



HAL
open science

Modèles à champ de phase et équations fractionnaires simulés par méthodes de Boltzmann sur réseaux

Alain Cartalade

► **To cite this version:**

Alain Cartalade. Modèles à champ de phase et équations fractionnaires simulés par méthodes de Boltzmann sur réseaux. Engineering Sciences [physics]. CEA - Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives, 2019. tel-04548517

HAL Id: tel-04548517

<https://cea.hal.science/tel-04548517>

Submitted on 16 Apr 2024

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

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

UNIVERSITÉ PARIS-SUD

École doctorale SMEMAG (ED 579)

Département de Modélisation des Systèmes et Structures (CEA)

Mémoire présenté pour l'obtention du

Diplôme d'Habilitation à Diriger les Recherches

Disciplines : Fluides, Matériaux et Transferts

par

ALAIN CARTALADE

Modèles à champ de phase et équations fractionnaires simulés par méthodes de Boltzmann sur réseaux

Rapporteurs :

IRINA GINZBURG
KLAUS KASSNER
JACKY CRESSON

Date de soutenance : 4 octobre 2019

Composition du jury :

J. CRESSON	Univ. Pau/LMAP	(Rapporteur)
I. GINZBURG	IRSTEA/HBAN	(Rapporteuse)
D. HILHORST	CNRS/LMO	(Présidente)
K. KASSNER	Univ. Magdeburg/IoP	(Rapporteur)
J. LATT	Univ. Genève/DCS	(Examinateur)
D. LEGENDRE	Univ. Toulouse/IMFT	(Examinateur)

Préambule

Résumé

Ce mémoire synthétise mes travaux réalisés au « Département de Modélisation des Systèmes et Structures », depuis mon embauche au CEA/Saclay en mai 2002 jusqu'à ce jour. Il s'articule autour de trois mots clés qui ont été extraits de mes activités et qui titrent ce document : il s'agit de la méthode numérique de simulation basée sur la « *méthode de Boltzmann sur réseaux* » (Lattice Boltzmann Method – LBM) qui a été adaptée pour simuler des « *modèles à champ de phase* » et des « *équations fractionnaires* ». La LBM est une méthode qui est spécialement adaptée à la simulation des équations de Navier-Stokes et plus généralement aux problèmes multi-physiques impliquant des fluides. Elle constitue le fil conducteur du manuscrit. Après avoir rappelé dans le chapitre 1 quelques éléments de contexte des activités liées aux fluides dans le Département, le principe de la LBM est rappelé dans le chapitre 2. Ce rappel permet de décrire ma démarche et d'introduire les méthodes qui sont reprises de la littérature pour les positionner vis-à-vis des principaux cadres théoriques alternatifs. Les modifications de la LBM sont ensuite présentées dans le chapitre 3 pour simuler la croissance des cristaux en s'appuyant sur des « *modèles à champ de phase* » de changement de phase solide-liquide. Ces modèles sont bien adaptés aux problèmes physiques qui nécessitent le suivi d'une interface entre une phase fluide et une phase solide, ou bien entre deux phases fluides. Dans le chapitre 4, d'autres modifications de la LBM sont présentées pour simuler des Equations aux Dérivées Partielles (EDPs) *fractionnaires*, c'est-à-dire des EDPs qui présentent des dérivées pouvant avoir des ordres non entiers. Les validations de la méthode sont illustrées par des comparaisons avec des marches aléatoires équivalentes à ces EDPs fractionnaires. Dans le chapitre 5, quelques simulations d'écoulements diphasiques immiscibles sont présentées sur un exemple de démixtion dans les verres binaires. Le modèle mathématique qui est simulé est composé des équations de Navier-Stokes couplées avec celle de Cahn-Hilliard qui est un autre exemple de modèle à champ de phase. Les validations sont réalisées avec le modèle conservatif de Allen-Cahn qui est étendu dans le chapitre 6 au changement de phase liquide-gaz. Sur cet exemple, ce dernier chapitre décrit brièvement les travaux qui sont en cours sur la *portabilité de performance* de la LBM dans un contexte de calcul haute performance. Enfin, des annexes et une bibliographie viennent clore le document. Dans chaque chapitre, les motivations et le contexte CEA sont rappelés avant de décrire l'évolution des travaux puis le modèle mathématique continu du problème. Ensuite, les méthodes LB sont présentées, validées et illustrées avec quelques simulations.

Table des matières

1	Introduction	6
1.1	Éléments de contexte CEA	6
1.2	« Problèmes inverses » en géosciences	7
1.3	Lignes directrices de ce document	8
1.4	Guide de lecture	9
2	Rappels de la LBM et démarche mise en œuvre	10
2.1	Introduction	10
2.2	Rappels de la « Lattice Boltzmann Method » (LBM)	11
2.2.1	LBM pour le Navier-Stokes monophasique	11
2.2.2	LBM pour une équation de transport	12
2.3	Démarche et réalisations	12
2.3.1	Évolution des travaux et démarche	12
2.3.2	Codes de simulation en Fortran90	14
2.3.3	Positionnement des approches LB vis-à-vis des variantes de la littérature	15
2.4	Validation avec le code TrioCFD du CEA/Den	16
2.4.1	Modèle de Navier-Stokes/Darcy-Brinkman-Forchheimer	17
2.4.2	Cas test de la « convection naturelle »	17
2.5	Pour aller plus loin	19
3	LBM pour la croissance cristalline	20
3.1	Introduction	20
3.2	Contexte CEA et évolution des travaux	21
3.2.1	Procédé de vitrification par creuset froid	21
3.2.2	La croissance cristalline dans la vitrification	22
3.2.3	Démarche et réalisations	22
3.3	Modèle à champ de phase	25
3.3.1	Modèle sharp interface	25
3.3.2	Modèle à champ de phase équivalent	26
3.4	LBM pour les modèles à champ de phase de croissance cristalline	27
3.4.1	Méthodes LB pour le modèle à champ de phase	27
3.4.2	Validations	29
3.5	Simulations	32
3.5.1	Croissance simultanée de plusieurs cristaux	32
3.5.2	Effets de la fonction d'anisotropie	33
3.6	Pour aller plus loin	34
4	Transport « anormal » en milieu poreux et LBM pour une ADE « fractionnaire »	36
4.1	Introduction	36
4.2	Contexte CEA et évolution des travaux	37
4.2.1	Dispositif expérimental BEETI du DPC	37
4.2.2	Modèles de transport en milieu poreux	38
4.2.2.1	Modèles classiques	38
4.2.2.2	Marches aléatoires (RW)	39
4.2.3	Démarche et réalisations	40
4.3	Identification paramétrique d'un modèle fractionnaire en temps	41

4.3.1	MIM fractionnaire	41
4.3.2	Problème adjoint avec intégrale fractionnaire	42
4.3.3	Variabilité spatiale et comparaison MIM/MIM fractionnaire	43
4.4	LBM pour l'ADE fractionnaire en espace	44
4.4.1	Modèle mathématique	44
4.4.2	Schémas LBM	45
4.4.3	Validations avec les méthodes de marches aléatoires	48
4.5	Pour aller plus loin	48
5	LBM pour la démixtion dans les verres et les écoulements diphasiques	52
5.1	Introduction	52
5.2	Contexte CEA et réalisations	53
5.2.1	Processus de démixtion des verres	53
5.2.2	Rappels des approches diphasiques dans la littérature	54
5.2.3	Démarche et réalisations	56
5.3	Modèles à champ de phase	57
5.3.1	Navier-Stokes (NS)	57
5.3.2	Modèle de Cahn-Hilliard (CH) pour le suivi de l'interface	58
5.3.3	Modèle Conservatif de Allen-Cahn (CAC)	59
5.3.4	Variantes des modèles	59
5.4	LBM pour les modèles NS/CH et NS/CAC	59
5.4.1	LBM pour les équations NS	60
5.4.2	LBM pour l'équation du champ de phase	60
5.4.3	Validations	61
5.5	Simulations de la démixtion d'un mélange binaire	62
5.6	Pour aller plus loin	66
5.6.1	Perspectives : thèse sur la « démixtion d'un système vitreux ternaire »	66
5.6.2	Fluides super-critiques avec oxydant	66
6	Travaux en cours et perspectives	67
6.1	Introduction	67
6.2	LBM dans un contexte HPC	68
6.2.1	Infrastructures et architectures pour le HPC	68
6.2.2	Développement d'un nouveau code LBM	68
6.2.3	Comparaison des temps de calculs sur un cas diffusif	69
6.3	Modèle à champ de phase pour la transition liquide/gaz	70
6.4	Perspectives générales	71
6.4.1	Simulations LBM des modèles à champ de phase	71
6.4.2	Autres perspectives	72
A	Méthode de l'état adjoint pour l'expérience DI du site du Mont-Terri	73
B	Développement de Chapman-Enskog pour la LBM fractionnaire	75
C	Liste des publications	77
C.1	Publications	77
C.2	Rapports techniques CEA, documents collaboratifs & thèse	78
C.3	Présentations orales et posters cités dans le texte	80
	Acronymes	81
	Bibliographie	82

Chapitre 1

Introduction

Ce mémoire synthétise mes travaux réalisés au « Département de Modélisation des Systèmes et Structures » (DM2S), depuis mon embauche au CEA/Saclay en mai 2002 jusqu'à ce jour. Après des études supérieures en physique fondamentale et une thèse en géosciences, mes activités au DM2S m'ont impliqué dans plusieurs projets centrés sur des systèmes d'étude qui présentent des phénoménologies et des échelles spatiales très différentes. Ces projets m'ont permis de collaborer avec des scientifiques d'autres départements du CEA ou des organismes tels que ANDRA¹, ORANO ou même dans un projet ANR avec l'Université d'Avignon et l'IFPEN. Tout au long de mon parcours, des choix ont été faits sur les modèles et les méthodes numériques, en adéquation avec les finalités de ces projets. Ces choix sont aussi en partie liés à l'environnement de travail au DM2S et aux collaborations mises en place au travers des projets. Les principaux d'entre eux se traduisent au final par les mots clés qui titrent ce mémoire et sont expliqués dans la section 1.3. Avant de les présenter, sont rappelés dans la section 1.1 ci-dessous quelques éléments de contexte des activités sur la mécanique des fluides dans le département DM2S du CEA. La section 1.2 décrit ensuite l'évolution de mes travaux sur la thématique des « problèmes inverses en géosciences », partie qui n'est pas détaillée dans ce mémoire.

1.1 Éléments de contexte CEA

Dans ce document, les références de la littérature sont classées dans la section « Bibliographie » et apparaissent en cyan dans le texte. Les références personnelles sont répertoriées dans l'annexe C et apparaissent en rouge précédées d'une lettre pour différencier le type de document : publications [P], rapports techniques [R], thèse [T], présentation orale [O] et poster [PT].

Simulations en thermo-hydraulique et mécanique des fluides au DM2S. Dans le « Service de Thermo-Hydraulique et Mécanique des Fluides » (STMF) du DM2S, les activités autour des équations de Navier-Stokes sont réalisées pour simuler les écoulements dans les réacteurs nucléaires. Certaines approches considèrent le réacteur dans sa globalité, tandis que d'autres se focalisent sur une partie seulement, par exemple le cœur du réacteur ou le générateur de vapeur. Dans ce contexte, les écoulements sont considérés à plusieurs échelles caractéristiques. La limite supérieure est l'échelle « système » (réacteur complet) où tous les composants sont représentés (cœur, pompe, générateur de vapeur, ...) avec des modèles simplifiés et des lois de corrélations. À l'autre extrémité, on trouve l'échelle locale avec des approches CFD où les EDPs sont couplées en 3D pour la compréhension des phénoménologies (e.g. transition de phase liquide-vapeur, coalescence, ...). Dans les réacteurs, les écoulements sont principalement monophasiques et turbulents en fonctionnement normal, mais l'étude du générateur de vapeur ou bien de certaines situations accidentelles (crise d'ébullition, brèche dans une conduite) nécessitent l'étude des écoulements diphasiques. Pour simuler les différentes échelles et leurs phénoménologies associées, plusieurs codes de calculs dédiés sont développés : Cathare pour l'échelle du système ; Flicca (cœur) et Genepi (générateur de vapeur) pour l'échelle des composants ; et TrioCFD pour l'échelle locale. Ces codes discrétisent différentes formulations des équations de Navier-Stokes avec des méthodes numériques standards (éléments finis, volumes finis, etc ...).

Autres applications. Parallèlement à cet axe principal, les ingénieurs-chercheurs du DM2S sont aussi amenés à modéliser et à simuler avec d'autres codes (e.g. Cast3M), des systèmes et des phénoménologies différents tels que l'enceinte de confinement au travers de la thématique du « risque hydrogène » [1] ; le procédé de soudage à l'arc qui est modélisé par un couplage entre l'électro- et la magnéto-statique avec le transfert de chaleur et les fluides incompressibles [2] ; ou encore à analyser des phénomènes transitoires rapides impliqués dans l'interaction fluides/structures (avec Europlexus) etc ... Par

1. Tous les acronymes des noms des structures, des projets et des méthodes sont indiqués dans la section « Acronymes » à la page 81.

ailleurs, durant les années 1990/2000, la thématique des « écoulements et du transport dans les milieux poreux » a fait l'objet de nombreuses études au DM2S compte tenu de ses applications dans le cadre du stockage des déchets radioactifs ou bien pour les études d'impact sur l'environnement. Ce sont les problématiques sur lesquelles j'ai débuté après ma thèse en 2002. La phénoménologie de tous ces systèmes implique différentes formes des équations de Navier-Stokes avec ou sans terme visqueux, homogénéisées ou non, avec ou sans terme non-linéaire, couplée à de la solidification etc ... Enfin, les problèmes physiques faisant intervenir des fluides apparaissent dans d'autres départements du CEA comme pour le creuset froid dédié au conditionnement des déchets radioactifs (au DE2D) ou bien dans les systèmes micro-fluidiques (au DPC). Dans ce manuscrit, sont décrites quelques applications relatives à la vitrification et au transport dans les milieux poreux réalisées dans les différentes équipes auxquelles j'ai contribué au DM2S. Avant de les présenter, sont rappelées ci-dessous mes travaux sur l'application de la « méthode de l'état adjoint » pour les problèmes inverses en géosciences.

1.2 « Problèmes inverses » en géosciences

Thèse de doctorat. La thématique « problèmes inverses » (ou « estimation des paramètres ») des modèles de géosciences a débuté lors mon stage de DEA (intitulé « concepts et méthodes de la physique ») en 1998 sur les « aspects théoriques des problèmes inverses en sismique réflexion ». Cette thématique s'est ensuite poursuivie en thèse de doctorat [T1] sur l'« hydrogéologie » sous le site du CEA/Cadarache (voir la topographie du bassin versant sur la Fig. 1.1a et la charge piézométrique issue d'une campagne de mesures sur la Fig. 1.1b) durant laquelle j'ai pratiqué la « méthode de l'état adjoint » [3] (calculs analytiques variationnels et programmation en Fortran) qui est une méthode mathématique de calage automatique des paramètres, couplée à un algorithme d'optimisation [4] sous contraintes (L-BFGS-B [5]). La méthode a été mise en œuvre dans un code 2D en « éléments finis » (voir un exemple de maillage du site de Cadarache sur la Fig. 1.2) avec un schéma implicite en temps, qui a été étendu durant la thèse aux écoulements dans les milieux poreux fracturés (échelle du bassin versant). Le code de calcul a été baptisé CAL3F pour CALibration Flow for Fractured Formation.

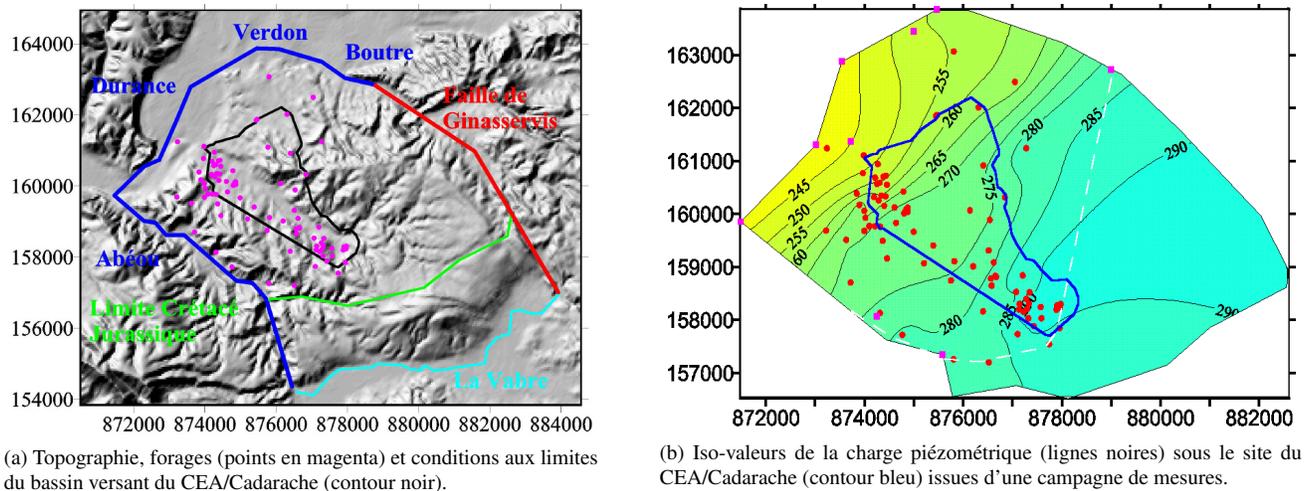
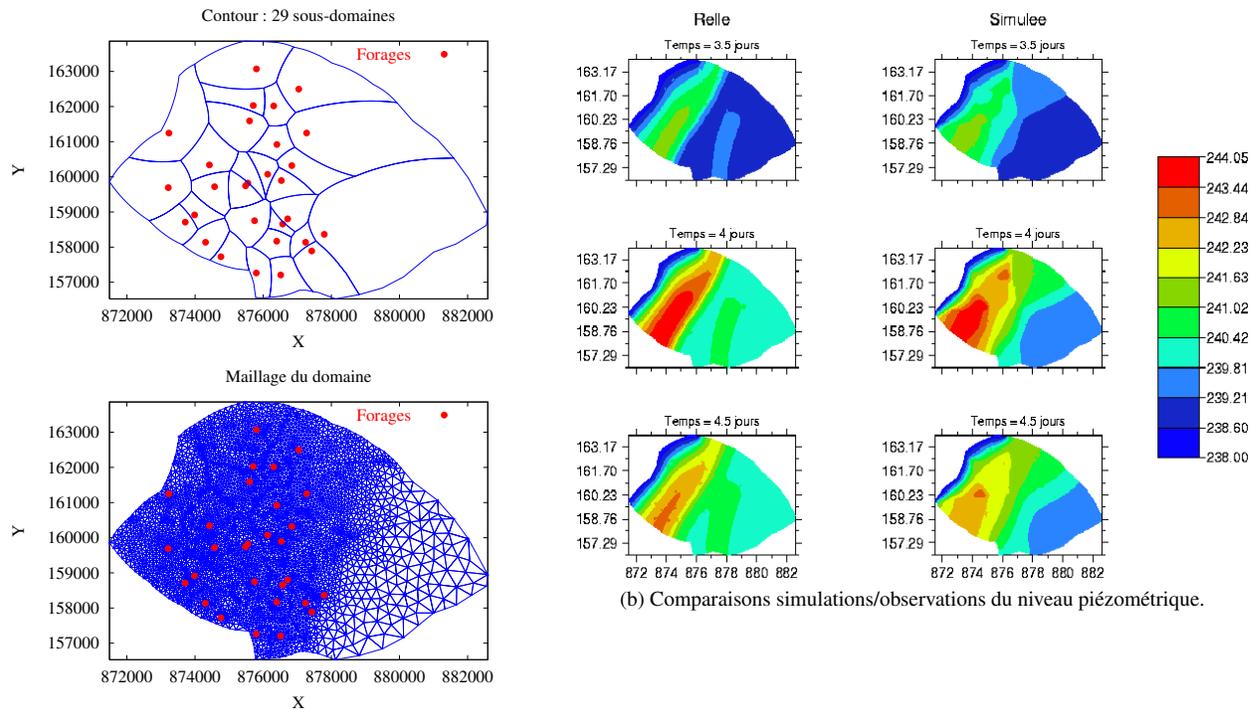


FIGURE 1.1 – (a) Topographie et (b) niveau piézométrique du site du CEA/Cadarache. D'après [T1], 2002.

Méthode adjointe pour le stockage. Le développement de la « méthode de l'état adjoint » est le sujet sur lequel j'ai été amené à travailler sur mon poste d'ingénieur au CEA en 2002 après ma thèse. L'application visée était l'identification des paramètres du transport des solutés dans le contexte du stockage des déchets radioactifs (projet MAVL) avec l'ANDRA (D. COEHLI et Y. WILEVEAU) pour l'expérience de « Diffusion Inerte du Mont-Terri » [R16]. L'Annexe A présente le principe de la méthode sur ce cas d'application. La thématique « problèmes inverses » était aussi identifiée dans le GdR MOMAS (MOdélisation MATHématique pour le Stockage) dans lequel j'ai participé. Il a donné lieu à des collaborations avec des partenaires académiques : CR F. CLÉMENT de l'INRIA/Rocquencourt et PR J. BLUM de l'Université de Nice. Le travail [R16] s'est poursuivi dans [R15] sur la « paramétrisation automatique » c'est-à-dire la mise en œuvre d'une méthode permettant d'identifier à la fois les valeurs des paramètres (diffusion et porosité) mais également leur structure spatiale en reprenant la méthode du « Raffinement et déraffinement de paramétrisation » [6]. La synthèse de ces travaux avec ceux réalisés sur la partie thermique (par Dr C. MÜGLER et M. FILIPPI) a conduit à une présentation en conférence internationale en 2005 [O5] et suivie d'une publication dans un Journal à Comité de Lecture [P10] en 2007. Enfin, j'ai été impliqué dans les simulations « directes » 3D avec Cast3M [7] des expériences de diffusion réalisées en laboratoire souterrain du site du Mont-Terri ([R13] et [R21]).

Encadrement de stages M2. Sur cette thématique, j’ai été le principal encadrant de deux stages de niveau M2 en mathématiques appliquées. Le premier est celui de D. BOUMBA SITOU (2006) qui a fait de l’adjoint sur le modèle de transport adapté au dispositif expérimental BEETI (voir chapitre 4). Pour ce travail, les outils numériques sur lesquels a débuté l’étudiant étaient ceux que j’ai développés dans [R15]. Le second est celui de ROMAIN RISCHETTE (2007) qui a testé dans CAL3F [T1], une méthode de « Back and Forth Nudging » [8] pour identifier la condition initiale du système aquifère du CEA/Cadarache. Ce dernier a présenté ses résultats lors d’une séance posters du GdR MOMAS en 2007 [PT4] et a ensuite poursuivi en thèse. J’ai également été impliqué dans le co-encadrement du stage de N. KHOVENKOVA (encadrant principal F. CLÉMENT, INRIA) qui s’est concentrée, dans l’outil développé dans [R15], sur l’analyse de sensibilité de la variable d’état aux paramètres par « décomposition en valeurs singulières » de la matrice de sensibilité [R14]. Enfin, dans le projet ANR TRAM, la méthode adjointe a été appliquée par B. MARYSHEV lors de son post-doctorat sur l’identification paramétrique d’une équation fractionnaire en lien avec des mesures expérimentales. On en parle dans le chapitre 4.



(a) Découpage du domaine tenant compte de la position des forages (en haut) et maillage en éléments finis (en bas).

(b) Comparaisons simulations/observations du niveau piézométrique.

FIGURE 1.2 – Simulations des écoulements à l’échelle pluri-kilométriques (d’après [T1], 2002).

1.3 Lignes directrices de ce document

De mon parcours, j’ai choisi d’extraire et de mettre en avant trois mots clés qui titrent ce mémoire. Il s’agit de la méthode numérique de simulation basée sur la « méthode de Boltzmann sur réseaux » (Lattice Boltzmann Method – LBM) qui a été adaptée pour simuler des « modèles à champ de phase » et des « équations fractionnaires ». Dans la suite de cette section on explique les contextes et les motivations de ces choix qui privilégient l’originalité des applications LBM telles que les modèles à champ de phase pour la croissance cristalline et les équations fractionnaires pour le transport anormal.

Méthode de Boltzmann sur réseaux (LBM). Les méthodes numériques traditionnelles sont déjà mises en œuvre dans les codes de calcul de mécanique des fluides du DM2S. Par exemple les éléments finis et volumes finis dans les codes Cast3M [7] ou encore les volumes-éléments finis et Volumes-Différences Finies (VDF) dans le code TrioCFD [9]. La méthode de Boltzmann sur réseaux est une méthode numérique alternative à la simulation des équations de Navier-Stokes. Elle consiste à discrétiser l’équation cinétique de Boltzmann (et non pas celles de Navier-Stokes) sur un maillage cartésien régulier et à calculer la densité et la quantité de mouvement grâce aux moments d’ordre zéro et du premier ordre de sa fonction de distribution. Le principe de la méthode sera rappelé dans le chapitre 2. Plusieurs livres [10, 11, 12, 13] et publications de synthèse [14, 15, 16] existent sur le sujet. De plus, la communauté reste très active puisqu’à ce jour deux conférences internationales annuelles sont dédiées à la méthode : l’« International conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics » (DSFD) et

l'« International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science » (ICMMES). La méthode LB connaît un grand succès dans les Journaux à Comité de Lecture et plusieurs codes en OpenSource et industriels (Palabos, OpenLB, ProLB, waLBerla, etc ...) l'utilisent pour simuler la dynamique des fluides. Cependant elle reste à ce jour très peu étudiée au DM2S malgré les travaux de Dr S. DELLACHERIE [17] et de Dr A. GENTY (références dans la section 4.5) au STMF. Ce mémoire est dédié à cette méthode et en constitue le fil conducteur.

Applications aux modèles à champ de phase. Entre 2010 et 2016, mon implication dans le projet SIVIT (SIMulation de la VITrification) du CEA en partenariat avec ORANO m'a conduit à simuler quelques phénoménologies rencontrées lors de l'élaboration des verres de conditionnement des déchets de haute activité. Dans ce projet, j'ai travaillé avec deux collègues du CEA/Marcoule/DE2D qui ont étudié leur élaboration et leurs propriétés en s'appuyant à la fois sur de la caractérisation expérimentale et une analyse thermodynamique rigoureuses. Avec Dr E. RÉGNIER je me suis intéressé à la simulation de la croissance des cristaux et avec Dr S. SCHULLER j'ai étudié la simulation de la démixtion dans les verres. Pour la croissance cristalline, il s'agit de problèmes avec changement de phase solide-liquide nécessitant le suivi d'une interface qui est caractérisée par une tension interfaciale très anisotrope. Pour la démixtion, il s'agit d'un problème de séparation de phase entre deux constituants en phase liquide. Il s'agit donc de deux problèmes faisant intervenir une phase fluide, modélisée par les équations de Navier-Stokes, et séparée d'une phase solide ou d'une phase fluide par une interface. Parmi les approches existantes de type « interface abrupte » ou « interface diffuse », le choix a été fait de développer les « modèles à champ de phase » (e.g. voir les références [18, 19, 20] pour la solidification et [21] pour les bi-fluides) qui tombent dans la seconde catégorie d'approches. La théorie du champ de phase est déjà appliquée par d'autres équipes du CEA pour étudier l'impact des rayonnements sur les matériaux du nucléaires [22] et simuler le corium dans des situations accidentelles de fusion du cœur [23]. Des travaux sont en cours au DM2S pour simuler la propagation de fissures dans le combustible en couplant la méthode avec une approche AMR (voir [24] pour une application AMR et « level-set »). Dans le projet SIVIT, mes activités se sont structurées autour de ces modèles dont le principal intérêt est leur cohérence thermodynamique, domaine sur lequel nous avons trouvé un langage commun avec les deux collègues du DE2D. Les méthodes LB pour simuler la croissance cristalline et la démixtion sont présentés aux chapitres 3 et 5 respectivement.

Application aux équations fractionnaires. Depuis ma thèse de doctorat, une partie de mes activités s'est concentrée sur l'étude des « écoulements et des transferts en milieux poreux ». Cette thématique a fait l'objet de nombreuses études au CEA/Den compte tenu de ses applications pour le stockage des déchets radioactifs géré par l'ANDRA, ou bien pour des études d'impact sur l'environnement. Au travers des projets MAVL et COSTO sur le stockage, puis MRIMP et MRISQ relatifs à l'environnement, j'ai été impliqué sur des systèmes « poreux » qui présentent différentes échelles d'espace et de temps : l'échelle du « bassin versant » [T1] ; l'échelle de la « colonne » [R8] et d'autres expériences à l'échelle du mètre [R16] ; et enfin l'échelle du « pore » [R7]. L'échelle « colonne » m'a donné l'occasion de participer à un projet expérimental depuis sa conception en 2004 par Dr C. LATRILLE (CEA/Den) et Dr D. CHAMBELLAN (CEA/DRT), jusqu'à son aboutissement dans le projet ANR TRAM de 2011 à 2013 piloté par M.-C. NÉEL (PR, Université d'Avignon). Cette échelle expérimentale a permis la confrontation aux mesures de plusieurs modèles de transport, du plus classique (advection-diffusion classique – ADE ; Modèle Immobile-Mobile – MIM) aux plus originaux : ADE et MIM *fractionnaires*. « Fractionnaire » signifie que l'ordre des dérivées partielles est non entier en espace et/ou en temps. L'évolution de ce « projet colonne » et les principaux résultats obtenus par l'application de la « méthode de l'état adjoint » sur un « MIM fractionnaire » seront présentés dans le chapitre 4, qui se concentrera ensuite sur les méthodes LB pour simuler une équation « fractionnaire en espace ».

1.4 Guide de lecture

Le mémoire est structuré comme suit. Dans le chapitre 2, on rappelle la méthode de Boltzmann sur réseaux « standard », dédiée à la simulation des écoulements de Navier-Stokes monophasiques dans la limite incompressible et couplée à l'équation de la chaleur. Puis dans les chapitres 3 et 4, on présente les méthodes qui ont été établies pour simuler respectivement la croissance des cristaux et le transport « anormal » en milieux poreux avec des équations fractionnaires en espace. Le chapitre 5 est consacré aux écoulements diphasiques immiscibles pour simuler la démixtion dans les verres. Enfin, le chapitre 6 présente le travail en cours sur la portabilité de performance de la LBM appliquée au changement de phase liquide-vapeur. Des annexes et une bibliographie viendront clore ce document. La méthode LB apparaît dans chaque chapitre tandis que les « modèles à champ de phase » concernent les chapitres 3 pour la croissance cristalline, et les chapitres 5 et 6 pour les applications bi-fluides. Les équations fractionnaires en espace et en temps sont abordées dans le chapitre 4. Dans chaque chapitre sont rappelés les motivations, le contexte CEA et l'évolution des travaux. La section suivante présente le modèle mathématique continu qui est simulé. Enfin, les méthodes LB sont présentées, validées et illustrées avec quelques simulations. Les zones grisées sont des rappels des modèles mathématiques et/ou des méthodes LB qui sont connus dans la littérature.

Chapitre 2

Rappels de la LBM et démarche mise en œuvre

2.1 Introduction

Lorsqu'on applique une méthode numérique classique (éléments finis, volumes finis, différences finies) pour discrétiser les EDPs, les grandeurs physiques d'intérêt (i.e. densité, vitesse, pression, ...) ainsi que leurs paramètres (viscosité, diffusion, ...) interviennent naturellement dans le système matriciel issu de la discrétisation (i.e. le produit matrice-vecteur et le second membre). Ensuite, selon la taille du maillage, la solution du système matriciel est obtenue à l'aide de méthodes directes (e.g. LU) ou itératives (e.g. BiCGStab). Après avoir pratiqué cette méthodologie traditionnelle pour des problèmes diffusifs avec la méthode des éléments finis dans [T1], puis les différences finies dans [R16], mon choix s'est porté sur la méthode de Boltzmann sur réseaux (Lattice Boltzmann Method – LBM) qui est particulièrement bien adaptée pour simuler les équations de Navier-Stokes et tout un tas de problèmes physiques qui impliquent des fluides.

La première raison de ce choix est que la méthode est suffisamment générale pour simuler d'autres EDPs non linéaires et couplées. La seconde raison est qu'elle est simple à programmer, même pour des problèmes multi-physiques complexes, ce qui permet au physicien de se concentrer davantage sur les modèles et ses liens avec l'expérimental plutôt que sur les développements informatiques. La simplicité de programmation se retrouve également dans d'autres méthodes comme les « marches aléatoires ». Celles-ci sont bien adaptées pour simuler l'équation d'advection-diffusion ou bien l'équation cinétique de Boltzmann qui est appliquée en neutronique ou pour les gaz raréfiés. Cependant elles restent limitées à ces phénomènes de transport et leur extension à la simulation des équations de Navier-Stokes ou bien celles de type « champ de phase » pour la solidification n'est pas évidente. Néanmoins, le cadre théorique de ces méthodes est bien établi et elles sont utilisées dans le chapitre 4 comme outil de validation des développements réalisés pour simuler des EDPs fractionnaires en espace.

En appliquant la LBM, la méthodologie traditionnelle est abandonnée car le problème physique est simulé par l'« équation de Boltzmann sur réseau » (Lattice Boltzmann Equation – LBE) qui est une équation déjà discrétisée. Elle fait évoluer « la fonction de distribution » qui dépend de la position, du temps et de plusieurs directions de déplacements du nœud courant à ses voisins. Le calcul de ses « moments » permet de retrouver les grandeurs physiques (densité, quantité de mouvement, ...) ce qui fait qu'elle apparaît comme un intermédiaire de calcul. Les grandeurs physiques interviennent à leur tour dans la « fonction de distribution à l'équilibre » qui contient la physique du problème. Comme la LBE n'agit pas directement sur les grandeurs physiques d'intérêt, ses liens avec les EDPs continues ne sont pas immédiats, mais les « développements de Chapman-Enskog » permettent d'établir formellement l'équivalence.

Une fois que cette méthodologie alternative est acquise, l'algorithme peut se résumer en deux étapes principales qui témoignent de sa simplicité de programmation : une étape de relaxation de la fonction de distribution vers la fonction à l'équilibre, appelée « étape de collision », suivie d'une « étape de déplacement » de cette fonction de distribution. La difficulté est reportée sur la façon de concevoir la fonction de distribution à l'équilibre qui est la mieux adaptée pour simuler les EDPs du problème physique. L'étape de collision est *locale* (i.e. qu'elle est réalisée au nœud courant) et l'étape de déplacement n'implique que les premiers voisins pour les réseaux standards. Ces avantages, associés au côté explicite de la méthode, la rendent très facilement parallélisable et extensible en 3D et donc bien adaptée au calcul haute performance (High Performance Computing – HPC). On en reparle au chapitre 6.

Dans ce chapitre, on rappelle tout d'abord le principe de la méthode LB standard pour simuler les équations de Navier-Stokes et celle du transport (section 2.2). Ces rappels sont réalisés pour présenter plus facilement les modifications qui ont été apportées pour simuler la croissance cristalline dans le chapitre 3, puis le transport anormal dans le chapitre 4. On présente ensuite dans la section 2.3 la démarche mise en œuvre en donnant des précisions sur les méthodes qui ont été reprises de la littérature et en les repositionnant vis-à-vis des principaux cadres théoriques alternatifs qui existent. On introduit aussi les codes 2D et 3D qui ont été développés en Fortran90 pour tester des modèles physiques et des méthodes LB pour les applications des chapitres suivants. Enfin la section 2.4 présente une illustration de la LBM pour simuler le modèle de Navier-Stokes/Darcy-Brinkman-Forchheimer couplé avec la température. Les validations sont réalisées avec le code TrioCFD.

2.2 Rappels de la « Lattice Boltzmann Method » (LBM)

La méthode de Boltzmann sur réseaux permet de simuler les équations de Navier-Stokes (NS) faiblement compressible (bas Mach) avec une loi d'état de type gaz parfait. De nombreux livres récents ou publications de synthèse sont consacrés à la théorie [10, 14, 16] et aux applications en diphasiques [11, 15]. Cette section rappelle une version simplifiée de la LBM qui utilise la collision dite BGK pour simuler les équations de Navier-Stokes (section 2.2.1) puis l'équation du transport par advection-diffusion (section 2.2.2).

2.2.1 LBM pour le Navier-Stokes monophasique

Équation de Boltzmann sur réseaux (LBE). La LBE (Lattice Boltzmann Equation) est une équation d'évolution en espace et en temps qui est issue de la discrétisation de l'équation cinétique de Boltzmann sur un maillage cartésien régulier [25, 26]. Dans la théorie cinétique, la fonction de distribution f est une fonction de la position \mathbf{x} , du temps t mais également de la vitesse microscopique \mathbf{c} des particules : $f(\mathbf{x}, \mathbf{c}, t)$. La LBE agit sur une fonction de distribution de particules $f_i(\mathbf{x}, t)$ où l'indice i indique que la fonction est déjà discrétisée dans l'espace des vitesses. Le réseau est un ensemble de quatre cellules (mailles) adjacentes en 2D ou huit cellules en 3D sur lequel sont indiquées les vitesses de propagation discrètes. La LBE s'écrit :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_u} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (2.1)$$

où les \mathbf{c}_i sont les vecteurs de vitesse de déplacement avec $\mathbf{c}_i = \mathbf{e}_i \Delta x / \Delta t$ où les \mathbf{e}_i sont les vecteurs de déplacement, Δx est le pas d'espace du maillage régulier et Δt est le pas de temps. Le coefficient τ_u est le taux de relaxation (unique) de la fonction f_i vers une fonction à l'équilibre f_i^{eq} et il est relié à la viscosité cinématique ν du fluide (voir ci-dessous). Cet opérateur de collision est appelé BGK (pour Bhatnager-Gross-Krook [27]). Les premiers modèles LBM [28, 29] sont basés sur une matrice de collision plus complexe, algébriquement équivalente à la collision MRT. On reparle de la collision MRT dans la section 2.3.3 et dans le chapitre 4. L'indice i varie de 0 à N_{pop} où N_{pop} dépend du nombre de directions propagation du réseau choisi. Les réseaux utilisés dans ce mémoire sont présentés dans la section 2.3. Dans l'équation (2.1), le terme entre crochets est le terme de collision. Après une étape de collision et une autre de déplacement de f_i , la densité $\rho(\mathbf{x}, t)$ et la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ sont calculés par les moments d'ordre 0 et 1 de f_i aux nœuds de chaque cellule :

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{x}, t), \quad \text{et} \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho(\mathbf{x}, t)} \sum_i f_i(\mathbf{x}, t) \mathbf{c}_i. \quad (2.2)$$

Fonction de distribution à l'équilibre pour le Navier-Stokes. Dans l'Eq. (2.1), la fonction de distribution à l'équilibre f_i^{eq} est une approximation de la maxwellienne issue de la théorie cinétique des gaz, en supposant que la température est constante et que la vitesse macroscopique $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ est petite devant celle du son : $u/c \ll 1$ (approximation à faible nombre de Mach) et en ne conservant lors du développement de l'exponentielle que les termes d'ordre 2 de la vitesse \mathbf{u} . La fonction de distribution à l'équilibre qui permet de reproduire les écoulements régis par les équations de Navier-Stokes s'écrit ([30]) :

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \rho(\mathbf{x}, t) \times \left[1 + \frac{1}{c_s^2} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)) + \frac{1}{2c_s^4} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t))^2 - \frac{1}{2c_s^2} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (2.3)$$

Dans l'Eq. (2.3), les w_i sont des poids dont les valeurs dépendent des directions de déplacement des f_i et de la structure du réseau utilisé. Pour le réseau D2Q9 (voir Fig. 2.3a), $w_i = 4/9$ pour $i = 0$, $w_i = 1/9$ pour $i = 1, \dots, 4$ et $w_i = 1/36$ pour $i = 5, \dots, 8$. La constante c_s^2 est la vitesse du son et prend comme valeur $c_s^2 = c^2/3$ avec $c = \Delta x / \Delta t$.

Liens avec les équations continues. En utilisant la méthode de mise à l'échelle de Chapman-Enskog (e.g. [14]) ou la méthode des développements de Taylor [31], il est possible de montrer que la résolution de l'équation (2.1) avec la fonction de distribution à l'équilibre (2.3) et les définitions de la densité et de la vitesse (Eqs. (2.2)) conduit à la simulation des équations de Navier-Stokes suivantes :

$$\partial_t \rho + \partial_\beta (\rho u_\beta) = 0, \quad (2.4)$$

$$\partial_t (\rho u_\alpha) + \partial_\beta (\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha (c_s^2 \rho) + \nu \partial_\beta [\partial_\beta (\rho u_\alpha) + \partial_\alpha (\rho u_\beta)] \quad (2.5)$$

où la convention de sommation d'Einstein est utilisée. Le coefficient de viscosité cinématique est relié au temps de relaxation τ_u par la relation :

$$\nu = \frac{1}{3} \left(\tau_u - \frac{1}{2} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t}, \quad (2.6)$$

et la pression est donnée par le produit de la densité par le coefficient $c_s^2 : p = c_s^2 \rho$.

2.2.2 LBM pour une équation de transport

On considère l'équation d'Advection-Diffusion (Advection-Diffusion Equation – ADE) suivante :

$$\partial_t C + \nabla \cdot \mathbf{u}C = \nabla \cdot (D(\mathbf{x}, t)\nabla C) + S_c \quad (2.7)$$

où $C \equiv C(\mathbf{x}, t)$ est la concentration, $S_c \equiv S_c(\mathbf{x}, t)$ est le terme source, $D(\mathbf{x}, t)$ est le coefficient de diffusion scalaire qui peut dépendre de la position \mathbf{x} et du temps t . Pour simuler cette équation, on introduit une nouvelle LBE qui agit sur une nouvelle fonction de distribution g_i :

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_c(\mathbf{x}, t)} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_i S_c \Delta t \quad (2.8)$$

où τ_c est le taux de collision qui est relié au coefficient de diffusion par $D(\mathbf{x}, t) = (1/3)(\tau_c(\mathbf{x}, t) - 1/2)\Delta x^2/\Delta t$. La fonction de distribution à l'équilibre s'écrit g_i^{eq} :

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i C(\mathbf{x}, t) \left[1 + \frac{1}{e^2} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{e}_i \frac{\Delta t}{\Delta x} \right]. \quad (2.9)$$

Finalement la concentration est mise à jour après l'étape de collision et de déplacement en calculant le moment d'ordre 0 de g_i : $C(\mathbf{x}, t) = \sum_i g_i(\mathbf{x}, t)$. Dans l'Eq. (2.9), les deux termes contenus dans les crochets correspondent aux deux premiers termes de la fonction à l'équilibre Eq. (2.3) où \mathbf{c}_i a été explicitée par $\mathbf{c}_i = \mathbf{e}_i \Delta x / \Delta t$, $c_s^2 = c^2/3$ et où on a posé $e^2 = 1/3$. La formulation en vitesse de déplacement \mathbf{c}_i ou en direction de déplacement \mathbf{e}_i est équivalente mais on utilisera cette dernière dans le chapitre 3. Dans le membre de gauche de l'Eq. (2.8) la fonction g_i est exprimée en $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x$.

2.3 Démarche et réalisations

Étant rattaché à un service de Mécanique des Fluides, j'ai commencé à m'intéresser à la LBM en 2007/2008 au laboratoire LSET avec le soutien des projets MRISQ et COSTO. Dans cette section, l'évolution des travaux sur la LBM est rappelée sur les premières simulations en monophasique puis sur les autres applications (section 2.3.1). Une illustration en monophasique est présentée dans la section 2.4 de ce chapitre tandis que les autres applications seront approfondies dans les chapitres suivants. La section 2.3.2 donne quelques précisions sur les codes de calcul qui ont été développés en Fortran90 pour simuler les applications des chapitres suivants. Enfin, la section 2.3.3 synthétise les principales méthodes LB qui ont été reprises de la littérature et les positionne vis-vis des cadres théoriques alternatifs qui existent, en particulier sur les différents opérateurs de collisions et la prise en compte de l'incompressibilité.

2.3.1 Évolution des travaux et démarche

Premières simulations en monophasique. Après avoir programmé (de zéro) la méthode standard de la littérature, des premières validations ont été effectuées sur plusieurs cas tests classiques dans le domaine monophasique laminaire : les écoulements de Couette, de Poiseuille puis ceux générés dans une « cavité avec paroi défilante ». La Fig. 2.1a présente les champs des vitesses de ce cas test et la Fig. 2.1b montre des comparaisons du code LBM avec les résultats de Ghia *et al.* [32]. Les conditions aux limites LBM de la paroi défilante sont reprises de [33]. L'ensemble de ce travail a été rédigé dans une première note technique. Dans une seconde note technique, les développements ont été étendus au couplage avec l'équation de la chaleur avec une hypothèse de Boussinesq ; puis les termes de Darcy et de Forchheimer ont été rajoutés dans le terme force de la quantité de mouvement. Les développements ont été validés sur deux cas tests de la « convection naturelle », avec et sans termes de Darcy-Forchheimer. Ces deux notes techniques ont été regroupées dans un seul rapport [R9] qui marque le début de mes développements numériques avec cette méthode. Sur ce modèle, un benchmark a aussi été réalisé dans [R2] entre la LBM et le code TrioCFD développé au STMF. Ce benchmark est rappelé dans la section 2.4.

Autres applications. Depuis, mes activités se sont structurées autour de cette méthode en variant les phénoménologies d'applications qui sont synthétisées sur la figure 2.2. Tout d'abord, elle a été évaluée (développements numériques et validations) pour les écoulements monophasiques non-newtoniens (avec des lois exponentielles et de Bingham) et sur un modèle de solidification de type « Enthalpie-porosité » en 2010 (non publié, présentation orale [O4]). Dans d'autres domaines que celui de la mécanique des fluides numériques, la méthode a été adaptée et appliquée en 2011 au Modèle Immobile-Mobile (MIM) en

lien avec le dispositif expérimental BEETI [R8] (voir chapitre 4) ; en 2012 au transport diffusif à l'échelle du pore à l'intérieur d'une géométrie solide complexe 3D [R7] ; de 2012 à 2016 à la croissance des cristaux (voir chapitre 3) ; et en 2018 aux équations aux dérivées partielles fractionnaires en espace adaptées au « transport anormal » (voir chapitre 4). La méthode a aussi été appliquée aux écoulements diphasiques immiscibles (voir chapitre 5) et elle est actuellement adaptée à la « portabilité de performance » des codes de calculs LBM pour les architectures HPC (voir chapitre 6).

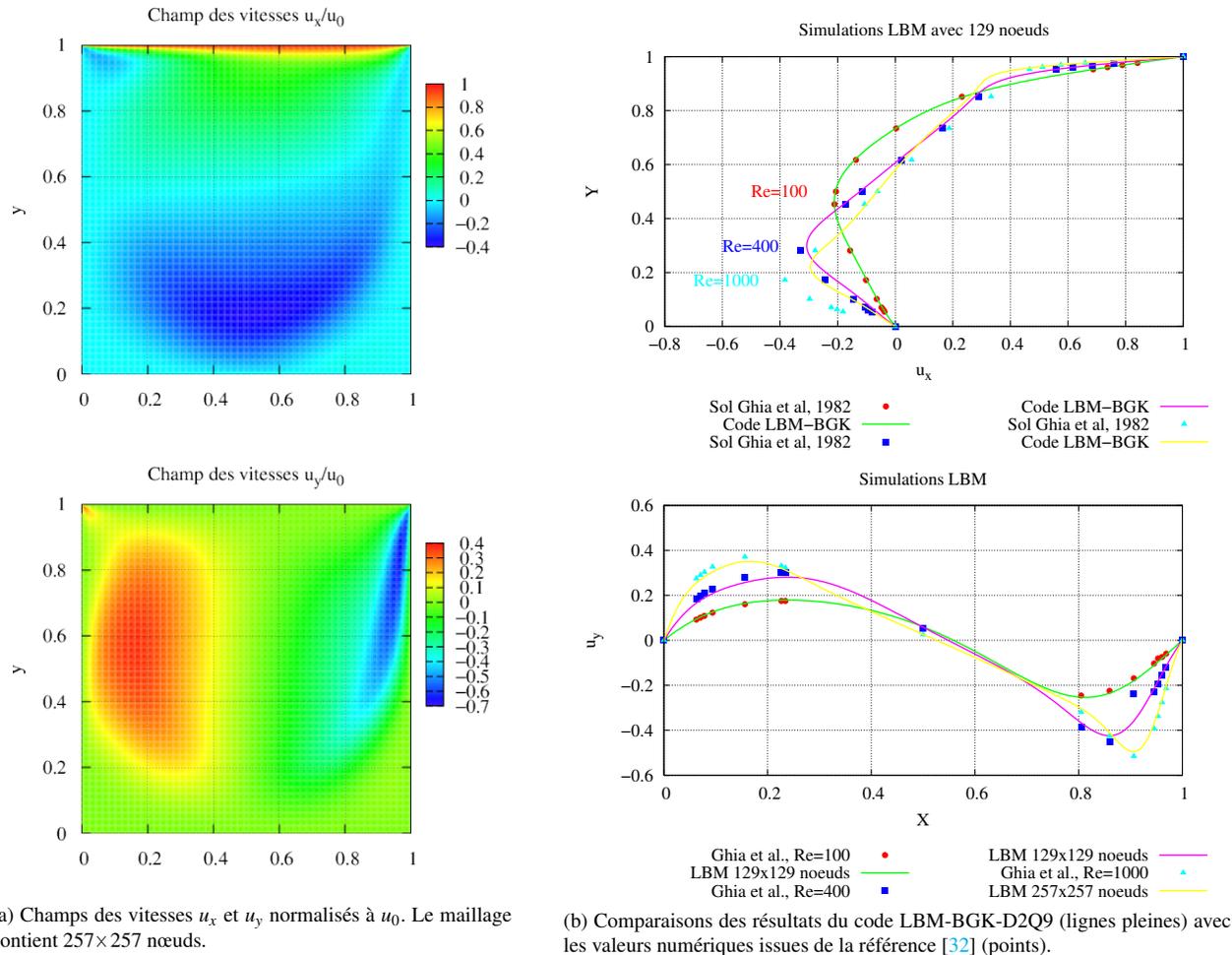


FIGURE 2.1 – Validation des développements LBM sur la « cavité avec paroi défilante ». (a) Champs des vitesses et (b) comparaisons avec les valeurs de la littérature. D’après [R9], 2009.

