM

Dans ce chapitre, on commence par expliquer comment implémenter la méthode LBM. On y présente les différentes étapes de l'algorithme et on détaille comment choisir les paramètres de simulation. Ensuite, on teste la méthode sur un premier cas test simple en 2 dimensions puis un deuxième cas test en 3 dimensions afin de valider la méthode avant de la coupler avec un obstacle solide dans le chapitre suivant.

2.1 Algorithme

On commence par présenter l'algorithme de la méthode de Lattice Boltzmann :

Algorithme 1 : Méthode de Lattice Boltzmann

Initialisation : On pose les paramètres du problème (ν , Re , dx , dt ...) et initialise l'ensemble des données (\vec{u} , f_i^e , ρ , f_i)

While : critère d'arrêt sur la vitesse \vec{u}

Diffusion : Pour toutes les directions i , $f_i^{temp} = f_i$ dans la direction \vec{c}_i

Condition limite (rebond à mi chemin) : Sur les parois, $f_i = f_{-i}^{temp}$, $\rho = \sum_i f_i$ et $\vec{u} = 0$

Valeurs macroscopiques : En dehors des parois, $\rho = \sum_i f_i^{temp}$ et $\vec{u} = \sum_i f_i^{temp} \vec{c}_i$

Équilibre : $f_i^e = \rho \omega_i \left(1 + \frac{3\vec{c}_i \cdot \vec{u}}{c^2} + \frac{9}{2c^4} (\vec{c}_i \cdot \vec{u})^2 - \frac{3}{2c^2} \vec{u}^2\right)$

Collision : Sur les nœuds fluides, $f_i = f_i^{temp} - \frac{1}{\tau} (f_i^{temp} - f_i^e)$

Body force : $f_i = f_i + \Delta t \rho \frac{\vec{g} \cdot \vec{c}_i}{Kc^2}$

End while

Sauvegarde : On stock dans des fichiers les résultats des valeurs macroscopiques obtenues.

Affichage : On affiche sur le terminal les paramètres initiaux (ν , Re , dx , dt ...) et les données finales (nombre itération, erreurs, vitesse max calculée ...)

Dans la littérature on retrouve différentes possibilités pour le choix de l'ordre des étapes de l'algorithme. Ici, ce choix se base sur des travaux réalisés antérieurement au laboratoire. Toutefois, on peut remarquer que l'ordre n'impacte pour ainsi dire pas le résultat car les étapes sont répétées en boucle jusqu'à atteindre le critère d'arrêt posé comme l'écart relatif entre deux vitesses \vec{u} calculée entre deux pas de temps successifs inférieur à 10^{-10} :

$$\frac{\|u(t) - u(t - \Delta t)\|_\infty}{\|u(t - \Delta t)\|_\infty} < 10^{-10} \quad (27)$$

La différence entre deux résultats à Δt près sera donc négligeable.

L'initialisation des paramètres dépend du problème étudié et du modèle choisi pour la simulation. On commence par définir les dimensions de notre domaine, comme sa longueur et sa hauteur. Puis on fixe le nombre de nœuds pour en déduire le pas de discrétisation. Dans le cas à 2 dimensions nos mailles sont donc carrées (et cubiques dans le cas à 3 dimensions). Par exemple, si n_x correspond au nombre de nœuds selon x et L à la longueur du domaine sur ce même axe alors le pas de discrétisation sur cet axe vaut $\frac{L}{n_x}$. Toutefois cette formule peut légèrement différer dans le cas de la condition limite de rebond à mi chemin qui situe la frontière concernée du

domaine entre deux nœuds.

Connaissant la discrétisation, on peut définir le pas de temps à l'aide de la formule obtenue par identification de l'équation de Navier Stokes (26), en redimensionnant cette formule et en écrivant la viscosité dynamique en fonction de la viscosité cinématique $\mu = \rho\nu$:

$$\Delta t = (\tau - 0.5) \frac{\Delta x^2}{3\nu} \quad (28)$$

car on rappelle que $c_s = \frac{c}{\sqrt{3}}$.

Pour simuler l'écoulement d'un fluide, le nombre de Reynolds est un paramètre important à prendre en compte. On peut le relier à la viscosité ν du fluide par la formule suivante :

$$Re = \frac{U_{moy} D}{\nu} \quad (29)$$

Où U_{moy} correspond à la vitesse moyenne de l'écoulement du fluide et D désigne une longueur caractéristique du domaine.

Pour une simulation, on va donc fixer certains paramètres et calculer les autres à l'aide de ces deux formules (28) et (29) qui les relient tous entre eux.

Dans la littérature, on trouve différentes façon d'intégrer une body force guidée par une accélération \vec{g} . On choisi, comme [Owen_2011], de l'introduire directement dans l'équation de Lattice Boltzmann, ce qui donne :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^e(\vec{x}, t)) + \Delta t \frac{\vec{G} \cdot \vec{c}_i}{K c^2} \quad (30)$$

Avec $\vec{G} = \rho \vec{g}$ la body force (ou densité de force), K une constante (vaut 6 pour le schéma D2Q9 et 10 pour le schéma D3Q15) et c la vitesse du réseau.

En pratique, on ajoute alors $\Delta t \frac{\vec{G} \cdot \vec{c}_i}{K c^2}$ à f_i après l'étape de collision.

Remarque : Pour gagner du temps de calcul, l'ensemble des codes ont été parallélisés à l'aide de OpenMP et on teste le critère d'arrêt uniquement toute les 2000 itérations pour les simulations à 2 dimensions et 10000 pour celles à 3 dimensions.

2.2 Cas test 2D

On choisi le schéma D2Q9 explicité dans le chapitre précédant (Figure 1) et on souhaite tester l'implémentation numérique de la méthode LBM en 2 dimensions dans le cas d'un écoulement de poiseuille.

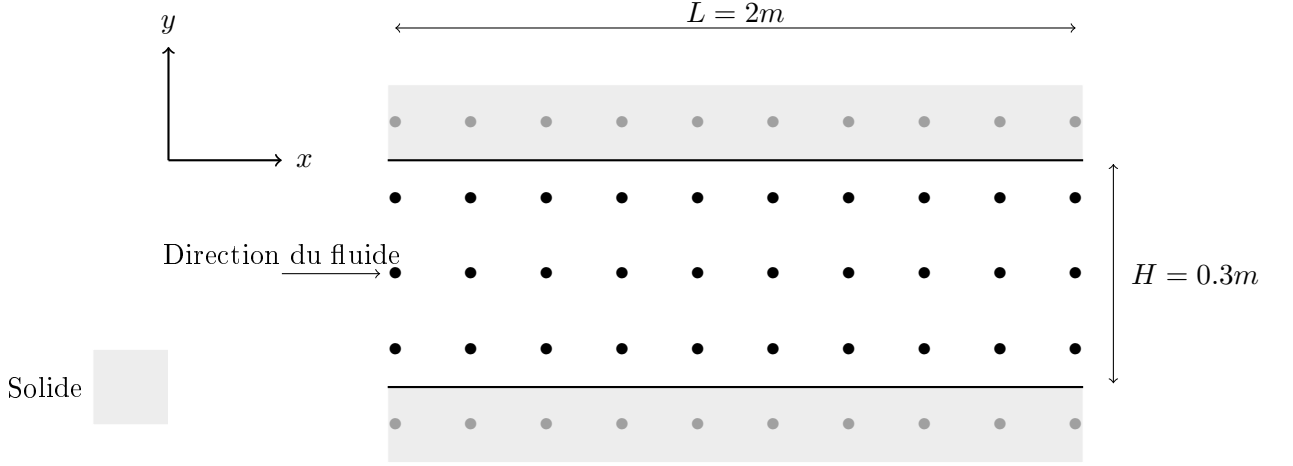


FIGURE 4: Domaine du cas test à 2 dimensions

On se place dans un domaine de 2 mètres de long et 0.3 mètres de hauteur. On fixe des frontières solides sur les bords haut et bas du domaine et on y impose une condition limite de rebond à mi chemin. Le fluide circule de gauche à droite entre ces deux frontières et une condition de périodicité est appliquée en entrée et en sortie. Pour la discrétisation du domaine en espace, on choisi $\Delta x = \Delta y = 0.002$ mètres. On doit alors poser $n_x = 1000$ et $n_y = 151$. De plus, on choisi comme temps de relaxation $\tau = 0.55$ et $\nu = 10^{-4} m^2/s$ comme viscosité cinématique du fluide. De là, on peut fixer Δt à l'aide de l'équation (28). Enfin, on initialise la densité du fluide ρ à $1000 kg/m^3$.

Dans cette simulation la vitesse \vec{u} est initialisée à $\vec{0}$ et l'écoulement est généré par une body force (qui n'est autre qu'un gradient de pression) $\rho \vec{g}$ tel que $\vec{g} = \begin{pmatrix} g_x \\ 0 \end{pmatrix}$. Étant dans la configuration d'un écoulement de Poiseuille, on peut facilement déterminer g_x en fonction du nombre de Reynolds. En effet, pour un écoulement de Poiseuille dans la direction x , on a la solution analytique suivante des équations de Navier-Stokes :

$$u^{(x)}(y) = \frac{\rho g_x}{2\rho\nu} (Hy - y^2)$$

$$\begin{cases} u^{(x)}(0) = u^{(x)}(H) = 0 \\ u^{(y)}(y) = 0 \quad \text{si } y = 0 \text{ ou } y = H \\ u^{(x)}(\frac{H}{2}) = u_{max}^{(x)} \end{cases} \quad (31)$$

où H représente la hauteur du domaine.

On a donc :

$$u_{max}^{(x)} = \frac{\rho g_x}{2\rho\nu} \frac{H^2}{2} \quad (32)$$

Comme dans un écoulement de Poiseuille on a $u_{moy} = \frac{2}{3} u_{max}$, on obtient donc par (29) :

$$g_x = \frac{3}{2} \frac{8\nu^2 Re}{H^2 D} \quad (33)$$

On introduit cette body force après l'étape de collision, comme explicité dans la partie précédente.

On teste ce cas pour différents nombres de Reynolds et on vérifie les profils de vitesse ainsi que les lignes de courants obtenues. Le nombre de Reynolds étant fixé, on calcule la vitesse maximale $u_{max}^{(x)}$ théorique de l'écoulement du fluide et son accélération g_x en utilisant les formules décrites précédemment (29) et (33). Les données de départ sont alors détaillées en fonction du nombre de Reynolds :

TABLE 1: Données initiales

| nombre de Reynolds | 0.5 | 5 | 10 | 34 |
|--|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| u_{max} théorique (selon x) (m/s) | $2.50 \cdot 10^{-4}$ | $2.50 \cdot 10^{-3}$ | $5.00 \cdot 10^{-3}$ | $1.70 \cdot 10^{-2}$ |
| accélération g_x (m/s^2) | $2.22 \cdot 10^{-6}$ | $2.22 \cdot 10^{-5}$ | $4.44 \cdot 10^{-5}$ | $1.51 \cdot 10^{-4}$ |

Après simulations, on obtient les résultats suivant :

TABLE 2: Résultats

| nombre de Reynolds | 0.5 | 5 | 10 | 34 |
|--|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|
| nombre d'itérations | 1 540 000 | 1 538 000 | 1 538 000 | 1 538 000 |
| écart relatif de vitesses entre 2 itérations | $9.90 \cdot 10^{-11}$ | $9.93 \cdot 10^{-11}$ | $9.93 \cdot 10^{-11}$ | $9.93 \cdot 10^{-11}$ |
| u_{max} calculée (selon x) (m/s) | $2.4997 \cdot 10^{-4}$ | $2.4997 \cdot 10^{-3}$ | $4.9995 \cdot 10^{-3}$ | $1.6998 \cdot 10^{-2}$ |
| erreur absolue sur la vitesse (m/s) | $1.55 \cdot 10^{-8}$ | $1.55 \cdot 10^{-7}$ | $3.10 \cdot 10^{-7}$ | $1.05 \cdot 10^{-6}$ |
| erreur relative sur la vitesse | $6.18 \cdot 10^{-3}\%$ | $6.20 \cdot 10^{-3}\%$ | $6.20 \cdot 10^{-3}\%$ | $6.20 \cdot 10^{-3}\%$ |

On commence par remarquer que notre code converge bien. En effet, on obtient bien un écart de vitesses entre deux itérations inférieur au seuil donné dans le critère d'arrêt (10^{-10}). On peut également observer que l'erreur relative reste du même ordre pour chacun des nombres de Reynolds choisis et qu'étant de l'ordre de 10^{-3} , on peut affirmer que la solution calculée est suffisamment proche de la solution analytique pour considérer que la vitesse calculée approche bien la vitesse réelle du fluide.