Démarche de modélisation et simulation. La figure 2.2 présente également ma démarche de modélisation et de simulation. Tout d’abord, les problèmes physiques simulés sont reliés à des systèmes physiques du CEA. Sur ces systèmes, mon intérêt d’approfondir une phénoménologie particulière est motivé par des données qui ont été mesurées par des expérimentateurs qui connaissent parfaitement leur système d’étude. Sur certains phénomènes qu’ils me décrivent, je choisis un modèle mathématique composé d’une ou de plusieurs EDPs couplées que j’exprime sous forme discrète en appliquant des méthodes LB. Celles-ci sont soit reprises de la littérature (chapitre 5) ou bien elles sont développées et adaptées spécifiquement à ces modèles (chapitres 3 et 4). Ensuite je réalise successivement la programmation, puis les validations et enfin les simulations en relation avec les observations. Les modèles mathématiques sont ensuite enrichis pour décrire des phénomènes plus complexes après itération avec les expérimentateurs. Cette démarche structure le plan des chapitres 3, 4 et 5 de ce document. Les développements informatiques sont intégrés dans des codes de calculs écrits en Fortran90, et quelques précisions sont données sur ces codes dans la section 2.3.2 ci-dessous.

Encadrement de stages et thèses. Sur cette thématique LBM, en plus de la thèse d’AMINA YOUNSI (voir chapitre 3), j’ai été le principal encadrant de quatre stages de niveau M2 : celui de JEAN-FRANÇOIS PAISANT (2011) sur la simulation d’un modèle de Navier-Stokes/Cahn-Hilliard adapté aux écoulements à deux phases immiscibles ; ceux de E. BARRÉ (2011) sur l’évaluation de la collision TRT et X. LU (2012) sur un fluide de Bingham ; et enfin celui de VICTOR HELLAUDAIS ([R3]) sur

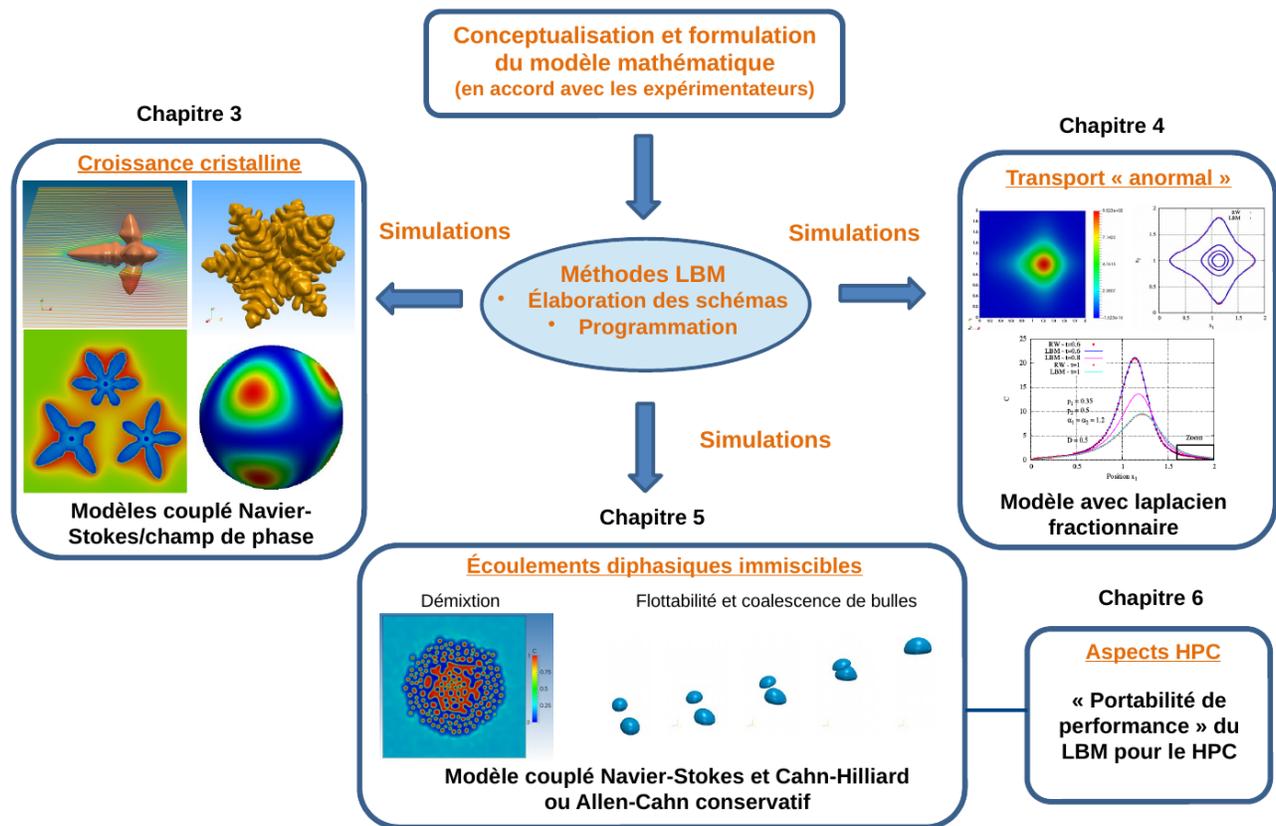


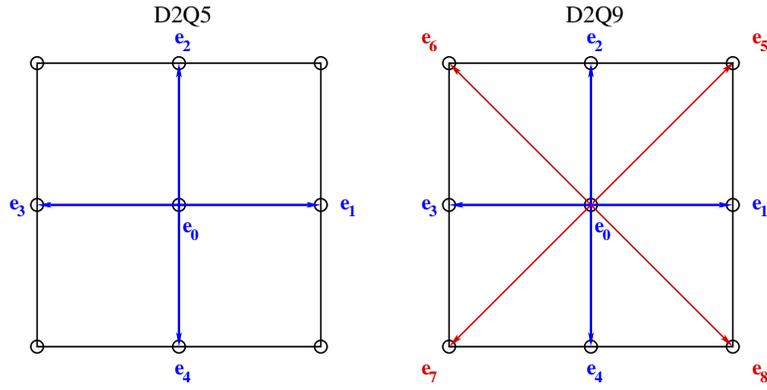
FIGURE 2.2 – Démarche personnelle et applications de la LBM dans ce manuscrit.

un modèle de croissance cristalline en 2014. Un sujet de thèse est proposé sur la démixtion d'un système vitreux ternaire (voir section 5.6.1) pour un début en octobre 2019. Enfin, le stage de WERNER VERDIER a débuté en avril 2019 sur un modèle Navier-Stokes/Allen-Cahn conservatif pour du changement de phase liquide-gaz (voir chapitre 6).

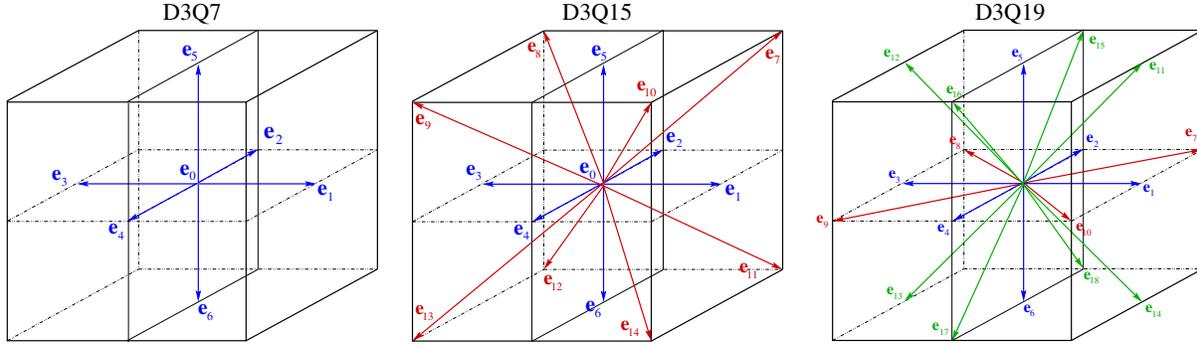
2.3.2 Codes de simulation en Fortran90

Tous les résultats 3D des chapitres qui suivent ont été obtenus grâce à un unique code LBM que je développe depuis 2011 : SILABE3D (SIMulations by LAttice Boltzmann Equations). Le code permet de simuler plusieurs équations aux dérivées partielles couplées (Navier-Stokes, thermique, concentration et champ de phase). Il est écrit en Fortran90 et parallélisé avec MPI pour la partie décomposition de domaines. Au plus bas niveau, on trouve plusieurs bibliothèques qui regroupent les briques de base pour résoudre une équation aux dérivées partielles. Parmi elles, certaines sont spécifiques aux étapes LBM classiques, telles que l'initialisation des vecteurs du réseau, les déplacements de la fonction de distribution et plusieurs fonctions de distribution à l'équilibre. D'autres sont relatives aux différences finies adaptées au réseau (dérivées directionnelles) et utilisées par exemple pour le calcul de la normale à l'interface (croissance cristalline et modèle conservatif de Allen-Cahn) et le gradient du potentiel chimique (Cahn-Hilliard). Enfin, des bibliothèques d'utilitaires ont été développées pour l'initialisation de diverses conditions initiales (condition initiale sphérique, mélange homogène, perturbation initiale pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor, ...) et la gestion des entrées-sorties. Les instructions relatives à la résolution de chaque équation sont regroupées dans un même fichier source. Puis une « sur-couche » vient piloter la résolution des différentes équations avec les termes de couplage et les options choisies dans les fichiers d'entrée. Enfin, sont également présents des fichiers qui contiennent les sous-routines sur l'environnement et les communications MPI. Les données d'entrées du problème et les options de calcul sont lues dans plusieurs fichiers d'entrée en ASCII. Les résultats des simulations sont sauvegardés dans plusieurs fichiers puis post-traités avec Gnuplot et Paraview.

Tous les résultats LBM en 3D des notes techniques et publications qui sont synthétisés dans ce mémoire sont issus de ce code. Ponctuellement, une maquette 2D (toujours en Fortran90) qui a été développée dans [R9] est utilisée pour les résultats de la section 2.4 et a été étendue au transport fractionnaire du chapitre 4. Les réseaux qui sont définis sont le D2Q5 et le D2Q9 pour le 2D (Figs 2.3a) et le D3Q7, D3Q15 et D3Q19 pour le 3D (Figs 2.3b). Les équations de Navier-Stokes nécessitent *a minima* l'utilisation des réseaux D2Q9 et D3Q15. Pour le transport par advection-diffusion, les réseaux D2Q5 et D3Q7 peuvent être utilisés. Pour la croissance cristalline, on montrera dans le chapitre 3 que pour éviter des effets d'anisotropie numérique



(a) Réseaux en deux dimensions.



(b) Réseaux en trois dimensions.

FIGURE 2.3 – Réseaux définis dans les codes de calcul. (a) Réseaux 2D. (b) Réseaux 3D.

non désirés, il est nécessaire d'utiliser les réseaux D3Q15 ou D3Q19 et éviter le D3Q7. Ces codes sont essentiellement conçus pour tester des méthodes LB et des modèles. Néanmoins, compte tenu de l'évolution des architectures de calcul et des logiciels associés, une nouvelle direction de travail est en cours sur la « portabilité de performance » des méthodes LB et le développement d'un nouveau code associé. Cette thématique est présentée dans le chapitre 6. Enfin, comme déjà mentionné, la LBM est principalement utilisée pour simuler tout un tas de problèmes physiques impliquant des fluides. Ici, on se positionne dans le cas où on souhaite « enrichir » son code dédié à la mécanique des fluides en le couplant avec d'autres phénoménologies tout en utilisant la LBM comme méthode de résolution.

2.3.3 Positionnement des approches LB vis-à-vis des variantes de la littérature

Quelques précisions sont apportées sur les approches LB qui sont reprises de la littérature en les repositionnant vis-à-vis des alternatives existantes. En effet, plusieurs cadres théoriques ont déjà été proposés pour améliorer la stabilité du schéma (par exemple en modifiant l'opérateur de collision), ou bien pour tenir compte de problèmes couplés fluide/thermique avec une fonction de distribution f_i unique. Plusieurs méthodes ont aussi été proposées pour tenir compte de l'incompressibilité des fluides et pour simuler des écoulements diphasiques.

Opérateurs de collision et stabilité. Dans l'équation (2.1), l'opérateur de collision est de type BGK. Cet opérateur relaxe la fonction de distribution f_i vers son équilibre local f_i^{eq} proportionnellement à un taux de relaxation τ_u unique qui est relié à la viscosité cinématique du fluide (Eq. (2.6)). Dans le cas du transport ADE (Eq. (2.7)) la collision est aussi de type BGK et le taux de relaxation τ_c est relié au coefficient de diffusion par une relation similaire. D'autres opérateurs de collision permettent de mieux contrôler la stabilité de l'algorithme : le « Two-Relaxation-Times » (TRT) [34] et le « Multiple-Relaxation-Times » (MRT) [35, 36]. Comme leurs noms l'indiquent, ces opérateurs introduisent au cours de l'étape de collision des taux de relaxation supplémentaires. Certains de ces coefficients sont reliés à des grandeurs physiques (e.g. tenseur de diffusion anisotrope pour le transport [37]) et d'autres permettent de contrôler la stabilité de l'algorithme. Le chapitre 4 présentera un cas d'application de la collision MRT pour (i) améliorer la stabilité du schéma pour des nombres de Péclet plus élevés et (ii) tenir compte de coefficients de diffusion anisotropes. Tous les autres chapitres utiliseront la collision BGK. Enfin d'autres alternatives sont proposées pour améliorer la stabilité : l'« Entropic Lattice Boltzmann Method » [38, 39] qui modifie la fonction à l'équilibre

f_i^{eq} pour tenir compte du théorème H de Boltzmann et de la « Regularized Lattice Boltzmann Method » [40] qui utilise uniquement la fonction d'équilibre et la fonction non-équilibre pour réaliser la collision. Une comparaison récente de ces quatre opérateurs de collision est réalisée dans [41].

Incompressibilité. Dans la section 2.2, la fonction de distribution à l'équilibre standard f_i^{eq} (Eq. (2.3)) permet de simuler la version compressible des équations de Navier-Stokes et, dans ce schéma, la pression est reliée à la densité par la relation $p = \rho c_s^2$ où le coefficient c_s^2 est un paramètre fixé. Plusieurs schémas alternatifs ont été proposés pour simuler des fluides incompressibles et en particulier pour pouvoir reproduire la solution de Poiseuille lorsqu'un fort gradient de pression est appliqué sur les conditions aux limites. La méthode proposée dans [42] nécessite de résoudre une équation de Poisson supplémentaire sur la pression tandis que dans [43] une étape supplémentaire de prédiction-corrrection est nécessaire. Dans ce manuscrit on préfère appliquer la méthode de compressibilité artificielle [44], méthode pour laquelle la condition solénoïdale $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ est approchée par $(1/\chi)\partial p/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ où χ est le coefficient de compressibilité artificielle. La méthode de compressibilité artificielle a été mise en œuvre dans le formalisme LB dans [45] avec $\chi = \rho_0 c_s^2$ où ρ_0 est la densité constante. Les détails de cette approche (fonction de distribution à l'équilibre et mise à jour de la pression et de la vitesse) sont donnés dans le chapitre 5.

Une nouvelle LBE pour chaque EDP supplémentaire. Lorsqu'on cherche à simuler un mono-fluide couplé avec la température, certains auteurs (e.g. [46]) cherchent à simuler les équations couplées Navier-Stokes et énergie en utilisant une fonction de distribution unique et en augmentant l'espace des vitesses (par exemple D2Q13 en 2D). Cette approche est cohérente avec la théorie cinétique des gaz [47], les moments de la fonction de distribution permettent de retrouver la masse, la quantité de mouvement et l'énergie. Néanmoins, des difficultés surviennent lorsqu'on cherche à appliquer des conditions aux limites sur l'énergie qui sont différentes de celles appliquées sur les fluides. Dans l'ensemble de ce manuscrit, on choisit d'introduire une LBE supplémentaire pour chaque nouvelle EDP : la LBE Eq. (2.1) sera utilisée pour simuler les équations de Navier-Stokes, une autre sera introduite pour la température (l'énergie), une autre pour la concentration et une dernière pour le champ de phase. Chaque LBE du système est résolu successivement l'une après l'autre. Chacune d'elles décrit l'évolution d'une nouvelle fonction (g_i par exemple) qui relaxe vers une fonction de distribution à l'équilibre (g_i^{eq}) qui lui est propre. Les couplages sont traités au travers des termes sources dans ces équations et du terme force dans la quantité de mouvement. Même si elle introduit une fonction supplémentaire, les avantages de cette méthode sont de pouvoir contrôler les nombres adimensionnels (Nusselt, Péclet, ...) grâce aux taux de collision de ces LBE et de pouvoir appliquer des conditions aux limites sur chaque fonction f_i et g_i séparément.

Approches « bottom-up » et « top-down ». Dans la section 2.2, n'est décrite que la partie monophasique laminaire. Lorsqu'on cherche à simuler des écoulements plus complexes comme les écoulements diphasiques, plusieurs alternatives existent en termes de modèles mais aussi en termes de philosophie d'approches. Dans la première (« bottom-up »), les acteurs font des hypothèses sur les interactions locales des particules et en déduisent les conséquences sur les équations macroscopiques effectivement simulées. Dans cette vision, des hypothèses sur le modèle physique sont intégrées et se mélangent à la méthode numérique elle-même. L'exemple le plus connu est le « modèle de Shan-Chen » [48, 49] pour les écoulements diphasiques. Néanmoins, l'une des difficultés liées à cette approche est que la méthode n'assure pas d'obtenir un modèle macroscopique qui est cohérent du point de vue de la thermodynamique. De plus, l'absence de paramètre pour contrôler la tension interfaciale indépendamment d'autres paramètres a conduit à faire évoluer la méthode. Plusieurs améliorations ont vu le jour et cette classe d'approche est qualifiée de « méthodes pseudo-potentielles » pour les écoulements diphasiques. Pour une synthèse des méthodes pseudo-potentielles, on pourra se référer au livre [11, chapitres 2 et 3] ou à la référence [15, section 3].

Dans la seconde façon de procéder, on suppose que le modèle mathématique (défini par une EDP ou un système d'EDPs) est connu et qu'il a été établi indépendamment de la LBE (« top-down »). On suppose que la LBE (Eq. (2.1)) est valable, et il s'agit de concevoir la fonction de distribution à l'équilibre $f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ du terme de collision de telle sorte qu'elle simule *au mieux* l'EDP du problème. On considère la LBM comme une méthode numérique alternative aux méthodes standards. C'est dans cette approche que se situe l'ensemble de la démarche générale de ce manuscrit, en particulier lorsqu'on cherche à concevoir une méthode LB pour simuler une équation à champ de phase pour la croissance des cristaux (chapitre 3) ou bien une ADE fractionnaire en espace (chapitre 4).

2.4 Validation avec le code TrioCFD du CEA/Den

Une illustration des méthodes LB de la section 2.2 est décrite sur un modèle de Navier-Stokes/Darcy-Forchheimer couplé avec l'équation de la température. Les comparaisons ont été réalisées avec le code TrioCFD [9] sur le cas test de la convection naturelle [50] avec et sans présence d'un milieu poreux dans le cadre du projet SITHY. Dans cette section, le modèle mathématique est présenté dans la section 2.4.1 et les résultats des comparaisons sont présentés dans la section 2.4.2. Les méthodes

LB et la prise en compte des termes forces sont intégralement reprises de la référence [51]. Elles sont présentées dans [R9] mais ne sont pas détaillées ici.

2.4.1 Modèle de Navier-Stokes/Darcy-Brinkman-Forchheimer

Modèle mathématique. Le modèle est repris de [51] et s'écrit :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.10a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\frac{\mathbf{u}}{\omega} \right) = -\frac{1}{\rho_0} \nabla(\omega p) + \nu_e \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (2.10b)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) \quad (2.10c)$$

où l'équation (2.10a) est l'équation de conservation de la masse pour un fluide incompressible de vitesse \mathbf{u} . L'équation (2.10b) est l'équation de conservation de la quantité de mouvement dans laquelle ω est la porosité, ρ_0 est la densité du fluide, p la pression et ν_e est la viscosité effective. Le qualificatif « effectif » signifie que c'est une viscosité qui tient compte de la présence des grains solides, qui est donc représentative du milieu poreux. L'équation décrivant l'évolution de la température T à l'intérieur du domaine est celle d'advection-diffusion où on a posé $\kappa = \lambda/C_p$. Dans la suite on considérera $C_p = 1$. Le terme force \mathbf{F} est défini par :

$$\mathbf{F} = \left[-\frac{\omega \mathbf{v}}{k} \mathbf{u} - \frac{\omega F_\omega}{\sqrt{k}} |\mathbf{u}| \mathbf{u} \right] + \omega \mathbf{G}, \quad \text{avec} \quad \mathbf{G} = -\mathbf{g} \beta (T - T_0). \quad (2.11)$$

Enfin \mathbf{G} est le terme de Boussinesq qui fait intervenir la gravité $\mathbf{g} = (0, g)$, le coefficient de dilatation thermique β et la différence entre la température T et une température de référence T_0 .

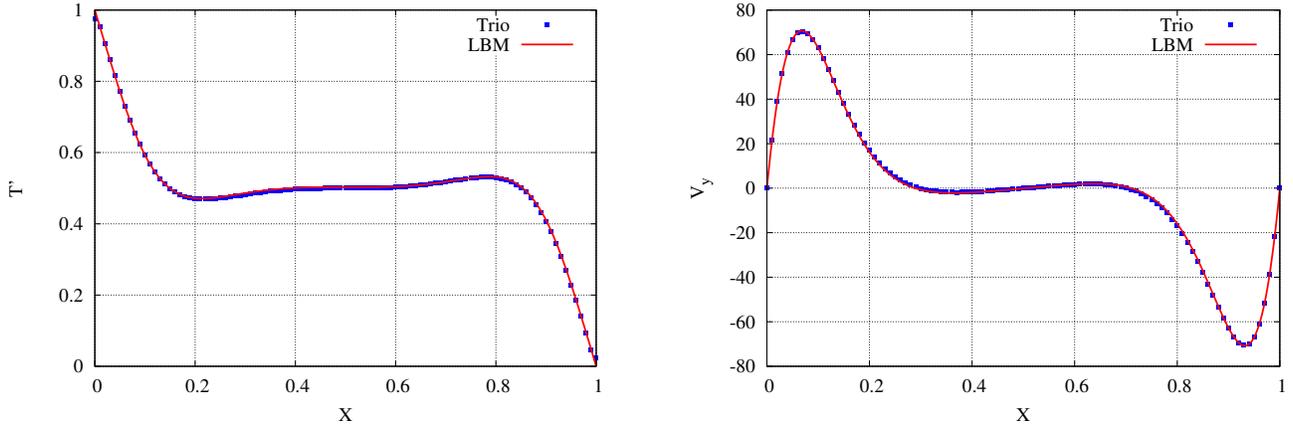
Termes forces de Darcy et de Forchheimer. Dans l'Eq. (2.11), le premier terme dans le crochet est proportionnel à la vitesse et s'appelle le terme de Darcy : $\mathbf{f}_1 = -\omega \mathbf{v} \mathbf{u} / k$. Dans ce terme ω (sans dimension) est la porosité, ν la viscosité cinématique ($[L^2]/[T]$) du fluide et k la perméabilité ($[L^2]$). Le second terme est proportionnel au carré de la vitesse et s'appelle le terme de Forchheimer : $\mathbf{f}_2 = \omega F_\omega |\mathbf{u}| \mathbf{u} / \sqrt{k}$ où F_ω est un facteur qui dépend de la structure du milieu poreux. Ce modèle de Darcy-Forchheimer peut être retrouvé théoriquement avec les méthodes d'homogénéisation [52]. Le modèle tient compte du milieu poreux au travers de coefficients « effectifs » représentatifs du milieu poreux : la porosité ω , la perméabilité k , la viscosité effective ν_e et le coefficient F_ω du terme de Forchheimer. Tous ces paramètres varient en fonction du système étudié et doivent être connus ou bien calés sur des expériences. Lorsque $\omega = 1$ et que les forces \mathbf{f}_1 et \mathbf{f}_2 sont nulles, on retrouve le modèle classique de Navier-Stokes couplé avec la thermique sous l'hypothèse de Boussinesq.

Lois phénoménologiques pour la perméabilité. La perméabilité k est une grandeur qui est difficile à mesurer. Plusieurs travaux expérimentaux cherchent à relier cette grandeur à la porosité ω qui est plus facilement accessible. Ces expériences sont conduites dans des conditions très particulières, souvent en colonne, en utilisant un milieu poreux bien connu composé de billes de verre ou de sable de propriétés physico-chimiques bien définies. Parmi ces propriétés, un paramètre souvent utilisé pour les corrélations est le diamètre d_p des billes de verre ou de sable. Dans TrioCFD, les deux relations les plus communément utilisées sont déjà programmées. Il s'agit de la loi de Kozeny-Carman : $k = \omega^3 d_p^2 / 180(1 - \omega)^2$ et celle d'Ergun $k = \omega^3 d_p^2 / 150(1 - \omega)^2$ avec $F_\omega = 1.75 / \sqrt{150 \omega^3}$. Seule la constante au dénominateur est différente entre ces deux lois.

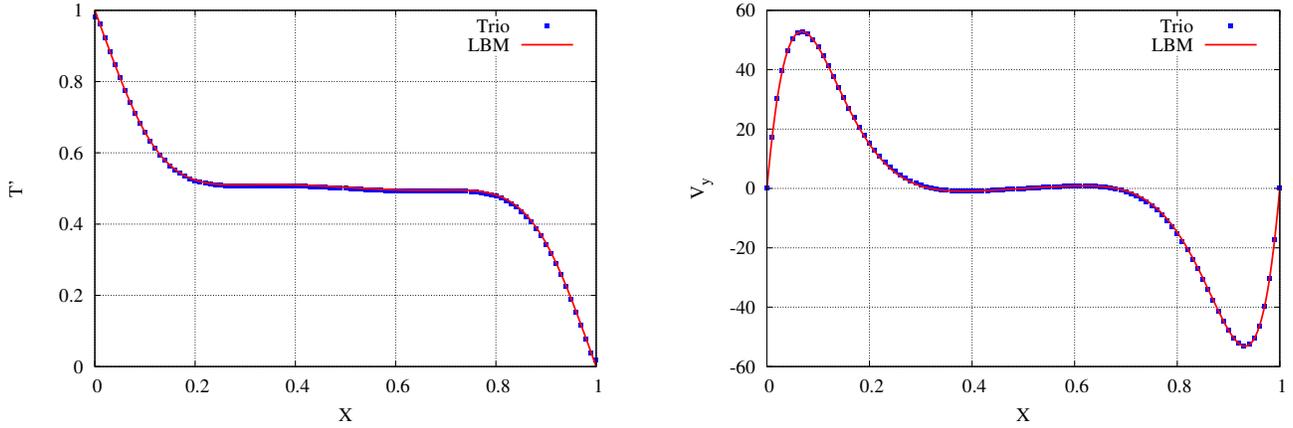
2.4.2 Cas test de la « convection naturelle »

Méthodes numériques. Dans TrioCFD, plusieurs fiches de validation existent sur le problème de convection naturelle dont une sur la cavité de Vahl-Davis en 2D. Le jeu de données discrétise les équations NS incompressibles avec la méthode des Volumes-Différences Finies (VDF) avec schéma explicite en temps. Les termes de Darcy et de Forchheimer sont pris en compte dans le terme source en rajoutant les options appropriées. Ces options tiennent compte de la valeur de la porosité et de les lois phénoménologiques de perméabilité de Kozeny-Carman et d'Ergun. Pour le code LBM, les méthodes sont reprises de [51] et mises en œuvre dans [R9]. La collision est le BGK et la fonction à l'équilibre est modifiée pour tenir compte de la porosité. Enfin les termes forces \mathbf{F} sont également reprises de cette référence.

Nombre adimensionnels. La physique du problème de convection naturelle est régie par deux nombres adimensionnels qui sont le nombre de Rayleigh (Ra) défini par : $Ra = g\beta(T_{\Gamma_1} - T_{\Gamma_3})H^3/\nu\kappa$ et le nombre de Prandtl (Pr) défini par le rapport de la viscosité cinématique et la diffusivité thermique : $Pr = \nu/\kappa$. Pour un domaine carré de dimension H , T_{Γ_1} est la température du bord vertical gauche et T_{Γ_2} est celle du bord vertical droit. Lorsqu'on tient compte de la présence d'un milieu poreux,



(a) Convection naturelle « standard ».



(b) Convection naturelle avec termes de Darcy et de Forchheimer.

FIGURE 2.4 – Comparaison LBM (ligne rouge) et TrioCFD (carrés bleus) sur la convection naturelle (a) sans et (b) avec termes de Darcy et de Forchheimer. À gauche : profils de température adimensionnés par $T' = (T - T_g)/(T_g - T_d)$. À droite : profils de vitesse V_y adimensionnés par $V_y = u_y H/\nu$. D'après [R2], 2016.

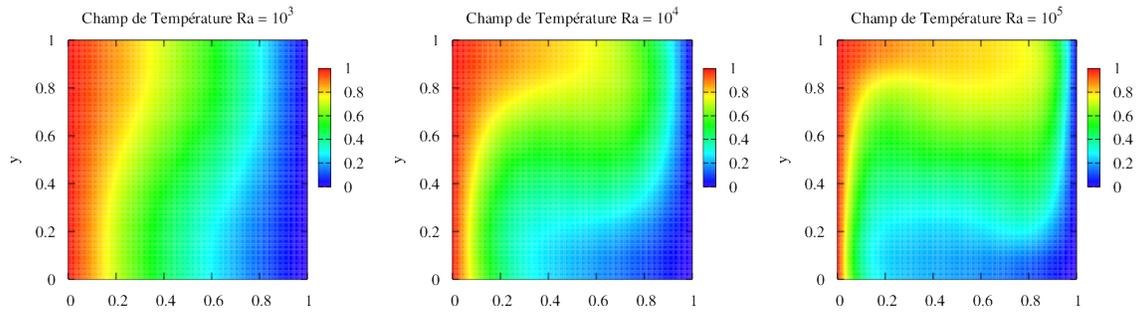
deux nombres adimensionnels supplémentaires sont utilisés. Le premier est le nombre de Darcy (Da) : $Da = k/L^2$ où L est une longueur caractéristique du milieu. Le second nombre caractérise le rapport entre la viscosité cinématique effective et la viscosité cinématique : $Je = \nu_e/\nu$. Les paramètres des jeux de données de chaque code seront choisis de telle manière à ce que ces nombres adimensionnels soient identiques.

Valeurs des paramètres. Dans chacun des deux codes, LBM et TrioCFD, les paramètres des équations sont choisis de telle sorte que les nombres adimensionnels soient identiques. On choisit : $Ra = 10^5$ et $Pr = 1$. Les valeurs des paramètres sont indiquées dans le tableau 2.1. Pour ces valeurs, seules celles situées dans la partie inférieure sont identiques i.e. la gravité $g = 9.81$, la différence de température $T_{\Gamma_1} - T_{\Gamma_3} = 19$ et la densité $\rho_0 = 1$.

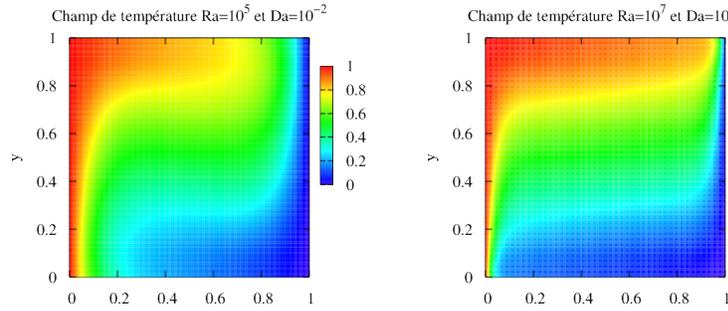
Comparaisons sans \mathbf{f}_1 et \mathbf{f}_2 . Les simulations sont réalisées sans les termes de Darcy et de Forchheimer. Pour les comparaisons, les résultats des deux codes sont post-traités puisque les valeurs des paramètres et les dimensions des domaines sont différentes. Pour les profils de température, on présente le champ T' , adimensionné par la relation $T' = (T - T_{\Gamma_1})/(T_{\Gamma_1} - T_{\Gamma_3})$ et les profils de vitesse, on présente le champ V_y , qui est adimensionné par la relation : $V_y = u_y H/\nu$. Pour le code LBM on prend $H = 1$ et $\nu = 4.3359375 \times 10^{-4}$ et pour TrioCFD, on prend $H = 0.01$ et $\nu = 1.85 \times 10^{-5}$. Pour

TABLE 2.1 – Paramètres physiques pour chaque code.

Code LBM		Code TrioCFD	
$L_x = L_y$	1	$L_x = L_y$	10^{-2}
$N_x = N_y$	257×257	$N_x = N_y$	101×101
ν	4.3359375×10^{-4}	ν	1.85×10^{-5}
κ	4.3359375×10^{-4}	κ	1.85×10^{-5}
β	1.008657×10^{-4}	β	0.1836
H^3	1	H^3	10^{-6}
g	9.81	g	9.81
$T_{\Gamma_1} - T_{\Gamma_3}$	19	$T_{\Gamma_1} - T_{\Gamma_3}$	19
ρ_0	1	ρ_0	1



(a) Convection naturelle pour trois nombres de Rayleigh.



(b) Convection naturelle en milieu poreux.

FIGURE 2.5 – Simulation LBM de convection naturelle standard avec $Ra = 10^5$ et $Pr = 1$. (a) Champs de température pour la convection naturelle et (b) champs de température avec les termes de Darcy et de Forchheimer. D’après [R9], 2009.

pouvoir comparer les profils, les résultats de `TriocFD` font l’objet d’une transformation d’échelle à l’aide de `Paraview` ($\times 100$ dans chaque direction). Les profils sont recueillis à mi-hauteur ($y = 0.5$) le long de x . Les profils de la température T' et de la vitesse V_y sont indiqués sur la Fig. 2.4a. Les champs de température sont présentés sur la Fig. 2.5a pour trois valeurs du nombre de Rayleigh ($Ra = 10^3, 10^4, 10^5$).

Comparaisons avec \mathbf{f}_1 et \mathbf{f}_2 . On tient compte dans les simulations `TriocFD` (VDF) et LBM de tous les termes contenus dans \mathbf{F} i.e. Darcy, Boussinesq et Forchheimer. Dans le code de référence, le coefficient F_ε est choisi de telle sorte que $\omega = 1$ i.e. que $F_\varepsilon = 0.142887$. On repart du cas test précédent de convection naturelle standard en tenant compte en plus des termes de Darcy et de Forchheimer. La perméabilité est choisie constante et telle que le nombre de Darcy soit égal à 10^{-2} dans chaque code. Pour `TriocFD` la perméabilité est prise égale à $k = 10^{-6}$ (puisque $L^2 = 0.01^2 = 10^{-4}$). Dans le code LBM elle est choisie égale à $k = 10^{-2}$ (puisque $L^2 = 1$). Comme précédemment la perméabilité est choisie constante dans les simulations mais d’autres options sont possibles. Les comparaisons sont indiquées sur les figures 2.4b et deux champs de température sont présentés sur la Fig. 2.5b pour $Ra = 10^5$ et $Da = 10^{-2}$ (à gauche) et $Ra = 10^7$ et $Da = 10^{-4}$ (à droite).

2.5 Pour aller plus loin

Les écoulements dans les cœurs des réacteurs sont principalement monophasiques, turbulents et couplés avec la conservation de l’énergie. Pour simuler des problèmes qui font intervenir des nombres de Rayleigh plus importants (de l’ordre de 10^9 par exemple), il est nécessaire de tenir compte d’un modèle « bas Mach » qui découple la pression en une pression thermodynamique et une pression hydrodynamique [53]. De plus, un terme supplémentaire doit être pris en compte dans le tenseur des contraintes visqueuses : $-2/3\nabla \cdot \mathbf{u}\bar{\mathbf{u}}$. On pourra se référer à [54] pour une application du modèle « bas Mach » dans le contexte des réacteurs avec `TriocFD`. En LBM, les modèles « bas Mach » ont été investigués dans [55].

Pour la turbulence, des modèles « Large Eddy Simulations » (LES) sont mis en œuvre en LBM dans [56, 57, 58, 59], LES-Wale dans [60] et « Reynolds Averaged Navier-Stokes » (RANS) avec les modèle « $k - \varepsilon$ » dans [61, 62]. Jusqu’à présent ces directions de travail n’ont pas été approfondies car, comme rappelé dans la section 1.1, de nombreux codes de calculs existent déjà au DM2S/STMF et sont dédiés aux écoulements turbulents avec des modèles et des lois de parois spécifiques. Néanmoins, compte tenu de nouveaux moyens de calcul (notamment les GPUs) et du travail actuel sur la « performance de portabilité du LBM dans un contexte HPC » (voir chapitre 6), des tests pourraient être réalisés avec LBM/GPU pour approfondir par la simulation le passage entre le milieu libre et le cœur.

Chapitre 3

LBM pour la croissance cristalline

3.1 Introduction

La compréhension fondamentale d'un phénomène physique implique son analyse détaillée et se traduit par l'établissement d'un modèle mathématique (EDPs). Celui-ci doit respecter quelques principes généraux (e.g. minimisation d'une énergie) et s'exprime au travers des lois de conservation. Une fois établi, leurs simulations prédictives sur des systèmes industriels ou naturels requièrent souvent une simplification (en raison de leurs complexités) en faisant appel à des relations de corrélation. Celles-ci traduisent notre méconnaissance et relient les grandeurs physiques entre elles en introduisant des paramètres empiriques. Les simulations de ce chapitre ont pour but de mieux comprendre les phénomènes de cristallisation en simulant un modèle physique établi rigoureusement et qui couple plusieurs EDPs entre elles. Dans le chapitre 4, on présentera une autre façon d'aborder la modélisation en s'affranchissant d'une analyse détaillée de la phénoménologie sous-jacente et en faisant porter une partie de notre méconnaissance sur un paramètre, celui des dérivées fractionnaires.

De nombreux problèmes physiques ou de méthodes mathématiques peuvent être formulés comme des problèmes de minimisation. Par exemple la trajectoire suivie par une particule est celle qui minimise son action et la résolution pratique des problèmes inverses passe par la minimisation d'une fonctionnelle coût qui calcule l'écart quadratique entre les grandeurs observées et simulées (voir annexe A). Ce chapitre synthétise les travaux qui ont été réalisés sur la simulation numérique de modèles qui minimisent une fonctionnelle d'énergie libre d'un système : les modèles à champ de phase. Ces derniers sont établis à partir de la théorie du même nom et interviennent dans une multitude de problèmes physiques qui impliquent des phases solides et/ou liquides séparées par une interface. Ici, ils sont appliqués pour simuler la transition de phase solide/liquide qui est à la base des phénomènes de cristallisation. Dans le chapitre 5 on présentera un autre exemple de minimisation d'une énergie libre qui conduit à la minimisation de l'aire interfaciale entre deux fluides immiscibles.

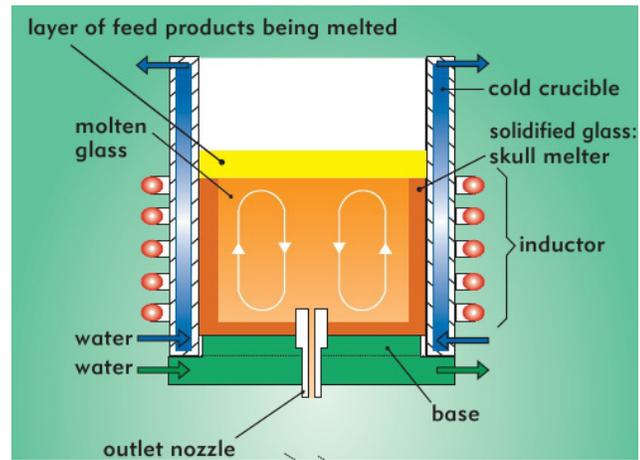
Comparée à d'autres approches (« level-set », « front-tracking », etc ...), le principal avantage de la théorie du champ de phase est sa cohérence thermodynamique. Ces deux ingrédients de la théorie (« thermodynamique » et « minimisation d'une fonctionnelle ») ont motivé mon intérêt à poursuivre l'étude de ces modèles en simulant la croissance cristalline. La cristallisation est un phénomène important dans l'industrie nucléaire car elle apparaît dans l'auto-creuset du procédé de vitrification des déchets de haute activité qui utilise la technique du creuset froid (section 3.2.1). Des travaux sont aussi réalisés sur la formulation des verres dédiés au conditionnement des déchets afin de « minimiser » son apparition. Les cristaux peuvent influencer le comportement à long terme du verre en modifiant ses propriétés physiques et sa tenue mécanique. De ce fait, de nombreuses études expérimentales ont été menées au CEA/Marcoule pour identifier les espèces chimiques qui cristallisent en fonction des formulations de verres et des conditions de températures (section 3.2.2).

Les modèles à champ de phase de croissance cristalline sont déjà simulés dans la littérature par différentes méthodes numériques (éléments finis, volumes finis, différences finies, ...). Chaque méthode possède ses propres avantages et inconvénients, mais l'utilisation des mêmes méthodes dans un même code informatique apporte une cohérence sur les développements qui y sont réalisés et réduit les « recettes numériques » pour corriger les défauts de la méthode. Ainsi, en prévision du couplage avec la dynamique des fluides, une nouvelle méthode LB a été développée pour simuler la croissance cristalline. Après avoir « tâtonné » sur le modèle d'« enthalpie-porosité » puis sur un des tous premiers modèles à champ de phase (voir section 3.2.3), les méthodes LB ont été adaptées et enrichies en considérant tour à tour une substance pure puis un mélange binaire. C'est ce dernier modèle, le plus général, qui est présenté dans la section 3.3 où on rappellera aussi le modèle à « interface raide » équivalent et la fonctionnelle d'énergie libre sur la base de laquelle le modèle est établi.

La section 3.4 synthétise les méthodes LB qui ont été établies pour simuler ce modèle tout en approfondissant les effets numériques liés au choix des réseaux. Enfin la section 3.5 présente des simulations issues de ces méthodes. La section 3.5.1 présente une simulation sur la croissance simultanée de plusieurs cristaux qui s'influencent mutuellement au cours de leur croissance. La particularité de cette simulation est que chaque cristal peut avoir un nombre de branches différent de ses voisins. La section 3.5.2 présente ensuite des simulations de sensibilité sur la fonction d'anisotropie qui est responsable de



(a) Dispositif expérimental du laboratoire LDPV au CEA/Marcoule.



(b) Formation d'un « auto-creuset » (en orange foncé) sur les parois du dispositif.

FIGURE 3.1 – Procédé du creuset froid pour la vitrification.

la forme caractéristique des cristaux. Ces simulations sont inspirées d'observations expérimentales qui proviennent de la caractérisation des verres par MEB (Microscopie Electronique à Balayage) et qui montrent une grande variété de formes dendritiques (équiaxe, facette, ...).

3.2 Contexte CEA et évolution des travaux

Dans cette section, le procédé de vitrification par la technique du creuset froid du CEA/Marcoule est rappelé dans la section 3.2.1. Puis dans la section 3.2.2, on rappelle les phénomènes de cristallisation qui apparaissent dans la vitrification. Ensuite la démarche, l'évolution des travaux et les réalisations sont présentées dans la section 3.2.3.

3.2.1 Procédé de vitrification par creuset froid

Parmi les procédés de l'aval du cycle du combustible qui existent au CEA/Marcoule, l'un d'eux, le creuset froid (Fig. 3.1a) installé au Laboratoire de Développement des Procédés de Vitrification (LDPV), est dédié à la vitrification des déchets radioactifs de haute et moyenne activités à vie longue.

Principe de fonctionnement du procédé. Le fonctionnement de ce dispositif repose sur l'application d'un champ magnétique qui induit des courants qui, par effet Joule, font fondre le précurseur vitreux (appelé fritte de verre) et les déchets aux alentours de 1200°C. Le verre est donc chauffé par induction directe, tandis que les parois et la sole du creuset sont maintenues à basse température ($T < 400^\circ\text{C}$) grâce à un système de circulation d'eau. De ce fait, il existe dans la fonte verrière, à proximité des parois et de la sole, un fort gradient de température (de l'ordre de $1000^\circ\text{C}\cdot\text{cm}^{-1}$) qui se traduit par la formation d'une couche de verre figée appelée « auto-creuset » (zone orange foncé sur la Fig. 3.1b). De cette situation découlent deux avantages : (i) la minimisation de la corrosion des parois par la fonte verrière, maximisant ainsi la durée de vie des creusets et diminuant le volume de déchets secondaires ; (ii) la possibilité d'accéder à un domaine de température supérieur (typiquement 1150 à 1300°C) à celui accessible avec le traditionnel pot chaud (autour de 1100°C), offrant ainsi de nouvelles possibilités en terme de formulation verrière.

Simulation du procédé. Pour la conception et le dimensionnement d'un tel dispositif, de nombreuses simulations ont été réalisées depuis les années 1980 sur le magnétisme et l'induction d'une part (e.g. [63]) et sur la thermo-hydraulique d'autre part. Plusieurs travaux de thèse ont ainsi été menés sur la modélisation et la simulation de l'électromagnétisme dans les creusets froids (e.g. [64]) ; sur le couplage thermo-magnéto-hydrodynamique dans le bain de verre [65] ; sur le bullage et le brassage mécanique [66], et sur la vidange d'une fonte verrière [67]. La sédimentation des platinoïdes qui perturbent le comportement rhéologique du bain de verre a également été étudiée dans [68].

3.2.2 La croissance cristalline dans la vitrification

Comme ORANO (anciennement AREVA NC) s'est équipé de ce dispositif à la Hague en 2010, la modélisation du creuset froid a été prise en charge dans un nouveau projet SIVIT (Simulation de la VITrification [69], [R18]) en partenariat entre CEA et ORANO. Ce projet a permis d'intégrer dans la modélisation des phénoménologies relatives à d'autres disciplines telles que la science des matériaux et la chimie. L'une d'elles concerne la cristallisation qui se produit dans les verres.

Études de la cristallisation dans les verres. Certains éléments chimiques présents dans la composition des verres nucléaires sont susceptibles de cristalliser, soit dans le four de vitrification, soit lors du refroidissement du verre coulé en conteneur. Les phénomènes de cristallisation dans les verres nucléaires sont étudiés depuis les années 2000 au CEA/Marcoule, e.g. [71, 70, 72] pour ce qui est des verres élaborés à partir des combustibles usés de type UOx (Oxyde d'Uranium). Dans ces travaux, la morphologie et les cinétiques de croissance des cristaux (principalement de types silicates de terres rares et molybdates de calcium pour les verres UOx actuels) ont été caractérisées via, entre autres, des observations au Microscope Electronique à Balayage (MEB) et de la diffraction des rayons X. Afin d'augmenter le taux de charge dans les verres et diminuer le nombre de colis à stocker, d'autres compositions de verres ont été étudiées mais pouvant induire la cristallisation de certaines phases riches en terres rares ou en molybdène et susceptibles de modifier les propriétés de confinement du verre [73]. Une méthode d'analyse d'image MEB a aussi permis des comparaisons de la cristallisation en condition de traitement isotherme et sous gradient thermique [70]. Les analyses mettent en évidence la cristallisation de plusieurs composés tels que des apatites qui ont une morphologie d'aiguilles hexagonales creuses ou pleines et des molybdates de calcium (CaMoO_4) qui ont une forme dendritique équiaxe (voir Fig. 3.2).

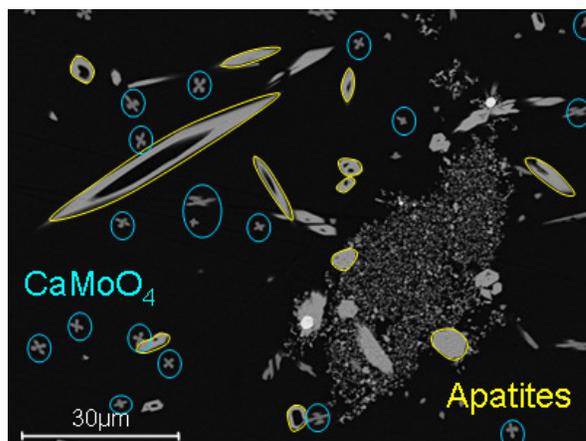


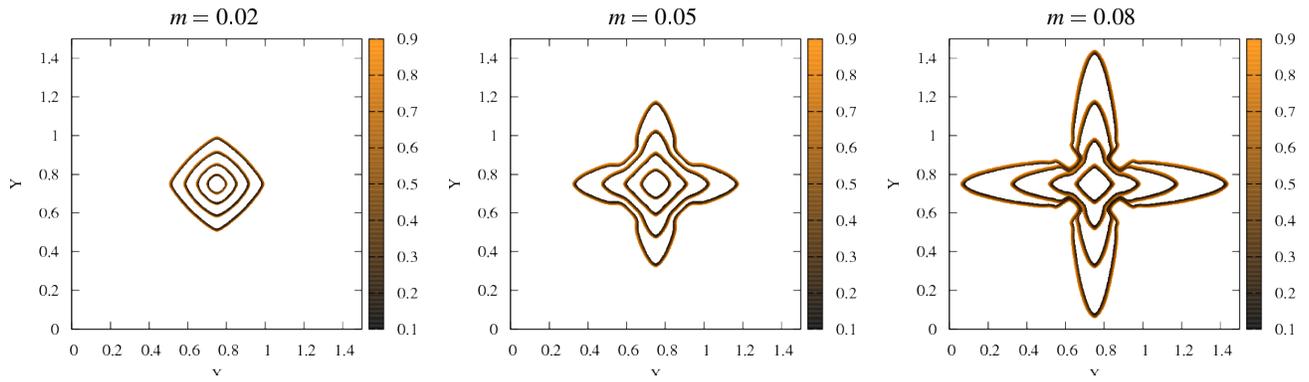
FIGURE 3.2 – Cristaux de molybdate de calcium (CaMoO_4) et de silicates de terres rares susceptibles de croître dans l'auto-creuset (d'après [70]).

Cristallisation dans l'auto-creuset. Soumise à des températures comprises entre 400 et 1200°C pendant plusieurs semaines, la zone d'auto-creuset est une zone du four particulièrement favorable aux phénomènes de cristallisation par nucléation-croissance. Dans les verres de types UOx, on y trouvera ainsi potentiellement les molybdates de calcium (CaMoO_4) ou les terres rares (de type $\text{Ca}_2\text{Nd}_8(\text{SiO}_4)_6\text{O}_2$) qui cristallisent dans des gammes de températures comprises entre 600 et 900°C [70, 72] (voir Fig. 3.2). L'agitation du bain de verre peut quant à elle être un facteur favorable (apport de matière en continu) ou au contraire défavorable (dissolution des cristaux entraînés dans le bain de verre) pour les phénomènes de cristallisation. Ainsi, tout le long de l'auto-creuset, des cristallisations apparaissent dans le verre, modifiant ainsi la micro-structure du verre et éventuellement ses propriétés physiques (conductivité thermique, viscosité, etc...). La présence ou l'absence des cristaux dans les différentes strates de l'auto-creuset va dépendre (i) des éléments présents dans le flux de déchets et la fritte de verre, (ii) de la température dans les différentes strates de l'auto-creuset et (iii) de la durée de la campagne.

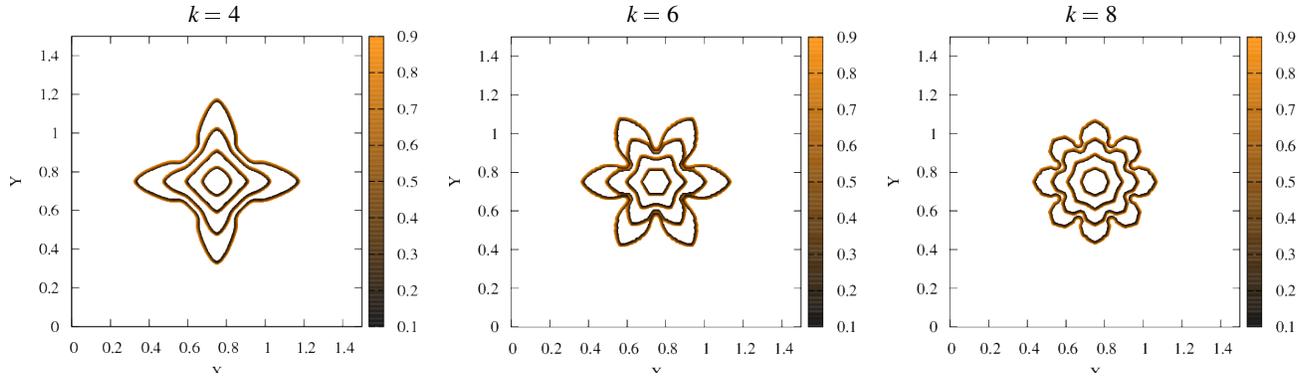
Objectifs dans SIVIT. Dans le projet SIVIT, les objectifs de la modélisation de la croissance cristalline étaient les suivants [74] : (I) « Décrire et prédire l'évolution de l'auto-creuset en terme de microstructure (nature, nombre, taille, répartition des phases cristallisées), de composition chimique et épaisseur » et (II) « Décrire l'impact de l'auto-creuset (phases cristallisées) sur le procédé ». Il s'agit en particulier de prévoir l'évolution des différentes strates de l'auto-creuset en fonction du temps, de la température, de la composition, etc... La problématique fait donc d'ores et déjà apparaître deux échelles caractéristiques : celle de la microstructure qui précise la nature, la morphologie, la répartition et la taille des phases cristallisées, et celle du procédé pour laquelle on désire connaître l'impact de la présence de ces cristaux sur les propriétés macroscopiques du bain de verre. Pour chacune des deux échelles, des caractérisations et des expériences ont été (et sont encore) mises en œuvre au DE2D au CEA/Marcoule. Les modèles de la première échelle se concentrent à l'échelle des cristaux (de la dizaine à la centaine de microns) et permettent de différencier leur nature et d'étudier leur dynamique de croissance et leur morphologie. Pour les modèles de la seconde échelle, la présence (ou l'absence) des cristaux intervient comme une modification (ou non) des propriétés thermodynamiques et rhéologiques moyennées sur un volume élémentaire de l'auto-creuset.

3.2.3 Démarche et réalisations

Le travail qui a été réalisé a initié la modélisation à l'échelle des cristaux et considère la solidification d'une substance pure et d'un mélange binaire avec ou sans influence des écoulements.



(a) Influence du paramètre de mobilité m .



(b) Influence du mode d'anisotropie k de l'interface.

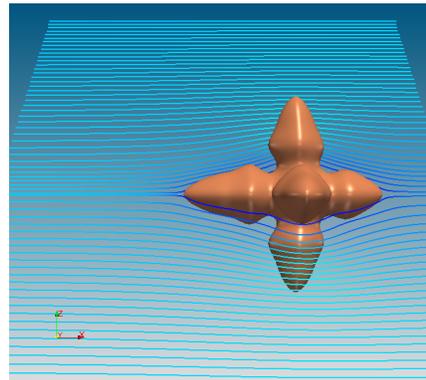
FIGURE 3.3 – Influence de (a) la mobilité m de l'interface et (b) du mode k , du modèle décrit dans [84] et simulé par LBM. Les interfaces du champ de phase sont présentées aux temps 1, 3, 6 et 10 ($\times 10^3 \Delta t$). Le maillage est composé de 501×501 nœuds, l'épaisseur de l'interface de l'interface vaut $\bar{\epsilon} = 0.003$ et le coefficient d'anisotropie $\gamma = 0.05$ (d'après [R6], 2012).

Modèle « enthalpie-porosité » pour la solidification. La cristallisation est un changement de phase liquide-solide et un premier modèle de solidification d'une phase fluide a été simulé : le modèle d'« enthalpie-porosité » [75]. Dans ce modèle, les phases liquide et solide sont prises en compte par l'intermédiaire de la dérivée temporelle d'une fraction liquide qui apparaît dans l'équation de la chaleur. À chaque pas de temps, l'enthalpie est mise à jour grâce au calcul de la température. La fraction de liquide est alors déduite par interpolation linéaire entre les enthalpies liquide et solide. La zone dans laquelle la fraction liquide ne vaut ni « zéro » (solide) ni « un » (liquide) est considérée comme une zone « pâteuse » qui est assimilée à une « porosité ». Ce modèle est déjà simulé par LBM dans [76] et a été testé dans le cadre de SIVIT avec une méthode LB ([O4]). Les développements numériques ont été validés par des solutions analytiques de problèmes de conduction [77]. Des publications étendent ce modèle d'« enthalpie-porosité » à la solidification anisotrope qui est caractéristique de la forme des cristaux [78, 79]. Cependant, afin d'assurer la cohérence thermodynamique du modèle de croissance cristalline, le choix a été fait de poursuivre dans une autre direction de travail : les « modèles à champ de phase ».

Premières simulations LBM de modèles à champ de phase. La théorie du champ de phase pour la solidification [80, 81, 18, 19, 20] permet d'établir des modèles qui sont issus d'une fonctionnelle thermodynamique à minimiser (énergie libre) ou à maximiser (entropie). De plus, des liens sont formellement établis avec les approches à « interface raide » grâce aux développements asymptotiques [82, 83]. L'approche « champ de phase » permet aussi d'unifier les modèles avec d'autres applications telles que la démixtion (voir chapitre 5). La LBM, normalement dédiée à la simulation des équations de Navier-Stokes monophasiques et diphasiques, a été adaptée à la simulation de plusieurs modèles à champ de phase pour la croissance cristalline. Deux modèles ont été testés sur un cas simplifié de substance pure. Le premier est celui de [84], simulé dans [85], qui est bien adapté pour simuler la solidification d'une substance pure dans un liquide surfondu. Ce modèle est composé de deux EDPs non linéaires couplées : une pour la température et une autre pour le champ de phase. Ce travail a permis d'initier des développements en 2D d'une méthode de simulation basée sur la LBM dans [R6] avec un réseau D2Q5 et une approximation BGK du terme de collision. Plusieurs simulations de sensibilité aux paramètres du modèle ont été réalisées, en particulier sur la mobilité de l'interface (Fig. 3.3a) et le mode d'anisotropie (Fig. 3.3b).



(a) Croissance d'un cristal équiaxe. Modèle [87] simulé par LBM sans effet d'écoulement (d'après [R5], 2013).



(b) Croissance d'un cristal fixe dans un écoulement dirigé de la gauche vers la droite. Modèle [88] simulé par LBM. À gauche, vitesse imposée u_1 . À droite, vitesse imposée $u_2 = 4u_1$. D'après [P5], 2014.

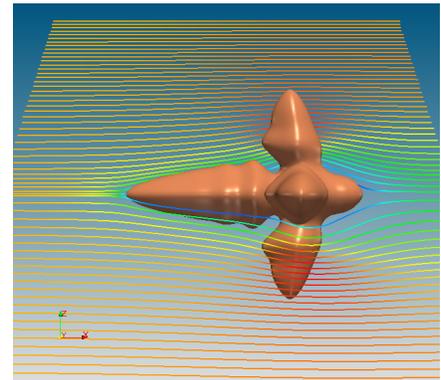


FIGURE 3.4 – Simulations de croissance cristalline d'une substance pure (a) sans et (b) avec écoulements.

Modèles issus des « développements asymptotiques raccordés » d'une interface fine. Le second modèle testé, lui aussi dédié aux substances pures, est celui de Karma-Rappel [86, 87]. Théoriquement, ce modèle tient compte d'une variation de la température dans la zone diffuse ce qui permet de corriger le coefficient cinétique avec un terme supplémentaire et permet de rendre accessible à la simulation des longueurs capillaires plus petites et des sous-refroidissements plus importants. Pour le modèle du paragraphe précédent, l'équivalence avec le modèle sharp interface est obtenue lorsque l'épaisseur de l'interface tend vers 0 mais la température est supposée constante dans la zone diffuse. Une méthode LBM originale a été développée dans [R5] pour simuler en 3D ce modèle, puis il a étendu au couplage avec l'hydrodynamique dans [P5] sur la base du modèle [88]. Sur la Fig. 3.4a, le cristal, qui n'est pas soumis à l'effet des écoulements, présente des branches qui sont identiques alors que sur la figure 3.4b, le cristal qui est fixé à l'intérieur d'un écoulement montre qu'une de ses branches croît plus vite que les autres. Sa croissance est d'autant plus rapide que la vitesse imposée est grande (vitesse initiale u_1 à gauche et $u_2 = 4u_1$ à droite). Les résultats sont en accord avec ceux présentés dans [88] en 2D et [89] en 3D. L'explication est donnée par des gradients de température qui sont plus importants en amont qu'en aval. La chaleur latente peut être évacuée plus rapidement en amont et la branche croît plus vite. L'application des modèles à champ de phase dans le contexte des verres a fait l'objet d'une intervention dans l'école d'été « SumGlass 2013 » [O3] suivie d'une publication [P5] mettant en avant la collaboration avec le DE2D.

Thèse « mélanges binaires et influence des écoulements ».

Les deux rapports techniques ([R5] et [R6]) ont conduit à la thèse d'AMINA YOUNSI que j'ai co-dirigée (Directeur de thèse officiel DR CNRS MATHIS PLAPP, Ecole Polytechnique). Elle a tout d'abord étendu dans une note technique [90] la LBM aux modèles de croissance cristalline pour les mélanges binaires isothermes sur la base du modèle [91]. Ce travail a été suivi d'un proceeding avec comité de lecture [P13] où le couplage avec l'équation de la température est réalisé en faisant l'hypothèse d'une diffusion identique dans le liquide et le solide (modèle symétrique). La figure 3.5 présente les champs simulés par le modèle symétrique pour un faible nombre de Lewis ($Le = 5$). La difficulté pour la méthode LB pour simuler le modèle complet [92] (voir section 3.3) réside dans l'annulation du coefficient de diffusion dans l'équation de la supersaturation (Eq. (3.6b)) et de la prise en compte du « courant anti-trapping » qui en découle (Eq. (3.6g)). Les méthodes pour résoudre ces difficultés ont fait l'objet d'une note technique [R4] et l'ensemble des travaux [R5], [P13] et [R4], ont été synthétisés dans la publication [P3]. Elle s'est ensuite concentrée sur l'étude de l'influence des écoulements sur la morphologie des cristaux et a proposé un modèle original de changement de densité au cours de la solidification. AMINA YOUNSI a aussi été récompensée par le prix du meilleur poster [PT2] dans la conférence internationale « Phase-Field Methods » à

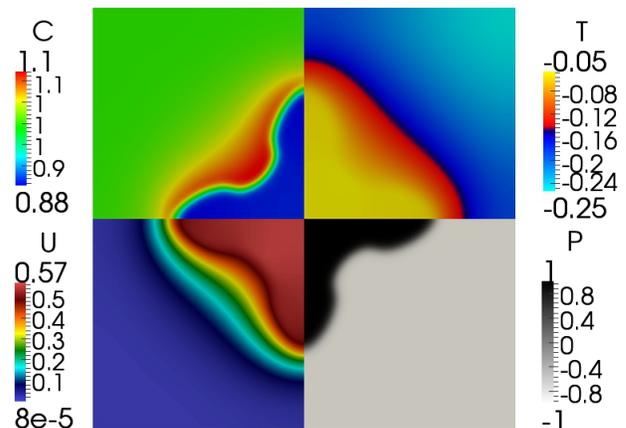


FIGURE 3.5 – Champs de concentration (C), température (T), supersaturation (U) et champ de phase (P) pour $\theta_0 = -0.3$ et $Le = 5$. D'après A. YOUNSI *et al.* [P13], 2014.

Effets de la fonction d'anisotropie. Compte tenu de la diversité des formes dendritiques observées dans les verres, l'étude de la fonction d'anisotropie $a_s(\mathbf{n})$ a été approfondie. Cette fonction est responsable de la forme caractéristique des cristaux et la majorité des travaux utilisent une fonction qui favorise une croissance équiaxe (branches du cristal dirigées selon les axes principaux). D'autres formes de cette fonction existent dans la littérature [94] et ont été simulées [95]. L'origine de cette fonction et ses effets ont été investiguées en 3D par méthodes LB pour un mono-cristal et pour plusieurs cristaux ayant chacun leur propre fonction d'anisotropie. Ce travail a conduit à la publication [P4] et il est synthétisé dans les sections 3.4 et 3.5.

3.3 Modèle à champ de phase

On considère un modèle à champ de phase pour la solidification d'un cristal dans un liquide surfondu. La densité est supposée constante et égale dans le liquide et le solide. Le fluide est considéré au repos et son écoulement n'est pas pris en compte dans le modèle. Les détails du développement du modèle peuvent être trouvés dans [92], ici on résume les points importants.

3.3.1 Modèle sharp interface

Le problème « sharp interface » formulé en termes de composition locale du mélange c et la température T s'écrit :

$$\partial_t c = D \nabla^2 c \quad (\text{liquide}), \quad (3.1a)$$

$$\partial_t T = \kappa \nabla^2 T \quad (\text{liquide et solide}), \quad (3.1b)$$

$$c_l(1-k)V_n = -D \partial_n c_l \quad (\text{interface}), \quad (3.1c)$$

$$LV_n = C_p \kappa (\partial_n T|_s - \partial_n T|_l) \quad (\text{interface}), \quad (3.1d)$$

$$T_i = T_m + mc_l - \Gamma \mathcal{K} - V_n / \mu_k \quad (\text{interface}). \quad (3.1e)$$

Les deux premières équations (3.1a) et (3.1b) décrivent le transport diffusif du soluté et de la chaleur selon les lois de Fick et de Fourier où D est le coefficient de diffusion du soluté et κ est la diffusivité thermique. La chaleur spécifique C_p et la diffusivité thermique κ , sont supposées les mêmes dans les deux phases (modèle symétrique). Par contre, le transport de soluté n'est supposé se produire que dans la partie liquide (« one-sided model »). Les deux équations suivantes (3.1c) et (3.1d) expriment la conservation de la masse et de la chaleur à la frontière libre (conditions de Stefan), où V_n est la vitesse normale de l'interface, $k = c_s/c_l$ est le coefficient de partition qui relie les compositions du solide et du liquide en contact à l'interface, L est la chaleur latente, et le symbole ∂_n est la dérivée spatiale dans la direction normale à l'interface. Dans le diagramme des phases pour un mélange binaire dilué, le cristal a une concentration plus petite que dans le liquide, de telle sorte que le soluté doit être redistribué durant le mouvement de l'interface. La chaleur latente est également libérée au cours de la cristallisation et génère des flux de chaleur. La dernière équation (3.1e) est la condition de Gibbs-Thomson qui relie la température de l'interface à la composition dans le liquide c_l , la courbure \mathcal{K} et la vitesse de l'interface. T_m est la température de fusion du solvant pur, m est la pente du liquidus dans le diagramme de phase, $\Gamma = \gamma T_m / L$ est la constante de Gibbs-Thomson, γ est l'énergie libre de surface liquide-solide, et μ_k est la mobilité de l'interface. Pour simplifier, c'est la version isotrope de la condition de Gibbs-Thomson qui est écrite.

Pour la suite on introduit les champs adimensionnées :

$$\theta = \frac{T - T_m - mc_\infty}{L/C_p}, \quad \text{et} \quad U = \frac{c - c_\infty}{(1-k)c_\infty}, \quad (3.2)$$

où c_∞ est la composition initiale de la fonte. Avec ces définitions, les équations ci-dessus deviennent :

$$\partial_t U = D \nabla^2 U, \quad (3.3a)$$

$$\partial_t \theta = \kappa \nabla^2 \theta \quad (3.3b)$$

$$[1 + (1-k)U_i]V_n = -D \partial_n U \quad (3.3c)$$

$$V_n = \kappa (\partial_n \theta|_s - \partial_n \theta|_l), \quad (3.3d)$$

$$\theta_i + M c_\infty U_i = -d_0 \mathcal{K} - \beta V_n. \quad (3.3e)$$

Les quantités évaluées à l'interface ont un indice i , et $M = -m(1-k)C_p/L$ est la pente du liquidus adimensionnée. Enfin,

$$d_0 = \frac{\Gamma C_p}{L} = \frac{\gamma T_m C_p}{L^2}, \quad \text{et} \quad \beta = \frac{C_p}{L\mu_k} \quad (3.4)$$

sont respectivement la longueur capillaire et le coefficient cinétique de l'interface.

3.3.2 Modèle à champ de phase équivalent

Dans la formulation « champ de phase » de ce problème [92], la position de l'interface est implicitement décrite par la fonction champ de phase ϕ . Cette fonction prend la valeur $\phi = 1$ dans le solide et $\phi = -1$ dans le liquide.

Fonctionnelle d'énergie libre. Le modèle à champ de phase, équivalent au problème sharp interface de la section précédente, est établi dans [92] en supposant que la fonctionnelle d'énergie libre \mathcal{F} est de la forme :

$$\mathcal{F}[\phi, c, T] = \int \left[\left(f(\phi, T_M) + f_T(\phi)\Delta T + \frac{RT_M}{V_0}(c \ln c - c) + \bar{\varepsilon}c + \bar{g}(\phi)\frac{\Delta\varepsilon}{2}c \right) + \frac{\sigma}{2}|\nabla\phi|^2 \right] dV \quad (3.5)$$

Dans le second membre de l'Eq. (3.5), le terme entre parenthèses est la densité d'énergie libre d'un mélange binaire composé de molécules A et B et c est la fraction molaire de B . Il s'écrit comme la somme de i) l'énergie libre d'un matériau pur $f(\phi, T)$, ii) de l'entropie de mélange $RT(c \ln c - c)/V_0$ où R est la constante des gaz parfaits et V_0 est le volume molaire, et iii) un terme de changement de densité d'énergie dû à l'ajout de la concentration $\varepsilon(\phi)c = \bar{\varepsilon}c + \bar{g}(\phi)\Delta\varepsilon c/2$ où $\bar{g}(\phi)$ est une fonction monotone de ϕ , $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_s + \varepsilon_l)/2$, et $\Delta\varepsilon = \varepsilon_s - \varepsilon_l$. L'énergie libre du matériau pur a été développé au premier ordre en $\Delta T = T - T_M$ où T_M est la température de fusion. Le terme $f(\phi, T_M) = H(-\phi^2/2 + \phi^4/4)$ est choisi de la forme d'un double-puits de potentiel où H est la hauteur de ce double-puits.

Modèle à champ de phase. Après analyse des propriétés à l'équilibre pour obtenir les profils de concentration c_0 et du champ de phase et de ϕ_0 à l'équilibre, et des changements de variables appropriés, le modèle établi est composé de trois EDPs couplées :

$$\tau(\mathbf{n})\frac{\partial\phi}{\partial t} = W_0^2\nabla \cdot (a_s^2(\mathbf{n})\nabla\phi) + W_0^2\nabla \cdot \mathcal{N} + (\phi - \phi^3) - \lambda(Mc_\infty U + \theta)(1 - \phi^2)^2, \quad (3.6a)$$

$$\left(\frac{1+k}{2} - \frac{1-k}{2}\phi\right)\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot (Dq(\phi)\nabla U - \mathbf{j}_{at}) + [1 + (1-k)U]\frac{1}{2}\frac{\partial\phi}{\partial t}, \quad (3.6b)$$

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = \kappa\nabla^2\theta + \frac{1}{2}\frac{\partial\phi}{\partial t}. \quad (3.6c)$$

L'épaisseur de l'interface diffuse est notée W_0 et le coefficient λ décrit la force de couplage entre le champ de phase et les champs transportés. Le temps de relaxation du champ de phase est noté $\tau(\mathbf{n})$ et dépend du vecteur unité normal à l'interface $\mathbf{n} = -\nabla\phi/|\nabla\phi|$. On choisit $\tau(\mathbf{n}) = \tau_0 a_s^2(\mathbf{n})$ où τ_0 est une constante et $a_s(\mathbf{n})$ est la fonction anisotropie. Pour une croissance équiaxe, la forme standard est définie par :

$$a_s(\mathbf{n}) = 1 - 3\varepsilon_s + 4\varepsilon_s \sum_{\alpha=x,y,z} n_\alpha^4, \quad (3.6d)$$

qui décrit une croissance anisotrope en 3D de force ε_s et où n_α (avec $\alpha = x, y, z$) est la composante cartésienne α de \mathbf{n} . La fonction $\mathcal{N} \equiv \mathcal{N}(\mathbf{x}, t)$ est un vecteur défini par :

$$\mathcal{N}(\mathbf{x}, t) = |\nabla\phi|^2 a_s(\mathbf{n}) \left(\frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial(\partial_x\phi)}, \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial(\partial_y\phi)}, \frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial(\partial_z\phi)} \right)^T. \quad (3.6e)$$

Les expressions formelles des dérivées $\partial a_s(\mathbf{n})/\partial(\partial_\alpha\phi)$ sont précisées dans [P3].

Dans l'équation (3.6b), le champ U est exprimé en termes de ϕ et c comme

$$U = \frac{1}{1-k} \left[\frac{c/c_\infty}{\frac{1}{2}[1+k-(1-k)\phi]} - 1 \right]. \quad (3.6f)$$

Cette définition étend U au domaine entier (solide, liquide, et interfaces); dans le liquide, l'expression est équivalente à l'Eq. (3.2). À l'équilibre, U est constante au travers l'interface diffuse. En fait, U est un potentiel de diffusion adimensionné (voir

[96] pour les détails). La fonction $q(\phi) = (1 - \phi)/2$ est une fonction qui interpole la diffusivité du soluté entre D dans le liquide et 0 dans le solide. \mathbf{j}_{at} est un courant phénoménologique (« anti-trapping current ») introduit dans [97] pour contre-balancer un piégeage de soluté (voir aussi [83]). Ce courant est défini par :

$$\mathbf{j}_{\text{at}}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{2\sqrt{2}}W_0 [1 + (1 - k)U] \times \frac{\partial\phi}{\partial t} \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}. \quad (3.6g)$$

Il est proportionnel à la vitesse $(\partial_t\phi)$ et à l'épaisseur W_0 de l'interface, et est orienté du solide vers le liquide $(-\nabla\phi/|\nabla\phi|)$. Alors que les autres termes du modèle peuvent être déduits de manière variationnelle d'une fonctionnelle d'énergie libre appropriée, le « courant anti-trapping » a été introduit pour des raisons phénoménologiques et justifié en faisant des développements asymptotiques. Ces derniers ont montré l'équivalence entre le modèle à champ de phase au problème à interface raide [91]. Récemment, une justification alternative a été proposée [98, 99].

Les développements asymptotiques de ce modèle conduisent à une relation entre les paramètres du champ de phase et ceux de l'interface raide par :

$$d_0 = a_1 \frac{W_0}{\lambda}, \quad (3.7a)$$

$$\beta = a_1 \left(\frac{\tau_0}{W_0\lambda} - a_2 \frac{W_0}{D} \left[\frac{D}{\kappa} + Mc_\infty [1 + (1 - k)U] \right] \right), \quad (3.7b)$$

où a_1 et a_2 sont deux coefficients qui, pour le modèle utilisé ici, valent $a_1 = 5\sqrt{2}/8$ et $a_2 \approx 0.6267$. Ces relations permettent de choisir des paramètres du champ de phase pour des valeurs données de la longueur capillaire (énergie de surface) et de la mobilité de l'interface (coefficient cinétique interfaciale). L'épaisseur de l'interface W_0 est un paramètre qui peut être choisi librement dans cette formulation ; l'analyse asymptotique reste valide tant que W_0 reste beaucoup plus petite que n'importe quelle échelle de longueur présente dans la solution à interface raide du problème considéré (par exemple rayon de la pointe de la dendrite dans le cas de la croissance dendritique).

3.4 LBM pour les modèles à champ de phase de croissance cristalline

Les méthodes LB de toutes les équations (3.6a)–(3.6g) sont présentées dans [P3] qui synthétise les travaux [R4], [R5] et [P13]. On présente dans la section 3.4.1 les détails relatifs aux équations de la température (Eq. (3.6c)) et du champ de phase (Eq. (3.6a)), ainsi que quelques pistes pour l'équation de la supersaturation (Eq. (3.6b)). Pour cette dernière équation, les détails LBM sont indiqués dans la section 3.3 de [P3]. On se référera aux Annexes A et B de cette même référence pour les développements de Chapman-Enskog et les fonctions à l'équilibre des équations (3.6a) et (3.6b). Les sections qui suivent sont une synthèse des méthodes et des simulations des deux références [P3] et [P4].

3.4.1 Méthodes LB pour le modèle à champ de phase

Équation de la température. L'équation de la température Eq. (3.6c) est une équation de type diffusion avec un terme source. Pour cette équation, la LBE-BGK est appliquée :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t + \delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\eta_\theta} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_i Q_\theta(\mathbf{x}, t)\delta t, \quad (3.8)$$

où $f_i(\mathbf{x}, t)$ est une fonction de distribution qui peut être vue comme une fonction intermédiaire pour calculer la température adimensionnée θ par : $\theta(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=0}^{N_{pop}} f_i(\mathbf{x}, t)$. Le pas de temps est noté δt et le pas d'espace est noté δx en supposant $\delta x = \delta y = \delta z$. Dans l'Eq. (3.8), la fonction de distribution à l'équilibre f_i^{eq} et le terme source Q_θ sont définis par :

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i\theta(\mathbf{x}, t), \quad \text{et} \quad Q_\theta(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \frac{\partial\phi}{\partial t}. \quad (3.9)$$

La diffusivité thermique κ est reliée au taux de collision η_θ par $\kappa = e^2(\eta_\theta - 1/2)\delta x^2/\delta t$, où e^2 est un coefficient qui dépend du réseau et provient du moment d'ordre deux de f_i^{eq} . L'indice θ dans Q_θ et η_θ indique que les deux quantités sont relatives à l'équation de la chaleur.

Équation du champ de phase. L'équation du champ de phase ressemble à une ADE avec un facteur supplémentaire $\tau(\mathbf{n})$ devant la dérivée en temps. Pour tenir compte de ce facteur et du terme de divergence $\nabla \cdot \mathcal{N}$, l'équation LB standard doit être

modifiée de la manière suivante :

$$a_s^2(\mathbf{n})g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t + \delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - (1 - a_s^2(\mathbf{n}))g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t) - \frac{1}{\eta_\phi(\mathbf{x}, t)} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_i Q_\phi(\mathbf{x}, t) \frac{\delta t}{\tau_0}, \quad (3.10a)$$

avec la fonction de distribution à l'équilibre $g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)$ définie par :

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \left(\phi(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{e^2} \mathbf{e}_i \cdot \mathcal{N}(\mathbf{x}, t) \frac{\delta t}{\delta x} \frac{W_0^2}{\tau_0} \right). \quad (3.10b)$$

Dans l'équation (3.10a), g_i est la fonction de distribution pour le champ de phase ϕ calculé par $\phi = \sum_{i=0}^{N_{pop}} g_i$ après l'étape de déplacement. Les moments d'ordre 0, 1 et 2 de la fonction à l'équilibre g_i^{eq} sont respectivement égaux à $\sum_{i=0}^{N_{pop}} g_i^{eq} = \phi$, $\sum_{i=0}^{N_{pop}} g_i^{eq} \mathbf{e}_i = -\mathcal{N} \delta t W_0^2 / (\tau_0 \delta x)$, et $\sum_{i=0}^{N_{pop}} g_i^{eq} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = e^2 \phi \bar{\mathbf{I}}$ où $\bar{\mathbf{I}}$ est le tenseur identité de rang 2. Le terme source $Q_\phi(\mathbf{x}, t)$ de l'équation du champ de phase est défini par :

$$Q_\phi(\mathbf{x}, t) = [\phi - \lambda(M_{c\infty}U + \theta)(1 - \phi^2)] (1 - \phi^2). \quad (3.10c)$$

Dans l'équation (3.6a), le coefficient $a_s^2(\mathbf{n})$ joue un rôle similaire à un coefficient de « diffusion » qui dépend de la position et du temps au travers de la normale \mathbf{n} (qui dépend de ϕ). Le taux de relaxation $\eta_\phi(\mathbf{x}, t)$ est une fonction de la position et du temps et doit être mise à jour à chaque pas de temps par la relation :

$$\eta_\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{e^2} a_s^2(\mathbf{n}) \frac{W_0^2}{\tau_0} \frac{\delta t}{\delta x^2} + \frac{1}{2}. \quad (3.10d)$$

Le schéma de Boltzmann sur réseau pour l'équation du champ de phase diffère de la méthode standard pour une ADE (voir section 2.2.2) sur deux points. La première différence est la présence dans l'Eq. (3.10a) (i) d'un facteur $a_s^2(\mathbf{n})$ devant $g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t + \delta t)$ dans le côté gauche de l'Eq. (3.10a) et (ii) d'un terme additionnel $(1 - a_s^2(\mathbf{n}))g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t)$ dans le côté droit. Ce dernier terme est un terme non local en espace, i.e., qu'il est impliqué dans l'étape de collision au temps t et nécessite la connaissance de g_i aux nœuds voisins $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x$. Ces deux termes permettent de tenir compte du facteur $a_s^2(\mathbf{n})$ devant la dérivée en temps $\partial\phi/\partial t$ dans l'Eq. (3.6a). On peut le voir en faisant les développements de Taylor de $g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t + \delta t)$ et $g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i\delta x, t)$ (voir [P3]). La méthode est inspirée de [100].

La seconde différence est la définition de la fonction à l'équilibre g_i^{eq} (Eq. (3.10b)). L'absence du champ de phase $\phi(\mathbf{x}, t)$ dans le terme $\nabla \cdot \mathcal{N}$ de l'Eq. (3.6a), explique que ϕ soit à l'intérieur de la parenthèse dans la fonction d'équilibre (Eq. (3.10b)), alors que pour l'ADE la concentration C est en facteur dans l'équation (2.9). De plus, on note le changement de signe devant le produit scalaire ce qui correspond au changement de signe du terme advectif dans l'ADE au terme $+\nabla \cdot \mathcal{N}$ pour l'équation du champ de phase. Enfin, la présence du facteur W_0^2/τ_0 dans les équations (3.10b) et (3.10d) peut être comprise en divisant dans l'Eq. (3.6a) chaque terme par τ_0 et en comparant cette équation avec l'équation des moments de g_i^{eq} (voir l'équation Eq. (A.6) dans l'annexe A de la référence [P3]).

Quelques pistes pour l'équation de la supersaturation. Deux difficultés apparaissent pour l'équation de la supersaturation (Eq. (3.6b)). La première est que le coefficient de diffusion s'annule dans la partie solide par l'intermédiaire de la fonction $q(\phi) = (1 - \phi)/2$ et la seconde est la prise en compte du facteur $((1 + k) - (1 - k)\phi)/2 \equiv \zeta(\phi)$ devant la dérivée en temps. Pour cette dernière, la méthode non locale appliquée pour l'équation du champ de phase a conduit à des instabilités de l'algorithme pour certaines valeurs du coefficient de partition k . Pour surmonter ces deux difficultés, l'équation de la supersaturation a été reformulée de la façon suivante :

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D \nabla \left(\frac{q(\phi)}{\zeta(\phi)} U(\mathbf{x}, t) \right) \right] - \nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{tot}}(\mathbf{x}, t) + S(\mathbf{x}, t) + \frac{Q_U(\mathbf{x}, t)}{\zeta(\phi)}, \quad (3.11a)$$

avec :

$$\mathbf{J}_{\text{tot}}(\mathbf{x}, t) = D \left[\nabla \left(\frac{q(\phi)}{\zeta(\phi)} \right) + q(\phi) \mathbf{F}(\phi) \right] U + \frac{\mathbf{j}_{\text{at}}}{\zeta(\phi)}, \quad (3.11b)$$

$$S(\mathbf{x}, t) = U \nabla \cdot (Dq(\phi) \mathbf{F}(\phi)) + \mathbf{j}_{\text{at}} \cdot \mathbf{F}(\phi), \quad (3.11c)$$

$$Q_U(\mathbf{x}, t) = [1 + (1 - k)U] \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (3.11d)$$

où $\mathbf{F}(\phi) = \nabla(1/\zeta(\phi))$. Les équations (3.11a)–(3.11d) sont issues d’applications successives des relations $\nabla(ab) = a\nabla b + b\nabla a$ et $\nabla \cdot (a\mathbf{c}) = a\nabla \cdot \mathbf{c} + \mathbf{c} \cdot \nabla a$ où a et b sont deux fonctions scalaires et \mathbf{c} est une fonction vectorielle. On note que l’inverse de $\zeta(\phi)$ peut être calculée car cette fonction ne s’annule pas pour $k > 0$. En effet $\zeta(\phi) = k$ si $\phi = +1$, $\zeta(\phi) = 1$ si $\phi = -1$ et varie linéairement entre ces deux valeurs pour $-1 < \phi < +1$.

Cette équation a été simulée par LBM dans [93]. Pour cela, une nouvelle fonction de distribution h_i a été introduite et une nouvelle fonction à l’équilibre a été établie de telle sorte que $\sum_{i=0}^{N_{pop}} h_i^{eq} = U$, $\sum_{i=0}^{N_{pop}} h_i^{eq} \mathbf{e}_i = \mathbf{J}_{tot} \delta t / \delta x$, and $\sum_{i=0}^{N_{pop}} h_i^{eq} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i = e^2(q(\phi)/\zeta(\phi))U\bar{\mathbf{I}}$. Les détails sont donnés dans la section 3.3 de la référence [P3] et les développements de Chapman-Enskog sont présentés dans l’Annexe B de cette référence. Le terme source de cette formulation nécessite le calcul de gradients et divergence supplémentaires qui sont calculés par la méthode des dérivées directionnelles (voir section suivante).

Précisions sur l’algorithme. L’étape de collision de l’équation du champ de phase s’écrit :

$$g_i^*(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{a_s^2(\mathbf{n})} \left\{ g_i(\mathbf{x}, t) - (1 - a_s^2(\mathbf{n}))g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta x, t) - \frac{1}{\eta_\phi(\mathbf{x}, t)} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_i Q(\mathbf{x}, t) \frac{\delta t}{\tau_0} \right\}, \quad (3.12a)$$

où le symbole \star signifie que la fonction de distribution est considérée après la collision. Sur les nœuds des limites, la collision standard est appliquée ($a_s^2(\mathbf{n}) = 1$). L’étape de déplacement est : $g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta x, t + \delta t) = g_i^*(\mathbf{x}, t)$.

La mise à jour des conditions aux limites est réalisée par la méthode du « Bounce Back » i.e. $g_i(\mathbf{x}, t) = g_{i'}(\mathbf{x}, t)$ où i' est la direction opposée à i . Le calcul du gradient $\nabla\phi$ qui est nécessaire pour le calcul du vecteur normal \mathbf{n} est réalisé par méthode des différences finies centrées qui sera comparée à la méthode des dérivées directionnelles dans la section suivante. Enfin, le calcul du vecteur $\mathcal{N}(\mathbf{x}, t)$ à chaque pas de temps nécessite le calcul des dérivées $\partial a_s(\mathbf{n}) / \partial (\partial_\alpha \phi)$ pour $\alpha = x, y, z$, qui s’écrit :

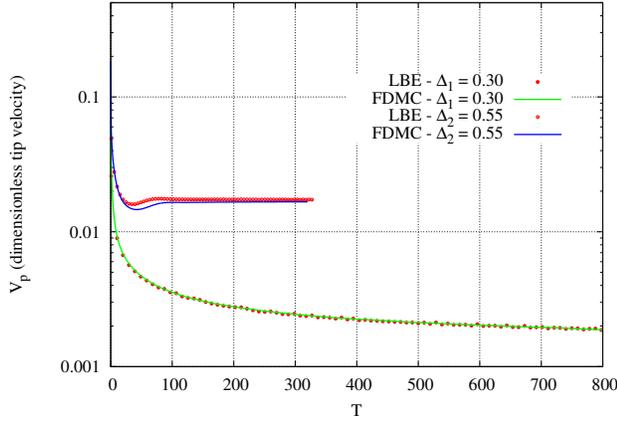
$$\frac{\partial a_s(\mathbf{n})}{\partial (\partial_\alpha \phi)} = - \frac{16\epsilon_s}{|\nabla\phi|^6} \times (\partial_\alpha \phi) \left[(\partial_\beta \phi)^4 - (\partial_\alpha \phi)^2 (\partial_\beta \phi)^2 - (\partial_\alpha \phi)^2 (\partial_\gamma \phi)^2 + (\partial_\gamma \phi)^4 \right]. \quad (3.13)$$

La première composante de \mathcal{N} est obtenue pour $\alpha \equiv x$, $\beta \equiv y$ et $\gamma \equiv z$; la seconde est obtenue pour $\alpha \equiv y$, $\beta \equiv x$ et $\gamma \equiv x$ et enfin la troisième pour $\alpha \equiv z$, $\beta \equiv x$ et $\gamma \equiv y$. L’algorithme est séquentiel : une fois que le champ de phase ϕ est connu au pas de temps courant, il est utilisé pour calculer le terme source $0.5\delta\phi/\delta t$ des équations de la supersaturation U et de la température θ en utilisant un schéma d’Euler.

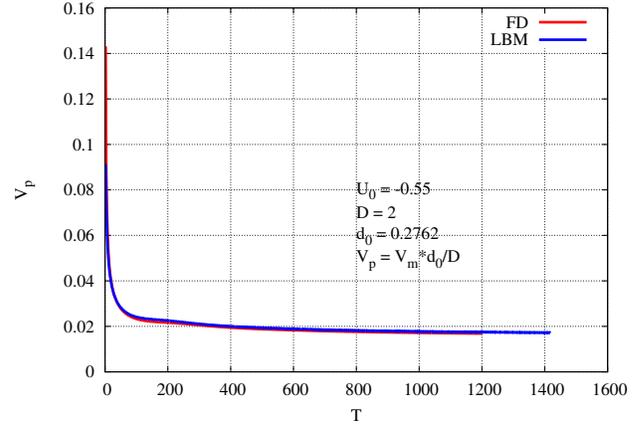
3.4.2 Validations

Comparaisons avec un autre code. Cet algorithme a été validé avec un autre code numérique en comparant la vitesse de croissance V_p de la pointe d’une dendrite pour deux sous-refroidissements : $\Delta_1 = 0.30$ et $\Delta_2 = 0.55$. Pour les comparaisons, le code de référence (2D) [101] est basé sur la méthode des différences finies (FD) pour l’équation du champ de phase et une méthode de Monte Carlo (FDMC) pour la température. Pour les méthodes LB, les réseaux utilisés sont le D2Q9 pour l’Eq. (3.6a) et D2Q5 pour l’Eq. (3.6c). Le domaine est carré, discrétisé par des mailles de taille δx . La graine initiale est un disque diffus de rayon $R_s = 10\delta x$ fixé à l’origine du domaine de calcul. Le problème est symétrique par rapport aux axes x et y . L’épaisseur de l’interface W_0 et le temps caractéristique τ_0 sont fixés à $W_0 = \tau_0 = 1$. Le pas d’espace est choisi tel que $\delta x/W_0 = 0.4$ [87], le pas de temps est $\delta t = 0.008$ et les longueurs du système dépendent du sous-refroidissement $\Delta = -\theta_0$. Un sous-refroidissement plus faible nécessite un maillage plus important à cause d’une longueur diffuse plus grande. Le temps nécessaire pour atteindre la vitesse stationnaire est aussi plus important. Pour $\Delta_1 = 0.30$ et $\Delta_2 = 0.55$, les maillages utilisés comportent respectivement 1000^2 et 500^2 nœuds. La longueur capillaire d_0 et le coefficient cinétique β sont respectivement donnés par l’Eq. (3.7a) et l’Eq. (3.7b) avec $a_1 \approx 0.8839$ et $a_2 \approx 0.6267$. Dans le benchmark, le paramètre λ est fixé tel que $\beta = 0$, i.e. $\lambda^* = \kappa\tau_0/a_2W_0^2$. Avec $W_0 = \tau_0 = 1$, le coefficient λ^* est égal à $\lambda^* = 1.59566\kappa$. Pour une diffusivité thermique égale à $\kappa = 4$, les coefficients sont $\lambda^* = 6.3826$ et $d_0 = 0.1385$. Les comparaisons sont présentées sur la Fig. 3.6a pour $\epsilon_s = 0.05$. Dans les comparaisons les lignes représentent les résultats pour le code de référence (FDMC) et les points rouges représentent les résultats pour les schémas LB. La vitesse de la pointe V_p est adimensionnée en utilisant le facteur d_0/κ ($V_p = \tilde{V}_p d_0/\kappa$), la position x est aussi adimensionnée en utilisant le pas d’espace ($x = \tilde{x}/\delta x$) et le temps T est le temps t divisé par τ_0 ($T = t/\tau_0$). Ce benchmark valide les schémas LB présentés dans la section précédente. Les erreurs relatives et la superposition des contours $\phi = 0$ sont commentées dans la référence [P3]. La Fig. 3.6b montre la validation des méthodes LB pour un mélange binaire.

Effets des réseaux sur un cas isotrope. Pour étudier les effets du réseau, les simulations sont réalisées sur un cas de solidification isotrope, i.e. avec $\epsilon_s = 0$ dans l’Eq. (3.6d), en considérant une substance pure. Le modèle est composé de l’Eq. (3.6a) en posant $M = 0$ et de l’Eq. (3.6c). La méthode Boltzmann est comparée avec un schéma en différences finies. Comme dans [102], le laplacien discret de l’équation du champ de phase est obtenu en utilisant un schéma à 6 (FD6) et 18 (FD18)



(a) Comparaisons code LB (points rouges) et code différences finies (lignes pleines) en substance pure pour deux valeurs du sous-refroidissement $\Delta_1 = 0.30$ et $\Delta_2 = 0.55$.



(b) Comparaisons entre code LBM et différences finies pour un mélange binaire.

FIGURE 3.6 – Validations des méthodes LB pour (a) une substance pure et (b) un mélange binaire (d’après [P3]).

plus proches voisins. Pour la simulation, le maillage est composé de 301^3 nœuds, le pas d’espace est égal à $\delta x = 0.01$ et le pas de temps vaut 1.5×10^{-5} . L’épaisseur de l’interface est égale à $W_0 = 0.01$, le facteur d’échelle en temps est $\tau_0 = 10^{-4}$. Enfin $\lambda = 10$ et $\kappa = 0.7$. Le rayon de la sphère vaut $R_s = 8$ unités de réseau (lattice unit – l.u.) Les iso-valeurs $\phi = 0$ du champ de phase sont présentées sur la Fig. 3.7 à $t = 10^4 \delta t$ pour trois réseaux D3Q7, D3Q15 et D3Q19. Sur cette figure, la condition initiale et les résultats issus de FD6 et FD18 sont superposés pour comparaison. Les coupes sont faites pour deux plans : le vecteur normal vaut $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ pour la première (Fig. 3.7a), et $\mathbf{n} = (1, 0, -1)$ pour la seconde (Fig. 3.7b). Sur chaque figure, l’enveloppe des solutions obtenues par LB-D3Q15, LB-D3Q19 et FD18 sont des cercles qui se superposent, contrairement à ceux obtenus par LB-D3Q7 et FD6. On pourra se référer à [P3] pour une estimation des erreurs liées à la grille, quantifiées sur les profils recueillis le long de deux directions. Sur les profils, les résultats obtenus avec le réseau D3Q15 sont légèrement plus précis car il est bien adapté à une croissance sphérique. En effet, ce réseau tient compte des diagonales du cube et permet le déplacement de la fonction de distribution dans toutes les directions diagonales contrairement au réseau D3Q19. Pour toutes les simulations qui suivent on utilise les deux réseaux D3Q15 ou D3Q19.

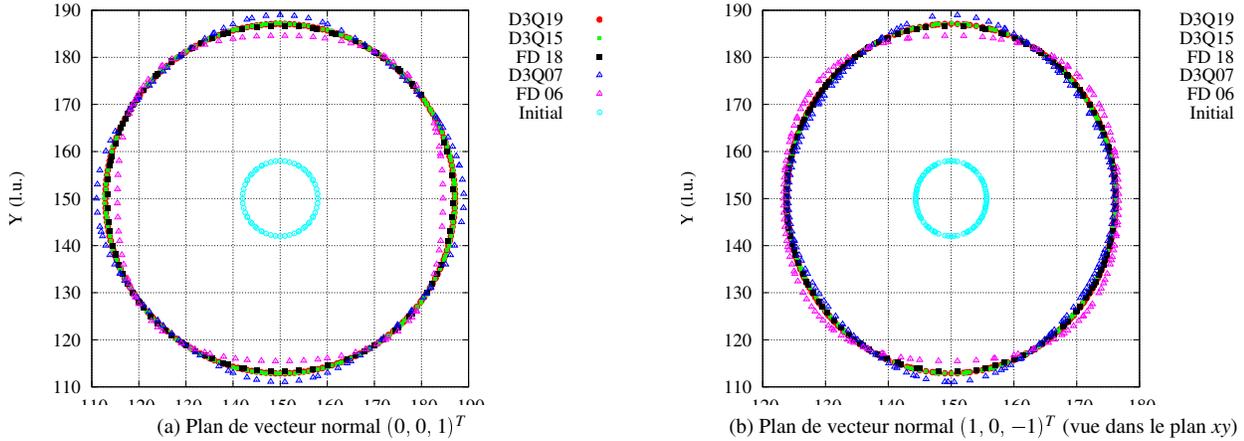


FIGURE 3.7 – Iso-valeurs $\phi = 0$ du champ de phase les schémas LB et FD à $t = 10^4 \delta t$. Les résultats pour LB-D3Q15, LB-D3Q19 et FD18 représentent des cercles qui se superposent contrairement à ceux obtenus avec LB-D3Q7. La condition initiale en cyan est présentée à titre indicatif. (d’après [P3]).