Lorsque l'on trace la courbe de vitesse calculée en entrée, milieu et sortie du domaine, et celle de la solution analytique attendue (31), on obtient pour chaque nombre de Reynolds testé, une superposition parfaite de ces quatre courbes. Par exemple, pour $Re = 10$, on obtient la figure suivante :

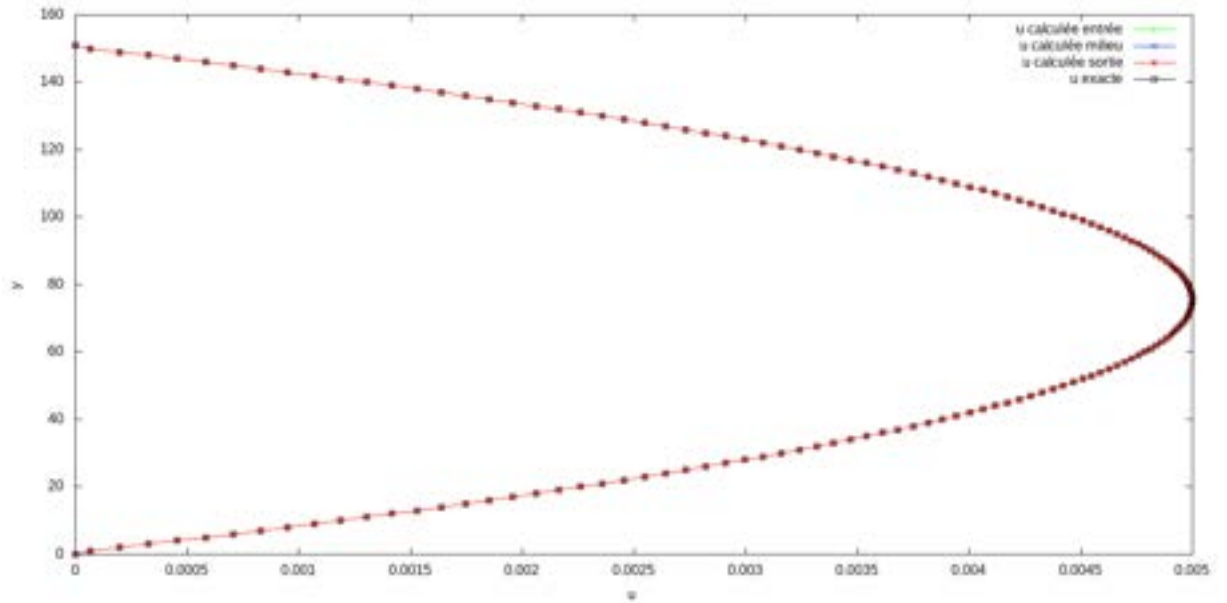


FIGURE 5: Profils de vitesse calculée et analytique pour $Re = 10$, dans un cas 2D

La figure des profils de vitesses confirme donc bien les observations numériques effectuées juste au-dessus : la vitesse calculée converge vers la vitesse analytique.

Maintenant, si on trace les lignes de courant, on obtient pour chaque nombre de Reynolds, des lignes parallèles. Si on reprend l'exemple de $Re = 10$, on a alors :

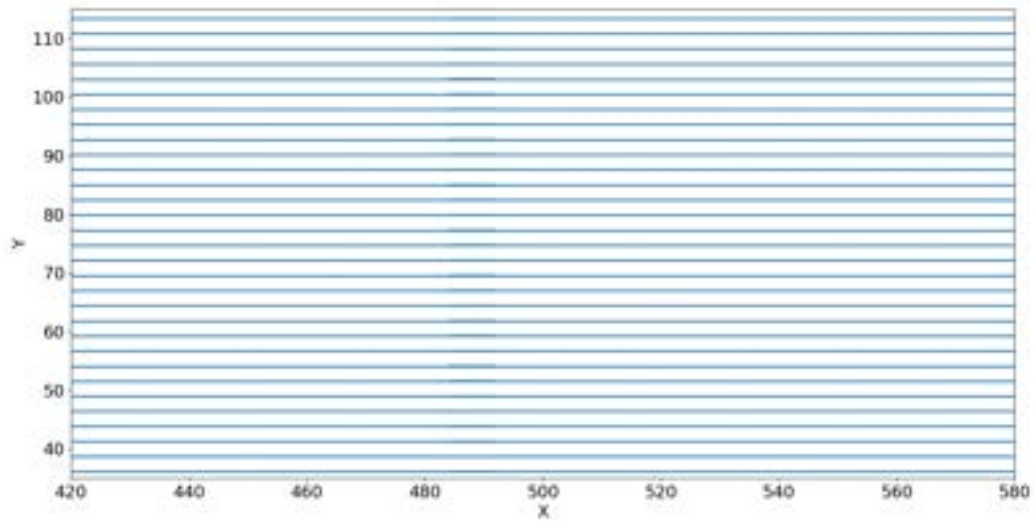


FIGURE 6: Lignes de courant pour $Re = 10$, dans un cas 2D sans obstacle

La convergence de la vitesse calculé par le code, la superposition des courbes de vitesse obtenues avec une erreur relative très faible et les lignes de courant bien parallèles nous permettent de confirmer l'efficacité de notre implémentation de la LBM en 2 dimensions.

On souhaite maintenant la tester pour 3 dimensions.

2.3 Cas test 3D

On choisi le schéma D3Q15, à 3 dimensions et 15 directions de propagations, explicité en annexe A [Portinari_2015]. On pose c comme étant la vitesse du réseau, on a alors pour ce schéma :

$$\vec{c}_0 = (0, 0, 0)$$

$$\vec{c}_i = c(\pm 1, 0, 0), c(0, \pm 1, 0), c(0, 0, \pm 1) \text{ pour } i = 1, \dots, 6$$

$$\vec{c}_i = c(\pm 1, \pm 1, \pm 1) \text{ pour } i = 7, \dots, 14$$

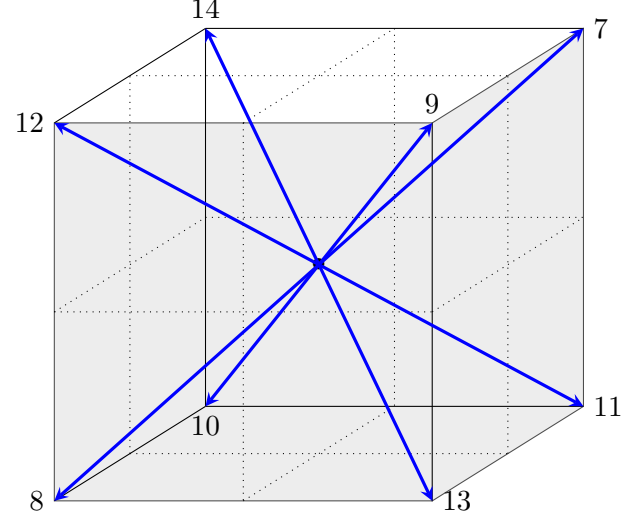
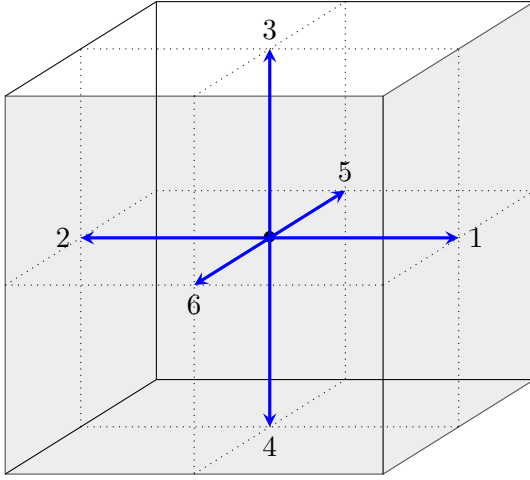


FIGURE 7: Discrétisation spatiale de la méthode de Lattice Boltzmann pour le schéma D3Q15
Seul les coefficients ω_i de la fonction d'équilibre changent pour ce schéma, et deviennent :

$$\omega_i = \begin{cases} \frac{2}{9} & \text{pour } i = 0 \\ \frac{1}{9} & \text{pour } i = 1, \dots, 6 \\ \frac{1}{72} & \text{pour } i = 7, \dots, 14 \end{cases}$$

On souhaite maintenant tester notre implémentation de la méthode LBM en 3 dimensions pour ce schéma. Pour cela, on choisit de reproduire le cas test de [Portinari_2015] de l'écoulement d'un fluide entre deux plaques parallèles de taille infinie (Figure 8).

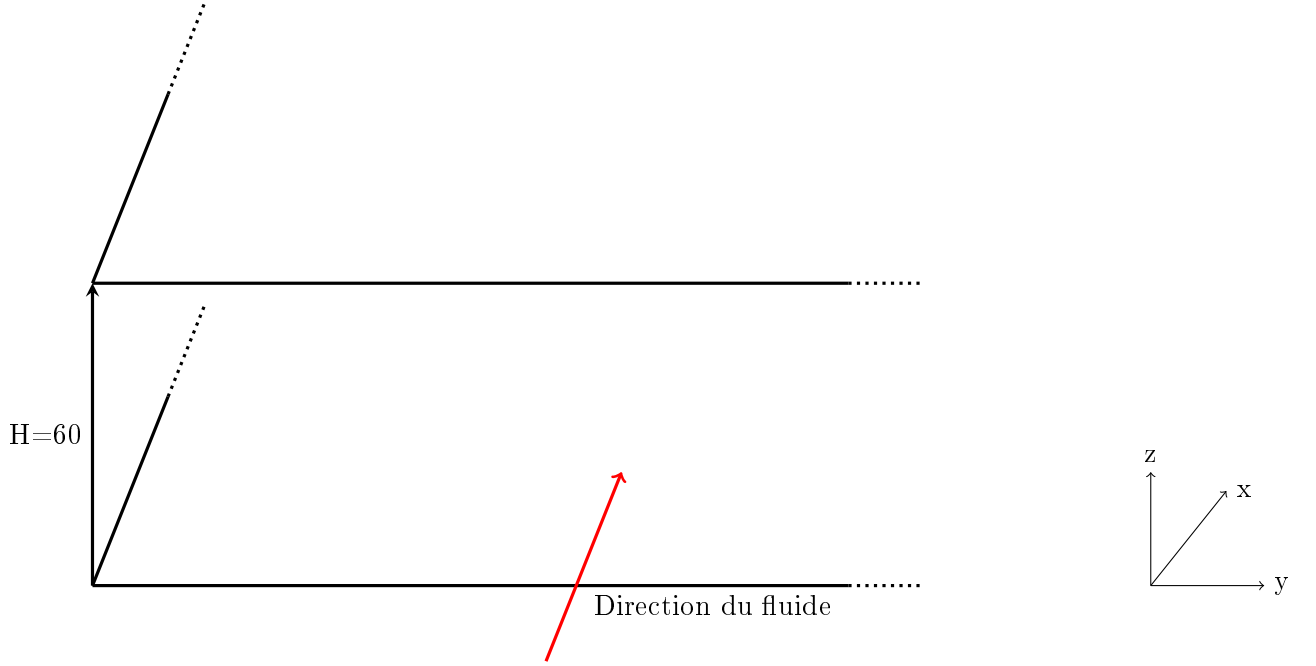


FIGURE 8: Domaine entre deux plaques parallèles de taille infinie

On place deux plaques parallèles de taille infinie espacées d'une hauteur de 60 unités de Lattice ($60 \times \Delta x$ mètres). On pose la longueur de la plaque selon y égale à 3 unités de Lattice et sa profondeur selon x à 60 unités de Lattice. Puis, pour simuler la longueur et la profondeur infinie des deux plaques, on impose une condition de périodicité selon les axes x et y . Sur les plaques (bords haut et bas du domaine), on applique une condition limite de rebond à mi chemin. On fait le choix de prendre $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.004m$ et on impose une vitesse moyenne au cours de la simulation de $0.05 \times \Delta x$ m/s dans la direction d'écoulement du fluide selon x , puis on fixe la viscosité ν à l'aide de la formule (29) où l'on prend D comme la hauteur de notre domaine. Le pas de temps Δt est alors initialisé grâce à (28). Comme pour les cas tests à 2 dimensions, on simule un gradient de pression à l'aide d'une body force correspondant à l'accélération \vec{g} définie en (33). Enfin, on initialise la densité du fluide ρ à 1000 kg/m^3 .