Méthode de calcul des dérivées. Pour le calcul de la fonction d’anisotropie $a_s(\mathbf{n})$ (Eq. (3.6d)), il est nécessaire de calculer le gradient ϕ pour calculer la normale à l’interface \mathbf{n} . Il est aussi nécessaire de calculer les dérivées de $a_s(\mathbf{n})$ par rapport à $\partial_x \phi$, $\partial_y \phi$ et $\partial_z \phi$ qui sont impliquées dans le vecteur $\mathcal{N}(\mathbf{x}, t)$. Deux méthodes de calcul des dérivées ont été comparées. Dans la première, le gradient est calculé en utilisant la formule classique des différences finies centrées (FD), i.e. en 2D : $\partial_x \phi \simeq (\phi_{j+1,k} - \phi_{j-1,k})/2\delta x$ et $\partial_y \phi \simeq (\phi_{j,k+1} - \phi_{j,k-1})/2\delta y$, où j et k sont les indices des coordonnées x et y . Dans la seconde

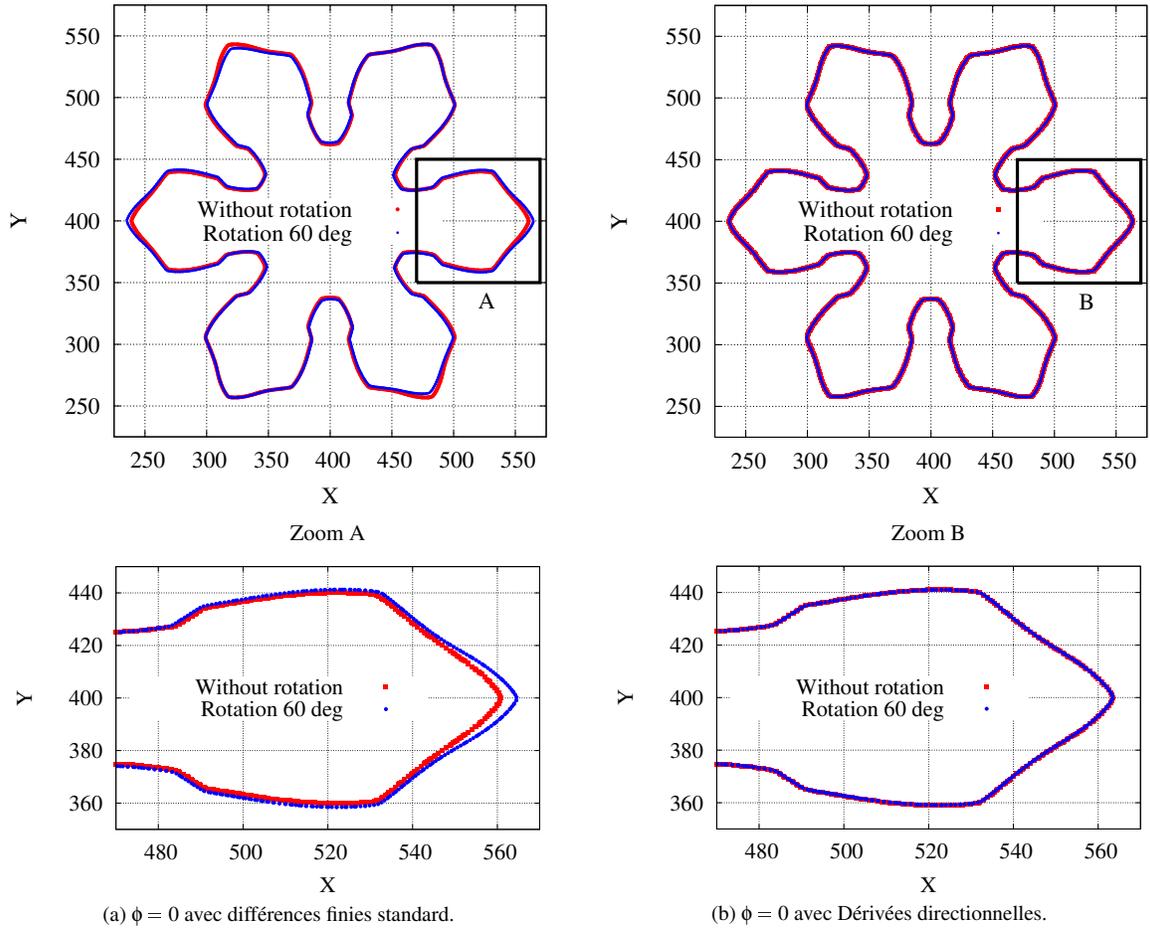
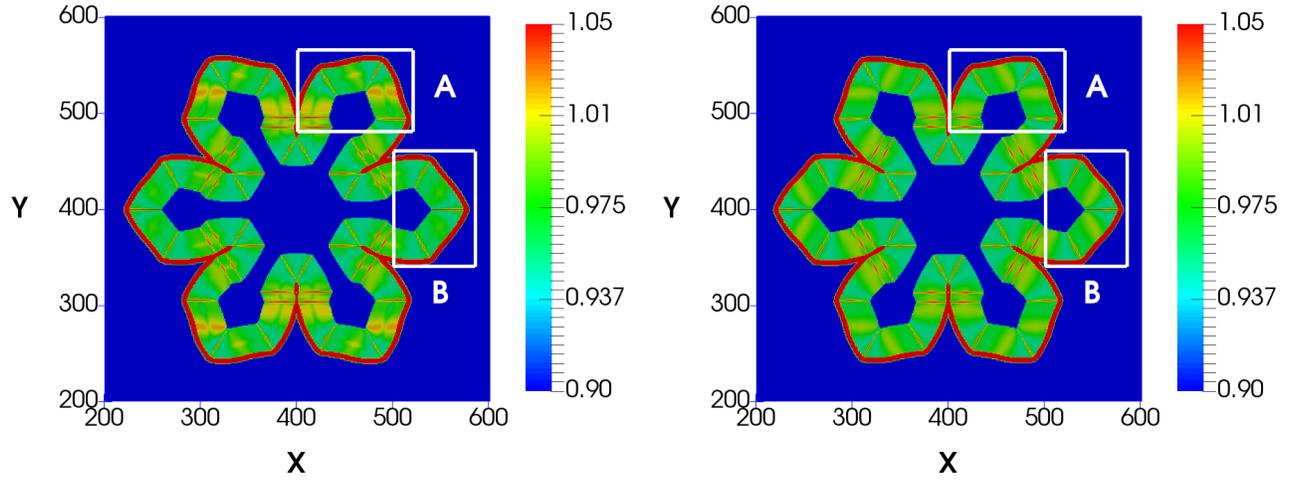


FIGURE 3.8 – Champ de phase $\phi = 0$ en utilisant (a) la méthode des différences finies centrées ou (b) la méthode des dérivées directionnelles pour le calcul des gradients de ϕ sur un réseau D2Q9. Sans dérivées directionnelles, le champ de phase $\phi = 0$ (rouge) à $t = 10^5 \delta t$ ne se superpose pas avec sa rotation de 60° (bleu). La rotation se superpose parfaitement en appliquant la méthode des dérivées directionnelles (d’après [P4]).

approche, on applique la méthode des Dérivées Directionnelles (DD) qui a déjà démontré sa performance pour les problèmes hydrodynamiques [103, 104, 105]. La dérivée directionnelle est la dérivée le long de chaque direction de déplacement sur le réseau. Le développement de Taylor d’une fonction scalaire différentiable du second ordre en $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta x$ et $\mathbf{x} - \mathbf{e}_i \delta x$ donne l’approximation suivante :

$$\mathbf{e}_i \cdot \nabla \phi|_{\mathbf{x}} = \frac{1}{2\delta x} [\phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta x) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i \delta x)] \quad \text{et} \quad \nabla \phi|_{\mathbf{x}} = \frac{1}{e^2} \sum_{i=0}^{N_{pop}} w_i \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i \cdot \nabla \phi|_{\mathbf{x}}). \quad (3.14)$$

Le nombre de dérivées directionnelles est égal au nombre de directions de déplacement \mathbf{e}_i sur le réseau i.e. N_{pop} . Les trois composantes du gradient $\partial_x \phi$, $\partial_y \phi$ et $\partial_z \phi$ sont obtenues en calculant chaque dérivée directionnelle avec la première relation de l’Eq. (3.14) puis en calculant le moment du premier ordre avec la seconde relation. Pour le calcul du gradient, le nombre et les directions des dérivées sont cohérents avec le nombre et les directions de déplacement des fonctions de distribution. La méthode des dérivées directionnelles est cohérente avec le réseau utilisé pour les simulations, c’est le principal avantage de la méthode. En effet, sur les réseaux D2Q9 et D3Q15, les fonctions de distribution f_i et g_i peuvent se déplacer dans les directions diagonales et avec cette méthode, chaque dérivée le long des directions de propagation est utilisée pour calculer le gradient. Ainsi les dérivées contiennent les contributions des directions diagonales des réseaux D2Q9 et D3Q15. Ces relations peuvent aussi être utilisées pour d’autres réseaux tels que D3Q19 et D3Q27. L’Eq. (3.14) est une formule de différences finies centrées pour l’approximation des dérivées directionnelles. D’autres approximations peuvent être utilisées telles que les schémas décentrés du premier ou second ordre [105].



(a) Fonction d'anisotropie a_s calculée par méthode de différences finies. (b) Fonction d'anisotropie a_s calculée par méthode des dérivées directionnelles.

FIGURE 3.9 – Fonction d'anisotropie a_s à $t = 10^5 \delta t$. (a) Avec la méthode des différences finies, les valeurs de a_s sont différentes à l'intérieur des cadres A et B, tandis que (b) avec la méthode des dérivées directionnelles, elles sont identiques (d'après [P4]).

Comparaison des méthodes. La méthode des différences finies (FD) et celle des Dérivées Directionnelles (DD) sont comparées en simulant les Eqs. (3.6a)–(3.6e) en 2D. Le maillage est composé de 800×800 nœuds. Les paramètres sont $\delta x = \delta y = 0.01$, $\delta t = 1.5 \times 10^{-5}$, $\tau_0 = 1.5625 \times 10^{-4}$, $W_0 = 0.0125$, $\kappa = 1$, le sous-refroidissement est égal à $\Delta = 0.30$, $\lambda = 10$, $\varepsilon_s = 0.05$. La graine est initialisée au centre du domaine en $\mathbf{x}_c = (400, 400)$, et le rayon vaut $R_s = 10$ l.u. Les comparaisons sont présentées sur la Fig. 3.8 qui présente la solution $\phi = 0$ à $t = 10^5 \delta t$ (en rouge) et la même solution avec une rotation de 60° (en bleu). Avec la méthode FD, le champ de phase $\phi = 0$ ne se superpose pas parfaitement avec sa rotation de 60° (Fig. 3.8a). Le champ de phase n'est plus isotrope et la solution numérique présente des effets d'anisotropie du réseau. Avec la méthode DD, les effets d'anisotropie du réseau sont réduits et le champ de phase $\phi = 0$ est bien isotrope (Fig. 3.8b). L'origine de ces différences peut être comprise en traçant la fonction a_s en fonction de la position (Fig. 3.9). À $t = 10^5 \delta t$, avec la méthode FD, le motif du champ à l'intérieur du cadre B, est différent de celui qui se trouve à l'intérieur du cadre A (Fig. 3.9a). Par contre, avec la méthode DD les motifs sont identiques dans chaque cadre A et B (Fig. 3.9b). En considérant les diagonales du réseau dans le calcul du gradient, a_s est plus précis et symétrique par rotation. Dans les simulations de la section suivante 3.5 la méthode des dérivées directionnelles est appliquée pour le calcul des gradients.

3.5 Simulations

Dans le modèle composé des équations (3.6a)–(3.6c), la forme caractéristique des cristaux est contrôlée par la fonction d'anisotropie $a_s(\mathbf{n})$ qui est définie pour une croissance dendritique équiaxe par la relation (3.6d). Dans cette section, deux simulations permettent d'illustrer les méthodes LB présentées dans la section précédente sur l'influence de cette fonction $a_s(\mathbf{n})$. La première considère en 2D la croissance simultanée de plusieurs cristaux qui peuvent avoir un nombre de branches différents (section 3.5.1). La seconde réalise des comparaisons en 3D entre plusieurs formes de la fonction $a_s(\mathbf{n})$ (section 3.5.2).

3.5.1 Croissance simultanée de plusieurs cristaux

On s'intéresse ici à la croissance simultanée de plusieurs cristaux qui peuvent avoir différents nombres de branches et différentes inclinaisons possibles. La difficulté ne réside pas dans la croissance simultanée de plusieurs cristaux puisque leur nombre est naturellement pris en compte dans le modèle à champ de phase par l'intermédiaire de la condition initiale. Par exemple, si on cherche à faire croître trois cristaux, on initialise trois graines qui vont grossir au fur et à mesure de la simulation. Néanmoins ces cristaux auront le même nombre de branches. On cherche ici à faire croître plusieurs cristaux, chacun d'eux possédant sa propre fonction d'anisotropie $a_s(\mathbf{n})$.

Algorithme. Cette fonction d'anisotropie doit dépendre d'un nouvel indice $a_s^{(I)}(\mathbf{n})$ où $I \equiv I(\mathbf{x}, t)$ est un champ d'indices entiers dont les valeurs correspondent au numéro du cristal. Ce nouveau champ est une fonction de la position et du temps et varie de 1 à N_I où N_I est le nombre de cristaux. L'indice I vaut 1 pour le premier cristal ; 2 pour le second, 3 pour le troisième,

etc ... Sa valeur est nulle partout ailleurs. Par exemple en 2D, si on choisit $N_I = 3$ cristaux, chacun d'eux composés de 4, 5 et 6 branches respectivement, il faut calculer l'évolution du champ $I(\mathbf{x}, t)$. Après l'initialisation des champs ϕ et I , on repère à chaque pas de temps les nœuds qui entourent chaque cristal à l'aide d'un critère sur la norme du gradient de ϕ : $|\nabla\phi| > \varepsilon$, où ε est une petite valeur numérique contrôlée par l'utilisateur. Ce critère permet d'identifier l'ensemble des nœuds du maillage ayant une valeur nulle du champ indiciel $I(\mathbf{x}, t)$ et situés à proximité de la zone diffuse de chaque cristal. On cherche ensuite à différencier les nœuds appartenant à chaque zone diffuse en leur attribuant un indice propre relatif au numéro de cristal. Dans la phase d'initialisation, pour chaque nœud d'une zone diffuse donnée, on utilise un critère de proximité par rapport au centre des graines pour lui attribuer un numéro de cristal. Ensuite, au cours des itérations en temps, chaque nœud d'indice 0 de la nouvelle zone diffuse prend la valeur du nœud le plus proche ayant un indice différent de zéro.

Simulation. La figure 3.10 présente les résultats de l'algorithme pour trois cristaux, et montre le champ de phase $\phi = 0$ en plusieurs temps (lignes noires) superposés au champ de température au temps final. Le premier cristal (en bas à gauche) possède quatre branches et il est incliné de 45° par rapport à l'axe des abscisses. Le second (en bas à droite) possède cinq branches et le troisième (en haut) en possède six. On constate que pour des temps courts, la taille de chaque branche de chacun des cristaux est identique. En revanche, pour des temps plus élevés, certaines branches de chaque cristal sont plus petites à cause de l'influence des autres cristaux. Plus précisément, la croissance de ces branches est limitée par le champ de température qui est plus élevée dans la zone centrale d'interaction des cristaux. Dans cette zone, la chaleur latente relâchée durant la solidification s'évacue moins vite dans le système, ce qui diminue la vitesse de croissance des branches concernées.

Observation expérimentale. Ce mécanisme pourrait expliquer certaines observations dans les verres. En effet, la figure 3.11a présente un cristal d'apatite à six branches observé dans un verre 8Nd-8Ca chauffé à 970°C pendant 15h [106]. Sur ce cristal, on constate des branches plus courtes qui pourraient s'expliquer par l'interaction avec les autres cristaux au cours de leur formation. La figure 3.11b présente le champ de concentration obtenu en relançant la simulation avec le modèle complet à trois équations. On constate que le modèle permet de reproduire à la fois le nombre de branches de la dendrite, le raccourcissement de certaines d'entre elles et la variation de composition à l'intérieur du cristal qui correspond à une zone plus foncée sur l'observation et en bleu clair sur la simulation. Les détails du mécanisme restent à approfondir, par exemple en étant plus quantitatif sur la vitesse de croissance des branches et en reproduisant le trou qui se forme au centre de la dendrite. Néanmoins, le modèle est prometteur car il permet de proposer différents scénarios phénoménologiques des formes dendritiques observées dans les verres.

3.5.2 Effets de la fonction d'anisotropie

La fonction d'anisotropie $a_s(\mathbf{n})$ est responsable des formes caractéristiques des cristaux. Dans les schémas LB, cette fonction $a_s(\mathbf{n})$ apparaît (i) dans l'équation du champ de phase (Eq. (3.10a)), (ii) dans la fonction vectorielle $\mathcal{N}(\mathbf{x}, t)$ de la fonction à l'équilibre (Eq. (3.10b)) et (iii) dans le taux de relaxation η_ϕ (Eq. (3.10d)).

Généralisation de la fonction d'anisotropie. On présente quelques simulations pour lesquelles la fonction d'anisotropie privilégie une croissance des branches de direction différente à celle $\langle 100 \rangle$ en 3D (ou $\langle 10 \rangle$ en 2D), c'est-à-dire une croissance des branches n'est pas dirigée le long des axes principaux du système de coordonnées. Une généralisation de la fonction $a_s(\mathbf{n})$ définie par l'Eq. (3.6d) est donnée par [94] :

$$a_s(\mathbf{n}) = 1 + \varepsilon_s \left(\sum_{\alpha=x,y,z} n_\alpha^4 - \frac{3}{5} \right) + \gamma \left(3 \sum_{\alpha=x,y,z} n_\alpha^4 + 66n_x^2n_y^2n_z^2 - \frac{17}{7} \right), \quad (3.15)$$

où ε_s contrôle l'intensité de l'anisotropie dans les directions $\langle 100 \rangle$ et γ contrôle son intensité dans les directions $\langle 110 \rangle$. Le premier terme du côté droit est l'harmonique cubique $K_{0,0} = 1$, le second est $K_{4,1} \propto [5Q(\mathbf{n}) - 3]$ et le dernier correspond à l'harmonique cubique $K_{6,1} \propto [462S(\mathbf{n}) + 21Q(\mathbf{n}) - 17]$ avec $S(\mathbf{n}) = n_x^2n_y^2n_z^2$. On pourra se référer à [107, 108] pour la définition

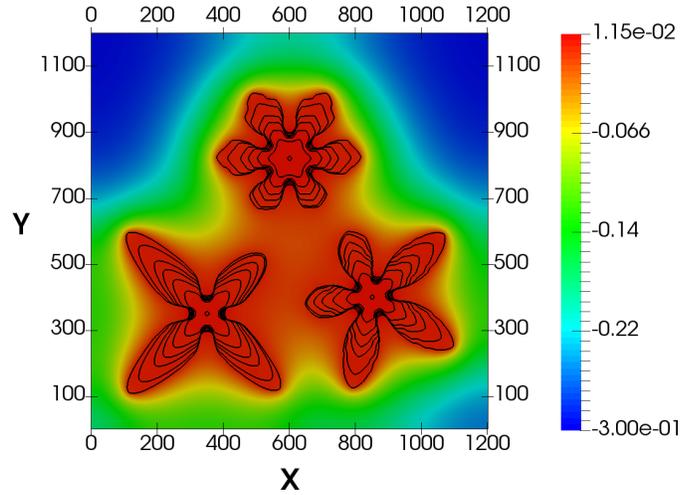
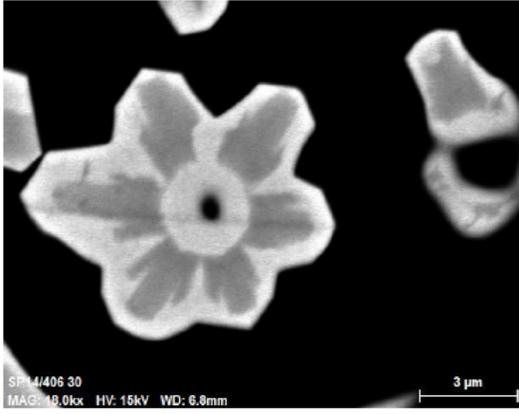
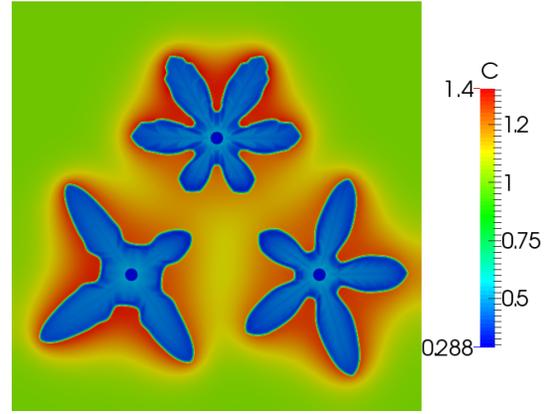


FIGURE 3.10 – Iso-valeurs du champ ϕ en plusieurs temps (lignes noires) superposées au champ de température au temps final (d'après [P4]).



(a) Cristal d'apatite à six branches observé dans un verre 8Nd-8Ca chauffé à 970° pendant 15h (d'après [106]).



(b) Champ de concentration de trois cristaux en interaction simulé par le modèle complet Eqs. (3.6a)–(3.6c) (d'après [R3]).

FIGURE 3.11 – (a) Observation d'un cristal à six branches. (b) Simulation LBM d'interaction de trois cristaux.

d'autres harmoniques cubiques d'ordre plus élevé, définies en terme de fonctions $Q(\mathbf{n})$ et $S(\mathbf{n})$. Plusieurs expériences et simulations qui impliquent la fonction d'anisotropie (Eq. (3.15)) ont été réalisées pour étudier la transition entre des dendrites orientées $\langle 100 \rangle$ à d'autres orientées $\langle 110 \rangle$ [95, 109].

Représentation graphique de $a_s(\mathbf{n})$. Pour visualiser l'influence de chaque terme de l'équation (3.15), une représentation graphique de chacun d'eux est tracée sur une surface sphérique. Pour cela, à l'intérieur d'un domaine cubique composé de 200^3 nœuds, le champ de phase $\phi(\mathbf{x}, 0)$ est initialisé au centre $\mathbf{x}_s = (100, 100, 100)^T$ sous la forme d'une sphère de rayon $R_s = 50$ l.u. Les composantes n_x , n_y et n_z sont ensuite calculées avec sa définition $\mathbf{n} = -\nabla\phi/|\nabla\phi|$. Enfin, chaque terme de l'Eq. (3.15) est calculé et post-traité sur une surface sphérique de rayon R_s et centrée en \mathbf{x}_s . Les résultats sont présentés sur la Fig. 3.12 pour différentes valeurs de ε_s et γ . Sur ces figures, les zones rouges et bleues correspondent respectivement aux zones où la croissance est maximale et minimale. Comme attendu, la fonction $Q(\mathbf{n})$ favorise la croissance dans la direction $\langle 100 \rangle$ (Fig. 3.12a); $S(\mathbf{n})$ la favorise dans la direction $\langle 111 \rangle$ (Fig. 3.12b), et $a_s(\mathbf{n})$ définie par Eq. (3.15) avec $\varepsilon_s = 0$ et $\gamma = -0.02$ favorise la croissance dans la direction $\langle 110 \rangle$ (Fig. 3.12e).

Simulations 3D de sensibilité à $a_s(\mathbf{n})$. Des simulations LBM 3D sont réalisées en utilisant trois fonctions d'anisotropie. La première est celle définie par l'Eq. (3.6d) avec $\varepsilon_s = 0.05$ qui favorise la croissance dans la direction $\langle 100 \rangle$ (voir Fig. 3.12a). La seconde fonction est définie par l'Eq. (3.15) qui favorise le développement du cristal dans la direction $\langle 110 \rangle$ si $\varepsilon_s = 0$ et $\gamma = -0.02$ (voir Fig. 3.12e). La dernière est définie par $a_s(\mathbf{n}) = 66\gamma n_x^2 n_y^2 n_z^2$, avec $\gamma = 0.02$. Cette fonction favorise la croissance dans la direction $\langle 111 \rangle$ (voir Fig. 3.12b). Pour chaque simulation, le domaine de calcul est composé de 351^3 nœuds et le sous-refroidissement est fixé à $\Delta = 0.30$. Le pas d'espace est $\delta x = 0.01$ et le pas de temps vaut $\delta t = 1.5 \times 10^{-5}$. La graine est initialisée au centre du domaine $\mathbf{x}_c = (175, 175, 175)^T$. L'épaisseur de l'interface est égale à $W_0 = 0.0125$, le temps cinétique est égal à $\tau_0 = 1.5625 \times 10^{-4}$, le coefficient de couplage vaut $\lambda = 10$, et la diffusivité thermique est fixée à $\kappa = 1$. Les enveloppes des cristaux $\phi = 0$ sont présentées sur la figure 3.13 pour des directions $\langle 100 \rangle$ (Fig. 3.13a), $\langle 110 \rangle$ (Fig. 3.13b) et $\langle 111 \rangle$ (Fig. 3.13c). Pour la seconde dendrite, le cristal présente douze branches : quatre contenues dans le plan XY , quatre autres au-dessus de ce plan et quatre dernières au-dessous. Enfin, la troisième dendrite présente quatre branches au-dessus de ce même plan et quatre autres au-dessous.

3.6 Pour aller plus loin

Couplage avec les fluides. Les couplages de la croissance cristalline avec l'hydrodynamique ont des applications importantes sur la sédimentation des dendrites et leur rotation. Plusieurs travaux étudient l'influence des écoulements sur la forme dendritique, lorsque les cristaux sont considérés fixes dans l'écoulement ([88, 110], avec de la convection naturelle ou forcée [111], en 3D [89]) et lorsque le cristal est supposé mobile dans l'écoulement et qu'il peut tourner sur lui-même [112, 113, 114]. Sur la base des couplages solidification/hydrodynamique déjà initiés dans [P5] et dans la thèse d'AMINA YOUNSI sur l'effet du changement de densité au cours de la solidification, les effets sur la croissance dendritique pourraient être approfondis pour les mélanges binaires et pour l'interaction avec les fluides diphasiques immiscibles. La simulation fluides binaires immiscibles est présentée dans le chapitre 5.

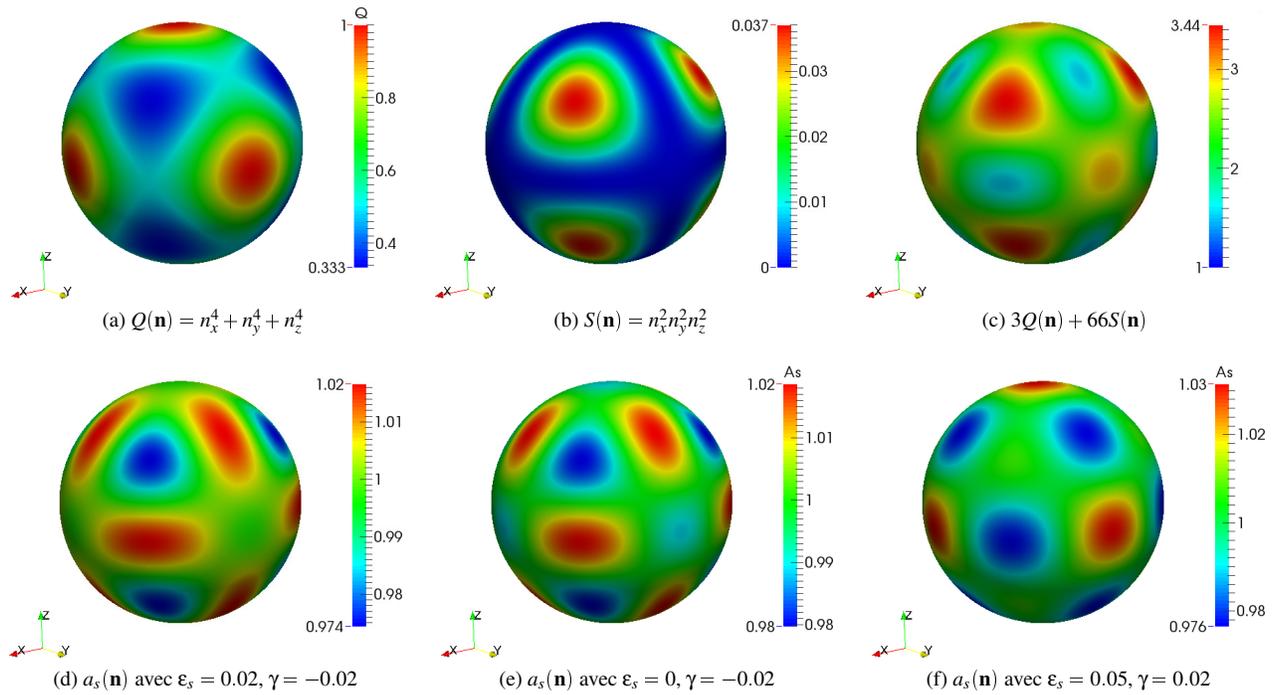


FIGURE 3.12 – Représentation graphique de chaque terme de l’Eq. (3.15). Les directions de croissance privilégiées correspondent aux zones en rouge sur les graphiques (d’après [P4]).

« **Phase-field crystal** ». Une autre classe de modèles à champ de phase, ceux dits « cristallins » (« Phase-Field Crystal » – PFC) [115, 116] permettent d’obtenir, en plus de la position de l’interface entre solide/liquide, la structure périodique de la phase solide. De nombreuses propriétés structurales sont contenues dans cette nouvelle classe de modèles qui nécessitent néanmoins une modification des équations aux dérivées partielles pour tenir compte de la périodicité du réseau cristallin. On pourra se référer à la publication de synthèse [117]. Une illustration récente de simulation PFC peut être trouvée dans [118] où le modèle à champ de phase cristallin fait apparaître une dérivée d’ordre six (divergence d’un gradient d’un bi-laplacien). La simulation du bi-laplacien sera présentée dans le chapitre 5 pour l’équation de Cahn-Hilliard, mais les méthodes LB doivent être adaptées pour simuler le modèle PFC. Ce travail pourra s’inspirer de [119] qui simulent les équations de Burgers, Korteweg-de Vries et Kuramoto-Sivashinsky (KS) par LBM. En particulier, l’équation KS fait intervenir une dérivée d’ordre quatrième et l’analyse au sixième ordre a été réalisée dans [120].

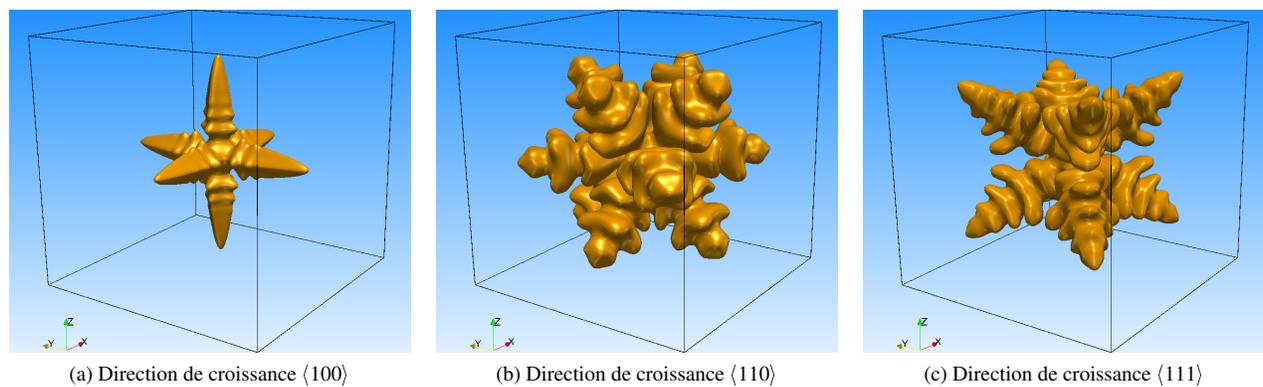


FIGURE 3.13 – Envelopes $\phi = 0$ pour $a_s(\mathbf{n})$ défini par (a) Eq. (3.6d) avec $\epsilon_s = 0.05$ à $t = 5 \times 10^3 \delta t$; (b) Eq. (3.15) avec $\epsilon_s = 0$ et $\gamma = -0.02$ à $t = 2.5 \times 10^4 \delta t$; (c) Eq. (3.15) avec $\epsilon_s = 0$ et $\gamma = 0.02$ à $t = 1.5 \times 10^4 \delta t$ (d’après [P4]).

Chapitre 4

Transport « anormal » en milieu poreux et LBM pour une ADE « fractionnaire »

4.1 Introduction

Pour les études d'impact sur l'environnement, et plus généralement pour l'étude des transferts de solutés dans les milieux poreux, de nombreux modèles de transport ont été proposés depuis plusieurs décennies. Les approches théoriques et les modèles qui en découlent, se différencient selon l'échelle spatiale du système considéré, par exemple l'échelle du bassin versant ou bien, à l'extrême opposé, celle du pore. Lorsqu'on cherche à améliorer la prédictibilité des modèles, on est souvent amené à découpler les effets multiphysiques et à les valider séparément. Pour cela, les systèmes naturels posent des difficultés car ils sont souvent insuffisamment instrumentés pour étudier les effets physiques séparément. D'autres difficultés sont aussi liées à leur hétérogénéité naturelle et à la méconnaissance des conditions initiales et des conditions aux limites ce qui explique les efforts faits en modélisation sur les méthodes inverses. Pour toutes ces raisons, sans une connaissance approfondie (caractérisation, instrumentation et expérimentation) du site naturel, des doutes subsistent sur la prédiction des simulations issues des codes de calcul et des modèles associés.

À la suite de l'expérience que j'ai acquise en thèse sur la simulation des systèmes naturels hétérogènes (CEA/Cadarache [T1]), je me suis intéressé à un système expérimental permettant de mesurer des données dans des conditions contrôlées. L'intérêt d'un tel système expérimental est de pouvoir agir sur les conditions opératoires des expériences ce qui permet de minimiser les incertitudes sur les paramètres d'entrées des codes de calculs. Plus précisément, elles permettent d'avoir des mesures sur la base desquelles les modèles peuvent être comparés rigoureusement tout en ayant la maîtrise du milieu poreux et de sa saturation, du type de traceur (réactifs ou non), du temps d'injection, etc ... Ensuite, ces modèles peuvent être enrichis petit à petit pour reproduire une phénoménologie plus complexe mais toujours en relation avec l'expérience. Le contact direct avec l'expérimentateur permet aussi de lever les doutes sur certaines valeurs du modèle lorsque celui-ci ne « colle » pas aux données. La limite de cette démarche est que les conclusions tirées de ces expériences ne sont valables que dans les conditions opératoires étudiées, et elles ne peuvent pas être extrapolées pour un site naturel qui possède ses propres caractéristiques.

Ce chapitre réalise la synthèse de travaux réalisés sur les modèles de transport en milieu poreux et se scinde en deux parties distinctes. Tout d'abord dans les sections 4.2 et 4.3, il synthétise les résultats issus du « va-et-vient » entre la modélisation du transport et des expériences réalisées sur un système simplifié : une colonne de sable de Fontainebleau calibré. L'expérimentation en colonne est très répandue dans les laboratoires, mais le principal atout du dispositif du CEA/DPC est qu'il permet d'avoir un grand nombre de données grâce à un système de mesures non intrusif et totalement automatisé (voir section 4.2.1). Les données mesurées dans les conditions insaturées présentent des traînées sur les courbes de concentration (« transport anormal »), et pour les reproduire, des modèles plus originaux ont été investigués. Il s'agit des EDPs *fractionnaires*, c'est-à-dire des EDPs qui présentent des dérivées pouvant avoir des ordres non entiers. Ces EDPs fractionnaires sont intimement liées aux approches particulières de type « marches aléatoires » qui seront rappelées avec les modèles classiques dans la section 4.2.2.

Ce travail exploratoire a été réalisé dans le projet ANR TRAM en comparant des modèles fractionnaires *en temps* avec des données. La LBM a été utilisée pour comparer avec les mesures les modèles classiques tels que l'Equation d'Advection-Diffusion et le Modèle eau Immobile et eau Mobile (section 4.2.3). Cependant les équations avec « effet de mémoire à longue portée » (i.e. fractionnaire en temps) ont été simulées en différences finies. Pour ces équations, des méthodes LB spécifiques devaient être établies et ce travail n'était pas la priorité dans le projet ANR. La simulation de l'ensemble des données, en particulier celles mesurées dans la partie inférieure de la colonne, a nécessité de complexifier le modèle fractionnaire en temps en approfondissant l'hétérogénéité spatiale de ses paramètres. La dépendance spatiale des paramètres augmente considérablement le nombre de paramètres d'entrée du code de calcul et l'approche inverse par « état adjoint » a été adaptée et étendue pour tenir compte de cette variabilité. Le problème adjoint continu pour un modèle fractionnaire en temps et les résultats de

son application sur des paramètres uniformes puis non uniformes seront synthétisés dans la section 4.3.

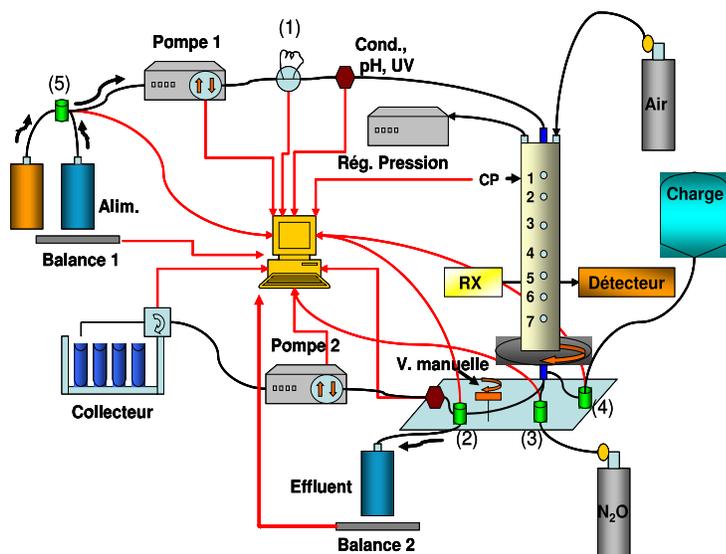
Sur la colonne, les données sont mesurées à plusieurs hauteurs et se présentent comme des courbes d'évolution de la concentration au cours du temps. Ces types de données justifiaient d'initier la modélisation en considérant un modèle fractionnaire en temps. Cependant, certaines expériences de RMN réalisées par l'IFPEN durant le projet ANR ont suggéré de s'intéresser à des équations fractionnaires *en espace*. Ces expériences s'ajoutent à plusieurs observations qui proviennent d'autres références de la littérature, et justifient la simulation numérique de telles équations. Pour cela, un effort a été fait récemment pour simuler ce type d'EDPs en utilisant la LBM (section 4.4). La synthèse de la méthode LB qui a été établie pour simuler une ADE *fractionnaire en espace* constitue la seconde partie de ce chapitre. Dans la section 4.4.2, des détails sont donnés sur les points importants de la méthode et la section 4.4.3 présente quelques validations avec des marches aléatoires. Des solutions analytiques existent pour ces équations mais on choisit de mettre en évidence l'équivalence de deux méthodes numériques très différentes pour simuler un même comportement « anormal » du traceur.

4.2 Contexte CEA et évolution des travaux

Dans cette section on présente tout d'abord le dispositif expérimental BEETI du CEA (section 4.2.1), puis on rappelle les modèles de transport en milieux poreux qui permettent de décrire les dissymétries qui apparaissent sur les courbes de concentration (section 4.2.2). Enfin la section 4.2.3 décrit l'évolution des travaux de laquelle sera extraite la partie relative à la « modélisation inverse du MIM fractionnaire en temps » qui sera synthétisée dans la section 4.3.

4.2.1 Dispositif expérimental BEETI du DPC

Dans une démarche visant à simuler des modèles de transport en relation avec des données expérimentales, je me suis intéressé au dispositif BEETI (pour Banc Expérimental pour l'Etude des Transferts Insaturés – voir Fig. 4.1a) qui a été mis en place au Département de Physico-Chimie (DPC) du CEA entre 2005 et 2007. Ce dispositif devait permettre d'étudier ultérieurement les phénomènes de transport dans un milieu poreux lorsque le soluté interagit avec le solide (rétention chimique) et dans des conditions non saturées en eau, c'est-à-dire que la porosité est remplie par un mélange d'eau et d'air. La présence d'une phase gazeuse dans la porosité modifie les lois classiquement utilisées dans le domaine. Par exemple, pour les écoulements, la « loi de Darcy » qui relie la vitesse \mathbf{q} au produit de la conductivité hydraulique par l'opposé du gradient de charge hydraulique est remplacée par l'équation de Richards [121]. Cette équation fait intervenir des lois phénoménologiques entre la conductivité hydraulique et la saturation avec la teneur en eau du milieu θ (e.g. la loi de van Genuchten–Mualem [122, 123], qui est modifiée dans [124] pour des propriétés proches de la saturation). Cette équation a déjà été simulée par LBM-TRT dans [125]. Sur BEETI, des études de rétention chimique ont été réalisées récemment en milieu saturé dans [126] et d'autres études sont actuellement en cours au DPC sur la partie insaturée.



(a) Schéma conceptuel du dispositif expérimental BEETI.



(b) Émetteur et détecteur dichromatique à rayons X entourant la colonne placée sous le système d'étalonnage.

FIGURE 4.1 – Dispositif expérimental BEETI du CEA/DPC. D'après C. LATRILLE, 2008.

Le principal atout de ce dispositif réside dans la façon de mesurer les propriétés du milieu poreux telles que la porosité, les fractions volumiques des phases mises en jeu, et les concentrations. Le principe de mesure est basé sur l'émission et la détection de deux énergies X (principe identique à l'atténuation des rayons gamma [127, 128]) qui permettent de caractériser simultanément deux phases contenues dans le système (colonne remplie du milieu poreux et des traceurs). Il est composé d'un bloc émetteur et d'un bloc détecteur, appelés « système dichromatique », positionnés de part et d'autre de la colonne (voir Fig. 4.1b). Chacun d'eux est disposé sur un support mécanique permettant le déplacement vertical de ces deux blocs le long de la colonne. L'ensemble du dispositif (dichromatique, système hydraulique, injection de traceurs, déplacement du couple émetteur-détecteur et mesure des taux de comptage) est totalement piloté par ordinateur. Le dispositif permet donc de mesurer localement les propriétés du milieu (porosité et/ou teneur en eau) et les concentrations en plusieurs hauteurs de la colonne alors que la majorité des dispositifs en colonne ne permettent que de mesurer les courbes à la sortie. Dr C. LATRILLE était chargée de la mise en place du dispositif expérimental et de la réalisation des expérimentations. Au CEA le dispositif a été soutenu par le projet STOEN et la modélisation par MRISQ.

4.2.2 Modèles de transport en milieu poreux

Après l'acquisition des premières mesures en 2007/2008, ce dispositif a été l'occasion d'appliquer plusieurs modèles de transport dans des conditions hydrauliques saturées et non saturées en eau. Ces modèles sont composés d'EDPs classiques et de leurs versions particulières (marches aléatoires) qui sont rappelés ci-dessous.

4.2.2.1 Modèles classiques

Équation d'Advection-Dispersion (ADE) en milieu saturé. Dans un milieu saturé et homogène, les courbes de concentration d'un traceur non-réactif mesurées en sortie de colonne sont généralement symétriques lorsqu'on soumet le système à une perturbation de durée finie (condition à la limite de type créneau par exemple). Cette propriété est facilement décrite et reproduite en résolvant l'équation d'advection-dispersion (ADE) suivante :

$$\omega(\mathbf{x}) \frac{\partial C}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = -\nabla \cdot (\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)C(\mathbf{x}, t) - \overline{\mathbf{D}}_e \nabla C), \quad (4.1)$$

où \mathbf{x} est la position, t le temps, $C(\mathbf{x}, t)$ est la concentration, $\omega(\mathbf{x})$ est la porosité du milieu, $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t)$ est la vitesse de Darcy et $\overline{\mathbf{D}}_e$ est le tenseur de dispersion effective. Le qualificatif « effectif » signifie que le paramètre de dispersion fait intervenir la diffusion moléculaire et des propriétés géométriques du milieu poreux telles que la dispersivité et la tortuosité [129]. Dans le cas d'un problème de diffusion pure ou de diffusion avec rétention chimique, ces paramètres effectifs peuvent être retrouvés par une méthode d'homogénéisation, par exemple la « prise en moyenne volumique » [52]. Une des solutions fondamentales en une dimension d'espace lorsque le système est soumis à un Dirac, est une gaussienne dont l'écart type varie avec la racine carrée du temps. Cette équation est obtenue à partir des lois de conservation (bilan de masse) pour laquelle l'expression du flux de concentration est prise en faisant une analogie à la loi de Fick. Le comportement de la solution de cette équation est qualifié de gaussien et le transport décrit est qualifié de fickien.

Modèle « eau Immobile et eau Mobile » (MIM). Cependant, lorsque le milieu est insaturé, les résultats des expériences indiquent que le transport est sujet à des variations de vitesses plus importantes ainsi qu'à un mélange du soluté plus lent que dans un milieu saturé [130]. La dispersivité devient aussi une fonction de la teneur en eau [130, 131]. En plus, la courbe de percée (courbe de concentration en fonction du temps mesurée en sortie de colonne) présente une traînée qui détruit sa symétrie. À cause d'elle, le comportement du traceur est généralement qualifié de « non-gaussien » (on parle également de transport « anormal » [132] ou « non-Fickien » [133]). L'ADE classique Eq. (4.1) s'avère impuissante à reproduire la totalité de la courbe de percée et des traînées qui sont observées sur les expériences. Une des toutes premières alternatives à l'ADE qui a été proposée est le « Modèle eau-Immobile et eau-Mobile » (MIM) [134, 135, 136] :

$$\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{q}C_m - \overline{\mathbf{D}}_e \nabla C_m) - \Lambda(C_m - C_{im}), \quad (4.2a)$$

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \Lambda(C_m - C_{im}), \quad (4.2b)$$

où C_m et C_{im} sont respectivement les concentrations mobiles et immobiles ; θ_m et θ_{im} sont les teneurs en eau mobile et immobile et le tenseur du second ordre $\overline{\mathbf{D}}_e$ représente le tenseur de dispersion effective. Le coefficient Λ , homogène à l'inverse d'un temps, représente le taux de transfert entre les deux phases mobile et immobile. Le principal avantage du modèle MIM est qu'il permet de reproduire le comportement dit « anormal » ou « non-Fickien » des courbes de concentrations en découplant

la teneur en eau totale du système θ en une teneur en eau mobile et une autre immobile : $\theta = \theta_m + \theta_{im}$. Cette dernière ne participe pas aux écoulements (pas de vitesse associée) mais elle est responsable de la rétention d'une partie de la concentration totale, i.e. la concentration immobile C_{im} . Le modèle est purement empirique et ses paramètres supplémentaires (à caler) permettent de mieux reproduire les trainées observées sur les courbes de percée. Les modèles de type « double-milieu » comme le système d'équations (4.2a)-(4.2b) apparaissent également dans plusieurs applications en milieu saturé et peuvent être déduits de considérations théoriques, basées sur les prises en moyenne volumique associées à des problèmes de fermeture. Par exemple [137] dans lequel le système est composé d'un mélange de sable de Fontainebleau et d'argile (illite du Puy).

4.2.2.2 Marches aléatoires (RW)

Une autre façon de décrire le comportement « non-fickien » du traceur est d'appliquer les EDPs « fractionnaires » ([138] par exemple) dans lesquelles l'ordre des dérivées en espace et/ou en temps ne sont plus entiers. Les dérivées partielles fractionnaires ont un lien avec les approches particulières de type « marches aléatoires » (Random Walk – RW). Celles-ci sont modifiées pour introduire une distribution qui n'est plus uniforme en temps (Marches Aléatoires à Temps Continu – CTRW) pour le fractionnaire en temps. Elles peuvent aussi être modifiées avec une distribution en espace qui n'obéit plus à une distribution gaussienne pour le fractionnaire en espace. Deux exemples d'EDPs fractionnaires sont présentées dans la suite : la première est fractionnaire en temps (section 4.3) et la seconde en espace (section 4.4). Les différentes marches aléatoires équivalentes à ces EDPs fractionnaires sont rappelées ci-dessous.

Marches aléatoires classiques. Les marches aléatoires tirent leurs origines du mouvement brownien [139] et elles permettent de reproduire le comportement diffusif d'une solution à partir d'une description particulière. Les positions \mathbf{x}^i de chaque particule i sont calculées et on en déduit leur distribution de position, c'est-à-dire en comptant le nombre de particules dans un élément de volume (ou de surface) et en divisant par cet élément de volume. Les positions successives de chaque particule au temps $t + \Delta t$ sont calculées à partir de la position au pas de temps courant t auquel on rajoute un terme qui représente le saut de la particule par la relation :

$$\mathbf{x}^i(t + \Delta t) = \mathbf{x}^i(t) + \begin{pmatrix} D_{xx}^{1/2} & 0 \\ 0 & D_{yy}^{1/2} \end{pmatrix} (2\Delta t)^{1/2} \mathbf{G}^i + \mathbf{u}\Delta t. \quad (4.3)$$

En 2D, $\mathbf{G}^i = (g_1^i, g_2^i)$ est un vecteur aléatoire de \mathbb{R}^2 avec des composantes indépendantes gaussiennes, i.e. de fonction de densité de probabilité $F(x) = (\sigma\sqrt{2\pi})^{-1} \exp - [(x - m)^2 / (2\sigma^2)]$ où m est la valeur moyenne et σ^2 est la variance. Dans l'Eq. (4.3), Δt est le pas de temps, D_{xx} et D_{yy} sont les coefficients de diffusion et \mathbf{u} la vitesse. En pratique, numériquement, on génère les variables g_1^i et g_2^i pour chaque particule en utilisant deux variables indépendantes r_1 et r_2 distribuées de manière uniforme et en appliquant les relations : $g_1 = \sqrt{-2 \ln(r_1)} \cos(2\pi r_2)$ et $g_2 = \sqrt{-2 \ln(r_1)} \sin(2\pi r_2)$. La densité de probabilité $P(\mathbf{x}, t)$ d'un tel algorithme obéit à l'équation $\partial_t P(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{u}P(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot (\overline{\mathbf{D}}\nabla P(\mathbf{x}, t))$. On pourra consulter les références [140, 141] pour une revue de ces approches particulières et aux équivalences avec les EDPs.