Du fait qu'on ait une plaque de dimension infinie dans la direction x (écoulement du fluide) et dans la direction y (largeur du domaine), la solution à l'état stable n'est donc pas dépendante de ces deux directions. On doit alors retrouver la même solution analytique dans le plan défini par les axes x et z que dans le cas à 2 dimensions pour un écoulement de Poiseuille ((31) en remplaçant les y par des z).

On affiche donc la vitesse calculée en fonction z en entrée, milieu et sortie du domaine et la compare avec la solution analytique attendue et on obtient les résultats suivant après simulation :

TABLE 3: Résultats

| | |
|-------------------------------------|------------------------|
| nombre de Reynolds | 500 |
| nombre d'itérations | 42 000 |
| écart de vitesse entre 2 itérations | $9.16 \cdot 10^{-11}$ |
| u_{max} calculée (selon x) | $2.9975 \cdot 10^{-4}$ |
| erreur sur la vitesse | $1.69 \cdot 10^{-7}$ |
| erreur relative sur la vitesse | $5.63 \cdot 10^{-2}\%$ |

On peut voir que l'algorithme a bien convergé et on obtient une erreur très faible sur la vitesse. De plus, si on observe la Figure 9, on remarque que tous les profils de vitesse calculés en entrée, sortie et milieu du domaine se superposent bien avec la solution analytique attendue.

On peut donc conclure de ce test numérique que notre implémentation de la méthode LBM en 3 dimensions est validée. On peut maintenant la coupler avec des obstacles solides.

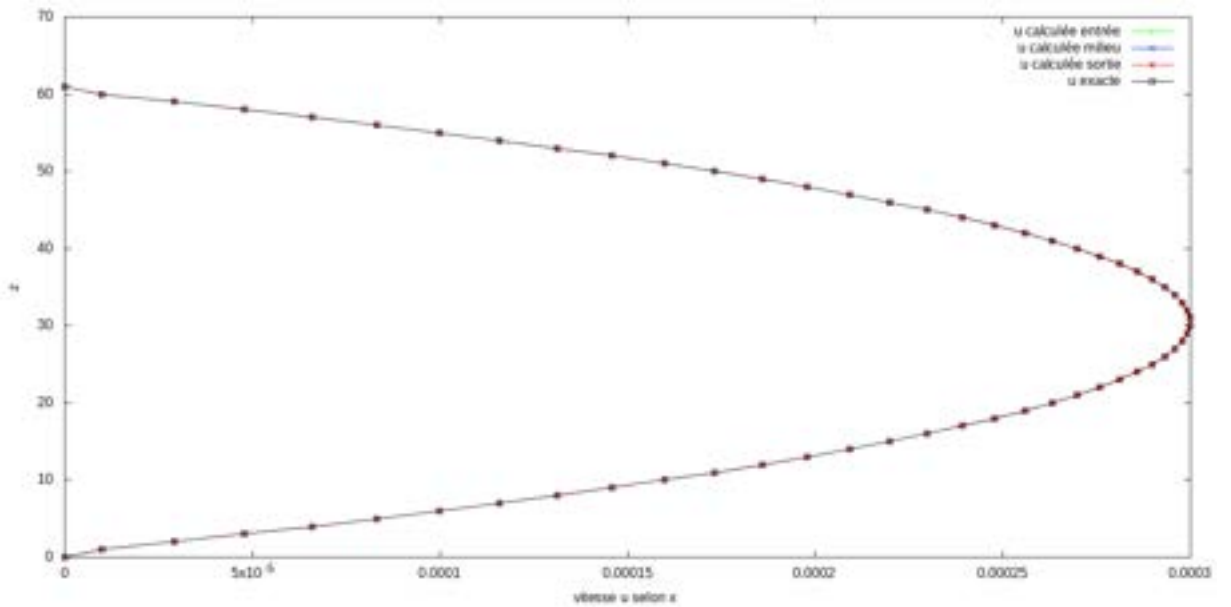


FIGURE 9: Profils de vitesse calculés et analytique dans le cas d'un écoulement entre 2 plaques de taille infinie pour $Re=500$, dans un cas 3D sans obstacle

3 Couplage LBM/obstacle solide

Dans ce chapitre, on présente deux méthodes permettant de coupler le code Lattice-Boltzmann avec un code d'éléments discrets. La DEM permet de simuler les interactions entre solides tandis que la LBM simule le comportement du fluide. Le couplage entre ces deux méthodes permettrait donc de décrire l'interaction entre solides et fluide. Pour cela, les deux codes doivent s'échanger des informations entre eux : le code DEM transmet la position et la vitesse des obstacles solides permettant au code LBM de simuler le comportement du fluide autour de ces solides tandis que la LBM renvoie à la DEM les forces hydrodynamiques exercées par le fluide sur les obstacles pour pouvoir calculer les champs de vitesse et de déplacement des solides. C'est pourquoi, on commencera par simuler une simple interaction entre un fluide et un obstacle solide pour calculer avec notre code LBM les forces hydrodynamiques et valider son efficacité. On présentera donc dans la suite de ce chapitre les résultats obtenus pour différents cas tests en 2 dimensions puis 3 dimensions.

3.1 Les principales méthodes

3.1.1 Immersed moving boundary method

Dans la "immersed moving boundary method", on utilise une approche eulérienne pour calculer l'écoulement du fluide sur un maillage cartésien fixe. Cette méthode, présentée par [Benamour_2015], a d'abord été conçue pour des solides élastiques par Peskin, dans les années 1970. Puis, la méthode a été modifiée pour s'adapter aux solides indéformables en considérant la frontière attachée, à l'aide d'un ressort, à un point de référence. On peut donc exprimer la densité de la force générée par l'élasticité du matériau \vec{F} comme suit :

$$\vec{F}(s, t) = -k(\vec{X}(s, t) - \vec{X}(s, t)^r) \quad (34)$$

Avec k qui correspond à la constante de raideur du ressort et $\vec{X}(s, t)^r$ au point de référence associé au nœud de la frontière de coordonnées cartésiennes $\vec{X}(s, t)$.

Pour forcer le nœud de la frontière à rester très proche de son nœud de référence, le coefficient de raideur k doit être choisi très grand. De plus, pour éviter la déformation du solide, on autorise uniquement un mouvement de rotation du point de référence entre deux pas de temps ce qui permet de garder une distance constante entre le centre de gravité du solide et sa frontière entre ces deux pas de temps. On obtient alors la formule suivante :

$$\vec{X}(s, t)^r = \vec{X}_p(t) + R(t)(\vec{X}(s, 0)^r - \vec{X}_p(0)) \quad (35)$$

Où \vec{X}_p est le centre de gravité du solide et $R(t)$ sa matrice de rotation.

Pour coupler cette méthode avec la LBM, on distribue $\vec{F}(s, t)$ sur le maillage eulérien de la LBM et on obtient alors la force exercée par l'obstacle sur le fluide \vec{f}_h pour le maillage eulérien :

$$\vec{f}_h(\vec{x}, t) = \sum_{n=1}^N \vec{F}(\vec{X}_n, t) \delta_h(\vec{x} - \vec{X}_n) \Delta s \quad \forall \vec{x} \in g_h \quad (36)$$

Avec N qui correspond au nombre de nœuds de la frontière immergée, $\delta_h(\vec{x})$ la distribution de Dirac, g_h désignant le maillage régulier eulérien des nœuds fluides et :

$$\vec{F}(\vec{X}_n, t) = -k(\vec{X}_n - \vec{X}_n^r) \quad (37)$$

[Benamour_2015] utilise alors l'équation de Lattice-Boltzmann avec terme source comme ceci :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^e(\vec{x}, t)) + \Delta t F_i \quad (38)$$

Où $F_i = \frac{3}{2} \omega_i \vec{f}_h \cdot \vec{c}_i$

L'équation de Lattice Boltzmann (38) peut alors être résolue pour calculer la vitesse du fluide sur les nœuds du domaine eulérien à l'aide des équations des moments sur la vitesse (4). La vitesse \vec{u} est ensuite interpolée sur les nœuds de la frontière immergée avec l'équation discrétisée suivante :

$$\vec{U}(\vec{X}_n, t + \Delta t) = \sum_{\vec{x} \in g_h} \vec{u}(\vec{x}, t + \Delta t) \delta_h(\vec{x} - \vec{X}_n) h^2 \quad (39)$$

On peut alors calculer la position de l'ensemble des points de la frontière immergée à l'aide de la vitesse $\vec{U}(\vec{X}_n, t + \Delta t)$ maintenant connue pour chacun de ces points.

La littérature sur cette méthode, révèle des problèmes de stabilité dans la résolution des équations du fluide pour des k trop élevés, et pour des k trop faibles les résultats semblent dépendre de ce coefficient k . On s'intéressera donc à une autre méthode, la "partially saturated cells method".

3.1.2 Partially saturated cells method

La "partially saturated cells method" a été proposée par [Noble et Tozczynski_1998] pour étudier des écoulements de fluides dans un milieu granulaire. Cette méthode de couplage entre un fluide et des solides se base sur l'équation de Lattice Boltzmann avec un opérateur de collision BGK (17). Cette équation est modifiée en y ajoutant une fonction de pondération, B_s , permettant de faire la distinction entre les cellules occupées ou non par les obstacles solides, et un terme de collision solide, Ω_i^s , qui prend en compte l'interaction du fluide avec chaque obstacle solide dans les cellules concernées. Elle permet alors de conserver le caractère local de la collision propre à la méthode de Lattice Boltzmann tout en s'adaptant à la présence de frontières évolutives des obstacles solides :

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\vec{x}, t) + (1 - \sum_{s=1}^N B_s) \left(-\frac{1}{\tau} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^e(\vec{x}, t)) \right) + \sum_{s=1}^N B_s \Omega_i^s \quad (40)$$

où N représente le nombre de solides dans le fluide étudié.

Il existe plusieurs formes possible pour l'opérateur de collision solide Ω_i^s , [Noble et Tozczynski_1998] en présentent deux dans leur étude. La première est basée sur la règle du "rebond" de la partie non équilibrée et s'écrit :

$$\Omega_i^s = f_{-i}(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x}, t) + f_i^e(\rho, \vec{u}_s) - f_{-i}^e(\rho, \vec{u}) \quad (41)$$

Où \vec{u}_s est la vitesse du solide s à l'instant t , au nœud de coordonnées x et la notation f_{-i} correspond au "rebond" à partir de f_i obtenu en inversant l'ensemble des vitesse moléculaire ($\vec{c}_i \rightarrow -\vec{c}_i$).

La deuxième forme est construite de façon à ce que la distribution de particules résultante soit égale à celle d'équilibre évaluée à la vitesse du solide plus un terme dépendant de la différence entre la distribution f_i et sa valeur d'équilibre :

$$\Omega_i^s = f_i^e(\rho, \vec{u}_s) - f_i(\vec{x}, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right)(f_i(\vec{x}, t) - f_i^e(\rho, \vec{u})) \quad (42)$$

Au delà des différentes formes possibles pour le terme de collision solide Ω_i^s , on a également plusieurs possibilités pour l'expression de B_s dans l'implémentation de l'équation (40). Suite à l'étude de [Noble et Tozczynski_1998], il s'avère que pour le choix de (41) pour Ω_i^s , une fonction de pondération simple suffit pour obtenir de bons résultats :

$$B_s = \varepsilon_s \quad (43)$$

où ε_s est la fraction volumique occupée par le solide s dans la cellule de calcul, comme illustré par la Figure (10).