Lois de Lévy « alpha-stable ». Une généralisation de la loi gaussienne est donnée par la « loi de Lévy alpha-stable » dont la relation d'évolution est donnée par :

$$\mathbf{x}^i(t + \Delta t) = \mathbf{x}^i(t) + \begin{pmatrix} (D\Delta t)^{1/\alpha_x} & 0 \\ 0 & (D\Delta t)^{1/\alpha_y} \end{pmatrix} \mathbf{S}^i + \mathbf{u}\Delta t \quad (4.4)$$

où \mathbf{S}^i est un vecteur aléatoire de composantes indépendantes et distribuées comme des variables aléatoires stables : $S_x = -\cos(\pi\alpha_x/2)S(\alpha_x, \beta_x)$ et $S_y = -\cos(\pi\alpha_y/2)S(\alpha_y, \beta_y)$. La référence [142] rappelle la définition d'une fonction de densité de probabilité d'une variable aléatoire alpha-stable et présente l'algorithme qui permet de générer une variable aléatoire alpha-stable $S(\alpha, \beta)$. Le paramètre α est appelé l'exposant de stabilité et il est tel que $0 < \alpha \leq 2$. Lorsque $\alpha < 2$, la particule peut effectuer des sauts plus grands plus souvent que lorsque $\alpha = 2$. Le paramètre $\beta = 2p - 1$ (la notation p sera utilisée dans la section 4.4) est le paramètre d'asymétrie et il est tel que $-1 \leq \beta \leq 1$ (i.e. $0 \leq p \leq 1$). Lorsque $\beta = 0$ (i.e. $p = 1/2$), la solution est symétrique et lorsque $\beta < 0$ (i.e. $p < 1/2$), davantage de particules peuvent effectuer des sauts vers la droite. Dans la section 4.4.2 on présentera l'EDP fractionnaire équivalente à cet algorithme particulière avec des comparaisons entre la LBM et ces marches aléatoires.

Marches aléatoires à temps continu (CTRW). Dans les deux marches aléatoires ci-dessus, la partie aléatoire intervient dans les sauts en espace et non sur le temps qui évolue selon un incrément de temps Δt fixe. La marche aléatoire à temps continu consiste à reprendre l'algorithme RW classique et de modifier la durée (ou les durées si on considère un MIM)

du temps de pause des particules. On parle de « Continuous Times Random Walk Theory » (CTRW) [143]. La théorie a été appliquée la première fois au mouvement d'électrons dans les semi-conducteurs désordonnés [144, 145], puis dans les milieux géologiques [146, 147, 148]. Elle peut aussi bien expliquer des transports fickiens que non-fickiens, et offre ainsi la possibilité de simuler une large gamme de comportements de transport différents. Sous certaines conditions, les modèles ADE et MIM apparaissent comme étant différents cas limites du modèle CTRW.

4.2.3 Démarche et réalisations

Étalonnage du système dichromatique et thèse sur le transport réactif. Le développement du système dichromatique était assuré par le CEA/DRT (Dr D. CHAMBELLAN) mais la technique de mesure est relative et nécessite une étape préalable d'étalonnage qui dépend du problème physique. Il revenait au DM2S et au DPC d'en assurer la mise en œuvre. De ce fait j'ai été impliqué dans l'interprétation du système de mesures (double lois de Beer-Lambert pour du dichromatique). Pour cela, j'ai été l'encadrant principal de quatre stages « ingénieur » qui ont été lancés en collaboration avec DPC et DRT : ceux de N. BAUCLIN (2006), de G. LAPASSET (2007) puis J.-M. BLANQUIES et P. THIEBOT (2008). Cette partie a donné lieu à un rapport de synthèse [R10] en 2007. Une description synthétique du dispositif est présentée dans le proceeding [P15] (2010). En parallèle de la mise en place du dispositif BEETI, a débuté la thèse de SÉBASTIEN CADALEN que j'ai encadré au CEA (Directeur de thèse officiel DR CNRS M. QUINTARD, IMFT). Cette thèse assurait le « soutien théorique » aux expériences. Son travail de thèse était relatif à la modélisation et simulation du « transport réactif en milieu poreux » à l'aide de simulations réalisées à l'« échelle du pore » suivi d'une homogénéisation pour obtenir un modèle représentatif de l'« échelle colonne ». La thèse a été soutenue en 2008 [137] et a donné lieu aux proceedings [P16] et [P18].

Premières simulations en insaturé. Sur la partie « Modèles et simulations », après avoir pris contact avec Dr J. TOURNEBIZE (IRSTEA/Antony) et Dr C. ARDOIS (IRSN/Fontenay-Aux-Roses) qui avaient déjà l'expérience de manipulations en colonnes insaturées, des collaborations se sont mises en place avec des stagiaires de niveau M1 (F. LEBAS) et M2 (R. HARICH) pour tester des modèles et faire des simulations sur leurs données. Dans le stage de F. LEBAS [R12] ont été testés des modèles classiquement appliqués dans la discipline (MIM) avec des outils déjà existants (HYDRUS®). Dans le stage de R. HARICH, un modèle plus original, basé sur les méthodes « Continuous Time Random Walks » a été testé en MATLAB®. Les travaux de cette dernière [R11], associés à la mise en place expérimentale [R10], ont conduit au post-doctorat de Dr ANDREA ZOIA (2008–2009) au CEA et pour lequel j'ai été le principal encadrant. Dans sa thèse, ce dernier avait déjà pratiqué la méthode CTRW. Il a adapté une méthode RW non-linéaire pour décrire la dynamique de panache dense de contaminant dans les milieux poreux, puis il a appliqué son approche sur les premières mesures expérimentales issues du dispositif [P7]. Son travail s'est poursuivi sur la modélisation des effets de densité observés sur BEETI [P8] avec le code Cast3M.

Projet ANR TRAM (TRansport Anormal en Milieux poreux). Les mesures expérimentales sur lesquelles a travaillé Dr A. ZOIA ont été obtenues dans des conditions saturées en eau. La modélisation et simulation des mesures obtenues dans des conditions insaturées se sont réalisées dans le post-doctorat de Dr BORIS MARYSHEV (2011–2013) et pour lequel j'ai été le principal encadrant CEA. Le post-doctorat de B. MARYSHEV a été soutenu par le projet TRAM de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR-09-SYSC-015) [R19]. Ce projet a été proposé en collaboration avec l'Université d'Avignon (PR M.-C. NÉEL qui était chef du projet, et MdC M. JOELSON), l'IFPEN (Dr D. BAUER et Dr M. FLEURY). Dans ce projet, la contribution du CEA reposait sur les expériences colonne en milieu insaturé (DPC) et les simulations associées (DM2S). L'IFPEN intervenait sur les mesures RMN et les simulations par réseaux de pores. Enfin l'université d'Avignon intervenait sur les approches basées sur les marches aléatoires et les équations fractionnaires associées. Dans ce projet, j'étais le coordinateur des activités côté CEA [PT3]. Dans son travail de post-doctorat, BORIS MARYSHEV, qui avait pratiqué numériquement les équations fractionnaires dans sa thèse (par différences finies), a développé dans [P6] la « méthode de l'état adjoint » pour l'estimation des paramètres du MIM fractionnaire en considérant tout d'abord des paramètres uniformes en espace. Il a ensuite étendu la méthode aux paramètres non uniformes le long de la colonne dans [P2]. Une synthèse de ces travaux est présentée dans la section 4.3.

LBM et transport « anormal ». Au cours du projet ANR, le modèle MIM (Eqs. (4.2a)-(4.2b)) a été simulé par LBM dans [R8]. Ce travail a été l'occasion de mettre en œuvre la collision MRT (Multiple-Relaxation-Time) pour l'Eq. (4.2a), puis sur cette base, la LBM a été adaptée récemment à la simulation d'une ADE avec dérivée fractionnaire en espace. Cette partie est présentée dans la section 4.4.2. Pour le LBM-MIM, les conditions aux limites ont été adaptées aux conditions expérimentales de la colonne :

$$(\mathbf{q}C_m - D\nabla C_m) \cdot \mathbf{n} = f(t) \text{ sur } \Gamma_1, \quad (D\nabla C_m) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_2, \quad \text{et} \quad (\mathbf{q}C_m - D\nabla C_m) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_3 \quad (4.5)$$

avec $f(t) = q_x C_0$ si $t \leq t_{\text{flux}}$ et $f(t) = 0$ si $t > t_{\text{flux}}$ où t_{flux} est le temps d'injection de la concentration C_0 . Ces conditions aux limites sont de type flux total imposé sur la face en entrée Γ_1 et variable au cours du temps ; une condition de flux diffusif nul en sortie Γ_2 et une condition de flux total nul sur les deux derniers bords Γ_3 . L'évolution de la concentration immobile (Eq. (4.2b)) est prise en compte en introduisant une seconde fonction de distribution pour le calcul de C_{im} . Enfin, le terme d'échange $\Lambda(C_m - C_{im})$ est pris en compte comme un terme source dans la LBE. Cette méthode a été validée par des comparaisons avec des solutions analytiques classiques pour la partie ADE puis avec Comsol Multiphysics® sur un MIM bidimensionnel avec des conditions aux limites variables en temps.

L'ensemble de l'approche a été appliquée sur les données expérimentales issues du dispositif BEETI en milieu insaturé. Des comparaisons entre le modèle standard ADE (en rouge) et le MIM (en bleu) sont indiquées sur la figure 4.2. Les données expérimentales de ce graphe sont mesurées en entrée de colonne à 0 cm, puis à 22 cm et à 40 cm du haut de la colonne. Les paramètres libres additionnels du MIM permettent de mieux reproduire les queues des courbes. Cependant l'approche est limitée aux courbes de concentration mesurées dans la partie haute de la colonne ($x \leq 40$ cm) car le profil de teneur en eau n'est pas uniforme et des décalages entre le modèle et les données apparaissent dans la partie basse ($x > 40$ cm). On en reparle dans la section 4.3.3.

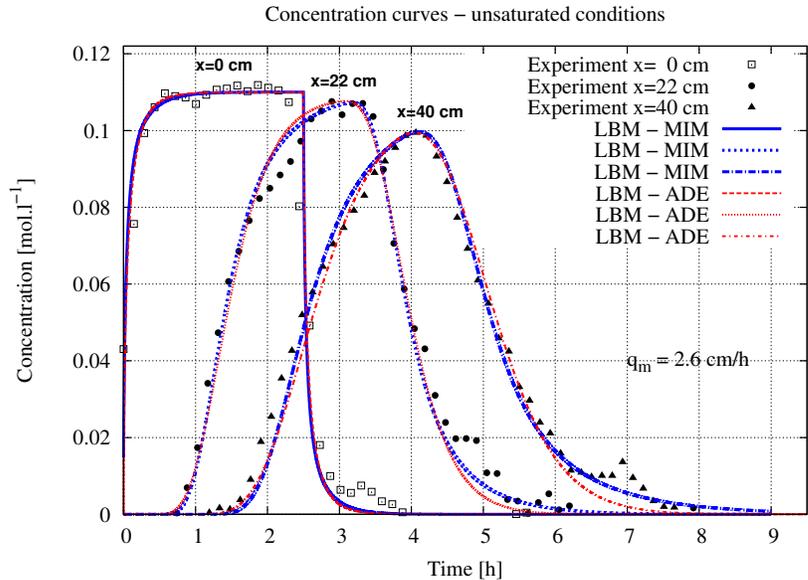


FIGURE 4.2 – Simulations LBM des modèles ADE et MIM comparés aux données expérimentales. D'après [R8], 2011.

4.3 Identification paramétrique d'un modèle fractionnaire en temps

Le retour d'expérience des simulations qui ont été réalisées avec les modèles classiques, en particulier celles qui ont conduit à la figure 4.2, a suggéré l'étude de modèles alternatifs pour pouvoir reproduire *simultanément* (i.e. au cours d'une même simulation) la totalité des courbes de concentration et de leurs trainées. La section 4.3.1 présente le plus original d'entre eux : le MIM fractionnaire en temps. Celui-ci fait intervenir plusieurs paramètres qui ne sont pas tous accessibles à la mesure et, pour le comparer aux données, il est nécessaire de les caler. Pour cela une méthode d'estimation automatique des paramètres, basée sur la méthode de l'état adjoint, a été développée sur le MIM fractionnaire (section 4.3.2). Enfin, les mesures elles-mêmes montrent que des paramètres non uniformes doivent être considérés ce qui augmente leur nombre. Pour cela, la méthode adjointe a été adaptée pour tenir compte de la variabilité spatiale des paramètres. Enfin, l'ensemble de la démarche a été reprise récemment pour comparer les modèles MIM classique et MIM fractionnaire sur la base des mêmes outils et des mêmes données (section 4.3.3). Cette section est une synthèse des références [P6] et [P2] pour des paramètres considérés uniformes puis non uniformes respectivement.

4.3.1 MIM fractionnaire

Le modèle MIM (Eqs. (4.2a)–(4.2b)) suppose que le fluide circulant dans le milieu est composé de deux phases qui échangent de la matière selon une cinétique du premier ordre. L'Eq. (4.2b) peut s'écrire de façon équivalente comme $\partial_t \theta_{im} C_{im} = a C_m - b C_{im}$ dont la solution est $C_{im} = (a/\theta_{im}) C_m * e^{-\tilde{b}t}$ où $\tilde{b} = b/\theta_{im}$ et le symbole $*$ représente la convolution de Laplace qui est réalisée avec une loi exponentielle. La concentration totale C_{tot} peut s'écrire en fonction de C_m par $C_{tot} = (\theta_m/\theta) C_m + (a/\theta) C_m * e^{-\tilde{b}t}$ et le modèle se simplifie en une seule équation d'inconnue C_m :

$$\partial_t \left(\theta_m C_m + a C_m * e^{-\tilde{b}t} \right) = -\partial_x [q_x C_m - D \partial_x C_m]. \quad (4.6)$$

Le modèle « MIM fractionnaire » [149, 150] est une généralisation fractionnaire de l'ADE qui décrit le transport de soluté dans un milieu unidimensionnel dans lequel les fluides peuvent s'immobiliser et retenir les solutés durant des temps de piégeage de moyenne infinie. Le milieu unidimensionnel peut être une rivière [149, 151] (avec sa zone hypothétique) ou bien une géométrie d'écoulement décrite dans [152]. Dans ce modèle, on suppose que C_{im} et C_m sont reliés par la

relation $C_{im} = \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} C_m$ où $I_{0,+}^{1-\alpha} C_m = (1/\Gamma(1-\alpha)) C_m * t^{-\alpha}$, c'est-à-dire que la convolution en temps a pour noyau une loi de puissance et non pas une loi exponentielle comme supposé dans le MIM classique. Dans ces relations, Γ est la fonction Gamma d'Euler, α appartient à l'intervalle $]0, 1[$ et $I_{0,+}^{1-\alpha}$ est l'opérateur d'intégration fractionnaire définie par $I_{0,+}^{1-\alpha} \varphi(t) = (1/\Gamma(1-\alpha)) \int_0^t (t-t')^{-\alpha} \varphi(t') dt'$ [153]. Avec cette hypothèse, le MIM fractionnaire appliqué à une colonne insaturée s'écrit :

$$\partial_t \left(\theta_m(x) C_m + \Lambda(x) I_{0,+}^{1-\alpha} C_m \right) = -\partial_x [q_x C_m - D \partial_x C_m], \quad (4.7)$$

avec une condition initiale $C_m(x, 0)$ nulle et des conditions aux limites données par la première équation de (4.5) en $x = 0$ et la seconde équation en $x = L_x = 80$ cm. La concentration totale C_{tot} qui est mesurée par le dispositif est reliée à la concentration mobile C_m par la relation :

$$C_{tot}(x, t) = \frac{\theta_m}{\theta} C_m(x, t) + \frac{\Lambda}{\theta \Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-t')^{-\alpha} C_m(x, t') dt' \quad (4.8)$$

L'équation (4.7) peut s'exprimer de façon équivalente avec une dérivée fractionnaire en temps d'ordre α en appliquant la définition $\partial_t I_{0,+}^{1-\alpha} \equiv \partial_t^\alpha$:

$$\partial_t (\theta_m(\mathbf{x}) C_m) + \partial_t^\alpha (\Lambda(\mathbf{x}) C_m) = -\partial_x [q_x C_m - D \partial_x C_m] \quad (4.9)$$

mais pour la résolution numérique, on choisira l'Eq. (4.7). Le modèle a été discrétisé par la méthode des différences finies avec un schéma implicite en temps. L'intégrale fractionnaire est discrétisée par la relation issue de [154]. Les développements ont été réalisés en Fortran puis validés par une solution analytique. Dans la section suivante on présente une méthode d'estimation automatique des paramètres de ce modèle (problème inverse) pour le comparer aux données expérimentales.

4.3.2 Problème adjoint avec intégrale fractionnaire

L'une des difficultés qui se pose en milieux poreux lorsqu'on cherche à comparer des modèles à des données est la détermination des paramètres de ces modèles. Dans l'Eq. (4.9) les paramètres inconnus sont θ_m , α , Λ , et D , sachant que certains d'entre eux peuvent dépendre des propriétés locales et donc de la position. Dans cette section on présente une méthode de résolution de problème inverse qui permet d'identifier ces paramètres, étant connues les mesures de concentration par le dispositif expérimental. La méthode est basée sur l'application de la « méthode de l'état adjoint » dont le principe a déjà été rappelé sur un cas classique de diffusion dans l'Annexe A. Ici on synthétise sur le cas continu les points importants de la méthode pour le modèle MIM fractionnaire. La déduction du système adjoint discret et des gradients discrets ont été vérifiés en calculant ces mêmes gradients par différences finies, puis l'ensemble de l'approche a été validée sur des cas tests synthétiques.

Formulation continue. La fonctionnelle à minimiser est définie par :

$$\mathcal{J}(D, \alpha, \Lambda, \theta_m) = \frac{1}{C_0^2} \int_0^{t_f} \int_0^{L_x} f(D, \alpha, \Lambda, \theta_m) dx dt \quad (4.10)$$

où on définit $f(D, \alpha, \Lambda, \theta_m) = [C_{tot}(x, t) - \hat{C}(x, t)]^2$ avec $\hat{C}(x, t)$ qui sont les concentrations mesurées expérimentalement et $C_{tot}(x, t)$ qui sont les concentrations solutions du problème direct et reliées à $C_m(x, t)$ par la relation (4.8). Les paramètres à identifier sont D , α , Λ et θ_m . Comme rappelé dans l'annexe A, la particularité du problème adjoint est d'être rétrograde en temps c'est-à-dire qu'il est résolu numériquement du temps final t_f au temps initial. Dans le cas du modèle fractionnaire en temps où l'opérateur de dérivation fractionnaire est remplacé par $\partial_t^\alpha \equiv \partial_t I_{0,+}^{1-\alpha}$, l'opérateur adjoint de $\partial_t I_{0,+}^{1-\alpha}$ est $(\partial_t I_{0,+}^{1-\alpha})^* = -I_{t_f,-}^{1-\alpha} \partial_t$ où l'intégrale fractionnaire $I_{t_f,-}^{1-\alpha}$ est définie par $I_{t_f,-}^{1-\alpha} = (1/\Gamma(1-\alpha)) \int_t^{t_f} (t'-t)^{-\alpha} \varphi(t') dt'$. En général les deux opérateurs de dérivation et d'intégration ne commutent pas sauf si $\psi(t_f) = 0$ et, pour que cette condition soit réalisée, les données expérimentales au temps final n'ont pas été prises en compte (contrairement au cas présenté dans l'Annexe A). En considérant les quatre paramètres uniformes tout le long de la colonne, si on définit l'opérateur \mathcal{A} tel que $\mathcal{A} C_m \equiv \partial_t [C_m + \Lambda I_{0,+}^{1-\alpha} C_m] - \partial_x [D \partial_x C_m - q_x C_m]$, alors l'opérateur adjoint \mathcal{A}^* appliqué à l'état adjoint ψ est :

$$\mathcal{A}^* \psi = \partial_t \left[\psi + \Lambda I_{t_f,-}^{1-\alpha} \psi \right] - \partial_x [D \partial_x \psi + q_x \psi] \quad (4.11)$$

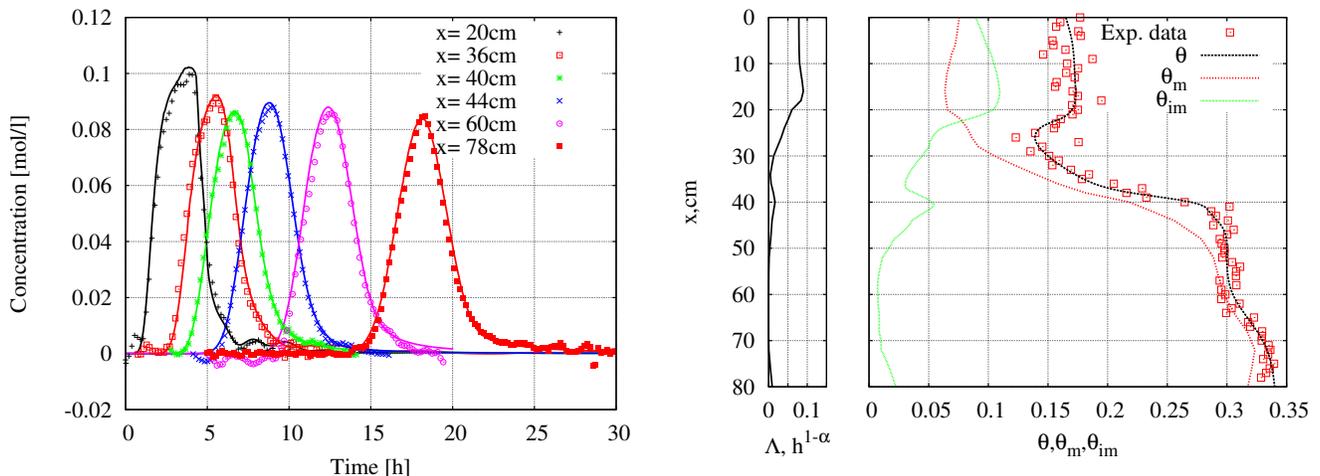
et le problème adjoint s'exprime comme $\mathcal{A}^* \psi = -\partial f / \partial C_m$ muni de la condition finale $\psi(x, t_f) = 0$ et des conditions aux limites $D \partial_x \psi + q \psi = 0$ et $\partial_x \psi = 0$ en $x = L_x$ et $x = 0$ respectivement.

Formulations discrètes. La déduction du système adjoint sous la forme continue permet d’anticiper les difficultés liées à l’intégrale fractionnaire et de mieux comprendre où interviennent les données expérimentales. Cependant, en pratique, la comparaison avec les données expérimentales se réalise avec un code qui traduit sous forme informatique des équations discrétisées. De plus, la fonctionnelle coût s’exprime comme une somme discrète au lieu d’une intégrale continue. Pour être cohérent avec les approximations utilisées pour la résolution du problème direct, le système adjoint discret et les gradients discrets doivent être établis en partant du problème direct discrétisé [155] et non pas en discrétisant le problème adjoint (Eq. (4.11)) et les gradients continus. Procéder de la sorte conduit à des erreurs de discrétisations qui ont un impact sur la précision des gradients. En appliquant la méthode de l’état adjoint sur le problème direct discrétisé par différences finies, le système adjoint et les gradients \mathcal{J} sont déduits sous forme discrète dans la référence [P6] (section 4).

Validations et inversion avec paramètres uniformes. La méthodologie ci-dessus a été appliquée par B. MARYSHEV en considérant tous les paramètres uniformes en espace. La programmation du système adjoint et des gradients a préalablement été vérifiée en comparant les valeurs des dérivées de \mathcal{J} par celles calculées par différences finies comme indiqué dans [156, Section 2.4]. Avec cette dernière méthode, si on cherche à calculer quatre dérivées de \mathcal{J} (une pour chaque paramètre), alors cinq calculs directs sont nécessaires pour obtenir l’ensemble des dérivées. Se pose aussi le problème du choix du pas de discrétisation qui varie pour chaque paramètre et à chaque itération de l’algorithme d’optimisation. Avec l’approche adjointe, seulement deux calculs sont suffisants : le calcul direct et le calcul adjoint. La méthode adjointe est donc très efficace lorsque le nombre de dérivées à calculer est grand, par exemple si les paramètres deviennent des fonctions de la position. Les développements ont aussi été validés sur des cas tests synthétiques, c’est-à-dire que des données \hat{C} sont générées en « mode direct » par le code avec un jeu de paramètres fixés, puis on cherche à retrouver ces paramètres en mode « inverse » à partir de ces « données synthétiques ». L’approche a ensuite été appliquée sur des données réelles issues de BEETI et les résultats de l’inversion sont satisfaisants pour les trois premières courbes mesurées pour $x \leq 40$ cm.

4.3.3 Variabilité spatiale et comparaison MIM/MIM fractionnaire

Dépendance des paramètres avec la position. Par contre, lorsque $x > 40$ cm des décalages en temps et en hauteur apparaissent entre les courbes mesurées et simulées. La raison est que le profil de teneur en eau totale n’est pas uniforme le long de la colonne (voir les carrés rouges sur la Fig. 4.3b) et il semble raisonnable de supposer que celui de la teneur en eau mobile ne le soit pas non plus. Il est donc nécessaire de considérer que certains paramètres varient avec la position x .



(a) Comparaisons entre données expérimentales (points) et modèle MIM fractionnaire (lignes) en plusieurs positions de la colonne.

(b) Paramétrisation du MIM fractionnaire.

FIGURE 4.3 – Concentrations et paramétrisation du MIM fractionnaire en temps. D’après B. MARYSHEV *et al.* [P2], 2017.

La méthode adjointe a été étendue dans [P2] en considérant que la teneur en eau mobile et le coefficient d’échange peuvent dépendre de la position x : $\theta_m(x)$ et $\Lambda(x)$. La teneur en eau totale θ mesurée expérimentalement est tout d’abord interpolée par des splines (courbes noires sur la Fig. 4.3b) en choisissant un certain nombre de points de base de coordonnées x_b . Les paramètres θ_m sont ensuite identifiés sur ces points x_b . Par exemple si on choisit cinq points de base alors il y aura cinq paramètres θ_m à identifier et la méthode adjointe fournit cinq dérivées de \mathcal{J} associées à chaque θ_m .

Finalement, plusieurs jeux de données ont fait l’objet d’une inversion. Pour l’un d’eux, mesurés pour une injection de $C_0 = 0.1$ mol/l pendant $t_{flux} = 3h$ à la vitesse de $q = 1.05$ cm. h^{-1} , les résultats du calage de toutes les courbes de concentration

sont présentés sur la figure 4.3a. Les paramètres inversés sont $\alpha = 0.892$ et $D = 3.48 \times 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{h}$. Les courbes $\Lambda(x)$ et $\theta_m(x)$ résultats de l'inversion sont présentées sur la Fig. 4.3b respectivement en noir (encart à gauche) et en rouge. La courbe $\theta_{im}(x)$ en vert est déduite par la relation $\theta_{im}(x) = \theta(x) - \theta_m(x)$.

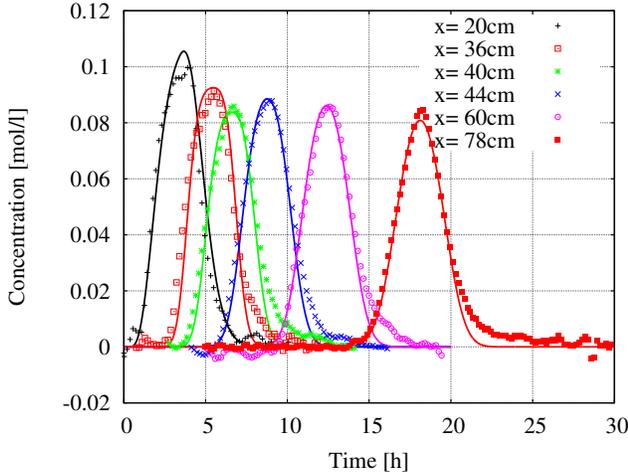


FIGURE 4.4 – Concentrations et paramétrisation du MIM classique. D'après B. MARYSHEV *et al.* [O1], 2017.

Comparaisons MIM et MIM fractionnaire. Finalement, sur la base des mêmes hypothèses de variabilité spatiale des paramètres, la méthode de l'état adjoint a été appliquée au modèle MIM classique [O1]. Le nombre de paramètres à optimiser est identique pour les deux modèles MIM classique et MIM fractionnaire. Il s'agit de $\theta_m(x)$, $a(x)$, $b(x)$ et D pour le MIM classique et $\theta_m(x)$, $\Lambda(x)$, α , D pour le MIM fractionnaire. Pour le MIM classique l'interpolation de $\theta(x)$ et les coordonnées des points de base x_b sont les mêmes pour identifier $a(x)$, $b(x)$ et $\theta(x)$. Les résultats de l'inversion pour le MIM classique sont présentés sur la figure 4.4 sur laquelle on constate que les traînées de toutes les courbes sont moins bien reproduites qu'en appliquant un MIM fractionnaire. Les écarts se traduisent par une valeur de la fonctionnelle J qui est plus grande pour le MIM ($J = 11.2$) que celle obtenue par le MIM fractionnaire ($J = 3.3$). L'interprétation physique des paramètres calibrés doit encore faire l'objet d'une étude approfondie sur d'autres données issues du dispositif BEETI.

4.4 LBM pour l'ADE fractionnaire en espace

Les expériences de RMN réalisées par l'IFPEN durant le projet ANR [157, 158] ont suggéré de s'intéresser à une ADE fractionnaire en espace. Elles s'ajoutent à d'autres expériences réalisées sur site [159] ou dans une rivière [160] qui observent des traceurs aux profils aux « ailes épaisses » qui sont bien modélisées par une loi alpha-stable et non par une gaussienne. Toutes ces observations justifient la simulation numérique de telles équations et la LBM est bien adaptée pour les simuler en 3D. Dans la section 4.4.1, on rappelle une forme particulière d'une ADE fractionnaire en espace, celle de Riemann-Liouville. Les détails de l'algorithme LBM pour simuler cette équation sont donnés dans la section 4.4.2. Une ADE fractionnaire de type Caputo (qui intervertit la dérivée partielle et l'intégrale fractionnaire) a également été simulée par LBM dans [P1]. Les modifications et les validations associées sont présentées dans la section 3.5 de [P1] mais elles ne sont pas détaillées ici. Enfin la section 4.4.3 présente quelques validations avec les marches aléatoires.

4.4.1 Modèle mathématique

On considère une équation fractionnaire qui modélise l'étalement d'un soluté de concentration C dans un fluide de vitesse moyenne $\mathbf{u} = \sum_{\mu=1}^d u_{\mu} \mathbf{b}_{\mu}$ et superposée à un champ de vitesses à petite échelle (fluctuations locales) et dont la complexité est responsable du flux dispersif non Fickien $-\overline{\overline{\mathbf{D}}}\mathcal{F}^{\alpha ps}(C)$:

$$\frac{\partial C}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)C(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \overline{\overline{\mathbf{D}}}(\mathbf{x})\mathcal{F}^{\alpha ps}(C) + S_c(\mathbf{x}, t). \quad (4.12)$$

La variable d'espace \mathbf{x} appartient à un domaine Ω de \mathbb{R}^d , et elle est décrite dans la base orthonormale $\{\mathbf{b}_{\mu}; \text{pour } \mu = 1, \dots, d\}$ de \mathbb{R}^d par ses coordonnées notées x_{μ} : les indices grecs indiquent les coordonnées spatiales. S_c est le terme source. Les coordonnées du vecteur $\mathcal{F}^{\alpha ps}(C)$ sont composées des dérivées partielles de C par rapport à x_{μ} et représentent les variations de C quand toutes les autres coordonnées de \mathbf{x} sont fixées. Ces dérivées sont d'ordre un dans l'ADE standard, mais dans l'Eq. (4.12) elles peuvent avoir un ordre fractionnaire $\alpha_{\mu} - 1$. Ces ordres α_{μ} peuvent avoir des valeurs différentes et sont regroupés dans un vecteur $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)^T$ qui appartient à $]1, 2]^d$. En général les dérivées fractionnaires ne sont pas complètement déterminées par leur ordre. C'est pourquoi le vecteur $\mathcal{F}^{\alpha ps}(C)$ dépend aussi des paramètres $p_{\mu} \in [0, 1]$ qui sont regroupés dans un vecteur $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_d)^T$ et dont la signification physique est donnée ci-dessous. Les $g_{\mu} \in \mathbb{R}_+$ sont simplement des facteurs auxiliaires également regroupés dans un vecteur $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_d)^T$, et $\overline{\overline{\mathbf{D}}}$ est un tenseur de diffusivité.

La dérivée fractionnaire par rapport à x_{μ} peut être vue comme une composition d'un opérateur de dérivation d'ordre entier (par rapport à cette variable), et d'une intégrale fractionnaire de la forme $I_{x_{\mu}^{\pm}}^{\gamma}$. Cette dernière est souvent présentée comme un opérateur intégro-différentiel d'ordre négatif $-\gamma$. Les intégrales fractionnaires sont des convolutions dont le noyau est une

masse de Dirac au point 0 si $\gamma = 0$, ou $(x_\mu)_\pm^{\gamma-1}/\Gamma(\gamma)$ si $\gamma > 0$: la notation en indice \pm désigne la part positive ou négative et Γ est la fonction Gamma d'Euler définie par $\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt$ [153]. Avec ces notations, le vecteur $\mathcal{F}^{\alpha p g}(C)$ est défini par ses composantes $\mathcal{F}_\mu^{\alpha_\mu p_\mu g_\mu}(C)$ dans la base $\{\mathbf{b}_\mu\}$

$$\mathcal{F}^{\alpha p g}(C) = \sum_{\mu=1}^d \mathcal{F}_\mu^{\alpha_\mu p_\mu g_\mu}(C) \mathbf{b}_\mu, \quad (4.13)$$

$$\mathcal{F}_\mu^{\alpha_\mu p_\mu g_\mu}(C) = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left[p_\mu I_{x_{\mu+}}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) + (1-p_\mu) I_{x_{\mu-}}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) \right] \quad (4.14)$$

où p_μ et $1-p_\mu$ pondèrent les deux intégrales fractionnaires $I_{x_{\mu\pm}}^{2-\alpha_\mu}$ et p_μ quantifie le degré de dissymétrie du panache de concentration dans la direction μ . Puisque $I_{x_{\mu+}}^0$ et $I_{x_{\mu-}}^0$ coïncident avec l'opérateur identité (Id), on voit que l'Eq. (4.12) est l'ADE standard pour toutes les valeurs de \mathbf{p} dans le cas limite $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{2} = (2, \dots, 2)$. Pour $\gamma > 0$ la convolution qui définit $I_{x_{\mu+}}^\gamma C(\mathbf{x}, t)$ résulte de l'intégration sur l'intervalle $\omega_+(\mathbf{x}, \mu) = \{\mathbf{y} \in \Omega / y_\nu = x_\nu \text{ pour } \nu \neq \mu, y_\mu < x_\mu\}$ jusqu'au point \mathbf{x} et parallèle à \mathbf{b}_μ . En d'autres mots, les éléments de cet intervalle ont exactement les mêmes coordonnées que \mathbf{x} à l'exception de la coordonnée de rang μ le long de laquelle l'intégration est réalisée. L'autre intégrale $I_{x_{\mu-}}^\gamma C$ correspond à l'intervalle opposé $\omega_-(\mathbf{x}, \mu) = \{\mathbf{y} \in \Omega / y_\nu = x_\nu \text{ pour } \nu \neq \mu, y_\mu > x_\mu\}$, et la définition complète de $I_{x_{\mu\pm}}^\gamma$ est

$$(I_{x_{\mu+}}^\gamma C)(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_{-\infty}^{x_\mu} \frac{1_{\omega_+(\mathbf{x}, \mu)}(\mathbf{y}) C(\mathbf{y})}{(x_\mu - y_\mu)^{1-\gamma}} dy_\mu, \quad \text{et} \quad (I_{x_{\mu-}}^\gamma C)(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_{x_\mu}^{+\infty} \frac{1_{\omega_-(\mathbf{x}, \mu)}(\mathbf{y}) C(\mathbf{y})}{(y_\mu - x_\mu)^{1-\gamma}} dy_\mu. \quad (4.15)$$

Dans l'Eq. (4.15), l'indice E de la fonction 1_E représente un sous-ensemble de Ω , tel que $1_E(\mathbf{x}) = 1$ pour $\mathbf{x} \in E$ et $1_E(\mathbf{x}) = 0$ pour $\mathbf{x} \notin E$. Ici on considère plus particulièrement le domaine $\Omega = \prod_{\mu=1}^d [\ell_\mu, L_\mu]$, et les deux intégrales ci-dessus correspondent aux intervalles $] \ell_\mu, x_\mu [$ et $] x_\mu, L_\mu [$. Par exemple si on suppose que $d = 3$ et $\mu = 1$, les équations (4.15) s'écrivent :

$$(I_{x_1+}^\gamma C)(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_{\ell_1}^{x_1} \frac{C(y_1, x_2, x_3)}{(x_1 - y_1)^{1-\gamma}} dy_1, \quad \text{et} \quad (I_{x_1-}^\gamma C)(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Gamma(\gamma)} \int_{x_1}^{L_1} \frac{C(y_1, x_2, x_3)}{(y_1 - x_1)^{1-\gamma}} dy_1. \quad (4.16)$$

Dans la section 4.4.2 on présente une méthode LB applicable pour un tenseur $\overline{\mathbf{D}}$ et un vecteur \mathbf{g} qui peuvent dépendre de \mathbf{x} , dépendances qui incluent une variété de configurations considérées par [161, 162] pour $\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{2}$ et par [140, 34] dans le cas d'une ADE. Les paramètres $\boldsymbol{\alpha}$ et \mathbf{p} restent néanmoins constants en temps et en espace. La définition (4.13) de $\mathcal{F}^{\alpha p g}(C)$ prend la même forme quand $\overline{\mathbf{D}}$ et \mathbf{g} dépendent de \mathbf{x} ou pas. De plus, sa structure est particulièrement bien adaptée pour concevoir un schéma LB qui simule l'Eq. (4.12), et elle est très souple à programmer. C'est la raison pour laquelle on préfère la formulation de l'Eq. (4.13) à ses expressions équivalentes à $\mathcal{F}^{\alpha p g}(C)$ qui exhibent les dérivées fractionnaires de type Riemann-Liouville [153] et définies par

$$\frac{\partial^{\alpha'} C}{\partial_{\pm x_\mu}^{\alpha'}}(\mathbf{x}) = \pm \frac{\partial}{\partial x_\mu} (I_{x_{\mu\pm}}^{1-\alpha'} C)(\mathbf{x}) \quad \text{pour} \quad \alpha' \in]0, 1[, \quad \frac{\partial^{\alpha'} C}{\partial_{\pm x_\mu}^{\alpha'}}(\mathbf{x}) = \frac{\partial^2}{\partial x_\mu^2} (I_{x_{\mu\pm}}^{2-\alpha'} C)(\mathbf{x}) \quad \text{pour} \quad \alpha' \in]1, 2[. \quad (4.17)$$

Par exemple, l'Eq. (4.12) s'écrit

$$\frac{\partial C}{\partial t}(\mathbf{x}, t) + \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) C(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mu=1}^d D_{\mu\mu} \left[p_\mu \frac{\partial^{\alpha_\mu} g_\mu C}{\partial_{+x_\mu}^{\alpha_\mu}} - (1-p_\mu) \frac{\partial^{\alpha_\mu} g_\mu C}{\partial_{-x_\mu}^{\alpha_\mu}} \right] + S_c(\mathbf{x}, t) \quad (4.18)$$

Dans la section suivante on présente une méthode LB pour simuler les équations (4.12)–(4.14).

4.4.2 Schémas LBM

Les méthodes LB pour simuler le modèle fractionnaire en espace reposent sur (i) la définition d'une nouvelle fonction à l'équilibre qui doit être conçue pour tenir compte des deux intégrales fractionnaires $I_{x_{\mu+}}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C)$ et $I_{x_{\mu-}}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C)$ et sur (ii) la modification de l'opérateur de collision BGK à l'opérateur MRT pour la prise en compte du tenseur de diffusion $\overline{\mathbf{D}}$. Enfin (iii) des précisions sont données sur le calcul des intégrales discrètes.

Fonction à l'équilibre. L'équation de Boltzmann avec la collision BGK s'écrit pour $i = 0, \dots, \mathcal{N}$ où \mathcal{N} est le nombre de directions de déplacement sur le réseau :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\lambda} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + w_i S_c(\mathbf{x}, t) \Delta t, \quad (4.19)$$

où $S_c(\mathbf{x}, t)$ est le terme source de l'Eq. (4.12), les f_i^{eq} sont les composantes du vecteur noté $|\mathbf{f}^{eq}\rangle$ de la fonction de distribution à l'équilibre. Le coefficient λ est le taux de relaxation qui relaxe f_i vers l'équilibre f_i^{eq} . L'opérateur de collision $|\mathbf{f}\rangle \mapsto \lambda^{-1} [|\mathbf{f}\rangle - |\mathbf{f}^{eq}\rangle]$ doit préserver la masse totale, une exigence équivalente à $\sum_i f_i = \sum_i f_i^{eq}$. Si on pose $\mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}) = \lambda^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{I}$ où \mathbf{I} est la matrice identité de dimension $\mathcal{N} + 1$, le système de toutes les équations (4.19) s'écrit

$$|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t)\rangle = |\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)\rangle - \mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}) [|\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)\rangle - |\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle] + |\mathbf{w}\rangle S_c(\mathbf{x}, t) \Delta t \quad (4.20a)$$

L'annexe B démontre que la LBE approche l'Eq. (4.12) avec $\boldsymbol{\alpha}$ quelconque et un tenseur sphérique $\overline{\mathbf{D}} = D\overline{\mathbf{I}\mathbf{d}}$ (où $\overline{\mathbf{I}\mathbf{d}}$ est l'identité de \mathbb{R}^d) quand le taux de relaxation λ est relié au coefficient de diffusion D par $D = e^2(\lambda - 1/2)\Delta x^2/\Delta t$ avec des moments d'ordre zéro, un et deux de la fonction à l'équilibre $|\mathbf{f}^{eq}\rangle$ qui satisfont :

$$\langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{eq} \rangle = C; \quad \langle e_\mu | \mathbf{f}^{eq} \rangle = \frac{\Delta t}{\Delta x} C u_\mu; \quad \langle e_\mu e_\nu | \mathbf{f}^{eq} \rangle = \left[p_\mu I_{x_\mu+}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) + (1 - p_\mu) I_{x_\mu-}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) \right] \delta_{\mu\nu}. \quad (4.21)$$

La fonction de distribution à l'équilibre

$$|\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle = |\mathcal{A}(\mathbf{x}, t)\rangle + \frac{C(\mathbf{x}, t)}{e^2} \frac{\Delta t}{\Delta x} u_\mu(\mathbf{x}, t) |e_\mu \mathbf{w}\rangle \quad (4.22a)$$

satisfait les Eqs (4.21) si chaque composante \mathcal{A}_i de $|\mathcal{A}(\mathbf{x}, t)\rangle$ est une fonctionnelle de C donnée par (pour $\mu = 1, \dots, d$)

$$\mathcal{A}_i(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} C(\mathbf{x}, t) - w_0 \sum_{\mu=1}^d \left[p_\mu I_{x_\mu+}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) + (1 - p_\mu) I_{x_\mu-}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) \right] & \text{si } i = 0 \\ w_i \left[p_\mu I_{x_\mu+}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) + (1 - p_\mu) I_{x_\mu-}^{2-\alpha_\mu}(g_\mu C) \right] & \text{si } i = 2(\mu - 1) + 1, 2(\mu - 1) + 2 \end{cases} \quad (4.22b)$$

Le second terme de l'Eq. (4.22a) est un terme classique des schémas LBM appliqué à l'ADE standard pour tenir compte du terme advectif $\nabla \cdot (\mathbf{u}C)$ dans l'Eq. (4.12). Le premier terme $|\mathcal{A}(\mathbf{x}, t)\rangle$, défini par (4.22b), généralise aux dimensions supérieures, la fonction à l'équilibre proposée par [163] pour le cas 1D.

Dans le cas particulier $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{2}$, la troisième Eq. des relations (4.21) s'écrit $\langle e_\mu e_\nu | \mathbf{f}^{eq(0)} \rangle = C \delta_{\mu\nu}$, et $|\mathcal{A}(\mathbf{x}, t)\rangle = C |\mathbf{w}\rangle$ retrouve la fonction à l'équilibre communément appliquée pour l'ADE classique [37]. Puisque seul les termes $\mathcal{A}_i(\mathbf{x}, t)$ dépendent de $\boldsymbol{\alpha}$, la simulation de l'équation générale (4.12) dans un code LB sur des réseaux D2Q5 ou D3Q7 nécessite seulement de calculer les approximations fractionnaires des intégrales $I_{x_\mu\pm}^{\alpha_\mu} g_\mu C$ dans la fonction de distribution à l'équilibre selon la relation (4.22b).

Opérateur de collision MRT. Afin de pouvoir simuler des tenseurs de diffusion anisotropes qui peuvent dépendre de \mathbf{x} et t , on considère une règle de collision plus flexible, toujours basée sur la fonction d'équilibre Eqs. (4.22a)-(4.22b) mais qui considère plus de degrés de liberté. Cette règle de collision permet également de diminuer les instabilités causées par des grandes vitesses, même pour une diffusion isotrope. L'opérateur de collision MRT [164, 36] $\mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}) \mathbf{M} [|\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)\rangle - |\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle]$ contient la fonction à l'équilibre définie ci-dessus ainsi que les matrices inversibles \mathbf{M} et $\mathbf{\Lambda}$ de dimensions $(\mathcal{N} + 1) \times (\mathcal{N} + 1)$. L'équation LB (4.20a) est remplacée par :

$$|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t)\rangle = |\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)\rangle - \mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda}(\mathbf{x}) \mathbf{M} [|\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)\rangle - |\mathbf{f}^{eq}(\mathbf{x}, t)\rangle] + |\mathbf{w}\rangle S_c(\mathbf{x}, t) \Delta t, \quad (4.23)$$

où la matrice \mathbf{M} représente un changement de base qui associe à chaque fonction $|\mathbf{f}\rangle$ un ensemble de $\mathcal{N} + 1$ moments indépendants, équivalents aux produits scalaires de $|\mathbf{f}\rangle$ par des éléments indépendants de $\mathbb{R}^{\mathcal{N}+1}$ qui incluent $|\mathbf{1}\rangle$, les vecteurs $|e_\mu\rangle$ et les combinaisons des produits de ces vecteurs. Dans la nouvelle base, les $d + 1$ premières composantes de $|\mathbf{f}\rangle$ sont la masse totale $\langle \mathbf{1} | \mathbf{f} \rangle$ (qui est une quantité conservée) et les $\langle \mathbf{f} | e_\mu \rangle$, proportionnels aux flux de particules fictives dans les d dimensions physiques. Ces $d + 1$ premières lignes sont orthogonales entre elles. La référence [37] suggère de les compléter avec $\mathcal{N} - d$ lignes associées aux moments du second ordre reliés à l'énergie cinétique $|\mathbf{e}^2\rangle = \sum_{\mu=1}^d |e_\mu e_\mu\rangle$ et à d'autres combinaisons linéaires de $|e_\mu e_\mu\rangle$ avec $\mu < d$, mutuellement orthogonales et orthogonales aux $d + 1$ premières lignes. N'importe quelle combinaison linéaire de ces vecteurs convient si les lignes sont orthogonales entre elles. Cette condition est satisfaite par plusieurs combinaisons parmi lesquelles on choisit celle suggérée par [35, 37] :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 6 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 4 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

pour D3Q7 ou D2Q5 respectivement. La matrice $\mathbf{\Lambda}(\mathbf{x})$ associée au réseau D3Q7 est définie par son inverse

$$\mathbf{\Lambda}^{-1}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \lambda_0(\mathbf{x}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{11}(\mathbf{x}) & \lambda_{12}(\mathbf{x}) & \lambda_{13}(\mathbf{x}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{21}(\mathbf{x}) & \lambda_{22}(\mathbf{x}) & \lambda_{23}(\mathbf{x}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{31}(\mathbf{x}) & \lambda_{32}(\mathbf{x}) & \lambda_{33}(\mathbf{x}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_4(\mathbf{x}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5(\mathbf{x}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_6(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

où les éléments sont les taux de relaxation. En dimension deux avec le réseau D2Q5, on supprime simplement les éléments $\lambda_{3\mu}$ et $\lambda_{\mu 3}$ et on remplace λ_5 et λ_6 par λ_3 . Dans les deux cas, on appelle $\bar{\bar{\mathbf{\Lambda}}}$ la matrice $d \times d$ d'éléments $\lambda_{\mu\nu}$.