En revanche, pour le choix de (42) pour Ω_i^s , [Noble et Tozczynski_1998] proposent une fonction de pondération un peu plus complexe :

$$B_s = \frac{\varepsilon_s(\frac{\tau}{\Delta t} - 0.5)}{(1 - \varepsilon_s) + (\frac{\tau}{\Delta t} - 0.5)} \quad (44)$$

On observe bien que dans les deux cas, on a $B_s = 0$ quand la cellule est remplie uniquement de fluide et $B_s = 1$ quand elle est remplie uniquement de solide s .

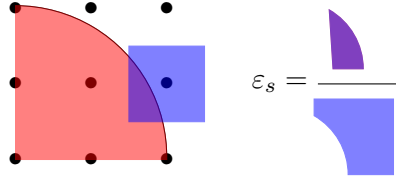


FIGURE 10: Représentation de ε_s pour une cellule intersectée par un solide

On peut alors calculer la force hydrodynamique totale agissant sur l'obstacle comme explicité par [Owen_2011] :

$$\vec{F}_h = \frac{\Delta x^D}{\Delta t} \sum_n B_n \left(\sum_i \Omega_i^s \vec{c}_i \right) \quad (45)$$

Où D représente la dimension du domaine, n le numéro du nœud et $B_n = \sum_{s=1}^N B_s$ dans la cellule de calcul associée au nœud n .

Pour une force hydrodynamique selon l'axe x , on a son coefficient de traînée associé :

$$C_d = \frac{2F_h^{(x)}}{\rho(u_m^{(x)})^2 S} \quad (46)$$

Avec $F_h^{(x)}$ la composante selon x de la force de traînée \vec{F}_h , S une surface de référence liée à l'obstacle et $u_m^{(x)}$ la composante selon x de la vitesse de l'obstacle relativement au fluide.

3.2 Implémentation numérique

Dans la suite nous utiliserons la “partially saturated cells method” pour coupler la méthode de Lattice Boltzmann avec un obstacle solide. Avec ce couplage, de nouvelles étapes (en bleu) apparaissent alors dans l’algorithme :

Algorithme 2 : Méthode de Lattice Boltzmann couplée avec un obstacle solide

Initialisation : On y ajoute l’initialisation des données de l’obstacle (rayon, coordonnée centre d’inertie, vitesse rotation, vitesse translation ...)

Calcul ε_s et u_s : Calcule et stockage dans un tableau des valeurs de ε_s et u_s pour les cellules qui intersectent l’obstacle

While : critère d’arrêt sur la vitesse \vec{u}

Diffusion

Condition limite (rebond à mi chemin)

Valeurs macroscopiques

f Équilibre : On y ajoute le calcul de $f_i^e(\rho, \vec{u}_s)$

Collision solide : $\Omega_i^s = f_{-i} - f_i + f_i^e(\rho, \vec{u}_s) - f_{-i}^e(\rho, \vec{u})$

Collision

Assemblage “partially saturated cells method” : Sur l’ensemble des cellules qui intersectent l’obstacle : $f_i = f_i + B_s \frac{1}{\tau} (f_i^{temp} - f_i^e(\rho, \vec{u})) + B_s \Omega_i^s$

Body force

$-B_s$ Body force : On retire la body force dans les cellules qui intersectent l’obstacle : $f_i = f_i - B_s \Delta t \rho \frac{g c_{ix}}{K c^2}$

End while

Calcule de la force de traînée : $F_h = \frac{\Delta x^D}{\Delta t} B_s \left(\sum_i \Omega_i^s c_i \right)$

Calcule du coefficient de traînée : $C_d = \frac{2F_h}{\rho u_m^2 S}$

Sauvegarde : On stocke dans des fichiers les résultats des valeurs macroscopiques et le coefficient de traînée obtenues.

Affichage : On affiche sur le terminal les paramètres initiaux (ν , Re , dx , dt ...) et les données finales (nombre itération, erreurs, vitesse max calculée, coefficient de traînée...)

Pour coupler la méthode de Lattice Boltzmann avec un obstacle solide, on a besoin de calculer la fraction volumique ε_s occupée par le solide dans chaque cellule qui intersecte l’obstacle. Pour cela, on s’inspire de la méthode présentée par [Galindo-Torres_2013] pour un obstacle 3D sphérique, qui consiste à trouver les points d’intersections entre la sphère et les arêtes de la cellule. Une fois les deux points extrêmes identifiés pour une arête, on calcule alors la distance entre ces deux points. On obtient donc la longueur intersectée de chaque arête et on définit la fraction solide ε_s comme étant le ratio de la somme de ces longueurs intersectées sur la longueur totale des arêtes de la cellule.

On souhaite adapter cette méthode à l’ensemble des polyèdre convexe. Pour cela, on commence par identifier les cellules qui intersectent le cercle circonscrit de l’obstacle. On commence par identifier les indices extrêmes des cellules qui intersectent le cercle (ou sphère) circonscrit de l’obstacle puis à partir de ces indices on obtient l’ensemble de ces cellules. On peut maintenant calculer ε_s et \vec{u}_s pour chacune de ces cellules. Pour calculer la vitesse de l’obstacle au centre de la cellule \vec{u}_s , on utilise la formule suivante :

$$\vec{u}_s = \vec{v}_t + \vec{v}_r \wedge \vec{X} \quad (47)$$

où \vec{v}_t est la vitesse de translation de l'obstacle, \vec{v}_r sa vitesse de rotation et $\vec{X} = \vec{X}_c - \vec{X}_o$ la différence entre le centre de la cellule et le centre de l'obstacle.

Pour le calcul de la fraction volumique ε_s occupée par le solide, on commence par parcourir l'ensemble des cellules qui intersectent le cercle inscrit de l'obstacle solide. Puis on regarde pour chacune de ces cellules (carré en dimension 2 et cube en dimension 3) le nombre de sommets dans le cercle inscrit de l'obstacle. Si l'ensemble de tout les sommets y sont, alors $\varepsilon_s = 1$ et on peut calculer \vec{u}_s associée à cette cellule (\vec{u}_s est d'abord initialisé à zéros puis calculée uniquement dans les cas où $\varepsilon_s \neq 0$). Si au moins un des sommets n'appartient pas au cercle inscrit de l'obstacle, alors on vérifie qu'il y en ai au moins un qui l'intersecte puis on détermine la longueur de chaque arête de la cellule dans l'obstacle. On peut alors les additionner puis diviser par le nombre totale d'arête d'une cellule (4 en 2 dimensions et 12 en 3 dimensions) multiplié par Δx ce qui nous donne la fraction volumique ε_s occupée par le solide dans la cellule de calcul. (On prend en compte que les cellules voisines ont des arêtes communes et donc on parcours uniquement les arêtes qui n'ont pas encore été calculées).

On résume l'ensemble de ces étapes pour dans l'algorithme suivant :

Algorithme 3 : Calcul de ε_s

```

for i=1, nombre cellules intersectées par le cercle circonscrit de l'obstacle :
  if Tous les sommets de la cellule sont dans le cercle inscrit de l'obstacle :
     $\varepsilon_s = 1$  et calcul de  $u_s$ 
  else :
    if la cellule n'intersecte pas le cercle circonscrit de l'obstacle :
       $\varepsilon_s = 0$ 
    else :
      for j=1, nombre d'arête de la cellule  $n_a$  :
        if arête déjà parcourue :
          Prendre longueur arête dans l'obstacle déjà calculé
        else :
          if l'arête intersecte le cercle circonscrit :
            Calcule longueur arête dans obstacle
          else :
            longueur arête = 0
          end if
        end if
      end for
      Addition de toutes les longueurs d'arête de la cellule dans l'obstacle  $n_a^0$ 
       $\varepsilon_s = \frac{n_a^0}{n_a \Delta x}$ 
      if  $\varepsilon_s \neq 0$  :
        Calcul de  $u_s$ 
      end if
    end if
  end if
end for

```

Pour toutes les simulations qui suivent, on garde le même critère d'arrêt que dans le cas sans obstacle 27.

3.3 Résultats numériques 2D

On souhaite valider le couplage de la méthode de Lattice Boltzmann avec un obstacle solide en 2 dimensions. Pour ce faire, on se base sur deux cas tests de l'article de [Owen_2011]. Le premier étant un écoulement de Poiseuille autour d'un disque et le second autour d'un carré. On comparera les résultats obtenus pour le coefficient de traînée avec ceux de l'article.

3.3.1 Écoulement de Poiseuille autour d'un disque

On se place dans le même domaine et avec les mêmes paramètres que pour l'écoulement de Poiseuille étudié en section 2.2. On ajoute un obstacle circulaire de diamètre 0.02 mètre, immobile, au centre du domaine (Figure 11).

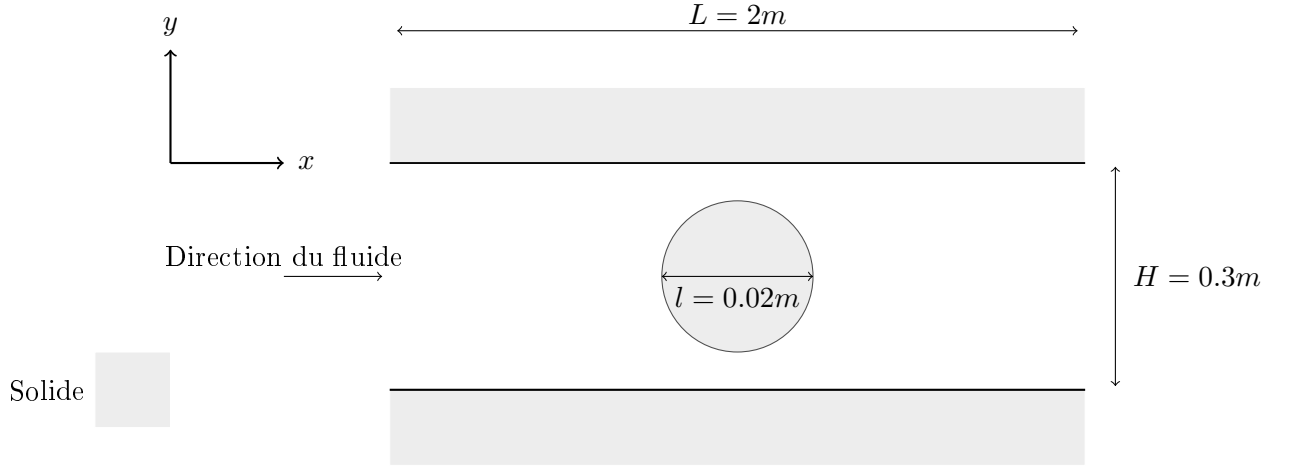


FIGURE 11: couplage fluide-grain en 2D avec un disque

Pour rappel, une condition limite de rebond à mi chemin est appliquée sur les bords solides haut et bas du domaine et une condition de périodicité sur l'écoulement du fluide en entrée et en sortie est imposée. On résume les paramètres choisis dans le tableau ci dessous :

TABLE 4: Données initiales

| | |
|------------|----------------|
| Δx | $0.002m$ |
| τ | 0.55 |
| ν | $10^{-4}m^2/s$ |
| ρ | $1000kg/m^3$ |

Pour calculer la collision solide Ω_i^s , on prendra la formule 41, et on choisira donc de prendre $B_s = \varepsilon_s$.

On calcule le coefficient de traînée à l'aide de la formule (46) en prenant S comme étant le diamètre de l'obstacle. L'écoulement du fluide étant un Poiseuille, on sait que avant interaction avec l'obstacle sa vitesse est maximale au centre du domaine. Comme l'obstacle est situé au

centre du domaine et de diamètre très petit devant la hauteur du domaine, on prend u_m comme étant cette vitesse maximale du fluide.