La référence [37] montre que le moment d'ordre zéro $C = \langle \mathbf{1} | \mathbf{f} \rangle$ déduit des Eqs. (4.23), (4.25), ou (4.24) obéit à l'ADE anisotrope (i.e. Eq. (4.12) avec $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{2}$) avec une erreur d'ordre ε^2 pour un tenseur de diffusion et des paramètres de relaxation reliés par

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}}(\mathbf{x}) = e^2 \left(\bar{\bar{\mathbf{\Lambda}}}(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \bar{\bar{\mathbf{1d}}} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t}. \quad (4.26)$$

L'Eq. (4.26) relie les éléments $\lambda_{\mu\nu}(\mathbf{x})$ de la matrice $\mathbf{\Lambda}^{-1}(\mathbf{x})$ ($\mu, \nu = 1, \dots, d$) au tenseur de diffusion généralisée, et $\lambda_0(\mathbf{x})$ (appliqué sur la quantité conservée) n'a pas d'effet. Les éléments diagonaux $\lambda_\mu(\mathbf{x})$ avec $\mu = d+1, \dots, \mathcal{N}$ peuvent être vus comme des degrés de liberté supplémentaires qui influencent la stabilité et la précision de l'algorithme.

Calcul des intégrales discrètes. La mise à jour de la fonction à l'équilibre à chaque pas de temps nécessite le calcul des intégrales fractionnaires discrètes aussi bien en BGK qu'en MRT. La précision de la discrétisation des intégrales fractionnaires $I_{x_\mu^\pm}^{2-\alpha_\mu}$ impliquées dans les $\mathcal{A}_i(\mathbf{x}, t)$ améliore significativement l'efficacité des schémas LB appliqués à l'Eq. (4.12). Les schémas discrets existent pour les intégrales fractionnaires 1D d'une fonction continue $f(x)$ d'une variable réelle $x \in [0, N\Delta x]$. Les approximations d'ordre Δx peuvent suffire dans des cas 1D comme dans la référence [163]. Puisque les dimensions d supérieures nous force à éviter des maillages avec des pas d'espace Δx trop petits, on abandonne cet algorithme pour interpoler $f(x)$, et on préfère celui de [154] qui découle de la règle des trapèzes et retourne une erreur d'ordre Δx^2 :

$$I_{n\Delta x+}^\gamma f \approx \frac{\Delta x^\gamma}{\Gamma(2+\gamma)} \sum_{l=1}^n f(l\Delta x) c_{ln}^+(\gamma) \quad I_{n\Delta x-}^\gamma f \approx \frac{\Delta x^\gamma}{\Gamma(2+\gamma)} \sum_{l=n}^N f(l\Delta x) c_{ln}^-(\gamma, N). \quad (4.27)$$

Ces équations utilisent la fonction Gamma d'Euler pour laquelle une fonction intrinsèque Fortran2008 existe, et les coefficients $c_{ln}^+(\gamma)$ et $c_{ln}^-(\gamma, N)$ sont définis par :

$$c_{ln}^+(\gamma) = \begin{cases} (1+\gamma)n^\gamma - n^{\gamma+1} + (n-1)^{\gamma+1} & \text{pour } l=0, \\ (n-l+1)^{\gamma+1} - 2(n-l)^{\gamma+1} + (n-l-1)^{\gamma+1} & \text{pour } 0 < l < n, \\ 1 & \text{pour } l=n \end{cases} \quad (4.28a)$$

et :

$$c_{ln}^-(\gamma, N) = \begin{cases} (1+\gamma)(N-n)^\gamma - (N-n)^{\gamma+1} + (N-n-1)^{\gamma+1} & \text{pour } l=N, \\ (l-n+1)^{\gamma+1} - 2(l-n)^{\gamma+1} + (l-n-1)^{\gamma+1} & \text{pour } n < l < N \\ 1 & \text{pour } l=n \end{cases} \quad (4.28b)$$

Pour $d > 1$ et chaque μ , on utilise l'Eq. (4.27) dans $(I_{x_\mu^\pm}^\gamma C)(\mathbf{x})$ qui est une intégrale de la forme $(I_{x_\mu^\pm}^\gamma f)(x_\mu)$ si on pose $f(x_\mu) \equiv C(\mathbf{x})$ dans lequel on fixe toutes les coordonnées de \mathbf{x} de rang différent de μ . Pour chaque $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)$ appartenant au domaine $\Omega = \prod_{\mu=1}^d [\ell_\mu, L_\mu = \ell_\mu + N_\mu \Delta x]$, on pose $x_\mu = \ell_\mu + n\Delta x$ ce qui donne

$$(I_{x_\mu+}^\gamma C)(\mathbf{x}) = \frac{\Delta x^\gamma}{\Gamma(2+\gamma_\mu)} \sum_{l=1}^n C(\mathbf{y}_l) c_{ln}^+(\gamma_\mu), \quad (I_{x_\mu-}^\gamma C)(\mathbf{x}) = \frac{\Delta x^\gamma}{\Gamma(2+\gamma_\mu)} \sum_{l=n}^{N_\mu} C(\mathbf{y}_l) c_{ln}^-(\gamma_\mu, N_\mu) \quad (4.29)$$

où la coordonnée discrète \mathbf{y}_l a la même signification que \mathbf{y} dans l'équation continue (4.15). Par exemple dans le cas particulier $d=3$, $\mathbf{y}_l = (\ell_1 + l\Delta x, x_2, x_3)$ si $\mu=1$, $\mathbf{y}_l = (x_1, \ell_2 + l\Delta x, x_3)$ si $\mu=2$ et $\mathbf{y}_l = (x_1, x_2, \ell_3 + l\Delta x)$ si $\mu=3$. Comme les intégrales fractionnaires sont non locales, la mise à jour de la fonction à l'équilibre à chaque pas de temps nécessite la description complète du champ de concentration dans Ω .

L'algorithme présenté dans cette section a été programmé en Fortran90 en 2D puis en 3D. La section suivante présente quelques cas tests qui ont permis de vérifier les schémas LBM et la programmation en dimensions deux et trois.

4.4.3 Validations avec les méthodes de marches aléatoires

Dans cette section on présente des comparaisons entre le schéma LBM avec la marche aléatoire équivalente à l'EDP fractionnaire qui a été rappelée dans la section 4.2.2. Les comparaisons se réalisent sur des profils et des iso-valeurs de concentration recueillis en plusieurs temps qui doivent se superposer pour des valeurs identiques des paramètres. Les publications qui existent sur le sujet se limitent à la comparaison de la LBM avec des solutions analytiques sans approfondir les comparaisons avec les marches aléatoires (e.g. [165] pour le fractionnaire en temps et [163, 166] pour le fractionnaire en espace). Dans la section 3.4 de la référence [P1], des vérifications du schéma LBM sont aussi réalisées avec des solutions analytiques. Celles-ci sont relatives à des cas bidimensionnels avec des coefficients de diffusion qui varient avec la position et des conditions aux limites qui varient avec la position et le temps. Cependant, on se limite ici à la présentation des validations qui comparent la LBM avec les marches aléatoires car elles illustrent l'équivalence de deux méthodes très différentes pour simuler le comportement « anormal » d'un traceur.

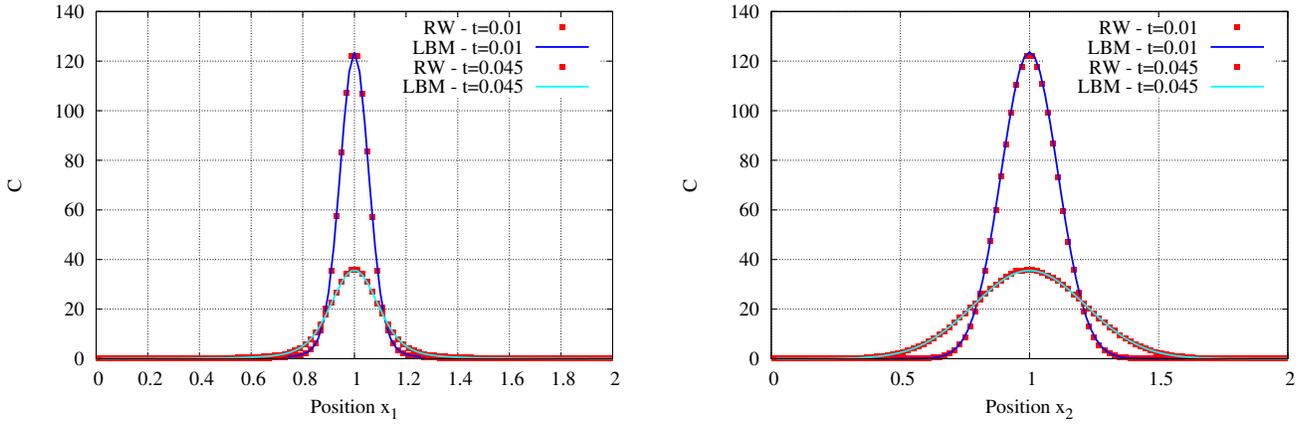
Validation 1 : effet des paramètres α_μ quand $\beta_\mu = 0$. Lorsque les paramètres α et β sont tels que $\alpha = (1.5, 1.99)^T$ et $\beta = \mathbf{0}$, les trajectoires des marches aléatoires sont symétriques. C'est équivalent à des intégrales $I_{x_\mu^\pm}^{2-\alpha_\mu}$ de poids égaux dans l'Eq. (4.13). Ici avec $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, on voit sur la Fig. 4.5a que la position du maximum de C reste immobile à la même position $x_1 = x_2 = 1$. Si on compte les trajectoires des particules qui quittent le domaine Ω , on constate que la plupart d'entre elles en sorte au travers des limites positionnées en $x_1 = \ell_1$ et $x_1 = L_1$. Ceci s'explique par des déplacements plus grands qui sont plus probables dans la direction x_1 car $\alpha_1 < \alpha_2$. Au temps t satisfaisant $D_{\mu\mu}g_\mu t < 1$, le graphe de gauche de la Fig. 4.5a montre les profils $C(x_1, x_2^s, t)$ dans la direction x_1 où la super-diffusion se produit ($\alpha_1 < \alpha_2$). Les courbes sont plus fines que celles des profils $C(x_1^s, x_2, t)$ présentés sur le graphe de droite et qui décrivent les variations de C dans la direction x_2 où la diffusion est presque normale. Les simulations LBM et RW présentent un bon accord même au voisinage des limites comme le prouve la zone agrandie sur la Fig. 4.5b, avec des pas d'espace et de temps égaux à $\Delta x = 0.02$ et $\Delta t = 10^{-4}$. La simulation s'est réalisée sur un domaine discrétisé en 100^2 nœuds et 10^3 pas de temps effectués en 9 minutes sur une station de travail en mono processeur.

Validation 2 : super-diffusion non symétrique. La Fig. 4.6a, obtenue avec $\alpha = \mathbf{1.2}$, $\mathbf{p} = (0.35, 0.5)^T$ et $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, illustre le déplacement du pic et montre des ailes plus épaisses à gauche qu'à droite. C'est parce-que $p_1 < 0.5$ qui rend plus probable des déplacements négatifs (vers la gauche) dans la direction x_1 . La Fig. 4.6b montre que la collision BGK est en très bon accord avec les marches aléatoires même au voisinage des limites, ici avec $\Delta x = 0.01$ et $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ nécessitant 200^2 nœuds et 2×10^4 pas de temps pour atteindre $t = 1$ et complété en 16.89 heures sur la station de travail mentionnée ci-dessus. La Fig. 4.7a représente l'évolution du champ de concentration qui correspond à la Fig. 4.7b : si $\mathbf{u} = \mathbf{0}$, le centre du panache se déplace vers la droite dans la direction x_1 . Néanmoins, les iso-valeurs de C s'étendent plus loin vers la gauche que vers la droite dans la direction x_1 . Elles montrent des courbures plus grandes que si p_1 et p_2 étaient égaux (voir [162]), et sont similaires à une diffusion anisotrope même si ici $\bar{\mathbf{D}}$ est sphérique avec $\alpha_1 = \alpha_2$.

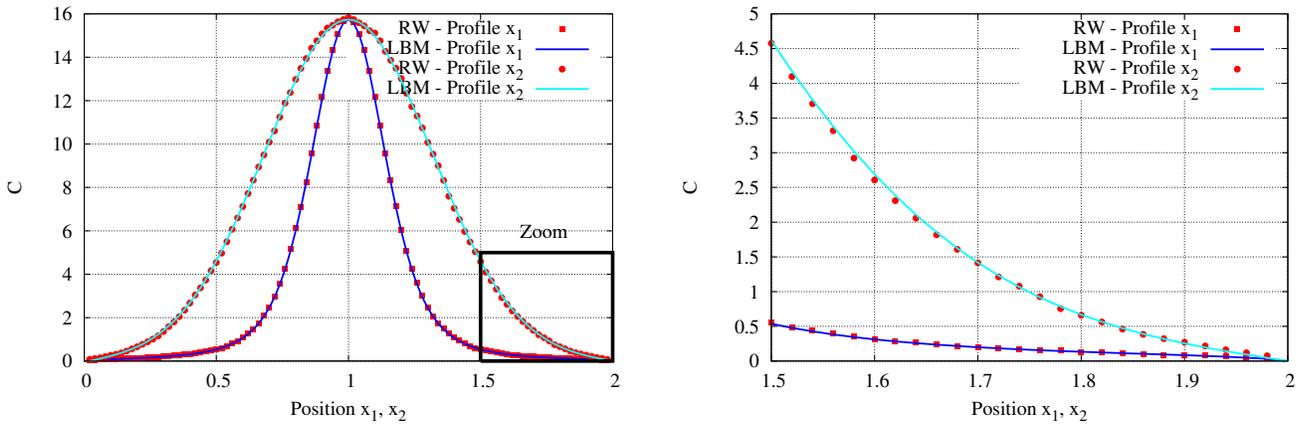
Validation 3 : simulations 3D. La méthode LB-BGK simule en 3D des contours anisotropes qui sont encore en parfait accord avec les marches aléatoires. La figure 4.8 présente les solutions de l'Eq. (4.12) dans $\Omega = [0, 1]^3$ pour $\alpha = \mathbf{1.2}$, $\mathbf{p} = (0.35, 0.5, 0.5)^T$ et $\bar{\mathbf{D}} = 0.5\bar{\mathbf{I}}$. La gaussienne initiale est positionnée au centre du cube en $\mathbf{x}^s = (0.5, 0.5, 0.5)^T$. Une tendance similaire au 2D est observée, excepté que la géométrie plus confinée rend les iso-valeurs (présentées sur la Fig. 4.8a) et les iso-surfaces (présentées sur la Fig. 4.8b) avec des courbures plus petites. Les vues globales et particulièrement l'iso-surface $C = 15$ non sphérique (voir la Fig. 4.8b) illustre l'anisotropie due au choix du vecteur \mathbf{p} , déjà visible sur le graphe de droite de la Fig. 4.8a. Les profils, recueillis le long de plusieurs lignes et les contours recueillis sur plusieurs plans valident les simulations LBM-BGK et les marches aléatoires. Ici on présente sur la Fig. 4.8a un profil particulier le long de x_1 et des iso-valeurs dans le plan x_1x_3 à $t = 0.21$. Ces figures ont été obtenues d'une simulation utilisant un pas d'espace égal à $\Delta x = 0.0125$ et un pas de temps de $\Delta t = 3 \times 10^{-5}$, avec 80^3 nœuds. Le calcul a pris 13.12h pour effectuer 7×10^3 pas de temps sur un mono processeur.

4.5 Pour aller plus loin

Le modèle fractionnaire est séduisant car il permet reproduire toute une gamme de comportements exhibés par les mesures, dont les trainées qui apparaissent sur les profils. De plus, les marches aléatoires équivalentes à ces EDP fractionnaires donnent une représentation physique en termes de particules à ces équations. Par ailleurs, la méthode de Boltzmann sur réseaux présentée dans la section précédente a été développée et validée pour simuler l'évolution d'un panache de traceur dans un aquifère en 3D. Cependant son application sur des cas réels soulève encore des questions, en particulier sur les conditions aux limites de type Neumann et sur les liens éventuels du paramètre fractionnaire avec les paramètres physiques.

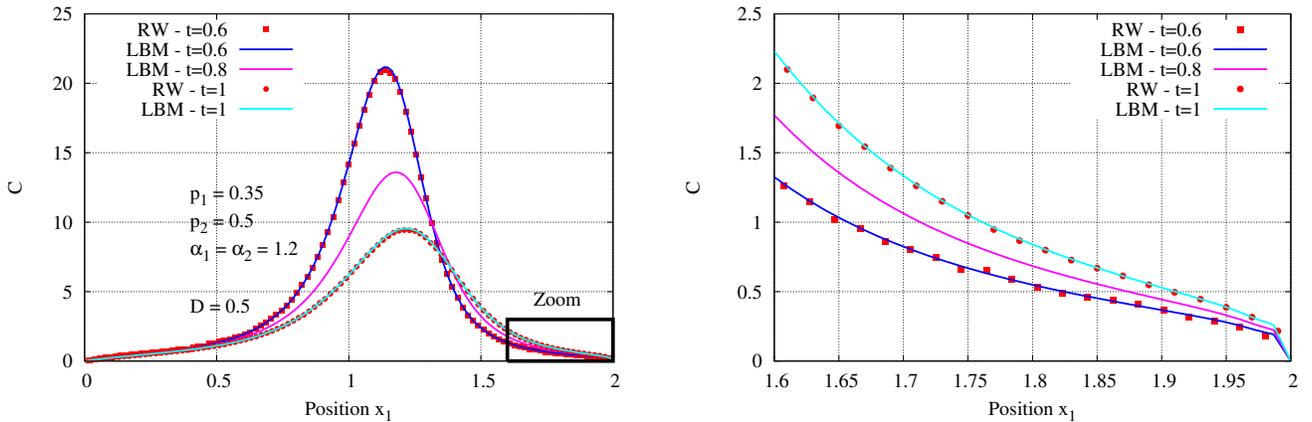


(a) Pic étroit dû à la super-diffusion aux temps courts. Gauche : profils $C(x_1, x_2^s, t)$ dans la direction x_1 le long de laquelle la super-diffusion se produit aux temps $t_1 = 0.01$ et $t_2 = 0.045$. Droite : profils $C(x_1^s, x_2, t)$ aux mêmes temps dans la direction x_2 le long de laquelle la diffusion est presque normale.



(b) Gauche : profils x_1 - et x_2 à $t_3 = 0.1$, et zoom. Droite : zoom près de la limite à droite. Au temps $t_3 = 0.1$, les profils dans la direction x_1 montrent des ailes épaisses, et le pic près du maximum reste étroit comparé au profil dans la direction x_2 .

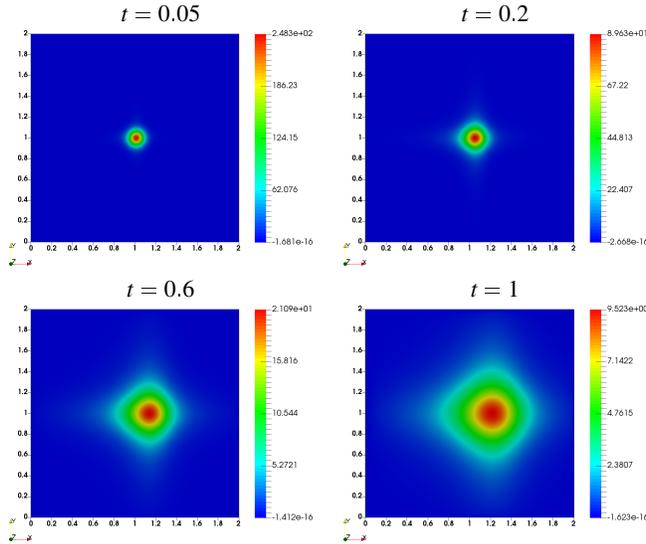
FIGURE 4.5 – Solutions 2D de l'Eq. (4.12) avec des intégrales symétriques ($p = 1/2$) par rapport à chaque coordonnée. Le paramètre de stabilité est équivalent à la super-diffusion uniquement dans la direction x_1 : $\alpha = (1.5, 199)^T$. LBM et RW donnent les mêmes résultats, même près des limites. D'après [P1].



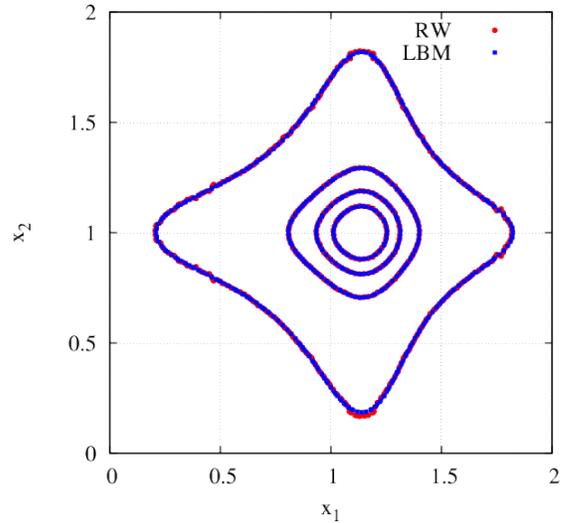
(a) Profils $C(x_1, x_2^s, t)$ à $t_1 = 0.6$ (bleu), $t_2 = 0.8$ (magenta) et $t_3 = 1$ (cyan).

(b) Zoom au voisinage de la limite à droite.

FIGURE 4.6 – Profils $C(x_1, 1, t)$, solutions de l'Eq. 2D (4.12) avec des paramètres de stabilité identiques dans les deux directions et des intégrales non-symétriques uniquement dans la direction x_1 : $p = (0.35, 0.5)^T$ et $\alpha = 1.2$. Les solutions LBM et RW s'accordent bien, même près de la limite droite où la solution décroît due à α_1 et à l'asymétrie. D'après [P1].



(a) Évolution du champ de concentration non-symétrique et super-diffusif dû à $p_1 = 0.35 < 0.5 = p_2$ et $\alpha = 1.2$.



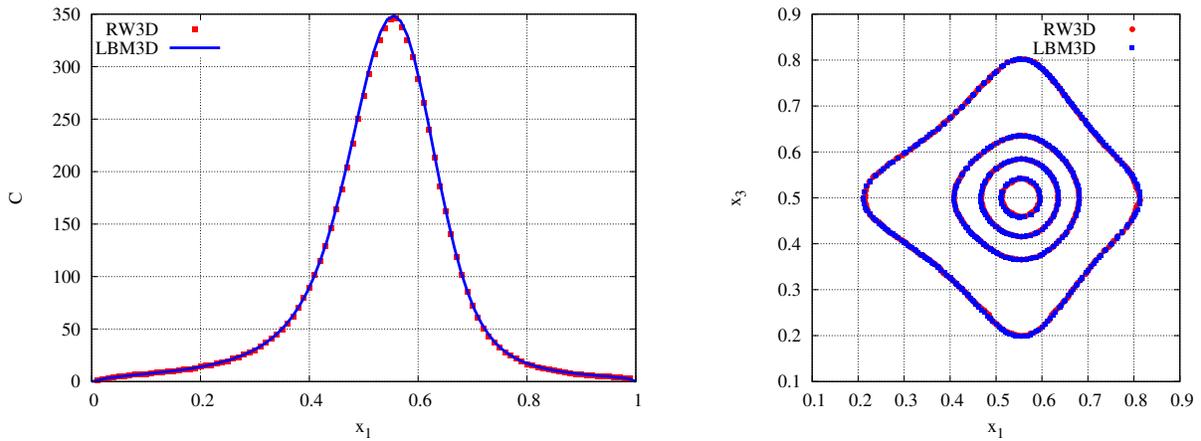
(b) Iso-valeurs $C = 0.5, 5, 10, 15$ à $t = 0.6$ pour RW (rouge) et LBM (bleu).

FIGURE 4.7 – Vues globales des solutions de l’Eq. (4.12) simulées avec les mêmes paramètres que pour la Fig. 4.6, et montrant (a) l’évolution en temps et (b) les iso-valeurs du LBM comparées à celles du RW. D’après [P1].

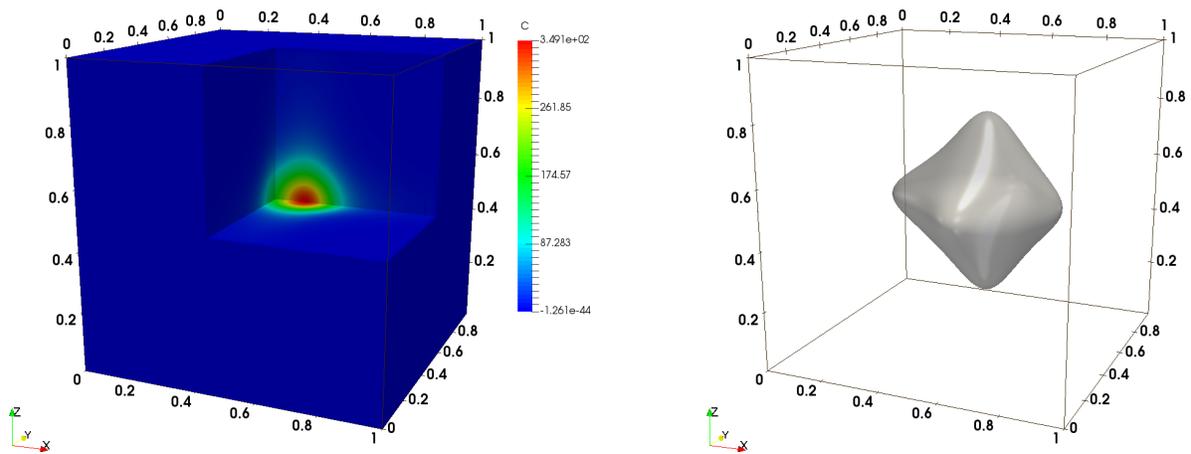
Conditions aux limites de Neumann. Dans [P1], seules les conditions aux limites de Dirichlet ont été mises en œuvre car les conditions de type flux nul soulèvent une difficulté liée à la définition du flux. En effet, en 1D avec $x_1 = x$, $\alpha_1 = \alpha$, $p_1 = p$ et $g_1 = 1$, le flux de Riemann-Liouville s’exprime comme la différence de deux termes pondérés par p et $(1 - p)$: $p\partial^\alpha C/\partial_+x^\alpha$ et $(1 - p)\partial^\alpha C/\partial_-x^\alpha$ (voir Eq. (4.18)). Imposer des conditions de type flux nul revient à égaliser ces deux dérivées. Cependant, ces conditions aux limites sont non locales puisque les dérivées en $x = \ell_1$ et en $x = L_1$ dépendent de toutes les valeurs de $C(x, t)$ dans l’intervalle $[\ell_1, L_1]$. La méthode du Bounce Back en LBM doit être modifiée et adaptée pour tenir compte de cette non localité. La simulation des équations de diffusion de Riemann-Liouville et de Patie-Simon avec des conditions de Neumann a été réalisée dans [167]. La mise en œuvre de ces conditions aux limites en LBM pourrait faire l’objet d’une comparaison approfondie avec les marches aléatoires équivalentes avant de l’appliquer sur un cas concret d’hydrologie comme dans [166].

Paramètres fractionnaires et paramètres physiques. Une autre question concerne les liens éventuels du paramètre fractionnaire (en temps ou en espace) avec la géométrie du milieu poreux et/ou les paramètres physiques (teneur en eau par exemple). Pour cela, des simulations LBM réalisées à l’échelle du pore et des simulations ADE/MIM fractionnaires peuvent être comparées sur des micro-modèles expérimentaux [168] qui permettent de contrôler les géométries, les débits et les natures des phases injectées puis de visualiser par microscopie leur répartition spatiale. À l’échelle du pore, plusieurs simulations LBM calculent la répartition liquide-gaz à l’intérieur d’une géométrie complexe 3D [169, 170] puis en déduisent, avec un calcul de transport, la diffusion effective du milieu poreux [171, 172]. Quant aux simulations du modèle fractionnaire, elles pourront s’appuyer sur les développements réalisés et validés dans la section précédente pour la partie fractionnaire en espace. Pour le modèle fractionnaire en temps, la LBM déjà proposée dans [165] pourra être complétée avec une méthode efficace de stockage de l’historique des champs de concentration qui est nécessaire pour calculer l’intégrale fractionnaire.

Identification d’une loi de dispersivité. Enfin, des liens ont été établis entre le coefficient de dispersion et la teneur en eau d’un milieu insaturé [130, 131]. Une démarche originale pour vérifier ces lois à l’aide du dispositif BEETI pourrait associer la LBM-MIM classique avec la méthode adjointe pour identifier les coefficients de dispersion $D(x_i)$ à plusieurs hauteurs de la colonne où $i = 1, \dots, N$. Par ailleurs, les valeurs des teneurs en eau θ sont connues à ces mêmes hauteurs x_i grâce au système dichromatique. Pour chaque position x_i correspond donc un couple de valeurs $D(x_i)$ et $\theta(x_i)$, la première issue de l’inversion et la seconde issue de la mesure. L’approche consiste à représenter sur un même graphe pour chaque position, les valeurs $D(x_i)$ sur l’axe des abscisses et $\theta(x_i)$ sur l’axe des ordonnées. Il s’agit ensuite d’ajuster une fonction (e.g. une loi de puissance) qui passe sur un maximum de points pour identifier la loi proprement dite. Plus le nombre de positions N est grand et plus précise sera la tendance présentée par les couples de valeurs sur le graphe. L’augmentation du nombre de points de mesures N augmente aussi le nombre de paramètres D à caler ce qui explique l’utilisation de l’état adjoint pour cette identification. On rappelle que la méthode adjointe a déjà été adaptée aux méthodes LB pour du Navier-Stokes dans [173].



(a) Comparaisons entre solutions RW (rouge) et LBM (bleu) de l'Eq. 3D (4.12) pour $\mathbf{u} = \mathbf{0}$: le paramètre $p_1 < 0.5$ (équivalent à $\beta_1 < 0$) déplace le maximum vers les x_1 grands. À gauche, profil $C(x_1, x_2^s, x_3^s, t)$ à $t = 0.21$. À droite, iso-valeurs $C = 15, 100, 200, 300$ pour $x_2 = x_2^s$.



(b) Champ de concentration à $t = 0.21$ (gauche), et iso-surface $C = 15$ (droite).

FIGURE 4.8 – Solutions 3D de l'Eq. (4.12) dans $\Omega = [0, 1]^3$ avec $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{1.2}$, $\mathbf{g} = \mathbf{1}$ et $\mathbf{p} = (0.35, 0.5, 0.5)^T$, $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ et $\bar{\mathbf{D}}$ sphérique. 4.8a : comparaisons LBM et RW sur un profil $C(x_1, x_2^s, x_3^s, t)$ (gauche) et iso-valeurs $C(x_1, x_2^s, x_3, t)$ dans le plan x_1x_3 (droite). 4.8b : iso-surface 3D. D'après [P1].

Chapitre 5

LBM pour la démixtion dans les verres et les écoulements diphasiques

5.1 Introduction

Lors de l'élaboration des verres, les conditions de température et leurs compositions peuvent faire apparaître simultanément sur un même cliché MEB des espèces chimiques sous forme solide et d'autres sous forme liquide. Ces phases sont elles-mêmes contenues dans une matrice vitreuse considérée comme une autre phase fluide. Cette problématique est intrinsèquement multi-phase (plusieurs phases liquides et solides) et multi-physique puisque les phases solides proviennent du processus de cristallisation (solidification) tandis que les autres sont issues du processus de séparation de phase liquide-liquide (hydrodynamique diphasique). La complexité des mécanismes sous-jacents ainsi que la diversité des phases et de leur morphologie ont conduit à une analyse de ces observations en deux parties. Tout d'abord la modélisation et la simulation de la croissance cristalline qui a été présentée dans le chapitre 3. Dans cette seconde partie on s'intéresse à la démixtion, c'est-à-dire la séparation de phase liquide-liquide qui est un cas particulier d'écoulements diphasiques de deux phases liquides immiscibles.

Dans ce chapitre on s'intéresse aux fluides immiscibles qui font intervenir deux constituants différents A et B , chacun caractérisé par sa densité et sa viscosité, on parle de « mélange binaire ». Les fluides immiscibles peuvent aussi faire intervenir un même constituant A mais sous deux phases différentes, l'une liquide et l'autre vapeur (e.g. H_2O). Il s'agit alors d'un problème de changement de phase liquide-vapeur et, comme pour la cristallisation, la modélisation de ce changement de phase doit faire intervenir une chaleur latente (voir chapitre 6). Sous certaines conditions de températures et de compositions, les deux constituants du mélange binaire se séparent pour former deux zones distinctes, la première est composée du constituant A et l'autre du constituant B , il s'agit de la « démixtion ». Ces deux zones sont séparées par une interface, caractérisée par une tension superficielle qui tend à minimiser l'aire interfaciale entre les zones enrichies en A et en B .

La modélisation de la séparation de phase se poursuit ici avec les modèles à champ de phase pour deux raisons principales. Tout d'abord, la thermodynamique des verres est étudiée par d'autres équipes du CEA et des diagrammes des phases sont déjà modélisés par la méthode CALPHAD (voir section 5.2.1). Comme on l'a dit, le principal avantage de la théorie du champ de phase est sa cohérence thermodynamique et les modèles mathématiques peuvent être établis sur la base de ces diagrammes de phases. La seconde raison est relative à la cohérence globale de l'approche pour anticiper les couplages avec la croissance cristalline. L'application des mêmes approches conceptuelles réduit les difficultés pour en corriger leurs défauts et elle minimise les difficultés techniques liées à l'utilisation de différentes méthodes (« interface abrupte » pour les écoulements et « interface diffuse » pour la solidification). Toujours dans cette logique, la LBM est encore appliquée comme méthode numérique de simulation.

Compte tenu de la diversité des applications diphasiques, de nombreuses approches ont été élaborées et améliorées pour simuler les fluides immiscibles (Level-Set, Front-Tracking, Eqs. de conservations doublées, ...) et/ou la transition de phase liquide/gaz. Certaines d'entre elles sont reprises par d'autres équipes du CEA/DM2S et sont rappelées dans la section 5.2.2. Dans le monde LBM, plusieurs approches existent également pour simuler les écoulements diphasiques (lois d'état, Eqs. de conservation doublées, champ de phase, ...). Le modèle de Navier-Stokes/Cahn-Hilliard (NS/CH) est le modèle à champ de phase le plus populaire pour simuler la séparation de phase des mélanges binaires et une littérature abondante existe aussi pour d'autres applications d'écoulements diphasiques (remontées de bulles, instabilités de Rayleigh-Taylor, etc ...). La synthèse des méthodes LB de la littérature (section 5.2.3) a conduit au choix de certaines d'entre elles pour simuler ce modèle NS/CH.

Dans la suite du chapitre, la section 5.3 décrit le modèle de NS/CH puis le modèle Conservatif de Allen-Cahn (CAC). Ce dernier devient de plus en plus populaire pour simuler des problèmes d'écoulements diphasiques avec suivi d'interface. Il est utilisé dans ce chapitre pour valider les développements réalisés sur la partie CH, et il sera étendu pour le changement

de phase liquide-gaz dans le chapitre 6. Les méthodes numériques LBM des deux modèles sont présentées dans la section 5.4 puis leurs programmations sont comparées sur les cas tests du « disque fendu de Zalesak » et sur la « déformation dans un vortex » (section 5.4.3). La partie fluide est validée sur le cas test classique du « double-Poiseuille ». Finalement, quelques simulations de la démixtion sont présentées dans la section 5.5. Celles-ci sont réalisées avec le modèle NS/CH pour plusieurs conditions initiales qui correspondent à différents mélanges initiaux.

5.2 Contexte CEA et réalisations

Le phénomène de démixtion dans les verres [174] figure parmi les exemples d'écoulements diphasiques qui apparaissent dans les systèmes nucléaires du CEA/Den. La démixtion est un processus de séparation spontanée entre deux ou plusieurs phases fluides immiscibles qui peut se produire lors de l'élaboration du verre de conditionnement en relation avec le procédé de vitrification par creuset froid du chapitre 3. On considère un verre très simplifié et composé uniquement de silice (SiO_2) et de molybdate (MoO_3) mélangés à haute température ($> 1000^\circ\text{C}$) qui constitue un mélange binaire.

5.2.1 Processus de démixtion des verres

Diagramme de phase des mélanges binaires. Un mélange binaire est caractérisé par sa composition C qui est définie par la fraction massique des deux constituants et qui varie localement entre 0 et 1. À titre d'exemple, on considère un mélange binaire constitué de MoO_3 et de SiO_2 . Lorsque localement sa composition vaut $C = 0$ (respectivement $C = 1$) alors le mélange est composé de 0% (resp. 100%) de MoO_3 et 100% (resp. 0%) de SiO_2 . L'état thermodynamique des mélanges binaires est représenté par un diagramme des phases qui représente les états du mélange sur un graphe avec la composition C en abscisse et la température T en ordonnées (diagramme $C-T$, Fig. 5.1). La courbe rouge du diagramme $C-T$ est la binode (ou courbe de coexistence) et la température du point maximum de la binode est appelée la température critique T_c . Dans le cas où la composition et la température définissent un point situé à l'intérieur de la binode, alors le processus de séparation des deux fluides se produit selon deux modes observés dans les verres. Le premier est la « décomposition spinodale » (au centre du domaine) et le second est la « nucléation et croissance » qui sont décrites ci-dessous.

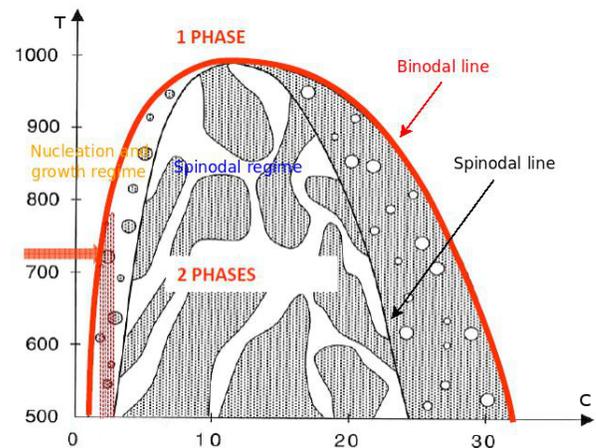
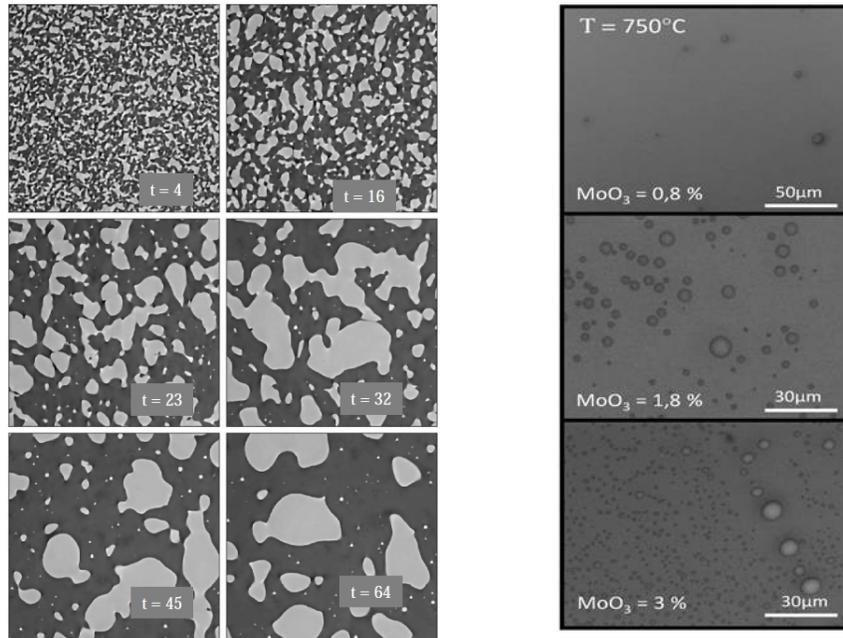


FIGURE 5.1 – Diagramme de phase $C-T$ illustrant schématiquement les deux modes de démixtion.

Décomposition spinodale. Lorsque la composition C et la température T du mélange définissent les coordonnées d'un point situé à l'intérieur de la ligne spinodale (courbe en cloche noire sur la Fig. 5.1), alors le système se situe dans un régime « spinodal ». Ce régime est illustré sur la figure 5.2a, issue de [175], qui présente plusieurs clichés observés en six instants différents sur lesquels on remarque la séparation des deux phases au cours du temps. La première phase est enrichie en A et la seconde est enrichie en B , elles sont représentées en noir et en blanc sur la figure. Après diminution de la température du système au-dessous de la température critique, on remarque, après une courte période d'inter-diffusion, que le système présente deux zones distinctes séparées par une interface. La structure évolue ensuite de manière à minimiser son aire interfaciale : chaque zone grossit et coalesce pour former deux zones distinctes étendues.

Nucléation–Croissance. Lorsque le point de coordonnées (C, T) est compris dans une zone située entre la ligne binodale (en rouge) et la ligne spinodale, alors le processus de séparation est de type « nucléation–croissance ». Lorsqu'il apparaît en faible quantité, l'oxyde de molybdate est schématisé par des « gouttelettes » noires sur un fond blanc (qui représente la silice) sur le diagramme de la figure 5.1. Pour des compositions élevées en MoO_3 , alors c'est le SiO_2 qui apparaît et grossit dans l'oxyde de molybdène (schématisé par des « gouttelettes » blanches sur fond noir sur la Fig. 5.1). Ce régime est observé sur la Fig. 5.2b qui présente trois observations d'un mélange MoO_3 - SiO_2 considéré à une température de 750°C pour trois compositions initiales de MoO_3 : 0.8%, 1.8% et 3%. L'augmentation de la quantité de MoO_3 initiale dans l'élaboration du verre augmente le nombre de sites de nucléation sur lesquels l'oxyde de molybdate va croître. La nucléation-croissance est également observée dans un verre borosilicaté de type « Corning 7070 » traité thermiquement à 700°C [176]. Après 1h, de petites gouttelettes de la phase minoritaire apparaissent dans le système. Puis certaines d'entre elles grossissent par « diffusion » de la phase minoritaire et/ou par « coalescence » avec d'autres petites gouttelettes environnantes.



(a) Observation de décomposition spinodale (d'après [175], 2013)

(b) Observation de nucléation-croissance (d'après [174])

FIGURE 5.2 – Observations de la (a) décomposition spinodale et (b) nucléation-croissance dans des verres.

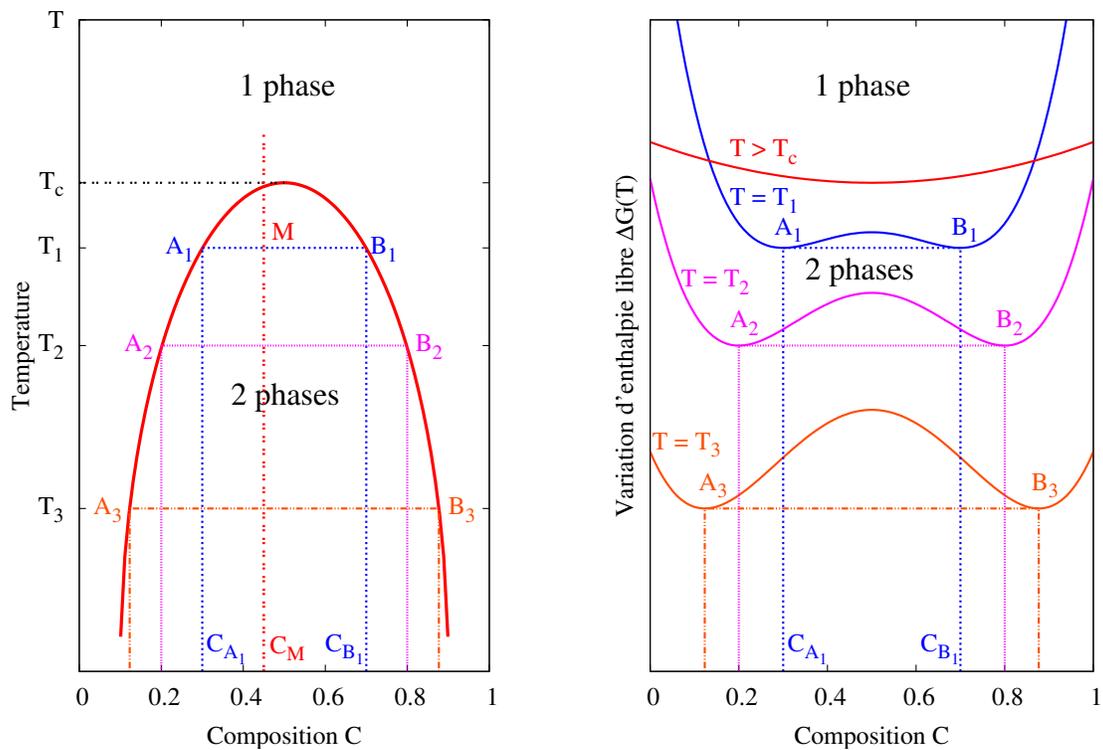
Thermodynamique de la démixtion. Les compositions C_A et C_B de chaque zone dépendent de la température du mélange. En effet, si le système a initialement une composition C_M et qu'il est considéré à une température $T_1 < T_c$, alors on voit apparaître deux domaines de compositions respectives C_{A_1} et C_{B_1} (en bleu sur la figure 5.3a). Si la température est abaissée telle que $T_2 < T_1$, alors les deux nouvelles zones qui apparaissent ont des compositions C_{A_2} et C_{B_2} (en magenta). Enfin, si on abaisse une fois de plus la température telle que $T_3 < T_2$ les deux nouvelles compositions seront C_{A_3} et C_{B_3} (ligne orange).

Pour des systèmes considérés à pression et température constantes, l'enthalpie libre G est la fonction d'état thermodynamique la plus appropriée pour étudier l'équilibre chimique. Le système est à l'équilibre lorsque cette fonction atteint un minimum. Pour des mélanges binaires, la variation d'enthalpie libre ΔG en fonction de la composition et de la température est schématisée sur la Fig. 5.3b. Au-dessus de la température critique la variation d'enthalpie libre présente une forme de parabole qui n'a qu'un seul minimum (courbe rouge). Lorsque la température vaut T_1 , T_2 ou T_3 alors la variation d'enthalpie libre se présente comme une fonction en double-puits, les valeurs minimales des double-puits étant données par les compositions C_{A_i} et C_{B_i} ($i = 1, 2, 3$) qui correspondent à chaque température T_i .

Modélisation thermodynamique CALPHAD. Dans le cas des systèmes $\text{SiO}_2\text{-MoO}_3$ le diagramme de phase $C\text{-}T$ et la variation d'enthalpie libre ΔG en fonction de la composition sont calculés à l'aide de la méthode CALPHAD (CALculation of PHase Diagram [177, 178]) et sont représentés sur la Fig. 5.4 (figure issue de [179]). La figure de gauche donne la variation d'enthalpie libre pour cinq températures différentes. Ces cinq courbes présentent une forme en double-puits avec des minima positionnés en 0 et 1 et une hauteur du double-puits qui varie avec la température. La hauteur du double-puits diminue lorsque la température T augmente, ou en d'autres termes, la barrière de l'énergie libre diminue lorsque la température du système s'approche de la température critique. La figure de droite (toujours issue de [179]) présente le diagramme des phases $C\text{-}T$ du système $\text{SiO}_2\text{-MoO}_3$. Le *quartz*, la *tridymite* et la *crystalite* sont trois formes solides différentes du dioxyde de silicium SiO_2 . Elles apparaissent sous ces trois formes selon la température considérée. Au-dessus d'une température seuil (environ 2000°K), chaque espèce est présente sous forme liquide.

5.2.2 Rappels des approches diphasiques dans la littérature

Les familles de modèles diphasiques se différencient selon l'échelle spatiale à laquelle on étudie le système, en particulier selon que l'on considère une fraction volumique de liquide ou de gaz dans chaque maille (approche moyennée comme en milieux poreux) ou bien que l'on considère des phases séparées par une interface.



(a) Diagramme des phases $C-T$ qui présente des compositions de A et de B différentes en fonction de la température.

(b) Variation enthalpie libre en fonction de la composition. Les minima des double-puits correspondent aux compositions du diagramme $C-T$.

FIGURE 5.3 – Diagrammes des phases : (a) $C-T$ et (b) $C-\Delta G$.