On a donc calculé le coefficient de traînée pour différents nombres de Reynolds et comparé avec les résultats de [Owen_2011]. Pour faire varier le nombre de Reynolds, on fait varier l'accélération \vec{g} de la body force et on obtient le nombre de Reynolds associé au fluide proche de l'obstacle avec :

$$Re = \frac{u_m D}{\nu} \quad (48)$$

où u_m correspond à la vitesse maximale du fluide calculée avant interaction avec l'obstacle, D le diamètre de l'obstacle et ν la viscosité cinématique du fluide.

Les résultats obtenus sont représentés sur la Figure 12 suivante :

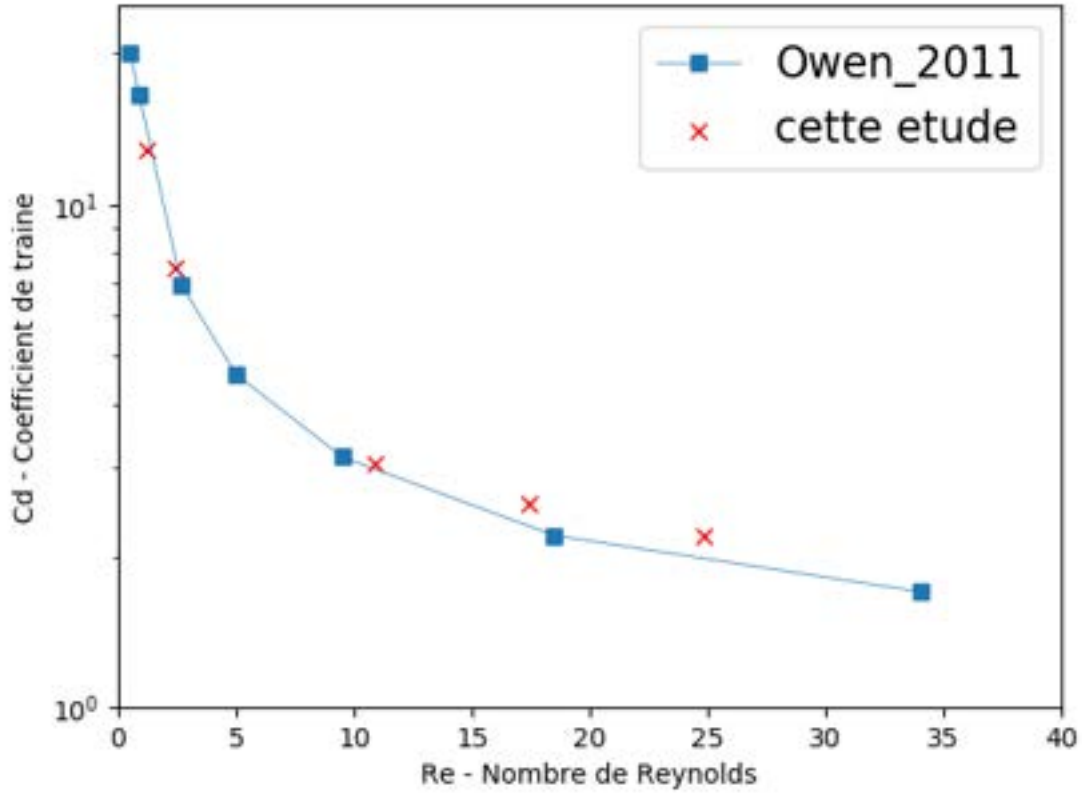


FIGURE 12: Coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds, pour un écoulement de Poiseuille autour d'un disque en 2D

On peut voir sur cette figure que, bien que nos coefficients de traînée s'éloignent légèrement de ceux obtenus par [Owen_2011] pour des nombres de Reynolds supérieurs à 10, ils restent tout de même très proches et semble bien suivre le profil de résultats de [Owen_2011]. On peut donc valider cette simulation.

3.3.2 Écoulement de poiseuille autour d'un carre

On s'intéresse maintenant à l'écoulement d'un fluide autour d'un carré selon [Owen_2011]. On se place dans un domaine de 3.07 mètres de long et 0.82 mètre de hauteur. On garde les mêmes conditions limites et les mêmes paramètres que dans le cas précédent. La taille du domaine étant différente, on change la discrétisation, on prend $\Delta x = 0.005$ mètres. On aura donc $n_x = 614$ et $n_y = 165$. Comme pour le cas précédent, l'écoulement du fluide est un écoulement de Poiseuille dirigé par une body force d'accélération \vec{g} que l'on fera varier pour obtenir différents nombres de Reynolds. On place au centre de ce domaine un obstacle carré de largeur 0.1025 mètre et immobile.

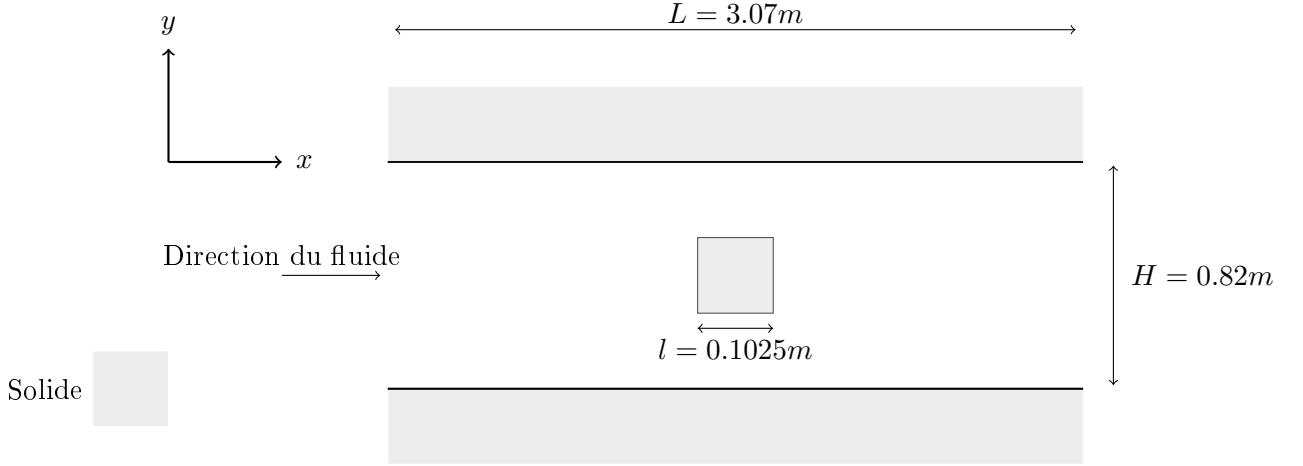


FIGURE 13: couplage à 2 dimensions avec un solide carré

Les paramètres de la simulation sont résumé dans le tableau suivant :

TABLE 5: Paramètres de simulation

| | |
|------------|----------------|
| Δx | $0.005m$ |
| τ | 0.55 |
| ν | $10^{-4}m^2/s$ |
| ρ | $1000kg/m^3$ |

Comme pour la simulation précédente, on souhaite calculer le coefficient de traînée pour différents nombres de Reynolds et comparer avec les résultats obtenus par [Owen_2011].

Pour calculer le coefficient de traînée, on utilise la formule (46) en prenant $u_m^{(x)}$ comme étant la vitesse maximale du fluide calculée au centre du domaine avant interaction avec l'obstacle dans la direction x . Ce choix est celui qui avait été validé dans le cas test autour de l'obstacle circulaire. On choisit également les mêmes formules pour la collision solide Ω_i^s et B_s ainsi que pour le nombre de Reynolds.

Pour l'obstacle carré, on obtient les résultats présentés sur la Figure 14.

On observe des résultats proche de ceux attendus bien que comme dans le cas précédent, des résultats légèrement moins bons pour des nombres de Reynolds supérieurs à 10. Cependant, le profil des résultats obtenus suit bien celui présenté par [Owen_2011].

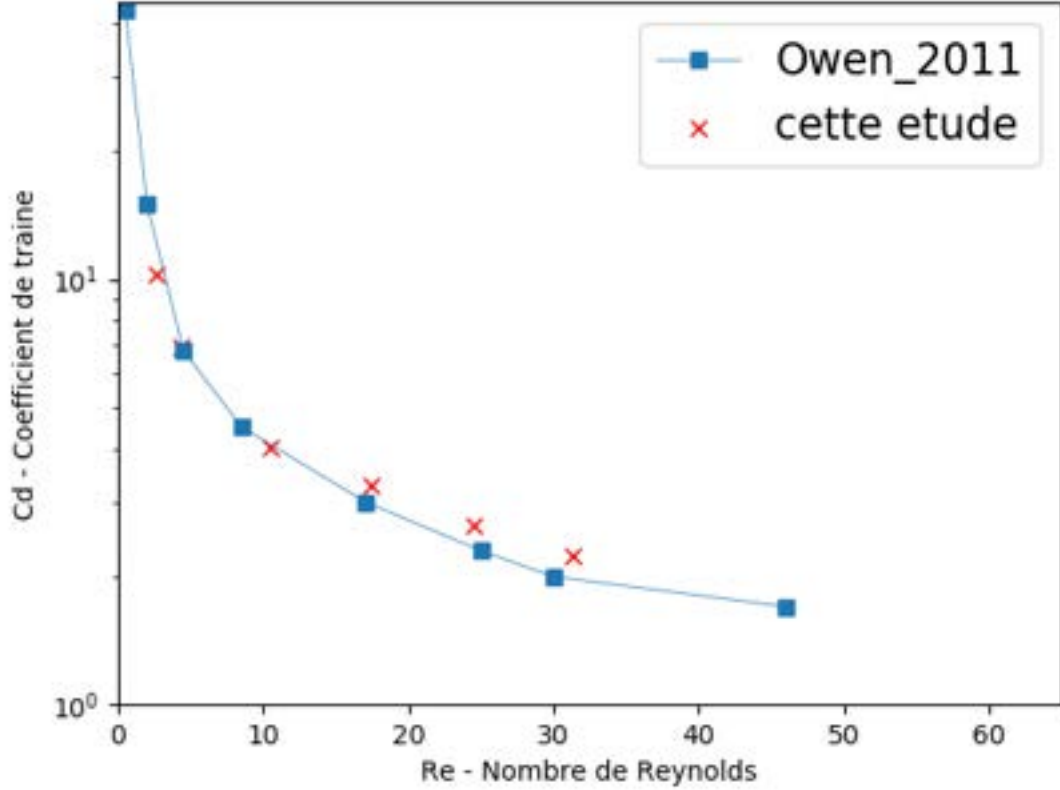


FIGURE 14: Coefficient de traînée en fonction du nombre de Reynolds, pour un écoulement de Poiseuille autour d'un carré en 2D

On peut donc également valider cette simulation et maintenant tester en 3 dimensions le couplage de la LBM avec un obstacle solide.

3.4 Résultats numériques 3D

On souhaite maintenant valider le couplage de la méthode de Lattice Boltzmann avec un obstacle solide en 3 dimensions. Pour cela, on reproduit un cas test de l'article de [Galindo-Torres_2013], qui simule l'écoulement d'un fluide autour d'une sphère. On comparera nos résultats de coefficient de traînée avec ceux de [Galindo-Torres_2013] mais également ceux de [Owen_2011] qui présente un test similaire, ainsi qu'avec une corrélation empirique trouvée avec des données expérimentales [White_1991] :

$$C_D \approx \frac{24}{Re} + \frac{6}{1 + \sqrt{Re}} + 0.4 \quad (49)$$

On se place dans un domaine de 240 cellules de longueur et 60 cellules de hauteur et profondeur où $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0.004m$. On place au centre de ce domaine une sphère solide de rayon $0.036m$. On pose la densité du fluide $\rho = 1000kg/m^3$, sa viscosité cinématique $\nu = 10^{-4}m^2/s$ et un temps de relaxation $\tau = 0.6$. On fixe alors le pas de temps à l'aide de (28). On applique dans chacune des trois directions une condition limite périodique et on impose une body force

d'accélération constante \vec{g} dans la direction du fluide x . On calcule le nombre de Reynolds en fonction du diamètre de la sphère D , de la viscosité cinématique du fluide ν et de la vitesse moyenne u_{ave} calculée dans les cellules non occupée par l'obstacle :

$$Re = \frac{u_{ave} D}{\nu} \quad (50)$$

Avec la vitesse moyenne u_{ave} qui est calculée comme suit :

$$u_{ave} = \frac{1}{n_x n_y n_z} \sum_{i=1}^n (1 - \varepsilon_{i_s}) u_i^{(x)} \quad (51)$$

où n représente le nombre de nœuds dans le domaine, $u_i^{(x)}$ la vitesse calculé au nœud i dans la direction x et ε_{i_s} le ratio de solide s dans la cellule de calcul associé au nœud i .