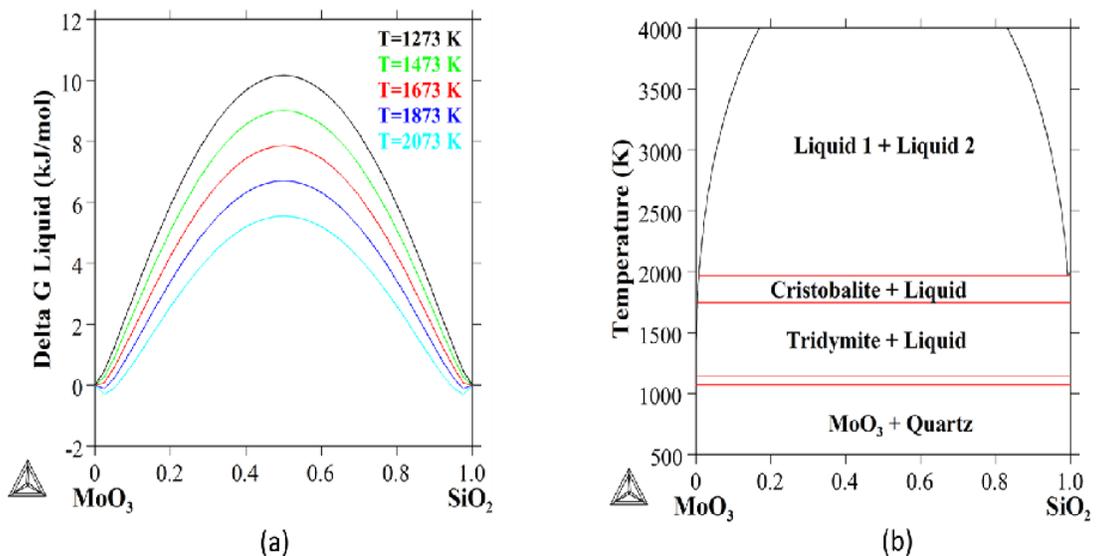


FIGURE 5.4 – Diagrammes des phases du système $\text{SiO}_2\text{-MoO}_3$ (d'après [179]). (a) Variation d'enthalpie libre en fonction de la composition à plusieurs températures et (b) Diagramme des phases $C-T$ (calculs réalisés par Dr S. GOSSÉ, CEA/Saclay).

Modèles avec fractions volumiques de liquide et de gaz. Une première approche populaire consiste à écrire les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie pour chacun des deux fluides A et B (ex. l'eau et la vapeur) en considérant pour chaque constituant le produit des fractions volumiques par leurs densités. Dans cette approche, où on multiplie par deux chaque équation de bilan, il est nécessaire d'établir des lois de corrélation ou de fermeture pour modéliser les échanges et les couplages entre ces équations. C'est dans cette approche que se situent les « codes systèmes » tels que Cathare développé au CEA ou bien le code CFD diphasique *Neptune_CFD* développé chez EDF (voir par exemple [180] pour la condensation en paroi). Ces approches sont bien adaptées lorsqu'on peut considérer qu'un grand nombre de bulles (ou gouttes) apparaissent dans une maille et que leur présence est prise en compte par une fraction volumique.

Modèles avec suivi d'interface. À l'extrême opposé, la modélisation des expériences dédiées à la formation de bulles de vapeur ou de la démixtion nécessitent de considérer le suivi de l'interface qui sépare chaque phase. Pour cela, une nouvelle équation est introduite pour simuler l'évolution de l'interface que l'on peut considérer comme une interface « raide » ou bien comme « diffuse ». Lorsqu'elle est considérée « raide », la méthode du Front-Tracking [181, 182] réalise un suivi lagrangien de la surface qui délimite les deux phases. Cette méthode a été mise en œuvre dans *TrioCFD* et une application pour les écoulements turbulents à bulles peut être trouvée dans [183]. Parmi les méthodes à interface diffuse, deux méthodes existent selon que l'on considère un changement de phase liquide-vapeur ou bien la séparation de phase d'un fluide binaire. Pour le changement de phase liquide-vapeur, certains modèles modifient la loi d'état dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Dans ce cas, c'est la densité qui joue le rôle d'« indicatrice de phase ». L'autre méthode consiste à introduire une nouvelle indicatrice de phase qui obéit à une nouvelle équation d'évolution. Cette dernière est établie de telle sorte qu'elle minimise une fonctionnelle d'énergie libre. C'est cette approche qui est reprise et mise en œuvre par LBM dans ce chapitre.

Rappels des approches diphasiques en LBM. Même si une méthode de Front-Tracking a déjà été initiée par méthode LB dans [184], la plupart des approches LBM considèrent l'interface comme une zone diffuse caractérisée par une épaisseur et une tension de surface. Plusieurs ouvrages ou publications de synthèse récents existent sur ces approches diphasiques [11, 15]. Elles sont classées en trois catégories : les méthodes « pseudo-potentielles » [48, 49] qui modifient la loi d'état pour étudier la transition de phase (on en reparle dans le chapitre 6), les modèles double-population (ou double couleur) [185] dans lesquels deux fonctions de distributions sont introduites pour le calcul de chacune des deux phases (la rouge et la bleue). Dans ces approches, la tension de surface est déduite d'un pas de « recoloriage » qui implique les deux fonctions de distribution [186]. Enfin, l'interface peut être suivie par une nouvelle équation, l'équation du champ de phase qui est basée sur une théorie thermodynamiquement cohérente : la théorie du champ de phase pour les écoulements diphasiques [21].

5.2.3 Démarche et réalisations

Modèles de Cahn-Hilliard (CH) et de Allen-Cahn Conservatif (CAC). La séparation de phase et les écoulements diphasiques sont considérés par le modèle de Cahn-Hilliard [187] (CH). Son origine thermodynamique (voir section 5.3) est bien adaptée aux observations, aux diagrammes des phases et aux modélisations CALPHAD qui ont été réalisées sur le système binaire $\text{SiO}_2\text{-MoO}_3$. Le modèle Conservatif de Allen-Cahn (CAC) est également considéré ici et sert à valider les développements du Cahn-Hilliard. Dans le chapitre 6 il sera étendu au changement de phase liquide-gaz. Ces deux modèles seront rappelés dans la section 5.3.

Le modèle CH est très populaire pour simuler divers phénomènes diphasiques : sans LBM, on peut citer [188] pour la simulation d'écoulements thermo-capillaires, puis [189] qui présente des simulations d'instabilités de Rayleigh-Taylor, et [190] pour la coalescence de gouttelettes d'un fluide visco-élastique ; avec LBM on peut citer [191] pour la décomposition spinodale, [192] pour la flottabilité des bulles, [105] pour l'impact des gouttes, [43] pour l'instabilité de Rayleigh-Taylor et [193, 194] pour le changement de phase liquide-vapeur etc ... Quant au modèle CAC, il a été développé dans [195] et formulé sous forme conservative dans [196]. Ce modèle devient populaire dans la communauté LB [197, 198, 199] et plusieurs publications comparent déjà ces deux modèles (e.g. [200] sans LBM et [201] avec LBM).

Synthèse des méthodes LB pour le NS/CH. De nombreux travaux simulent le modèle NS/CH par LBM et les schémas diffèrent sur plusieurs points. La première différence se situe sur la forme de l'équation de conservation de la masse et de sa discrétisation : fluides incompressibles à divergence nulle avec étape de prédiction-corrrection [43] ou solveur de Poisson [42] ; fluide à compressibilité artificielle avec équation d'évolution de la pression [202, 104] ; et enfin fluide quasi-compressible avec une loi d'état des gaz parfaits [191, 192]. Toutes ces méthodes LB reposent sur l'approximation BGK du terme de collision même si, sur la base de ces mêmes idées, l'approximation MRT est utilisée dans [203].

Les méthodes diffèrent aussi sur le choix des fonctions à l'équilibre pour simuler l'équation CH. Dans [192, 204] une fonction à l'équilibre f^{eq} est spécialement conçue pour l'équation CH tandis que dans [202, 104] la fonction f^{eq} est celle du Navier-Stokes et des termes sources sont ajoutés dans la LBE pour tenir compte du laplacien du potentiel chimique. Cette approche nécessite donc de discrétiser plusieurs gradients supplémentaires par différences finies (le gradient de pression et le

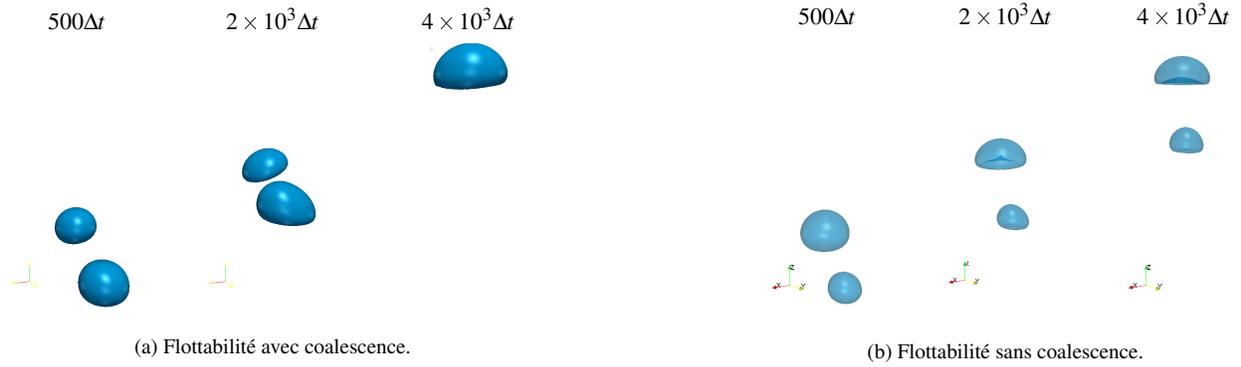


FIGURE 5.5 – Flottabilité de deux bulles par le modèle NS/CH simulé par LBM (d’après [O2], 2014). (a) Coalescence lorsque la bulle de plus grand diamètre se trouve au-dessous de celle de diamètre plus petit. (b) Pas de coalescence lorsque la bulle de plus grand diamètre est au-dessus.

gradient du potentiel chimique) qui ne s’imposent pas pour l’équation de CH. Néanmoins, d’après ces travaux, cette méthode permet de réduire les courants parasites issus de la discrétisation des équations, lorsqu’elle est associée à une discrétisation centrée et décentrée du second ordre des gradients [103] et à une formulation potentielle des forces capillaires [189, 205]. Cette approche a été reprise dans [206] pour des fluides binaires et dans [207] pour des fluides ternaires.

Simulations LBM en Fortran90. L’approche décrite dans [192] a été testée en 2D dans le stage de J.-F. PAISANT (2011) mais cette voie n’a pas été poursuivie pour plusieurs raisons. L’une d’elles est que la fonction de distribution à l’équilibre pour le NS est modifiée pour tenir compte de la présence du terme $\mu_\phi \phi$ dans le gradient de pression du NS (seconde forme potentielle du terme de tension interfaciale – voir section 5.4) et sa généralisation en 3D n’est pas immédiate. Après la programmation dans SILABE3D des méthodes LB qui ont été mises en œuvre (voir section 5.4), plusieurs simulations diphasiques ont été réalisées : la démixtion (voir section 5.5), l’instabilité de Rayleigh-Taylor, et la flottabilité et coalescence de bulles ([O2]). Pour ces deux derniers cas tests, les simulations se sont limitées aux faibles rapports de densité, $\rho_A/\rho_B < 5$ car les simulations ont présenté des instabilités pour des rapports supérieurs. Pour les deux simulations de flottabilité des bulles (Fig. 5.5) le maillage est composé de $80 \times 80 \times 300$ nœuds, les nombres adimensionnels de Eötvös et Morton étaient respectivement égaux à $Eö = 20$ et $Mo = 0.9$. Lorsque la bulle de plus gros diamètre est initialisée sous la plus petite, elle la rattrape au cours de la simulation pour finalement coalescer avec elle (Fig. 5.5a). Tandis que la coalescence n’est pas observée lorsque la bulle de plus petit diamètre est initialisée sous la plus grosse (5.5b).

5.3 Modèles à champ de phase

Dans cette section on rappelle le modèle classique de Navier-Stokes/Cahn-Hilliard (sections 5.3.1 et 5.3.2) puis le modèle conservatif de Allen-Cahn (section 5.3.3). Dans la section 5.3.4 on rappellera quelques formulations alternatives du modèle NS/CH. Le système considéré est un fluide binaire composé de deux fluides incompressibles et immiscibles de densité ρ_A, ρ_B et de viscosité η_A, η_B . Les indices A et B représentent respectivement le dioxyde de silicium (SiO_2) et l’oxyde de molybdate (MoO_3). Le rapport des densités est de l’ordre de deux et le rapport des viscosités est de l’ordre de 100.

5.3.1 Navier-Stokes (NS)

La densité moyenne locale du fluide binaire est notée $\rho(\mathbf{x}, t) \equiv \rho$. La vitesse moyenne \mathbf{u} est calculée par les équations suivantes de conservation de la masse et de quantité de mouvement :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (5.1a)$$

$$\rho(\phi) \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \phi \nabla \mu_\phi + \mathbf{F}_v. \quad (5.1b)$$

L’Eq. (5.1a) est l’équation de conservation de la masse lorsque les deux fluides immiscibles du mélange binaire sont considérés incompressibles. L’Eq. (5.1b) est l’équation de conservation de la quantité de mouvement où $\rho(\phi)$ est la densité du

fluide dépendante de la composition locale ϕ , la pression dynamique est notée $p(\mathbf{x}, t) \equiv p$ et $\eta(\phi)$ est la viscosité dynamique qui dépend aussi ϕ et \mathbf{F}_v est la force de flottabilité liée au vecteur gravité \mathbf{g} . Le premier terme du membre de droite de l'Éq. (5.1b) fait intervenir la pression dynamique qui joue le rôle de multiplicateur de Lagrange de la condition d'incompressibilité $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Le terme $\mathbf{F}_s = -\phi \nabla \mu_\phi$ représente les forces de capillarité qui agissent à l'interface entre le liquide et le gaz. Les formes alternatives de cette force sont indiquées dans la section 5.3.4. Le potentiel chimique μ_ϕ est défini dans la section 5.3.2. Enfin les deux derniers termes représentent respectivement les forces liées aux contraintes de cisaillement et la force de gravité.

5.3.2 Modèle de Cahn-Hilliard (CH) pour le suivi de l'interface

Énergie libre. La méthode de suivi de l'interface est réalisée par une approche qui minimise l'énergie libre du système. Pour un mélange binaire de composition $C \equiv \phi$ considéré à température constante, l'énergie libre est [187] :

$$\mathcal{F} = \int_v \left[\mathcal{V}(\phi) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dv, \quad (5.2)$$

où le premier terme $\mathcal{V}(\phi)$ est le potentiel et le second terme est le terme d'énergie de gradient où κ est le coefficient d'énergie de gradient. La fonction $\mathcal{V}(\phi)$ est choisie comme un double-puits de potentiel qui assure des minima positionnés en $\phi = 0$ et $\phi = 1$:

$$\mathcal{V}(\phi) = H\phi^2(1-\phi)^2. \quad (5.3)$$

La figure 5.6 présente la forme de ce potentiel $\mathcal{V}(\phi)$ en considérant que la hauteur du double-puits de potentiel vaut $H = 1$. Une analyse dimensionnelle indique que le coefficient H possède une dimension d'une énergie par unité de volume, tandis que le coefficient κ possède les dimensions d'une énergie par unité de longueur.

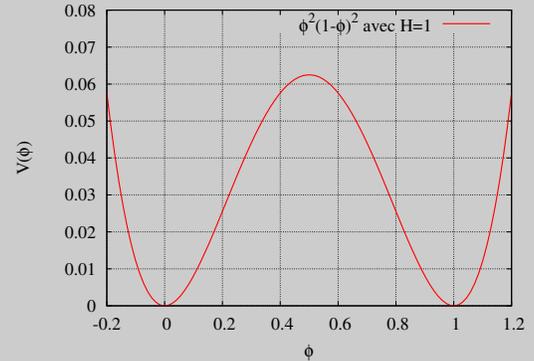


FIGURE 5.6 – Double-puits de potentiel $\mathcal{V}(\phi)$ avec $H = 1$ (Eq. (5.3)).

Équation de Cahn-Hilliard et potentiel chimique. La minimisation de cette fonctionnelle d'énergie libre conduit à une équation de conservation de la composition du mélange :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) + \nabla \cdot (M_\phi \nabla \mu_\phi). \quad (5.4)$$

L'Eq. (5.4) est l'équation de Cahn-Hilliard avec un terme advectif dans lequel $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \equiv \mathbf{u}$ est la vitesse du fluide. M_ϕ est le coefficient de mobilité de l'interface et $\mu_\phi(\mathbf{x}, t) \equiv \mu_\phi$ est le potentiel chimique. Le premier terme du membre de droite représente le flux advectif. Le second terme représente le flux de matière que l'on suppose être de la forme $\mathbf{j} = -M_\phi \nabla \mu_\phi$. Ici, le coefficient de mobilité M_ϕ est considéré indépendant de la composition et identique pour les deux liquides. Le potentiel chimique μ_ϕ quantifie le taux de changement de l'énergie libre pour une petite variation de la composition locale du mélange : $\mu_\phi = \delta \mathcal{F} / \delta \phi$. Lorsque l'énergie libre \mathcal{F} est choisie de la forme (5.2), le potentiel chimique s'écrit :

$$\mu_\phi = 4H(\phi - 1) \left(\phi - \frac{1}{2} \right) \phi - \kappa \nabla^2 \phi. \quad (5.5)$$

Le premier terme du membre de droite de l'Eq. (5.5) est la dérivée du double-puits de potentiel $\mathcal{V}(\phi)$ par rapport à la composition et le second terme provient du terme d'énergie de gradient.

Propriétés de l'interface. En étudiant les solutions à l'équilibre de l'Eq. (5.5) en 1D, i.e. $\mu_\phi = 0$, on peut montrer (en multipliant par $d\phi/dz$ de chaque côté et en intégrant) que le profil à l'équilibre est de la forme $\phi(z) = [1 + \tanh(2z/W)]/2$ où W est l'épaisseur de l'interface diffuse. Dans ce formalisme, la tension interfaciale σ et l'épaisseur de l'interface diffuse W sont données par le produit et le rapport des coefficients κ et H :

$$\sigma = \frac{1}{6} \sqrt{2\kappa H} \quad \text{et} \quad W = \sqrt{\frac{8\kappa}{H}}. \quad (5.6)$$

Une analyse dimensionnelle indique que le terme en $\sqrt{\kappa H}$ est bien homogène à une énergie par unité de surface, qui correspond bien à la dimension d'une tension superficielle. Le terme en $\sqrt{\kappa/H}$ est quant à lui bien homogène à une longueur. En pratique, lors de la résolution numérique des équations (5.4) et (5.5), on fixera les valeurs de σ et W et on en déduira les valeurs de κ et H correspondantes en « inversant » ces deux relations.

5.3.3 Modèle Conservatif de Allen-Cahn (CAC)

L'équation conservative de Allen-Cahn pour modéliser le suivi de l'interface s'écrit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot \left[M_\phi \left(\nabla \phi - \frac{4}{\xi} \phi(1-\phi)\mathbf{n} \right) \right] \quad (5.7)$$

Dans cette équation, le terme $4\phi(1-\phi)\mathbf{n}/\xi$ est le flux de séparation de phase qui est conçu de telle sorte à imposer un profil de tangente hyperbolique à l'équilibre. Plusieurs expressions de ce flux peuvent être trouvées dans la littérature et dépendent des valeurs de ϕ qui annulent ce flux : $\phi = \pm 0.5$ ou bien $\phi = \pm 1$. Ici on suit la formulation de [198] en considérant que les valeurs $\phi = 0$ et $\phi = 1$ annulent ce terme. Dans cette équation, \mathbf{u} est la vitesse, M_ϕ et ξ sont respectivement la mobilité et l'épaisseur de l'interface. La normale de l'interface \mathbf{n} est définie par : $\mathbf{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$. Le principal intérêt de ce modèle CAC est qu'il ne fait intervenir que des dérivées du second ordre alors que le modèle de Cahn-Hilliard fait intervenir une dérivée d'ordre quatre.

5.3.4 Variantes des modèles

D'autres formulations équivalentes à ce modèle incompressible de NS/CH sont possibles. Pour les écoulements, les différences apparaissent sur la forme de la force de tension superficielle \mathbf{F}_s et sur les méthodes d'interpolation de la densité moyenne ρ et de la viscosité η . Elles sont décrites ci-dessous. Pour l'équation de Cahn-Hilliard, les variantes apparaissent sur la définition du double-puits de potentiel. Certains auteurs préfèrent la choisir de telle sorte qu'il s'annule en $\phi = \pm \phi^*$ [192] ou bien en $\rho_{l,g}^{\text{sat}}$ lorsque c'est la densité qui est choisie comme indicatrice de phase [202]. Le choix des valeurs des minima influe sur les relations de W et σ (Eqs. (5.6)) qui sont modifiées pour tenir compte de ces nouveaux minima (voir [192, 202]). Ici on préfère s'appuyer sur la définition de la composition du mélange sur la base de laquelle on établit les diagrammes des phases $C-T$ et $C-G$ (voir Fig. 5.3) pour choisir les minima en $\phi = 0$ et $\phi = 1$.

Force de tension superficielle. Dans l'Éq. (5.1b), le terme représentatif des forces capillaires est écrit sous la forme dite « potentielle ». Cette forme potentielle apparaît également dans la littérature sous la forme $-\phi \nabla \mu_\phi = -\nabla(\phi \mu_\phi) + \mu_\phi \nabla \phi$. Dans cette formulation, la pression est alors redéfinie en $p + \phi \mu_\phi$. Le terme $\mu_\phi \nabla \phi$ représente l'étalement, sur l'épaisseur de l'interface, d'une force proportionnelle à sa courbure et orientée dans la direction normale à l'interface, donnée par $\nabla \phi$. Cette force capillaire peut également s'écrire de manière équivalente sous la forme de la divergence d'un tenseur de pression [191] : $\phi \nabla \mu_\phi = \nabla \cdot \bar{\mathbf{P}}$ avec $P_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} [p^{th} - \kappa \phi \nabla^2 \phi - \kappa |\nabla \phi|^2 / 2] + \kappa (\nabla_\alpha \phi) (\nabla_\beta \phi)$. Dans cette expression, p^{th} est la pression thermodynamique définie par $p^{th} = \phi(d\mathcal{V}/d\phi) - \mathcal{V}$. La forme du terme de force capillaire retenue dans l'Éq. (5.1b) est la forme potentielle qui, d'après la littérature, est celle qui permet de réduire les courants parasites liés à la discrétisation des équations [189, 103]. Une autre forme est possible aussi [208] : $\mathbf{F}_s \propto -\nabla \cdot (\nabla \phi / |\nabla \phi|) |\nabla \phi| \nabla \phi$ qui a été reprise de [209].

Interpolations de la densité et viscosité. Dans l'Éq. (5.1b), \mathbf{u} est la vitesse du fluide et $\rho \equiv \rho(\phi)$ est la densité du fluide binaire qui dépend de $\phi \equiv \phi(\mathbf{x}, t)$ est la composition du mélange et des densités ρ_A et ρ_B de chaque fluide A et B . Dans ce travail, elle est définie par :

$$\rho(\phi) = \phi(\mathbf{x}, t)\rho_B + (1 - \phi(\mathbf{x}, t))\rho_A. \quad (5.8)$$

Avec cette définition, lorsque localement la composition du mélange vaut $\phi = 1$, la densité locale est égale à celle du fluide B ($\rho(\phi = 1) = \rho_B$) et inversement, lorsque localement $\phi = 0$, la densité est égale à celle du fluide A ($\rho(\phi = 0) = \rho_A$). Dans la zone diffuse en présence des deux espèces, la composition est comprise entre 0 et 1 et la densité est une combinaison des deux densités ρ_A et ρ_B . Pour la viscosité on utilise l'une des deux relations suivantes :

$$\eta(\phi) = \phi(\mathbf{x}, t)\eta_B(\mathbf{x}, t) + (1 - \phi(\mathbf{x}, t))\eta_A(\mathbf{x}, t) \quad \text{ou} \quad \eta(\phi) = \frac{\eta_A \eta_B}{\phi(\mathbf{x}, t)\eta_A + (1 - \phi(\mathbf{x}, t))\eta_B} \quad (5.9)$$

La seconde méthode d'interpolation (reprise de [43]) utilise le principe des moyennes harmoniques et elle est appliquée lorsque le rapport des viscosités augmente.

5.4 LBM pour les modèles NS/CH et NS/CAC

Suite à la synthèse des méthodes LB pour le modèle NS/CH, on présente une méthode mixte entre les deux références [105] pour l'équation de NS et [192, 204] pour l'équation de CH.

5.4.1 LBM pour les équations NS

Le schéma pour la simulation des équations de Navier-Stokes est le suivant :

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_f(\mathbf{x}, t)} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] + \Delta t F_i(\mathbf{x}, t), \quad (5.10a)$$

$$f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = w_i \left[p + \rho(\phi) c_s^2 \left(\frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right) \right], \quad (5.10b)$$

$$F_i(\mathbf{x}, t) = (\mathbf{c}_i - \mathbf{u}) \cdot [\nabla \rho c_s^2 (\Gamma_i - \Gamma_i(\mathbf{0})) - \phi \nabla \mu_\phi \Gamma_i]. \quad (5.10c)$$

Ici on suppose que $\mathbf{F}_v = \mathbf{0}$ et on se restreint au réseau D3Q19. Pour ce réseau, les 18 directions de déplacement de chaque fonction f_i sont représentées sur la Fig. 2.3b. Les valeurs des poids sont $w_0 = 1/3$, $w_{i=1,\dots,6} = 1/18$ et $w_{i=7,\dots,18} = 1/36$. Dans le terme force microscopique F_i (Eq. (5.10c)), la fonction $\Gamma_i(\mathbf{x}, t) \equiv \Gamma_i$ est donnée par :

$$\Gamma_i = w_i \left(1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}{2c_s^2} \right), \quad (5.10d)$$

qui correspond à un facteur ρ près à la fonction de distribution à l'équilibre standard. $\Gamma_i(\mathbf{0})$ signifie que la vitesse est considérée nulle ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) et correspond donc aux valeurs des poids w_i . Plusieurs autres formes de F_i sont possibles (voir [10, chap. 6]). Dans les Eqs. (5.10b) et (5.10c), le coefficient c_s vaut $c_s = (1/\sqrt{3})c$ où $c = \Delta x/\Delta t$. Enfin le coefficient $\tau_f(\mathbf{x}, t)$ est relié à la viscosité cinématique $\nu(\mathbf{x}, t) \equiv \nu$ par : $\nu = (1/3)(\tau_f - 1/2)\Delta x^2/\Delta t$. La viscosité cinématique est interpolée par l'une des deux relations (5.9). Les autres quantités physiques sont calculées à l'aide des relations suivantes [105] :

$$\rho \mathbf{u} = \frac{1}{c_s^2} \sum_i f_i \mathbf{c}_i - \frac{\Delta t}{2} \phi \nabla \mu_\phi \quad \text{et} \quad p = \sum_i f_i + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla \rho c_s^2 \quad (5.10e)$$

La fonction de distribution à l'équilibre (Eq. (5.10b)) est celle qui correspond à un schéma LBE d'un fluide incompressible. Elle a été établie dans [45], puis reprise et adaptée aux écoulements diphasiques dans [210, 202, 104]. Le terme force microscopique (Eq. (5.10c)) n'est pas standard. Plusieurs formulations existent dans la littérature pour tenir compte de la force externe dans les équations NS (voir [12] pour une synthèse des différentes méthodes). Cette forme est celle issue de l'intégration de l'équation de Boltzmann continue avec l'approximation de f_i par f_i^{eq} dans le terme de force. Après intégration et approximation de l'intégrale par la formule du trapèze, on aboutit à ce terme force microscopique [211]. La méthode a été mise en œuvre dans [210] pour les instabilités de Rayleigh-Taylor.

5.4.2 LBM pour l'équation du champ de phase

Équation de Boltzmann sur réseau. L'équation discrète de Boltzmann s'écrit :

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) = g_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau_g(\mathbf{x}, t)} [g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{eq}(\mathbf{x}, t)] \quad (5.11)$$

Le champ de phase ϕ est calculé par le moment d'ordre 0 : $\phi = \sum_i g_i$.

Fonction à l'équilibre pour le modèle de Cahn-Hilliard. La fonction à l'équilibre pour la simulation de l'équation de Cahn-Hilliard est la suivante :

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{A}_i(\phi, \mu_\phi) + 3\phi w_i \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad \text{avec} \quad \mathcal{A}_i(\phi, \mu_\phi) = \begin{cases} \phi - 3\mu_\phi(1 - w_0) & \text{si } i = 0 \\ 3w_i \mu_\phi & \text{si } i \neq 0 \end{cases} \quad (5.12)$$

L'Eq. (5.12) est la fonction de distribution à l'équilibre standard pour la simulation d'une ADE. La différence entre l'ADE et l'équation de Cahn-Hilliard provient du terme en laplacien du potentiel chimique. Le moment d'ordre 2 de la fonction de distribution à l'équilibre doit être égale à $M_\phi \Delta \mu_\phi$ alors que ses moments d'ordre 0 et 1 doivent être égaux à ϕ et $\mathbf{u} \phi$ respectivement. La fonction g_i^{eq} est donc celle d'une ADE à la différence des coefficients \mathcal{A}_i . Pour une ADE classique les \mathcal{A}_i sont identifiés à ϕ . Ici, on peut vérifier que le moment d'ordre 0 est bien égal à ϕ en faisant la somme sur i des $w_i \mathcal{A}_i$: les termes en μ_ϕ de la première et seconde ligne de s'annulent en pondérant μ_ϕ de la première ligne par $(1 - w_0)$. Son moment d'ordre 2 vaut quant à lui μ_ϕ . Le potentiel chimique nécessite le calcul du laplacien de la composition $\nabla^2 \phi$ qui est calculé par la méthode des dérivées directionnelles (voir chapitre 3) [105] :

$$(\mathbf{e}_i \cdot \nabla)^2 h \Big|_{\mathbf{x}} = \frac{\phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x) - 2\phi(\mathbf{x}) + \phi(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i \Delta x)}{\Delta x^2} \quad \text{et} \quad \nabla^2 \phi \Big|_{\mathbf{x}} = 3 \sum_{i \neq 0} w_i (\mathbf{e}_i \cdot \nabla)^2 \phi \Big|_{\mathbf{x}}. \quad (5.13)$$

Fonction à l'équilibre pour le modèle Conservatif de Allen-Cahn. L'équation CAC ressemble à une ADE (Eq. (2.7)) avec un terme de flux supplémentaire $-\nabla \cdot (4M_\phi \phi(1-\phi)\mathbf{n}/\xi)$. Sa fonction à l'équilibre est donc celle de l'ADE (Eq. (2.9)) à laquelle est ajouté le terme qui tient compte du flux de séparation de phase :

$$g_i^{eq}(\mathbf{x}, t) = \phi w_i \left[1 + \frac{\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} \right] + w_i M_\phi \left[\frac{4}{\xi} \phi(1-\phi) \right] \frac{(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n})}{c_s^2} \quad (5.14)$$

Le coefficient de mobilité est défini par $M_\phi = (1/3)(\tau_g - 1/2)(\Delta x^2/\Delta t)$.

Remarque sur l'introduction d'un coefficient pour contrôler la mobilité. Dans certaines publications (e.g. [192, 203]), un coefficient Γ apparaît dans la fonction d'équilibre qui permet de contrôler la mobilité M_ϕ de l'équation de Cahn-Hilliard tout en la découplant du coefficient de relaxation τ_g . En effet pour une collision BGK classique, le coefficient de mobilité est relié au taux de collision par une relation du type : $M_\phi = (1/3)(\tau_g - 1/2)(\Delta x^2/\Delta t)$. Cette relation impose une contrainte sur les valeurs de M_ϕ car le taux de collision τ_g est directement impliqué dans la stabilité du schéma. Lorsque la valeur de τ_g est trop proche de $1/2$ l'algorithme devient instable. Pour éviter cela, les auteurs introduisent un coefficient Γ dans la fonction d'équilibre via les coefficients \mathcal{A}_i [192, Eq. (18)] et la modification est associée à une collision non locale [192, Eq. (7)]. Le paramètre Γ permet de contrôler la mobilité ([192, Eq. (15)]). Néanmoins, les paramètres supplémentaires des collisions TRT et MRT sont des alternatives pour contrôler la stabilité de la méthode, pistes que l'on privilégiera à l'avenir.

5.4.3 Validations

On présente ici trois validations de la programmation de ces schémas. Dans la première validation, on vérifie que le contour d'un disque fendu est bien conservé à l'intérieur d'un fluide tournant [212]. Dans la seconde, on vérifie que la simulation retrouve bien un cercle quand cette condition initiale est déformée à l'intérieur d'un vortex qui change de sens de rotation au cours de la simulation. Enfin la troisième validation est relative aux équations de Navier-Stokes sur le cas test du double-poiseuille. Pour les simulations LBM qui suivent, on considère un domaine de longueurs $L_x = 1, L_y = 1, L_z = 0.01$ discrétisé en $N_x = 201, N_y = 201, N_z = 3$ nœuds. Les simulations sont en quasi-2D c'est-à-dire que le nombre de nœuds en z est très petit par rapport aux deux autres directions. Le pas d'espace vaut $\Delta x = 5 \times 10^{-3}$ et le pas de temps $\Delta t = 10^{-4}$. Le réseau est le D3Q19 et les conditions aux limites sont périodiques pour toutes les faces du domaine.

Disque fendu de Zalesak. À l'intérieur d'un domaine de longueurs $L_x = 1, L_y = 1, L_z = 0.01$, un disque est initialisé par : $\phi(\mathbf{x}, 0) = [1 + \tanh((R - d_c)/\sqrt{2W})]/2$ avec $d_c = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2 + (z - z_c)^2}$, $\mathbf{x}_c = (100, 100, 1)^T$, $W = 2$ et $R = 80$ (Fig. 5.7). Toutes les valeurs sont données en unités de réseau (1.u.). Le disque diffus est fendu en imposant $\phi(\mathbf{x}, 0) = 0$ si $x_c - R/6 \leq x \leq x_c + R/6$ et $y_c - 1.1R \leq y \leq y_c$. Les composantes de la vitesse sont imposées par $u_x(\mathbf{x}) = u_0(2y - 1)$, $u_y(\mathbf{x}) = u_0(1 - 2x)$ et $u_z(\mathbf{x}) = 0$. u_0 est choisi tel que le disque fendu effectue un tour complet sur lui-même à $T_f = 4$: $u_0 = 0.7853975$. Les deux paramètres du modèle conservatif de Allen-Cahn sont fixés à $M_\phi = 2 \times 10^{-2}$ et $W = 0.015$. Les résultats sont présentés pour quatre temps sur la Fig. 5.8a pour le modèle CAC et la Fig. 5.8b pour le modèle CH. Sur cette dernière, on remarque qu'à T_f le contour $\phi = 0.5$ (en bleu) se compare bien à celui de la condition initiale (en noir) bien que les coins sont légèrement plus arrondis que ceux arrondis obtenus avec CAC (en rouge).

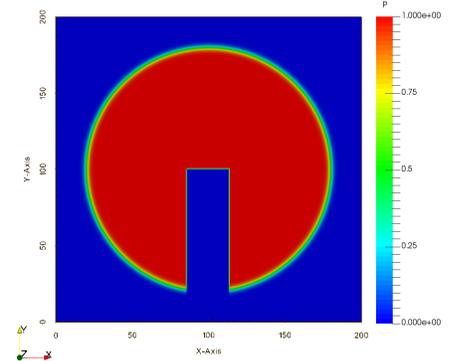


FIGURE 5.7 – Condition initiale du disque fendu de Zalesak.

Vortex. Dans ce cas test on considère un disque diffus centré en $\mathbf{x}_c = (100, 60, 1)$ avec $W = 2$ et $R = 40$ l.u. qui est déformé à l'intérieur d'un vortex 2D défini par $u_x(\mathbf{x}) = -u_0 \cos[\pi(x - 0.5)] \sin[\pi(y - 0.5)]$, $u_y(\mathbf{x}) = u_0 \sin[\pi(x - 0.5)] \cos[\pi(y - 0.5)]$ et $u_z(\mathbf{x}) = 0$. Ces composantes de la vitesse imposent un sens de rotation qui est inverse aux aiguilles d'une montre. Les paramètres sont $T_f = 4$, $\xi = 0.03$ et $M_\phi = 5 \times 10^{-4}$. Les iso-valeurs $\phi = 0.5$ de la condition initiale et les lignes de courant sont présentées sur la Fig. 5.9a pour $u_0 = 0.7853975$. Sur la Fig. 5.9a, pour $t = T_f/2$ et $t = T_f$, les contours noirs $\phi = 0.5$ sont comparables à ceux présentés dans la référence [197]. On modifie maintenant la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ en la multipliant par un facteur qui dépend du temps : $\mathbf{u}'(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{x}) \times \cos(\pi t/2T_f)$. Avec ce nouveau facteur, quand $t = T_f$ la fonction cosinus annule la vitesse \mathbf{u}' et quand $t > T_f$, le signe change et le sens de rotation devient celui des aiguilles d'une montre. Comme attendu, à la fin de la simulation à $t = 2T_f$, l'enveloppe $\phi = 0.5$ est similaire à celle de la condition initiale pour les deux modèles CAC (Fig. 5.9b) et CH (Fig. 5.9c) malgré une très légère déformation pour ce dernier.

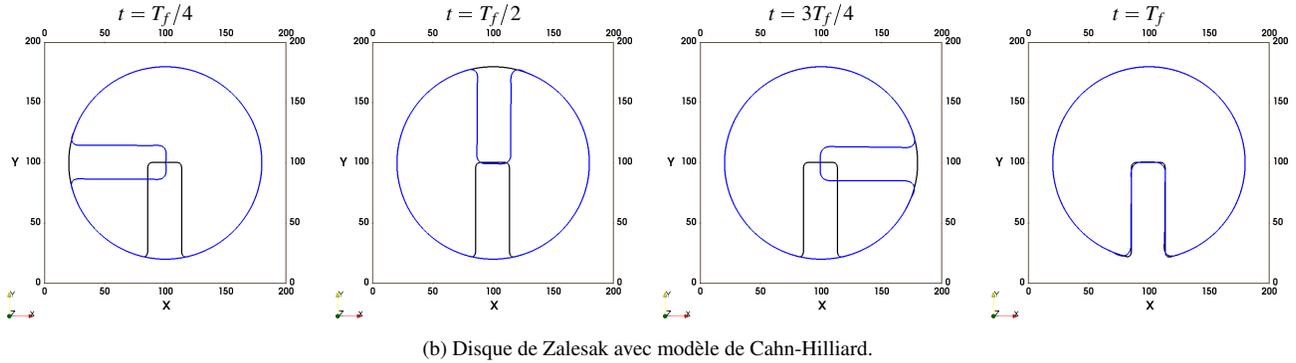
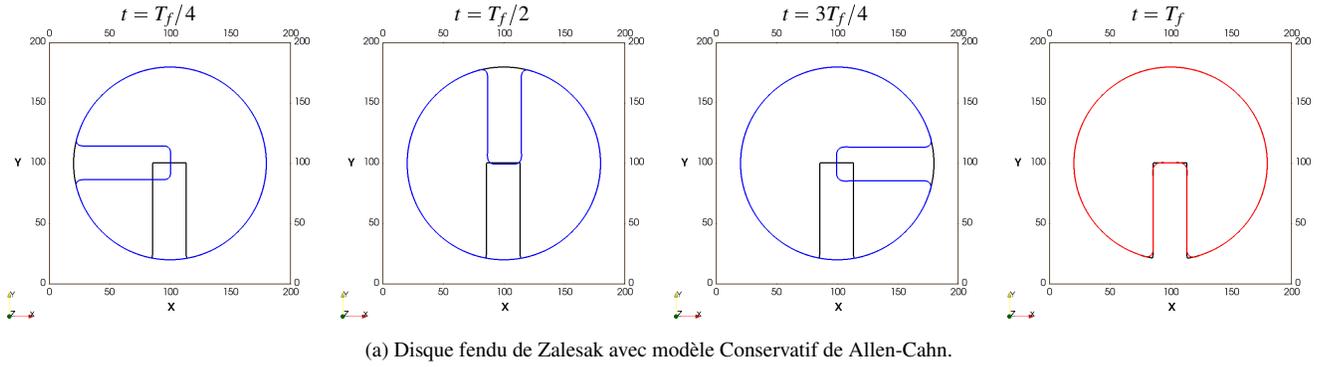


FIGURE 5.8 – Validation sur le cas test du disque de Zalesak. (a) Iso-valeur $\phi = 0.5$ du modèle Conservatif de Allen-Cahn en plusieurs temps. (b) $\phi = 0.5$ du modèle de Cahn-Hilliard aux mêmes temps (d'après [R1], 2019).

Double-Poiseuille. La mise en œuvre numérique du Navier-Stokes est validée avec la solution analytique du double-Poiseuille [186, 43] :

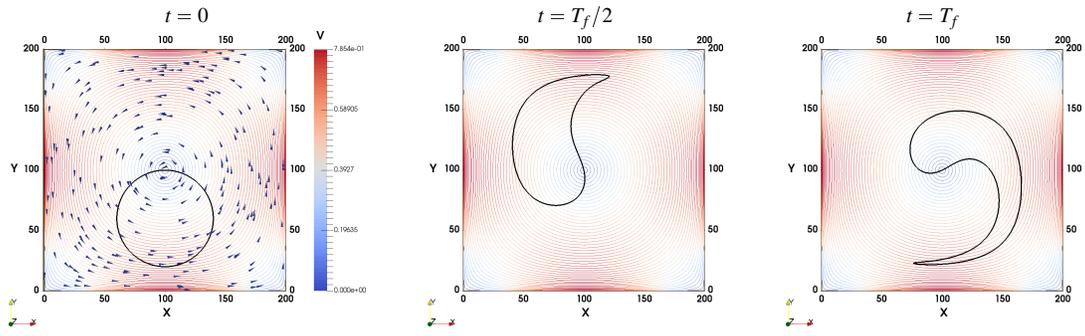
$$u_x(y) = \begin{cases} \frac{Gh^2}{2\eta_A} \left[-\left(\frac{y}{h}\right)^2 - \frac{y}{h} \left(\frac{\eta_A - \eta_B}{\eta_A + \eta_B} \right) + \frac{2\eta_A}{\eta_A + \eta_B} \right] & \text{si } 0 \leq y \leq h \\ \frac{Gh^2}{2\eta_B} \left[-\left(\frac{y}{h}\right)^2 - \frac{y}{h} \left(\frac{\eta_A - \eta_B}{\eta_A + \eta_B} \right) + \frac{2\eta_B}{\eta_A + \eta_B} \right] & \text{si } -h \leq y \leq 0 \end{cases} \quad (5.15)$$

où η_A et η_B sont les viscosités dynamiques et $2h$ est la largeur du canal. Le gradient de pression est remplacé par un terme force défini par $\mathbf{F} = (G, 0, 0)$ où $G = u_c(\eta_A + \eta_B)/h^2$ et $u_c = 5 \times 10^{-5}$. Pour la simulation LB, le maillage est composé de $101 \times 101 \times 3$ nœuds et $\rho_A = \rho_B = 1$. Des conditions aux limites périodiques sont imposées sur toutes les limites du domaine à l'exception des plans de vecteur normal dirigé selon l'axe des y où des conditions de non-glissement sont imposées. La méthode du « half bounce-back » est appliquée. Deux couches de différente viscosité sont définies comme condition initiale pour ϕ : $\phi(\mathbf{x}, 0) = \tanh[(y_0 - y)/W]/2$ où $W = 4\Delta x$ contrôle la pente de la tangente hyperbolique et $y_0 = (y_{max} + y_{min})/2$. Le coefficient de mobilité est fixé égal à $M_\phi = 0.1$. Des comparaisons entre le code LBM et la solution analytique sont présentées sur la Fig. 5.10 pour trois rapports de viscosité : $\eta_B/\eta_A = 3, 5, 10$ respectivement. Pour chaque rapport, les viscosités cinématiques ont été fixées à $\nu_A = 0.1$ et $\nu_B = 0.3$; puis $\nu_A = 0.07$ et $\nu_B = 0.35$ et $\nu_A = 0.01$ et $\nu_B = 0.1$. Ce cas test valide le schéma LBM pour les équations de Navier-Stokes.

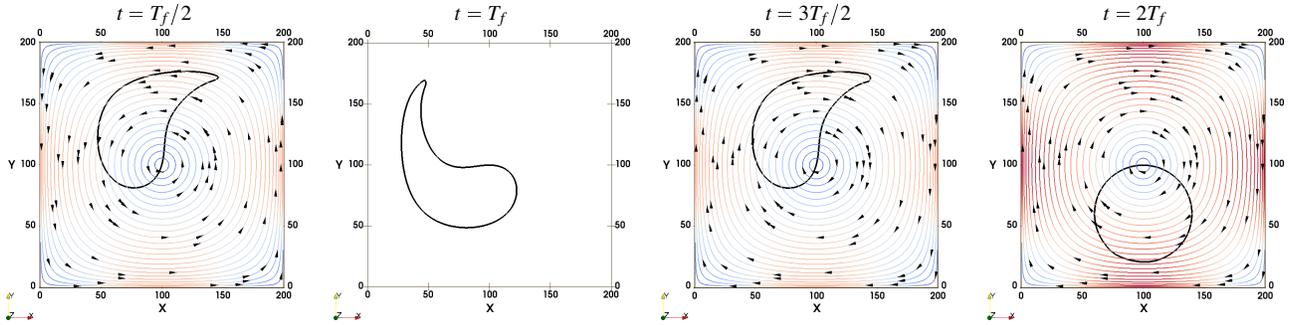
5.5 Simulations de la démixtion d'un mélange binaire

Dans cette section on présente quelques simulations qui illustrent l'influence de la composition moyenne du mélange initial sur les modes démixtion d'un système binaire. L'extension au système vitreux ternaire sera réalisée dans le cadre d'une thèse qui doit débuter en octobre 2019. Le sujet est brièvement présenté dans la section 5.6.

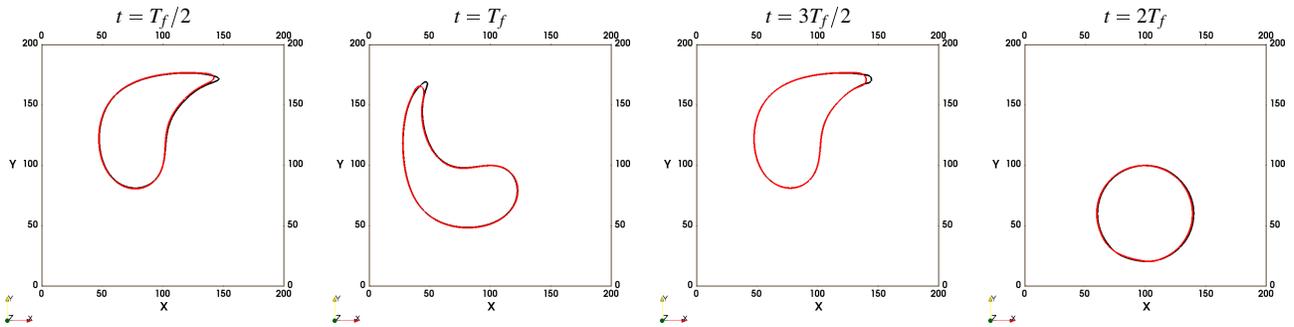
Les simulations de cette section ont pour but d'étudier l'influence de la condition initiale de l'équation de Cahn-Hilliard sur la cinétique de séparation des deux phases. Pour cela, un domaine de dimensions $L_x = 1.5, L_y = 0.025$ et $L_z = 1.5$ est discrétisé en $301 \times 6 \times 301$ nœuds. Le pas d'espace vaut $\Delta x = 0.005$ et le pas de temps est fixé à $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$. Pour l'équation CH, l'épaisseur de l'interface est fixée à $W = 0.01$, la tension interfaciale à $\sigma = 5 \times 10^{-5}$ et la mobilité à $M_\phi = 0.01$. Pour les



(a) Contour $\phi = 0.5$ aux temps $t = 0, t = T_f/2$ et $t = T_f$ dans le champ des vitesses \mathbf{u} .



(b) Déformation de l'interface dans un vortex défini par le champ des vitesses $\mathbf{u}' = \mathbf{u} \times \cos(\pi t/2T_f)$.



(c) Comparaisons entre le modèle conservatif de Allen-Cahn (noir) et celui de Cahn-Hilliard (rouge) dans le champ des vitesses \mathbf{u}' .

FIGURE 5.9 – Contour $\phi = 0.5$ en différents temps dans le champ des vitesses (a) \mathbf{u} et (b, c) \mathbf{u}' (d'après [R1], 2019).

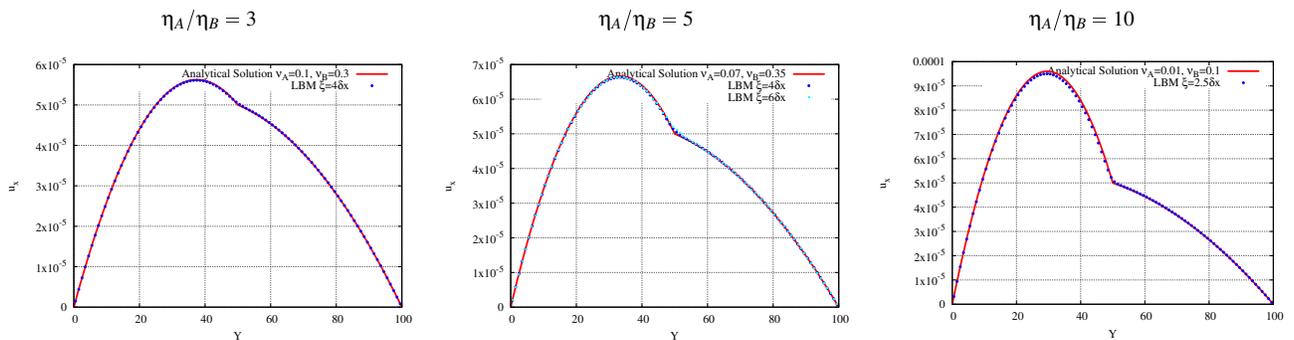


FIGURE 5.10 – Validation de la LBM avec la solution analytique du double-Poiseuille pour trois rapports de viscosité (d'après [R1], 2019).