Pour faire varier le nombre de Reynolds, on test notre simulation pour différentes accélérations \vec{g} . Pour chaque simulation, on calcule la vitesse moyenne dans le domaine à l'aide de la formule 51 puis le nombre de Re avec 50. On y associe alors le coefficient de traînée calculé à l'aide de la formule suivante :

$$C_D = \frac{8F_h^{(x)}}{\rho u_{ave}^2 \pi D^2} \quad (52)$$

Pour ces simulations, on applique un nouvel opérateur de collision que [Galindo-Torres_2013] utilise :

$$\Omega_i^s = f_{-i}(\vec{x}, t) - f_i(\vec{x}, t) + f_i^e(\rho, \vec{u}_s) - f_{-i}^e(\rho, \vec{u}_s) \quad (53)$$

Cet opérateur de collision est associé à la fonction de pondération suivante :

$$B_s = \frac{\varepsilon_s(\tau - 0.5)}{(1 - \varepsilon_s) + (\tau - 0.5)} \quad (54)$$

Les résultats obtenus sont exposés sur la figure 15. On peut y voir que les résultats obtenus sont très similaires à ceux de [Galindo-Torres_2013] et [Owen_2011]. Les valeurs restent proches et suivent bien le profil de résultats présenté par [Galindo-Torres_2013]. On peut donc valider cette simulation 3D.

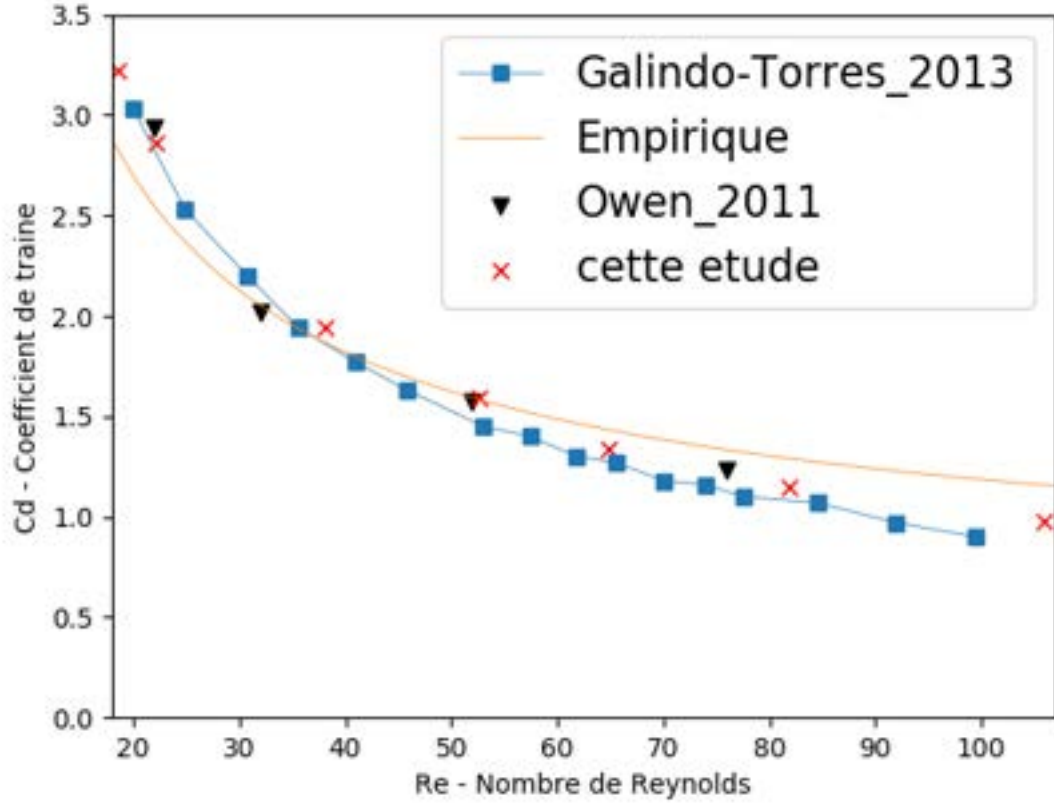


FIGURE 15: Coefficient de traînée calculé en fonction du nombre de Reynolds, écoulement d'un fluide autour d'une sphère en 3D

3.5 Discussion

Pour la simulation à 2 dimensions autour d'un disque on a d'abord commencé par fixer un nombre de Reynolds puis imposé l'accélération de la body force \vec{g} à partir de ce nombre à l'aide de la formule (33), comme dans les simulations d'écoulement de Poiseuille sans obstacle en section 2.2. On calculait alors le coefficient de traînée comme présenté en section 3.3.1 mais avec le nombre de Reynolds fixé au départ pour le calcul de la body force et en prenant la vitesse maximale théorique obtenue à l'aide de la formule suivante :

$$U_{max} = \frac{3}{2} \frac{Re\nu}{D} \quad (55)$$

Avec D le diamètre de l'obstacle.

On obtenait alors les résultats résumés dans le tableau suivant :

TABLE 6: Coefficients de traînée calculés à partir de de la vitesse maximale théorique, en fonction du nombre de Reynolds fixé en début de simulation

| Re | C_d cette étude | C_d Owen | erreur relative |
|------|-------------------|------------|-----------------|
| 0.5 | 16.60 | 20.1 | 17.41% |
| 0.9 | 9.56 | 16.5 | 42.06% |
| 2.7 | 3.78 | 6.9 | 45.22% |
| 5 | 2.37 | 4.6 | 48.48% |
| 9.5 | 1.49 | 3.15 | 52.70% |
| 18.5 | 0.92 | 2.2 | 58.18% |
| 34 | 0.58 | 1.7 | 65.88% |

On peut voir que les résultats sont globalement très éloignés de ceux de [Owen_2011]. On choisit alors de tester à nouveau notre simulation en prenant une moyenne de cette vitesse maximale. Pour un écoulement de Poiseuille, cela revient à prendre $\frac{2}{3}$ de cette vitesse maximale. Ce choix vient du fait que l'obstacle étant plus large qu'une cellule de calcul, on suppose que la vitesse de l'obstacle relativement au fluide doit être plus proche de la vitesse moyenne du fluide dans le domaine. On teste cette théorie d'abord pour des nombres de Reynolds autour de 10, et les résultats semblent cohérents et proches de ceux attendus. Cependant, quand on s'éloigne de ce nombre de Reynolds, les résultats sont moins bons :

FIGURE 16: Coefficient de traînée calculé à partir de $\frac{2}{3}$ de la vitesse maximale théorique, en fonction du nombre de Reynolds fixé en début de simulation

| Re | C_d cette étude | C_d Owen | erreur relative |
|------|-------------------|------------|-----------------|
| 0.5 | 37.36 | 20.1 | 85.87% |
| 0.9 | 21.51 | 16.5 | 30.36% |
| 2.7 | 8.50 | 6.9 | 23.19% |
| 5 | 5.33 | 4.6 | 15.87% |
| 9.5 | 3.35 | 3.15 | 6.35% |
| 18.5 | 2.06 | 2.2 | 6.36% |
| 34 | 1.30 | 1.7 | 23.55% |

Suite à ces résultats pas encore assez proche de ceux attendus, on souhaite vérifier par un autre moyen l'efficacité et la cohérence de notre implémentation de ce couplage pour savoir si le problème vient du calcul du coefficient. Pour cela on regarde les lignes de courant et les profils de vitesse obtenus pour notre simulation (Figure 17 à 22).

Il faut noter que le profil de vitesse calculé à partir du u_{max} théorique ne correspond pas forcément à la solution exacte attendu. En effet, il correspond à la vitesse d'un écoulement de Poiseuille dans un domaine de hauteur l , le diamètre de l'obstacle, sans obstacle. Dans notre cas, avec l'obstacle au centre du domaine, on ne connaît pas la vitesse exacte attendue.

Quand on observe le profil de la vitesse calculé, on voit que les vitesses en entrée et en sortie du domaine sont parfaitement superposées et on retrouve bien une vitesse nulle au milieu du domaine à l'endroit de l'obstacle avec une accélération de part et d'autre de l'obstacle. Ce profil semble donc cohérent.

De plus, si on regarde les lignes de courant, on observe bien qu'elles contournent l'obstacle comme voulu, et plus le nombre de Reynolds est élevé plus la longueur de recirculation du fluide

derrière l'obstacle est grande. On voit également que cette longueur impacte le profil de vitesse pour des nombres de Reynolds élevé. Ces résultats sont donc tout à fait cohérents avec ce que l'on peut trouver dans la littérature.

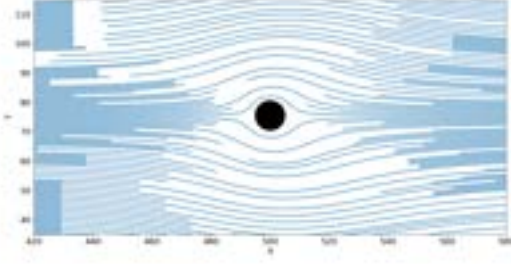


FIGURE 17: lignes de courant autour d'un disque pour $Re = 0.5$

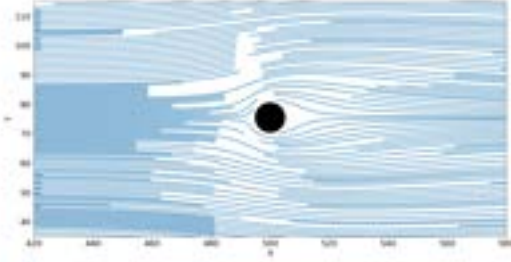


FIGURE 18: lignes de courant autour d'un disque pour $Re = 9.5$

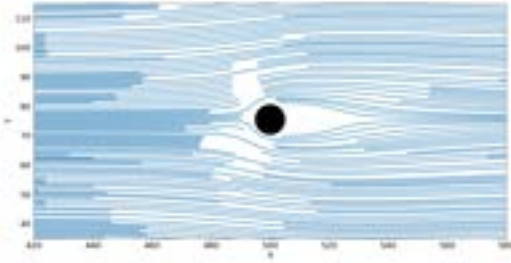


FIGURE 19: lignes de courant autour d'un disque pour $Re = 34$

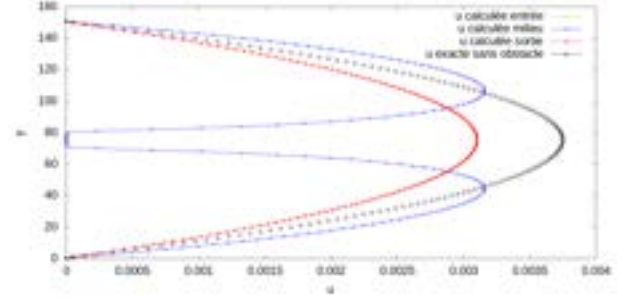


FIGURE 20: profils de vitesse pour $Re = 0.5$

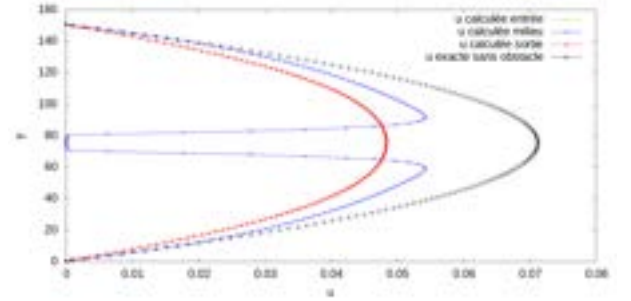


FIGURE 21: profils de vitesse pour $Re = 9.5$

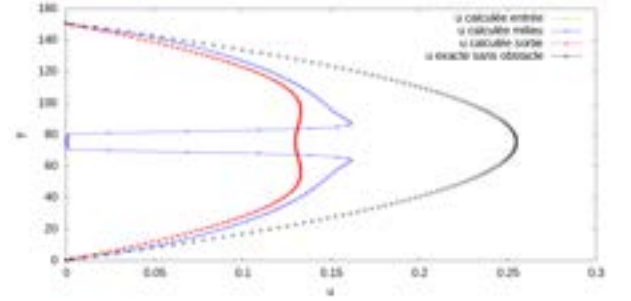


FIGURE 22: profils de vitesse pour $Re = 34$

Comme la vitesse maximale calculée autour de l'obstacle est considérablement différente de la vitesse maximale théorique, on choisi de prendre, dans la formule du coefficient de traînée (46), u_m comme la vitesse maximale calculée autour de l'obstacle situé au centre du domaine. Cette vitesse pourrait correspondre à la vitesse de l'obstacle relativement au fluide. On avait commencé par tester avec la valeur théorique au centre du domaine selon l'axe des y (maximum de la courbe noire des Figures ci-dessus), on teste donc maintenant avec la valeur maximale calculée au centre du domaine selon l'axe des x (c'est à dire le maximum de la courbe bleu des Figures ci-dessus). On obtient les coefficients de traînée suivants :

TABLE 7: Coefficient de traînée calculé à partir de la vitesse maximale calculée autour de l'obstacle, en fonction du nombre de Reynolds

| Re | C_d cette étude | C_d Owen | erreur relative |
|------|-------------------|------------|-----------------|
| 0.5 | 23.38 | 20.1 | 16.31% |
| 0.9 | 13.57 | 16.5 | 17.76% |
| 2.7 | 5.60 | 6.9 | 18.84% |
| 5 | 3.72 | 4.6 | 19.13% |
| 9.5 | 2.56 | 3.15 | 18.73% |
| 18.5 | 1.84 | 2.2 | 16.36% |
| 34 | 1.44 | 1.7 | 15.29% |

On remarque que bien que l'erreur relative du coefficient de traînée calculé ne descende pas plus bas que 15%, elle reste relativement constante (varie entre 15% et 20%) en fonction du nombre de Reynolds contrairement au cas précédent. On peut donc dire que dans ce deuxième cas, le profil du coefficient de traînée calculé semble globalement mieux suivre celui attendu. On les représente graphiquement dans la figure suivante :

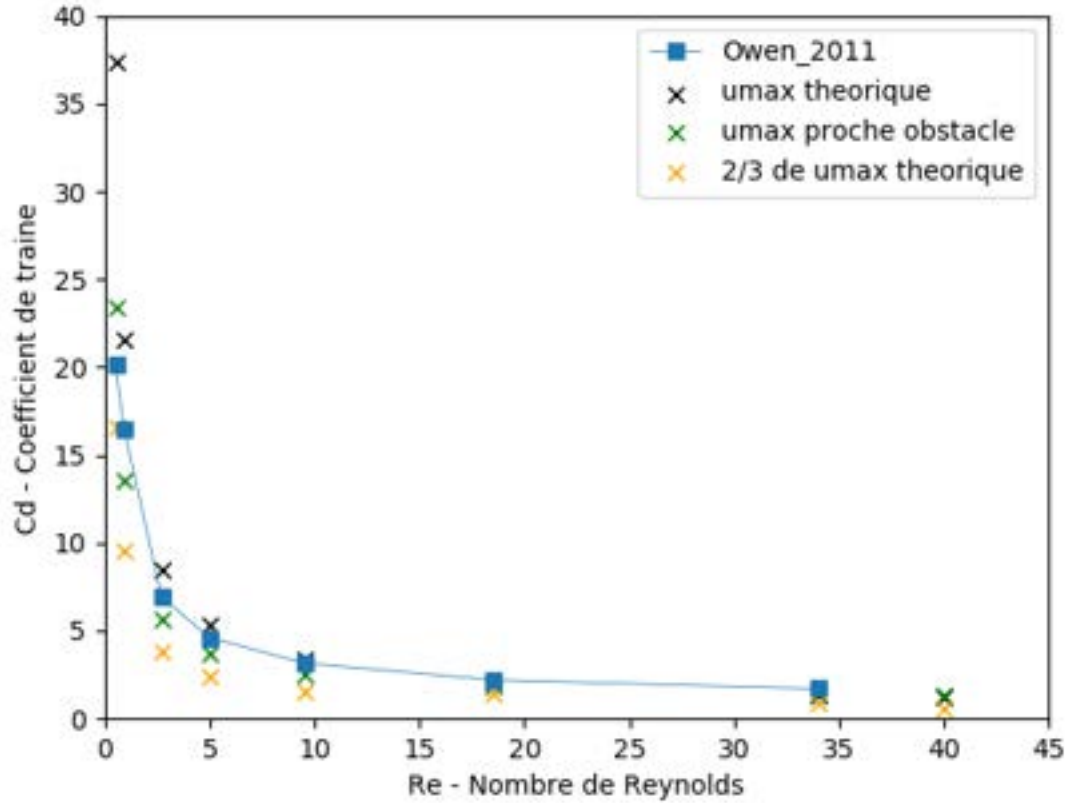


FIGURE 23: Coefficient de traînée calculé à partir de $\frac{2}{3}u_{max}$ théorique et du u_{max} calculé autour de l'obstacle, en fonction du nombre de Reynolds

Quand on regarde les figures 20 à 22, on peut remarquer que la vitesse maximale calculée au centre du domaine avant l'interaction du fluide (maximum de la courbe rouge) avec l'obstacle est très différente de celle calculé à partir du nombre de Reynolds fixé en début de simulation. C'est pourquoi on a finalement choisi de recalculer le nombre de Reynolds en fin de simulation à partir de la vitesse obtenue au centre du domaine en entrée et en sortie du domaine et de calculer le coefficient de traînée à partir de ces nouvelles valeurs. Ce sont finalement les résultats présentés en section 3.3.1 et retenus pour le reste des simulations 2D.

On s'intéresse donc maintenant à ces résultats présentés en section 3.3.1 et 3.3.2. On a remarqué que les résultats semblaient légèrement moins bon pour des nombres de Reynolds supérieurs à 10. On peut se demander si la condition de périodicité n'influencerait pas la vitesse calculée et donc le calcul du coefficient de traînée. Cette condition limite fait apparaître un réseau périodique d'obstacles espacés de façon régulière et on ne se retrouve donc plus exactement dans le cas d'un écoulement de fluide infini autour d'un seul obstacle. En effet, on peut observer dans le cas du disque comme dans celui du carré, une zone de recirculation derrière l'obstacle qui augmente avec le nombres de Reynolds (figures 17 à 19 pour le disque et figures 24, 26 et 28 pour le carré), et quand il est supérieur à 10 on peut voir que la vitesse semble être impactée par cette zone de recirculation en entrée et en sortie du domaine (courbe rouge des figures 20 à 22 pour le disque et figures 25, 27 et 29 pour le carré).

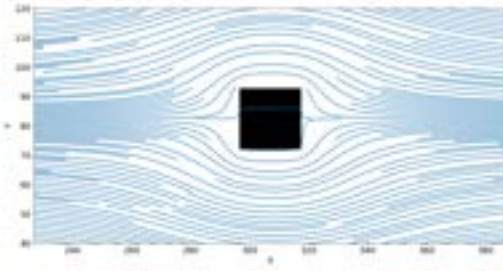


FIGURE 24: lignes de courant autour d'un carré pour $Re = 0.5$

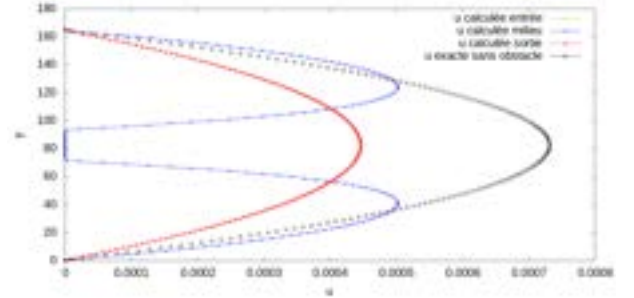


FIGURE 25: profils de vitesses pour $Re = 0.5$

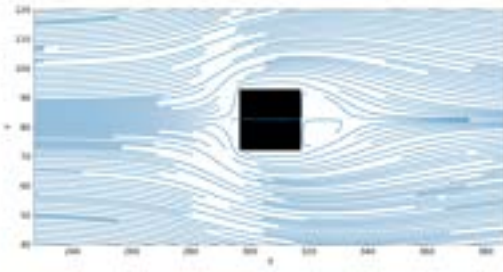


FIGURE 26: lignes de courant autour d'un carré pour $Re = 17$

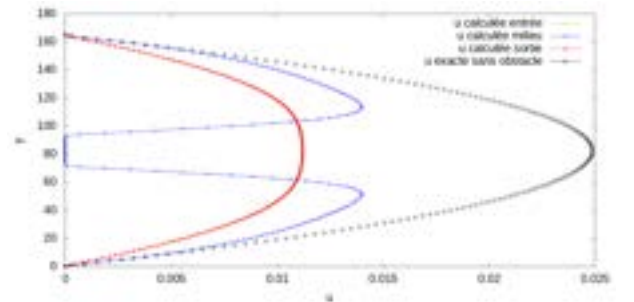


FIGURE 27: profils de vitesses pour $Re = 17$

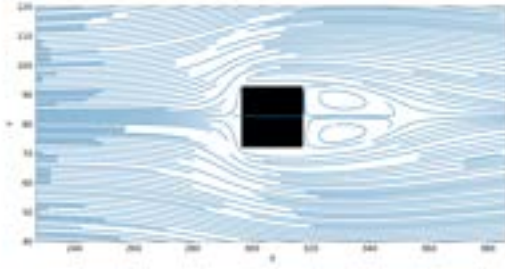


FIGURE 28: lignes de courant autour d'un carré pour $Re = 46$

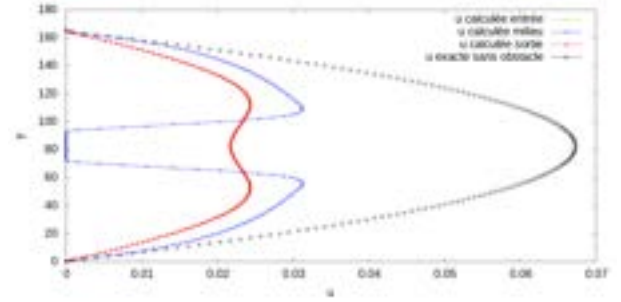


FIGURE 29: profils de vitesses pour $Re = 46$

4 Couplage DEM/LBM

Jusque là, on couplait la methode de Lattice Boltzmann avec un obstacle solide immobile par rapport au domaine (vitesse non nul fluidemais ps par rapport au fluide), maintenant on souhaite que l'obstacle se déplace.

La DEM permet de simuler les interactions entre différents solides. Elle résoud les équations de Newton sur chaque grain solide soumis à des forces à distance et de contact. Dans un premier temps, on code une version simplifiée de la DEM dans laquelle il n'y a pas de force de contact solide, seulement des forces fluide, et un seul grain en translation. Il en résulte que la partie DEM se limite à la résolution d'une équation de Newton en translation et au calcul de vitesse et déplacement en translation par un schéma de différences finies d'ordre 2 tout simple ("Leap-frog Verlet").

On souhaite donc maintenant coupler la LBM avec cette méthode de différences finies en 2 dimensions. Pour cela, on se place dans une cuve remplie d'huile au repos, de $H = 0.48m$ de hauteur et $L = 0.045m$ de largeur. Puis on laisse tomber une bille en aluminium, que l'on représentera par un disque, de masse volumique $\rho_b = 2700kg/m^3$ et de diamètre $D = 0.003m$.

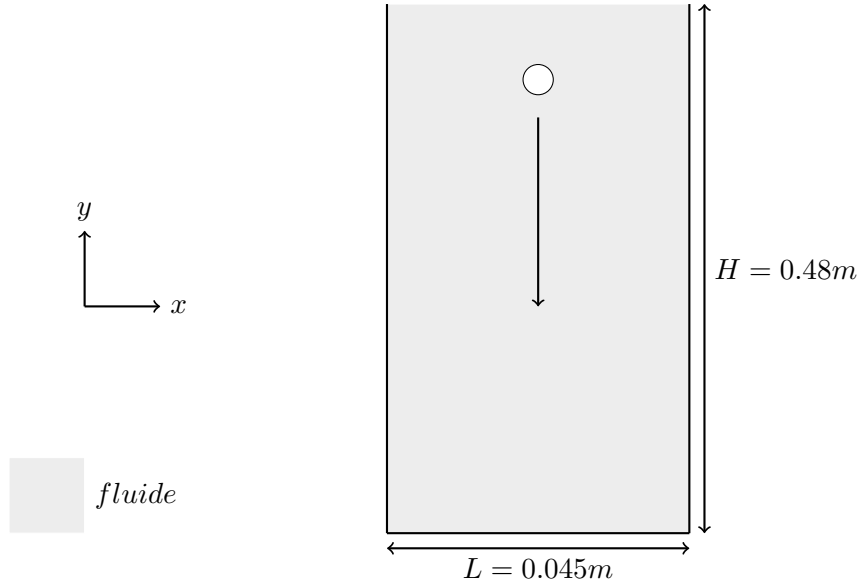


FIGURE 30: représentation schématique de la simulation

À l'aide d'une méthode de différence finie on va calculer la position et la vitesse de l'obstacle à chaque pas de temps puis transmettre ces informations au code LBM qui calculera la force de traînée obtenue. On comparera nos résultats avec ceux obtenus par la loi de Stokes qui nous donne la vitesse limite V_l atteinte par la bille pendant sa chute dans le fluide :

$$V_l = \frac{g(\rho_b - \rho_f)D^2}{18\rho_f\nu} \quad (56)$$

où g correspond à l'accélération de pesanteur que l'on estimera à $9.81m/s^2$, D le diamètre de la bille et ρ_f la masse volumique du fluide et ν sa viscosité.

4.1 LBM

Pour la méthode LBM, on applique des conditions de rebond à mi chemin sur chacune des parois solides et on pose $\Delta x = 0.0003m$ et $\Delta t = 6.8 \times 10^{-5}s$. La masse volumique du fluide vaut $\rho_f = 880kg/m^3$.

4.2 La méthode de différences finies

On pose $z(t)$ la position de la bille à l'instant t et donc $\dot{z}(t)$ sa vitesse au temps t . Par développements de Taylor à l'ordre 2, on obtient :

$$\begin{cases} \dot{z}(t + \frac{dt}{2}) = \dot{z}(t) + \frac{dt}{2}\ddot{z}(t) + \frac{dt^2}{8}\dddot{z}(t) + o(dt^2) \\ \dot{z}(t - \frac{dt}{2}) = \dot{z}(t) - \frac{dt}{2}\ddot{z}(t) + \frac{dt^2}{8}\dddot{z}(t) + o(dt^2) \end{cases} \quad (57)$$

On fait alors la différence des deux formules précédentes :

$$\dot{z}(t + \frac{dt}{2}) - \dot{z}(t - \frac{dt}{2}) = dt\ddot{z}(t) + o(dt^2) \quad (58)$$

La bille est soumise à trois forces, la poussée d'Archimède, la force de gravité et celle de traînée. On a alors par la deuxième loi de Newton :

$$m\ddot{z}(t) = \vec{F}_h(t) + \vec{F}_A + \vec{F}_g \quad (59)$$

Où $\vec{F}_h(t)$ correspond à la force de traînée à l'instant t , \vec{F}_A la poussée d'Archimède et \vec{F}_g la force de gravité.

La poussée d'Archimède et la force de gravité sont connues :

$$\begin{cases} \vec{F}_A = V_b \vec{g} \rho_f \\ \vec{F}_g = V_b \vec{g} \rho_b \end{cases} \quad (60)$$

Où V_b est le volume de la bille.

La force de traînée sera calculer à l'aide du code LBM, et on pourra tester dans un premier temps notre code DEM à l'aide de la formule de Stokes :

$$\boxed{\vec{F}_h(t) = -6 \pi \rho_f \nu R \dot{z}(t)} \quad (61)$$

Avec R le rayon de la bille.

En combinant les équations 58 et 59, on obtient finalement le schéma de différences finies suivant :

$$\begin{cases} \boxed{\dot{z}(t + \frac{dt}{2}) = \dot{z}(t - \frac{dt}{2}) + \frac{dt}{m} \left(\vec{F}_h(t) + \vec{F}_A + \vec{F}_g \right) + o(dt^2)} \\ \boxed{z(t + dt) = z(t) + dt\dot{z}(t + \frac{dt}{2}) + o(dt^2)} \end{cases} \quad (62)$$

De plus, comme on considère que la bille est lâchée à une vitesse nulle à la hauteur $H - 0.01m$ de sorte que la bille soit complètement immergée, alors on a pour condition initiale $z(t = 0) = H - 0.01$ et $\dot{z}(t = 0) = 0$.

Pour cette méthode on veut un pas de temps petit devant le temps caractéristique de chute de la bille sur une hauteur égale à son diamètre en ignorant le fluide, $t_c = \sqrt{\frac{D}{g}} \approx 1.75 \times 10^{-2}$. On veut

prendre un pas de temps à la fois inférieur ou égale à 0.5% de ce temps (qui vaut 8.75×10^{-5}) et au pas de temps de la LBM (qui vaut 6.8×10^{-5}). Comme $6.8 \times 10^{-5} < 8.75 \times 10^{-5}$, on prend alors $dt = 6.8 \times 10^{-5}s$ le même pas de temps que pour la LBM.

Implémentation numérique

Pour implémenter le couplage de ces deux méthodes, on suit l'algorithme suivant :

Algorithme 4 : Couplage LBM/DEM

Initialisation

While : critère d'arrêt sur la vitesse de la bille

LBM : On calcule la force de traînée de fluide sur l'obstacle

DEM : On calcule la nouvelle position de l'obstacle et sa vitesse

End while

Sauvegarde : On stocke dans un fichier les vitesses et positions de la bille en fonction du temps et la force de traînée

Affichage : On affiche sur le terminal les paramètres initiaux et les données finales

Dans l'initialisation, on initialise la vitesse de la bille à zéros et sa position à la hauteur $H - 0.01$. On fait également, comme précédemment, l'ensemble des initialisations nécessaires pour la méthode de Lattice Boltzmann.

Comme on sait par la loi de Stokes que la vitesse de la bille va converger vers une certaine vitesse limite, on peut donc prendre pour critère d'arrêt l'écart relatif entre deux vitesses \vec{v} calculée pour la bille entre deux pas de temps inférieur à 10^{-6} :

$$\frac{\|\vec{v}(t) - \vec{v}(t - dt)\|_{\infty}}{\|\vec{v}(t - dt)\|_{\infty}} < 10^{-6} \quad (63)$$

Si le pas de temps DEM avait été choisi plus petit que celui de la LBM, on aurait rajouté une boucle sur la DEM jusqu'à retrouver le pas de temps LBM. Par exemple, si le pas de temps DEM est 10 fois plus petit que celui de la LBM, après chaque code LBM on lance 10 fois consécutives le code DEM avant de relancer le code LBM.

Résultats

Dans un premier temps, on va tester le code DEM. Pour cela, on remplace dans l'algorithme le code LBM par le calcul de la force de traînée par la formule (61). Quand le code DEM sera validé on pourra alors le coupler avec notre code de la méthode de Lattice Boltzmann qui calculera alors la force de traînée du fluide sur la bille pour que le code de différences finies puisse simuler son déplacement dans la cuve et calculer sa vitesse limite atteinte pendant sa chute. Je n'ai pour le moment pas de résultats à présenter pour cette simulation.

5 Conclusion et perspectives

Lors de mon stage j'ai pu compléter et appliquer mes connaissances dans le domaine de la mécanique des fluides ainsi que développer une première expérience de chercheur.

J'ai commencé par revoir les bases de la mécanique des fluides avant de me pencher sur l'origine et le fonctionnement de la méthode de Lattice Boltzmann où j'ai notamment travaillé sur le passage de l'équation de Lattice Boltzmann aux équations de Navier-Stokes. Suite à cette étude théorique, j'ai réécrit des codes 2D, implémentés lors de travaux de recherche préalables au sein du laboratoire, puis je les ai parallélisés à l'aide de OpenMP. Une fois la parallélisation validée, j'ai repris le couplage avec des obstacles solides et validé les résultats en 2D et en 3D sur la base de références bibliographiques. Après avoir examiné différentes méthodes de couplage DEM/LBM, j'ai implémenté la "partially saturated cells method" puis j'ai comparé mes coefficients de traînée résultants de mes simulations avec ceux rapportés par [Galindo-Torres_2013] et [Owen_2011]. J'ai finalement commencé à travailler sur un cas test de couplage d'une méthode de différences finies avec la LBM comme exemple de premier couplage DEM/LBM. Je travaille actuellement sur la validation de l'implémentation de mon code DEM et il me restera donc ensuite à valider le couplage avec mon code LBM.

Dans la suite du stage, je vais continuer à travailler sur le couplage DEM/LBM d'abord pour le cas simple d'un grain chutant dans un fluide puis pour des cas plus complexes faisant intervenir plusieurs grains.

Par la suite on pourrait envisager de raffiner le maillage autour des obstacles solides pour gagner en précision sur les calculs de forces hydrodynamiques. Il serait également intéressant de tester un couplage sur des obstacles de type polyèdres convexes quelconques. Le raffinement du maillage autour de ces obstacles serait alors d'autant plus pertinent.

Références

- [Benamour_2015] M. BENAMOUR, Développement d'une méthode de pénalisation volumique en lattice Boltzmann : application aux domaines mobiles, *Mécanique des fluides [physics.class-ph]*. Université de la Rochelle, (2015). Français. NNT : 2015LAROS017. tel-01373446
- [Bhatnagar_1954] P.L. BHATNAGAR, EP. GROSS, M. KROOK, A model for collision processes in gases, I : small amplitude processes in charged and neutral one-component system, *Phys. Rev.*, (1954) 94 :511-525
- [Cao_2019] W. CAO, Investigation of the applicability of the lattice Boltzmann method to free-surface hydrodynamic problems in marine engineering. *Fluids Mechanics [physics.class-ph]*. École centrale de Nantes, (2019). English. NNT : 2019ECDN0011. tel-02383174
- [Chen_1998] S. CHEN et G. D. DOOLEN, Lattice Boltzmann method for fluid flows, *Annual Reviews*, Fluid Mech. (1998) 30 :329-364
- [Frisch_1987] U. FRISCH et al., Lattice Gas Hydrodynamics in Two and Three Dimensions, *Complex Systems*, 1 (1987) 649-707
- [Galindo-Torres_2013] S.A. GALINDO-TORRES, A coupled Discrete Element Lattice Boltzmann Method for the simulation of fluid-solid interaction with particles of general shapes, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, (2013) 265 :107-119
- [Noble et Tozczynski_1998] D.R. NOBLE, J.R. TORCZYNSKI, A lattice-Boltzmann method for partially saturated computational cells, *International Journal of Modern Physics C*, (1998) 9(8) :1189-1201
- [Owen_2011] D.R.J. OWEN et al, An efficient framework for fluid-structure interaction using the lattice Boltzmann method and immersed moving boundaries, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, (2011) 87 :66-95
- [Portinari_2015] M. PORTUNARI, 2D and 3D verification and validation of the Lattice Boltzmann method, *Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal*, (2015)
- [Succi_2001] S. SUCCI, The Lattice Boltzmann Equation : For Fluid Dynamics and Beyond, *Clarendon press : Oxford*, (2001)
- [White_1991] F. WHITE, Viscous fluid flow, *McGraw-Hill New York*, (1991) Vol. 66
- [Zou&He_1997] Q. ZOU, X. HE, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *American Institute of Physics*. (1997) [S1070-6631(97)03406-5]