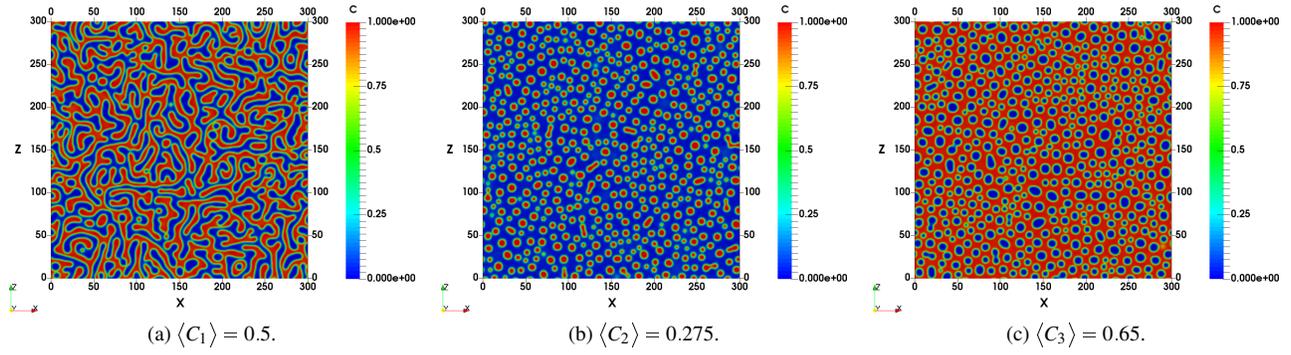


FIGURE 5.11 – Effet des mélanges initiaux (a) M_1 , (b) M_2 et (c) M_3 sur le champ $C(\mathbf{x}, t)$ au temps $t = 5 \times 10^4 \Delta t$.

équations NS, les densités sont identiques $\rho_A = \rho_B = 1$, au même titre que la viscosité cinématique $\nu_A = \nu_B = 0.1$, la vitesse initiale est nulle et les effets de gravité sont négligés. Les réseaux D3Q19 et D3Q7 sont respectivement utilisés pour les équations NS et celle de CH, et les conditions aux limites sont périodiques sur toutes les faces pour les deux équations. La cinétique de démixtion est simulée pour cinq mélanges M_i (pour $i = 1, \dots, 5$) initialisés comme suit.

Séparation de phase : mélanges M_1 , M_2 et M_3 . Pour initialiser le mélange M_1 on attribue à chaque nœud du maillage une valeur aléatoire tirée d'une distribution uniforme et comprise entre 0 et 1. La composition initiale moyenne vaut $\langle C_1 \rangle = 0.5$ et les espèces A et B apparaissent en quantité équivalente.

Pour le mélange M_2 , on parcourt l'ensemble des nœuds du maillage et on impose tous les 10 sites une valeur $C_2 = (9 + r)/10$ où r est une valeur tirée aléatoirement d'une distribution uniforme et comprise entre 0 et 1. Les valeurs $C(\mathbf{x}, 0)$ des autres nœuds sont fixées à $C'_2 = 4r/10$. Avec cette façon de procéder, $N_t/10$ nœuds du maillage a une composition fixée à C_2 dont la valeur est comprise entre 0.9 et 1, ce qui signifie que sur ces nœuds, la proportion de phase B est plus importante. Sur les $9N_t/10$ des autres nœuds la composition est fixée à C'_2 dont la valeur est comprise entre 0 et 0.4 et sur ces nœuds la proportion de phase A est plus importante. La composition moyenne de cette condition initiale vaut $\langle C_2 \rangle = 0.275$.

Pour le mélange M_3 , on utilise la même méthode en imposant maintenant tous les 5 sites une valeur $C_3 = r/10$ et sur les autres nœuds $C'_3 = (4r + 6)/10$. Cette fois, $N_t/5$ nœuds a une composition fixée à C_3 (avec $0 \leq C_3 \leq 0.1$) et les $4N_t/5$ nœuds restants sont imposés à la composition C'_3 avec ($0.6 \leq C'_3 \leq 1$). La composition moyenne de cette condition initiale vaut $\langle C_3 \rangle = 0.65$.

L'effet de ces conditions initiales sur la composition au temps $t = 5 \times 10^4 \Delta t$ est présentée sur la Fig. 5.11 pour chacun des trois mélanges. Sur la Fig. 5.11a la quantité de A et de B apparaissent en proportion égale, le motif présente deux zones distinctes et chacune d'elles coalesce et grossit. Pour le mélange M_2 le fluide B (en rouge), qui apparaît en plus faible quantité, forme des « gouttelettes » qui coalescent dans le fluide A (en bleu). Pour le mélange M_3 , c'est l'inverse qui se produit : le fluide A (en bleu) forme des « gouttelettes » dans le fluide B (en rouge).

Condition initiale gaussienne : mélange M_4 . Pour cette simulation, on impose sur tous les nœuds du maillage une composition égale à $C_4^a = 3r/10$ où r est toujours un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 et qui suit une distribution uniforme. En chaque nœud, la composition est comprise entre 0 et 0.3. Ensuite, sur 10% du nombre total de nœuds, on impose une autre valeur $C_4^b = (9 + r)/10$. La composition moyenne initiale de ce mélange vaut $\langle C_4 \rangle = 0.23$. Les positions x, y et z de ces nœuds sont obtenues par tirage de trois autres nombres aléatoires r_x, r_y et r_z . Les nombres aléatoires r_x et r_z suivent des lois de distribution gaussiennes tandis que r_y est uniformément distribué. Les valeurs moyennes des gaussiennes correspondent au centre du domaine x_c et z_c et l'écart à la moyenne est fixée à 45 nœuds. La condition initiale est présentée sur la figure 5.12 à $t = 0$ sur laquelle on constate une composition plus élevée à l'intérieur d'un disque circulaire positionné au centre du domaine. L'évolution du champ de composition est indiquée sur les cinq figures qui suivent où on constate que la phase B, en plus faible quantité, forme des gouttelettes dans le fluide A. Celles-ci grossissent par coalescence avec d'autres gouttelettes déjà formées et par diffusion de l'espèce B vers elles qui appauvrit localement la composition en B : une zone bleue apparaît autour des gouttes rouges.

Nucléation-Croissance : mélange M_5 . Dans cette simulation, on impose sur tous les nœuds du maillage une composition constante égale à $C_5 = 0.2$. Ensuite, sur 3% du nombre total de nœuds, on impose une autre valeur $C'_5 = (9 + r)/10$ où r est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1 et qui suit une distribution uniforme ($0.9 \leq C'_5 \leq 1$). Les positions x, y et z de ces nœuds sont obtenues par tirage de trois autres nombres aléatoires r_x, r_y et r_z , eux aussi distribués uniformément. La composition initiale moyenne du mélange M_5 vaut $\langle C_5 \rangle = 0.264$ qui est très proche de celle du mélange M_2 ($\langle C_2 \rangle =$

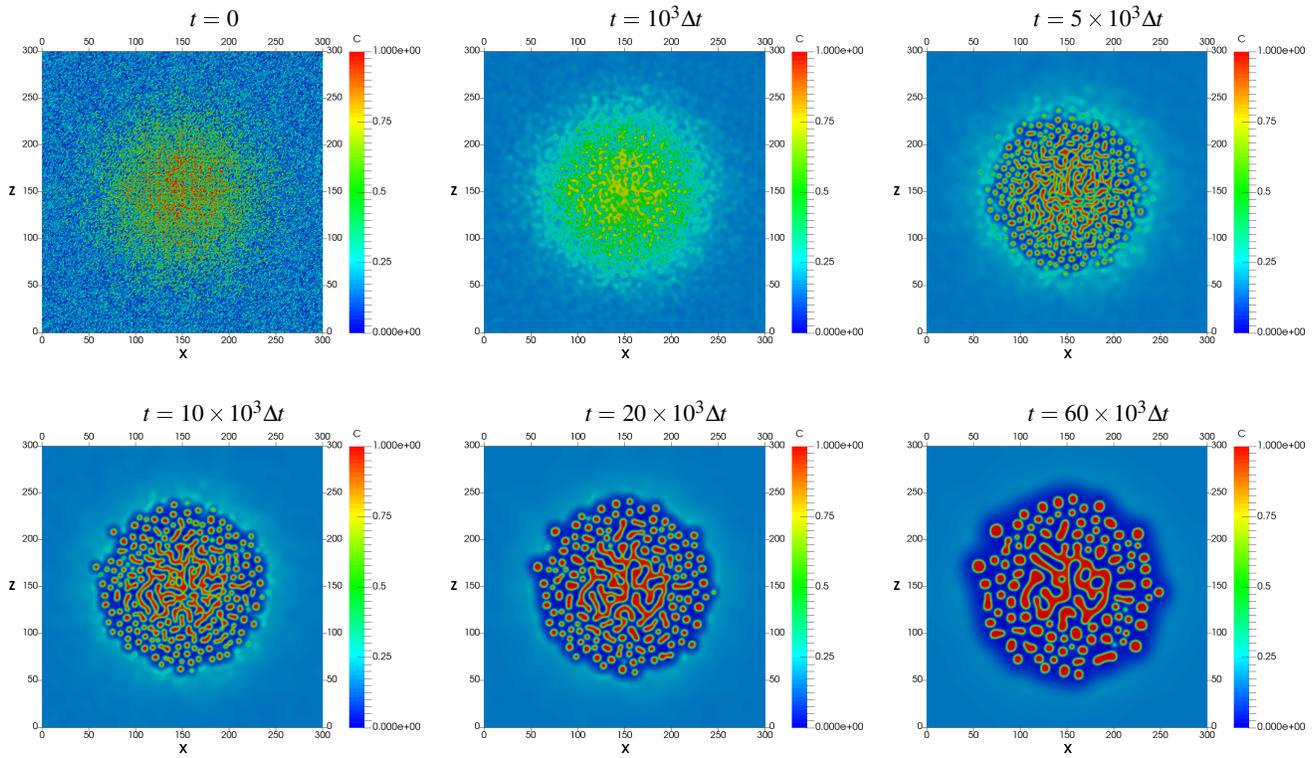


FIGURE 5.12 – Séparation de phase du mélange M_4 avec condition initiale distribuée de manière gaussienne.

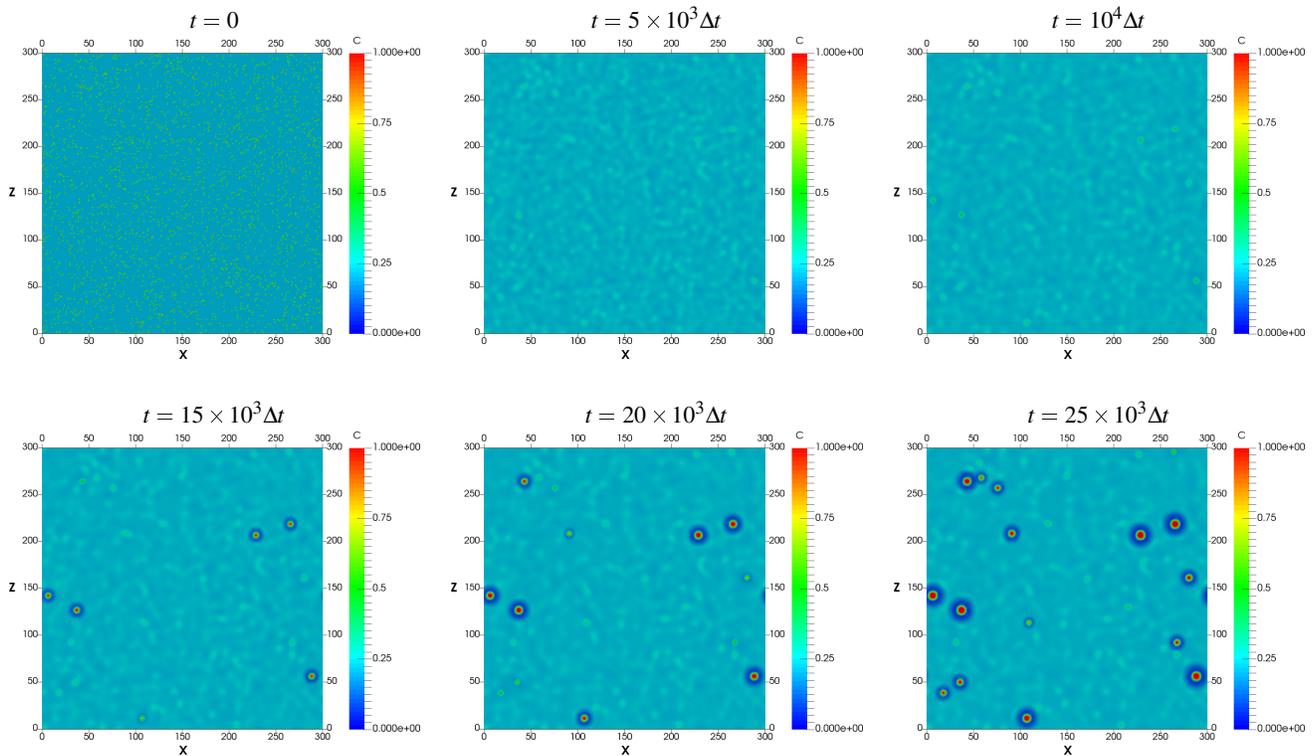


FIGURE 5.13 – Nucléation – croissance : mélange initial de 3% de la phase B dans le mélange.

0.275), mais, contrairement à ce dernier, seuls 3% des sites ont une composition proche de 1. Ces nœuds sont des sites de nucléation privilégiés de la phase B (en rouge sur la Fig. 5.13 à $t = 15 \times 10^3 \Delta t$) et vers lesquels la phase B « diffuse » et croît ($t = 25 \times 10^3 \Delta t$). Comme pour le mélange M_4 , une zone bleue foncée apparaît autour de la phase B et qui correspond à la phase A.

5.6 Pour aller plus loin

Les principales perspectives de ce travail concernent l’extension du modèle « Navier-Stokes/Champ de phase » pour simuler des fluides ternaires. Les modèles envisagés diffèrent légèrement selon que l’application visée est relative à la démixtion dans les verres (section 5.6.1) ou aux fluides super-critiques (section 5.6.2). En LBM, quelques articles présentent déjà des simulations de fluides ternaires en introduisant deux équations de Cahn-Hilliard [213, 214, 207] (modèle repris ou adapté de [215, 216]), ou bien en triplant les équations de conservation de masse et de quantité de mouvement [217, 218], ou encore en agissant sur les lois d’état [219].

5.6.1 Perspectives : thèse sur la « démixtion d’un système vitreux ternaire »

Un sujet de thèse est proposé (début en octobre 2019, directeur de thèse officiel M. PLAPP) pour étudier la démixtion d’un système vitreux ternaire constitué de $\text{SiO}_2\text{-Na}_2\text{O-MoO}_3$ et pour lequel le diagramme des phases a déjà été caractérisé à la fois expérimentalement et par modélisation thermodynamique CALPHAD (voir Fig. 5.14 issue de [179, page 65]). Sur cette figure, les points représentent les observations expérimentales tandis que les lignes vertes représentent les modélisations CALPHAD. Sur la base de l’enthalpie libre (énergie de Gibbs) déjà disponible par la modélisation thermodynamique, le travail de thèse consiste à formuler un modèle mathématique qui couple deux équations de type champ de phase (Cahn-Hilliard et Allen-Cahn conservatif). Ces deux équations seront couplées aux équations de Navier-Stokes. La première année sera dédiée au développement du modèle théorique (travail sur la fonctionnelle d’énergie libre et nécessitera une modélisation des termes de couplage entre ces quatre équations (masse, quantité de mouvement et les deux équations à champ de phase)). La seconde année sera consacrée à la simulation de ce modèle par LBM et la troisième année sera consacrée à la valorisation des résultats. Les développements informatiques seront mis en œuvre dans un nouveau code LBM spécialement conçu pour sa « portabilité de performance » dans un contexte HPC (voir chapitre 6). Le sujet de thèse est mis en visibilité avec le label « thèse phare amont-aval » [220].

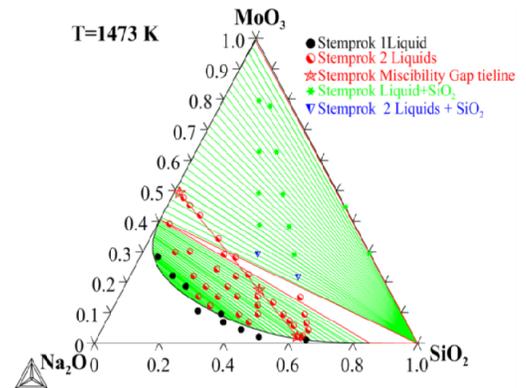


FIGURE 5.14 – Diagramme des phases du système ternaire $\text{SiO}_2\text{-Na}_2\text{O-MoO}_3$ (d’après [179]).

5.6.2 Fluides super-critiques avec oxydant

Au CEA, des services possèdent des dispositifs expérimentaux qui sont dédiés au traitement des déchets. Celui-ci peut se réaliser à l’aide de systèmes micro-fluidiques (au DPC à Saclay) [221, 222], ou bien par un procédé d’oxydation qui utilise de l’eau super-critique (au DE2D à Marcoule). Dans ce dernier, les déchets sont injectés avec de l’eau et un oxydant (qui peut être du H_2O_2 ou du O_2 ou de l’air) dans un réacteur sous pression et sous température permettant d’oxyder (ou minéraliser) les organiques. Après dépressurisation on récupère un effluent gazeux (constitué de CO_2) et un effluent liquide (avec des sels de radioéléments dissous) [223]. Les conditions de température et de pression sont au-delà du point critique de l’eau, c’est-à-dire des conditions telles que l’eau se trouve dans un état qui n’est ni liquide ni vapeur mais dans un état super-critique (voir le diagramme des phases de l’eau dans [224, Chap. 1 page 8]). Une approche de modélisation qui est bien adaptée à l’étude de la transition de phase autour du point critique (passage du fluide super-critique au fluide sous-critique) est basée sur la modification de la loi d’état qui n’est plus celle des gaz parfaits. Sur ce procédé, un travail sur la thermodynamique à ces conditions de température et de pression a déjà été réalisé [224] ainsi que des simulations d’écoulements avec une loi d’état de Peng-Robinson avec le code *Fluent*[®] [225]. Des simulations d’un fluide proche du point critique ont également été réalisées par une approche Navier-Stokes/Cahn-Hilliard dans [226]. Pour la prise en compte de différentes lois d’état par méthode LB, les méthodes « pseudo-potentielles » (à la « Shan-Chen » [48]) sont bien adaptées et les principales lois d’état ont déjà été simulées par cette méthode dans [227]. Pour cette application, une direction de travail pourrait coupler une approche avec une loi d’état pour tenir compte de la phase fluide sous-critique, avec un modèle à champ de phase pour tenir compte de l’oxydant en phase gazeuse. Ces deux approches sont cohérentes entre elles car elles considèrent toutes les deux une interface diffuse. Pour la phase fluide sous-critique c’est la densité qui joue le rôle d’indicatrice de phase tandis que pour le mélange fluide/gaz, c’est la composition qui joue ce rôle.

Chapitre 6

Travaux en cours et perspectives

6.1 Introduction

Les modèles mathématiques des chapitres précédents se présentent sous la forme de plusieurs EDPs couplées entre elles. Lorsque le maillage comporte un nombre de nœuds qui devient important (e.g. supérieur à 300^3), leurs simulations numériques en des temps « raisonnables » (de quelques heures à quelques jours de calculs) nécessitent des puissances de calcul qu’offrent les super-calculateurs. Pour en tirer avantage, il est nécessaire d’adapter les codes de calcul à ces architectures, ou mieux, d’optimiser les développements à leurs caractéristiques matérielles pour réaliser des « Calculs Haute Performance » (High Performance Computing – HPC). Adapter un code pour le HPC peut se faire de différentes façons car plusieurs types d’architectures HPC sont disponibles : les calculateurs multi-CPU (Central Processing Units) et les calculateurs multi-GPU (Graphics Processing Units). Sur les premiers, les calculs sont réalisés par des processeurs classiques tandis que sur les seconds, les calculs sont réalisés sur des cartes graphiques qui possèdent leurs propres instructions et langages de programmation. De plus, pour une même architecture, par exemple les CPU, plusieurs méthodes sont possibles pour « paralléliser » un code selon que l’on cherche à l’exécuter sur plusieurs cœurs d’un même processeur (mémoire partagée) ou bien sur plusieurs processeurs (mémoire distribuée), ou mieux sur plusieurs cœurs de plusieurs processeurs.

Au DM2S, le développement des codes HPC basés sur la LBM s’est concentré sur la simulation *i*) des écoulements et du transport dans les « milieux poreux » (voir les références de la section 4.5) et sur *ii*) les problèmes décrits dans les chapitres 3, 4 et 5 de ce document. Sur chacun de ces deux points, deux codes dédiés aux plateformes CPU ont été développés et ont mis en œuvre les deux stratégies de parallélisation mentionnées ci-dessus. Le premier est un code 3D écrit en C et parallélisé avec OpenMP (mémoire partagée), tandis que le second est un code 3D écrit en Fortran90 et parallélisé avec MPI (mémoire distribuée). Ce dernier a brièvement été décrit dans la section 2.3.2. De plus, des « maquettes » dédiées ont aussi été développées afin de tester les performances des codes LBM exécutés sur des GPU. La première maquette, en 3D, est écrite en CUDA et la seconde, en 2D, est écrite en OpenCL. Chacun de ces codes est optimisé sur une plate-forme spécifique et rend difficile leur maintenance. Au travers de tous ces développements et études successifs, un savoir-faire s’est développé sur la LBM et sur quelques-unes de ses applications. Cependant l’inventaire des outils de simulation montre une grande hétérogénéité des codes en termes de langage informatique (C, Fortran, CUDA, OpenCL), de méthode de parallélisation (OpenMP, MPI) et d’architecture ciblée pour l’exécution de ces codes (CPU et GPU).

Afin de mutualiser les efforts de développement et de partager le retour d’expérience des difficultés spécifiques à chaque application, les activités se structurent actuellement autour d’un nouveau code de calcul LBM conçu pour le HPC (section 6.2). Cet outil a pour vocation d’être exécuté sur des super-calculateurs du CEA mais aussi sur des calculateurs d’autres infrastructures (section 6.2.1). La simplicité de mise en œuvre de la LBM permet de se concentrer sur la « portabilité de performance » du code, c’est-à-dire la possibilité d’exécuter un même code source sur différentes architectures et tout en maintenant de très bonnes performances sur chacune d’elles. Cette portabilité doit nécessiter un effort relativement faible pour l’adapter d’une architecture à l’autre, pour permettre un haut niveau de productivité développeur. Pour cela, ce nouveau code est écrit en C++ et s’appuie sur les fonctionnalités de la bibliothèque Kokkos pour la portabilité de performance (section 6.2.2). Des comparaisons des temps de calculs sont présentées entre les plate-formes CPU et GPU sur un cas simplifié de diffusion (section 6.2.3). Dans ce code, le modèle qui est programmé et validé est composé des équations de Navier-Stokes couplées au modèle Conservatif de Allen-Cahn qui ont été introduites dans le chapitre 5. Dans la section 6.3, on présente le travail qui est en cours sur l’extension de ce modèle pour l’étude du changement de phase liquide-gaz.

Dans le travail actuel, les gains en temps de calculs se réalisent par la parallélisation du code exécuté sur des super-calculateurs. Une autre voie complémentaire consiste à répartir les nœuds dans les zones d’intérêt du calcul tout en diminuant leur nombre total. Par exemple pour l’équation du champ de phase, la zone d’intérêt est celle située à l’interface entre les deux phases qui doit être maillée finement tandis que les zones homogènes peuvent être maillées grossièrement. Il s’agit du raffinement et déraffinement du maillage au cours de la simulation (LBM sur maillage adaptatif). Cette direction de travail

est l'une des perspectives présentée dans la section 6.4 qui décrira aussi d'autres pistes d'applications de modèles à champ de phase simulés par LBM.

6.2 LBM dans un contexte HPC

Compte tenu de sa collision locale et explicite, la méthode LB est bien adaptée aux calculs hautes performances sur différentes architectures. Dans cette section on rappelle les caractéristiques matérielles des diverses architectures dédiées au HPC (section 6.2.1). Ensuite on décrit le développement d'un nouveau code LBM qui peut être exécuté sur ces architectures (section 6.2.2). Enfin, des comparaisons des performances sont indiquées sur un cas test préliminaire de diffusion (section 6.2.3).

6.2.1 Infrastructures et architectures pour le HPC

Infrastructures CEA. Le complexe de calcul scientifique du CEA, localisé sur le site de Bruyères-le-Châtel (DAM/Île de France) [228] comprend plusieurs grandes infrastructures de calcul haute performance (High Performance Computing – HPC) au service de la recherche, de l'industrie et de la défense. L'une d'elles est celle de la DAM qui est réservée aux programmes de Défense. Elle héberge la machine Atos/Bull **Tera1000-1**, d'une puissance de 2,5 Petaflops (un million de milliards d'opérations par seconde), et depuis juin 2018, elle est accompagnée de **Tera1000-2** d'une puissance de 25 Petaflops (voir Fig. 6.1). Le site comprend également dans sa zone ouverte le Très Grand Centre de Calcul du CEA (TGCC) qui est également une infrastructure qui héberge des supercalculateurs de puissance du petaflops. Ce centre de calcul a été conçu pour accueillir la première machine pétaflopique française **Curie** (financée par GENCI pour l'infrastructure de recherche Prace), ainsi que la nouvelle génération du Centre de Calcul Recherche et Technologie (CCRT). Le nouveau calculateur **Irene**, qui a remplacé **Curie** à l'été 2018, est un supercalculateur Bull Sequana X1000 constitué de deux partitions distinctes. La première est **Irene SKL** qui contient 1656 nœuds bi-processeurs Intel® Skylake 8168 à 2,7 GHz avec 24 cœurs par processeur. La seconde est **Irene KNL** qui contient 666 nœuds Intel® KNL 7250 à 1,4 GHz avec 68 cœurs par processeur.



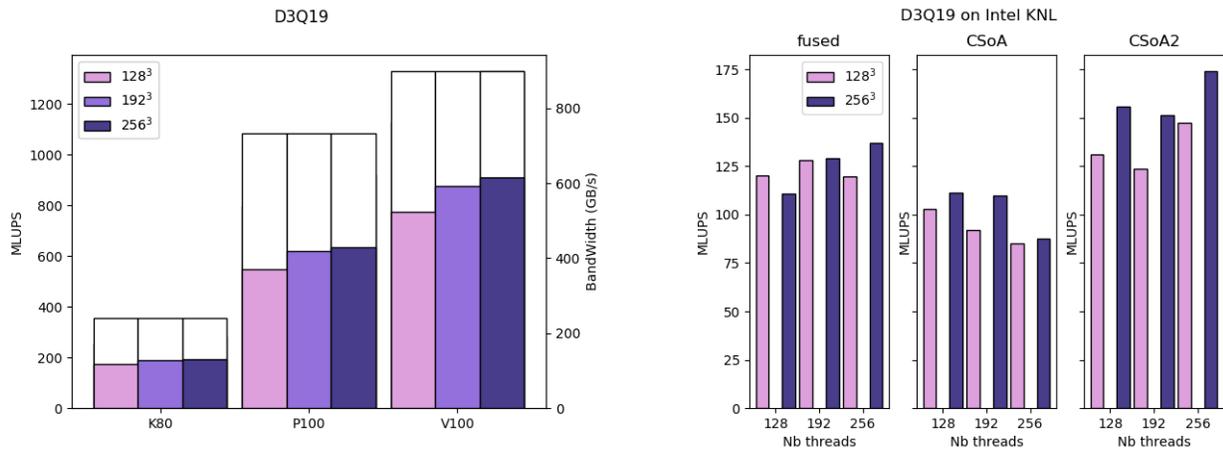
FIGURE 6.1 – Super-calculateur **Tera1000** au CEA DAM à Bruyères-le-Châtel.

Calcul scientifique sur GPUs et autres infrastructures. Depuis une dizaine d'années, l'utilisation des cartes graphiques (Graphics Processing Units – GPUs) comme dispositifs d'accélération de certains types de calculs a rapidement augmenté. Initialement conçues pour les jeux vidéo, leur utilisation pour le calcul scientifique connaît une progression régulière, si bien que le supercalculateur **Jean Zay** qui possède une partition de plus de 1000 GPUs (NVIDIA® V100 SXM2 32 Go) sera installé à l'IDRIS (Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique) au premier semestre 2019 [229]. La Maison De La Simulation (MDLS) au CEA/Saclay est également équipée d'un petit calculateur de 14 GPUs pour réaliser des tests.

6.2.2 Développement d'un nouveau code LBM

« **Portabilité de performance** » du LBM. Les codes de calcul basés sur la LBM sont très largement compilés et exécutés depuis plus de dix ans sur ces architectures de calculs en mono-GPU [230, 231, 232, 233] et même en multi-GPUs [234]. Cependant, malgré les gains de performance, ces moyens de calculs nécessitent de ré-écrire les codes en utilisant un langage bas-niveau adapté à l'architecture matérielle (e.g. CUDA pour GPU NVIDIA® ou OpenCL) et les codes sont par conséquent dédiés à l'architecture et non « portables » sur d'autres. Ici on s'intéresse à la « portabilité de performance du LBM », c'est-à-dire la possibilité d'écrire les algorithmes LBM avec un haut niveau d'abstraction, tout en restant performant sur une large gamme d'architectures : multi-cœurs x86 (Intel® KNL, Intel® SKL, ...), GPU NVIDIA®, processeurs ARM, etc ... Depuis quelques années, la portabilité des codes sur les nouvelles architectures (notamment les GPUs), se fait à l'aide d'une approche par directives (OpenMP ou OpenACC). Cependant, une autre approche prometteuse a été sélectionnée notamment parce qu'elle met en œuvre un modèle de programmation en C++ pour l'écriture d'applications portables et performantes.

Bibliothèque Kokkos. Depuis le début de l'année 2018, une collaboration s'est mise en place avec Dr PIERRE KESTENER du CEA/DRF/MDLS pour développer un nouveau code LBM (LBM_saclay) en utilisant la bibliothèque C++/Kokkos [235].



(a) Comparaison des performances sur trois cartes GPUs (K80, P100 et V100) pour trois tailles de maillage.

(b) Comparaison des performances pour deux optimisations du code source (CSOA, CSOA2) spécialement adaptées à l'architecture Intel KNL et comparée à la version standard (fused).

FIGURE 6.2 – Comparaison des performances du code LBM en C++/Kokkos pour une équation de transport exécuté sur (a) des cartes GPU et (b) un CPU multi-cœurs de type Intel KNL. Les performances sont exprimées en « Million Lattice Updates Per Second » (MLUPS) (d'après P. KESTENER *et al.* [PT1], 2019).

Actuellement, la bibliothèque fournit des outils pour l'exécution parallèle de codes en s'appuyant sur OpenMP, Pthreads et CUDA. Elle a été utilisée récemment pour accélérer l'optimisation de maillage d'ordre élevé dans [236]. Elle fournit également des conteneurs de données avec les mêmes notations d'indice que le Fortran pour les tableaux multi-dimensionnels. De ce fait, la plupart des sous-routines et des bibliothèques développées dans le code Fortran du chapitre 2 (section 2.3.2) peuvent être reprises moyennant quelques adaptations liées au C++ et à la bibliothèque Kokkos. Comme dans le code Fortran90, une sur-couche MPI est rajoutée dans le code pour la gestion de la mémoire distribuée.

6.2.3 Comparaison des temps de calculs sur un cas diffusif

Les performances de ce nouveau code LBM sont comparées entre les plate-formes GPUs et CPUs. Les benchmarks sont réalisés sur un modèle simplifié de diffusion pour trois tailles de maillages 128³, 192³ et 256³. Les résultats synthétisés ci-dessous sont issus de [PT1].

Performances des GPUs. Pour les GPUs, le code a été exécuté sur trois architectures de cartes GPU NVIDIA® Tesla® : Kepler (K80 de 2014), Pascal (P100 de 2016) et Volta (V100 de 2017). Les comparaisons sont réalisées pour les réseaux D2Q9, D3Q7, D3Q15 et D3Q19 mais seuls les résultats de ce dernier sont présentés sur la Fig. 6.2a sur laquelle on constate que, comme attendu, plus la carte est récente et plus le code est performant : pour un maillage 256³ les performances sont respectivement d'environ 900 > 600 > 200 MLUPS (Million Lattice Updates Per Second).

Optimisations et performances des CPUs. Les tests de performance du code sur CPUs sont réalisés sur les deux partitions Irene/SKL et Irene/KNL. Pour les processeurs Intel® KNL, l'algorithme LBM standard (« fused ») a montré de très faibles performances de la bande passante théorique pour des réseaux D3Q7 et D3Q19 et deux tailles de maillage : (128³ et 256³). La variante « fused » désigne l'implantation LBM dans laquelle les étapes de collision et advection sont fusionnées (et ne nécessitent pas de stockage intermédiaire en mémoire, à la différence des implantations standards où les deux opérations sont bien séparées). Deux optimisations des noyaux LBM spécialement adaptées à cette architecture (inspirées de la référence [237]) ont été testées : il s'agit de l'optimisation « CSOA » (Cluster of Structure of Array) et « CSOA2 » (i.e. l'indice de la population i_{pop} d'un tableau $data(i, j, k, i_{pop})$ est interverti en $data(i, i_{pop}, j, k)$). Sur la Fig. 6.2b on constate que l'optimisation CSOA2 améliore nettement les performances du code sur processeur KNL mais elles restent en-dessous des performances de GPUs, même d'ancienne génération. Sur un maillage 256³, la performance de l'optimisation CSOA2 est d'environ 175 MLUPS. Pour les processeurs SKL, la version « fused » est la plus optimisée et ses performances restent elles aussi très en-dessous de celles du GPU V100 (< 160 MLUPS pour du D3Q19).

6.3 Modèle à champ de phase pour la transition liquide/gaz

Sur le simple cas diffusif ci-dessus, les performances sont clairement en faveur des GPUs. Néanmoins d'autres comparaisons sont actuellement en cours sur un problème physique plus complexe d'écoulements diphasiques où le couplage des EDPs nécessite le calcul de gradients intermédiaires qui peuvent modifier les temps de calcul. Le modèle diphasique qui est déjà programmé dans `LBM_saclay` est celui de Navier-Stokes/Allen-Cahn conservatif (présenté dans les sections 5.3.1 et 5.3.3 respectivement) et les validations reposent sur les mêmes cas test du chapitre 5. Le modèle qui est actuellement en cours de développement étend ce modèle à la simulation de phénomènes de changement de phase liquide-gaz tels que la condensation en paroi, ou des bulles de vapeur qui se recondensent. Dans cette section, avant de décrire le modèle mathématique, on rappelle les différentes façons de modéliser la transition liquide/gaz.

Modèles de changement de phase dans la littérature. Pour simuler le changement de phase liquide-gaz il est possible d'utiliser les modèles issus de la théorie du second gradient [205] ou bien ceux qui modifient la loi d'état. Les méthodes LB qui procèdent en agissant sur la loi d'état ont pour origine le modèle de Shan-Chen [48, 49] et sont qualifiées de méthodes pseudo-potentielles. Dans cette façon de procéder, un terme force supplémentaire est ajouté dans l'équation de quantité de mouvement pour tenir compte d'une loi d'état qui n'est pas celle des gaz parfaits (e.g. celle de van der Waals [238]). Une comparaison de plusieurs loi d'état par LBM est réalisée dans [227]. Dans ce cas, c'est la densité qui joue le rôle d'une « indicatrice de phase » qui varie régulièrement entre les densités liquide et vapeur. Plusieurs applications récentes utilisent cette méthode pour simuler la condensation [239, 240]. Les modèles à champ de phase permettent aussi de simuler la transition de phase liquide-vapeur [21]. Parmi ces modèles, certains utilisent la densité comme indicatrice de phase [202] et d'autres utilisent l'équation de Cahn-Hilliard qui est modifiée pour tenir compte du taux de production liquide à l'interface [193, 194]. Ici on se place dans la continuité de ces derniers travaux en adaptant le modèle Conservatif de Allen-Cahn à la transition de phase.

Modèle mathématique. On considère un système composé d'un constituant A qui peut se trouver sous deux phases thermodynamiques distinctes, la première sous forme liquide (l) et la seconde sous forme gazeuse (g). Il s'agit d'un système de deux fluides immiscibles qu'on suppose incompressibles de densité constantes ρ_l et ρ_g . On considère une indicatrice de phase $\phi(\mathbf{x}, t)$ qui vaut 0 pour la phase g , 1 pour la phase l et qui varie continûment entre ces deux valeurs. Les densités locales qui dépendent de la position et du temps sont notées $\tilde{\rho}_i$ (pour $i = g, l$) et s'expriment comme $\tilde{\rho}_g(\mathbf{x}, t) = \rho_g\phi(\mathbf{x}, t)$ et $\tilde{\rho}_l(\mathbf{x}, t) = (1 - \phi(\mathbf{x}, t))\rho_l$, tandis que la densité locale moyenne s'exprime par $\rho(\mathbf{x}, t) = \rho_g\phi(\mathbf{x}, t) + (1 - \phi(\mathbf{x}, t))\rho_l$. Les équations de bilan pour chaque phase g et l s'écrivent :

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_g \mathbf{u} - \rho_g \mathbf{j}_g) = +\dot{m}''' \quad (6.1a)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho}_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho}_l \mathbf{u} - \rho_l \mathbf{j}_l) = -\dot{m}''' \quad (6.1b)$$

où \dot{m}''' est le terme de production (+) ou de retrait (-) volumique due au changement de phase et sera défini ci-dessous. Dans les équations (6.1a) et (6.1b) les signes sont choisis tels que le changement de phase produit de la phase g au détriment de la phase l . Le flux massique lié à l'advection dans chaque phase est $\tilde{\rho}_i \mathbf{u}$. Dans la région interfaciale, le flux massique $\rho_i \mathbf{j}_i$ est d'origine diffusif et résulte d'une transition régulière de la composition entre les différentes phases. En exprimant les Eqs. (6.1a) et (6.1b) en fonction de $\phi(\mathbf{x}, t)$ en supposant que les flux \mathbf{j}_g et \mathbf{j}_l sont identiques et opposés $\mathbf{j} = -\mathbf{j}_g = \mathbf{j}_l$ on obtient :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi + \mathbf{j}) = +\frac{\dot{m}'''}{\rho_g} \quad (6.2a)$$

$$\frac{\partial (1 - \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}(1 - \phi) - \mathbf{j}) = -\frac{\dot{m}'''}{\rho_l} \quad (6.2b)$$

Après avoir fait la somme, on obtient :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \dot{m}''' \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right). \quad (6.3)$$

Pour l'équation du suivi de l'interface, dans [193], l'hypothèse sur le flux celle de Cahn-Hilliard $\mathbf{j} = -M_\phi \nabla \mu_\phi$ où μ_ϕ est le potentiel chimique et l'équation (6.2a) devient celle de Cahn-Hilliard avec un terme source de production au second membre. Ici on suppose que le flux est celui de [195, 196] de l'équation conservative de Allen-Cahn : $\mathbf{j} = -M_\phi (\nabla \phi - 4\phi(1 - \phi)\mathbf{n}/\xi)$ et l'équation (6.2a) est le modèle CAC du chapitre 5 avec un terme source :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = \nabla \cdot \left[M_\phi \left(\nabla \phi - \frac{4}{\xi} \phi(1 - \phi)\mathbf{n} \right) \right] + \frac{\dot{m}'''}{\rho_g} \quad (6.4)$$

Comme dans [193], on suppose que la température de la phase liquide est à la température de saturation et la force qui pilote l'évaporation est la quantité de chaleur qui est transférée à l'interface. Dans ce cas, le taux de vaporisation surfacique est $\dot{m}'' = \kappa \nabla T \cdot \mathbf{n} / \mathcal{L}_{AB}$ où κ est la conductivité thermique, \mathcal{L}_{AB} est la chaleur latente de vaporisation et $\mathbf{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$ est la normale à l'interface. La conversion de \dot{m}'' en quantité volumique \dot{m}''' (liée à l'interface diffuse) est donnée par [193] $\dot{m}''' = \dot{m}'' |\nabla \phi| = \kappa \nabla T \cdot \nabla \phi / \mathcal{L}_{AB}$. Finalement, le modèle complet de changement de phase s'écrit :

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \dot{m}''' \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (6.5a)$$

$$\rho(\phi) \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\phi) (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] - \phi \nabla \mu_\phi + \rho(\phi) \mathbf{g} \quad (6.5b)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = \nabla \cdot \left[M_\phi \left(\nabla \phi - \frac{4}{\xi} \phi (1 - \phi) \mathbf{n} \right) \right] + \frac{\dot{m}'''}{\rho_g} \quad (6.5c)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \lambda \nabla^2 T \quad (6.5d)$$

où λ est la diffusivité thermique dans l'Eq. (6.5d). Les méthodes LB pour simuler ce modèle ont été présentées dans le chapitre 2 (pour la température) et le chapitre 5 (pour NS et CAC). Il s'agit d'adapter la méthode LB pour tenir compte du taux de production dans l'Eq. (6.5a). Le modèle est en cours de développement dans le nouveau code `LBM_saclay`.

6.4 Perspectives générales

En complément des pistes « pour aller plus loin » indiquées dans chaque chapitre, sont décrites ci-dessous quelques perspectives pour poursuivre les simulations des modèles dédiés aux phénomènes physiques « multi-phases et multi-constituants ». Dans ces perspectives, la conception des « modèles à champ de phase », la conception des « méthodes LB » et les développements numériques du code de calcul `LBM_saclay` sont les trois piliers des activités sur lesquels viendront s'appuyer les simulations des diverses applications. Sur la conception de nouveaux modèles physiques, la thèse d'A. YOUNSI (2015) et la thèse à venir en octobre 2019 approfondissent déjà cette facette du travail. Dans la section 6.4.1, on précise l'axe principal des travaux relatifs au procédé de vitrification et du procédé d'oxydation super-critique. Ensuite on complète avec l'ouverture à d'autres applications potentielles des modèles à champ de phase. Dans la section 6.4.2 sont indiquées d'autres perspectives numériques qui pourront être utiles pour ces applications.

6.4.1 Simulations LBM des modèles à champ de phase

En plus du projet de thèse décrit dans la section 5.6 et de la publication des travaux sur la portabilité de performance du LBM, plusieurs applications sont envisagées qui viendront enrichir le retour d'expérience sur la simulation des modèles à champ de phase.

De deux à trois phases immiscibles. Les travaux actuels se structurent autour des modèles diphasiques pour améliorer les méthodes LB sur les mélanges binaires, puis pour les étendre et les adapter pour les mélanges ternaires. Pour des transitions de phase liquide-vapeur, les rapports de densité entre les deux phases sont de l'ordre de ~ 775 alors que ceux qui interviennent dans les verres sont de l'ordre de 2. Pour cette problématique, on testera quelques méthodes LB les plus pertinentes pour avoir un retour d'expérience avec des simulations quantitatives : par exemple [105] qui a été reprise dans [206, 207] ou bien [241] qui a été étendu dans [209]. Pour l'extension de deux à trois phases immiscibles, des modèles couplent déjà deux équations de Cahn-Hilliard pour des applications dans les polymères [242], ou pour étudier l'interaction entre le corium et le béton [243]. Pour simuler un système ternaire, la fonctionnelle d'énergie libre définie dans [215, 216] et le modèle qui en découle sont déjà repris en LBM pour simuler l'étalement d'une lentille liquide [207] et l'instabilité de Kelvin-Helmholtz [214]. Les termes de couplage issus de la fonctionnelle d'énergie libre et les solutions qui en découlent seront comparés à ceux obtenus dans le projet de thèse de la section 5.6 où la forme analytique de la fonctionnelle d'enthalpie libre du système ternaire est déjà disponible grâce à la modélisation CALPHAD. D'autres travaux qui font des simulations LBM de systèmes ternaires à l'aide de méthodes pseudo-potentielles [219] pourront être comparés pour des applications aux fluides super-critiques.

Sédimentation des particules, micro-fluidique et fabrication additive. Dans le projet SIVIT, le procédé du creuset froid utilise des particules de platinoïdes qui sédimentent au cours du fonctionnement. Plusieurs approches de sédimentation des particules existent déjà dans la littérature. Lorsque le nombre de particules est grand par unité de volume, des approches avec une équation de type « advection-diffusion » avec un terme advectif modifié (empiriquement) sont utilisées (voir [68]). On pourra tester un modèle à champ de phase, basé sur une modification de la fonctionnelle d'énergie libre à minimiser

[244] pour simuler la stratification des particules, puis il s'agira de l'adapter à la sédimentation et à l'agglomération des platinoïdes. La micro-fluidique est également un domaine d'application de la LBM (e.g. avec une approche LBM « double-couleur » dans [245, 246]). Un laboratoire du CEA/DPC développe déjà des systèmes micro-fluidiques pour de la séparation [221, 222] et des contacts ont déjà été initiés pour une application LBM sur ce sujet. Concernant les effets relatifs à la tension superficielle (voir [247] pour une synthèse récente), les effets Marangoni pourront être approfondis pour les problèmes couplés avec la température. Ces effets sont déjà pris en compte dans les modèles de fabrication additive [248, 249] qui est une autre application potentielle du « champ de phase » pour modéliser un changement de phase solide/liquide en contact avec un gaz. Pour cette application, les travaux existants sur le sujet mettent en œuvre le suivi de l'interface par une méthode « level set » dans [250] et par une méthode « volume of fluid » dans [250, 249]. Enfin signalons que les modèles à champ de phase trouvent également des applications en biologie des membranes [251] et des vésicules [252, 253].

Couplage « solidification et deux phases liquides immiscibles ». Enfin, toujours en relation avec la phénoménologie des verres, des observations ont montré qu'en fonction des gammes de températures rencontrées, une cristallisation (ou dissolution) de certains éléments de composition du verre peuvent se produire au sein de plusieurs espèces considérées comme des fluides immiscibles. La simulation 3D de telles observations représente un challenge aussi bien du point de vue « modèles » (couplage conservation masse, quantité de mouvement, champ de phase, thermique et thermodynamique) que d'un point de vue « méthodes numériques » et des moyens de calculs associés. Les « modèles à champ de phase » seront enrichis et mis en œuvre dans l'outil `LBM_saclay` dans cette direction de travail.

6.4.2 Autres perspectives

À partir de l'axe principal du paragraphe précédent pourront être initiées de nouvelles directions de travail qui pourront être utiles pour les applications ci-dessus.

Raffinement automatique de maillage et estimation d'erreur *a posteriori*. Toutes les simulations de ce manuscrit ont été réalisées sur un maillage fixe c'est-à-dire avec un nombre de nœuds fixé constant tout le long de la simulation. Des méthodes de raffinement automatique de maillage en LBM ont été proposées [254, 255, 256] et appliquées récemment avec le modèle CAC pour le suivi d'une bulle qui s'élève [198] sous l'effet de la flottabilité. Dans cette référence, le seul critère utilisé pour le raffinement du maillage est celui sur le gradient du champ de phase $\nabla\phi$ qui doit être plus petit qu'une valeur fixée. Par conséquent, le raffinement se limite aux interfaces entre les deux phases. Cependant un raffinement local basé sur un critère qui implique la vitesse du fluide peut être important. Par exemple pour la flottabilité et la coalescence des deux bulles de la Fig. 5.5a, un déraffinement du maillage peut être envisagé au début de la simulation sur la partie haute du domaine tandis que le sillage de la bulle unique issue de la coalescence pourrait être maillé plus finement en fin de simulation. Ces raffinements/déraffinements successifs peuvent se baser sur la technique des « estimations d'erreur *a posteriori* » qui permet d'avoir des critères de raffinement/déraffinement sur une [257] ou plusieurs autres grandeurs physiques d'intérêt (e.g. [258] pour la vitesse et la pression). Dans `LBM_saclay`, les développements pourront s'appuyer sur ceux déjà mis en œuvre dans [259] mais aussi à l'aide de la bibliothèque `Pablo` [260].

Analyse du schéma LBM pour le modèle CAC. Pour le modèle conservatif de Allen-Cahn, des analyses du schéma LBM sont à approfondir pour étudier l'impact des termes d'ordre supérieur à deux qui apparaissent lors des développements du schéma. L'analyse peut être réalisée par la méthode de Chapman-Enskog (présentée en annexe B) en poussant les développements aux termes d'ordre supérieur à deux, ou bien par la méthode des développements de Taylor déjà appliquée pour identifier les EDPs équivalentes à la LBE (Navier-Stokes) [31]. En considérant une collision de type TRT (Two-Relaxation-Times), l'impact des termes d'ordre trois est déjà approfondi pour l'ADE dans [261]. Une comparaison des développements de Chapman-Enskog à ceux de Taylor est déjà réalisée sur des équations qui font intervenir des dérivées spatiales d'ordre supérieur à deux comme les équations de Korteweg-de Vries et de Kuramoto-Sivashinsky [119]. L'application de cette méthodologie peut améliorer les simulations LBM du modèle de Cahn-Hilliard du chapitre 5 qui fait intervenir une dérivée d'ordre quatre.

Autres applications. La théorie du champ de phase est un outil puissant pour concevoir de nouveaux modèles « multi-phases et multi-constituants » et des travaux théoriques peuvent être menés pour établir leur équivalence avec les modèles à « interface abrupte » en appliquant les développements asymptotiques raccordés. Enfin, comme indiqué dans les chapitres 3 et 4, les « modèles à champ de phase cristallins » et les « équations fractionnaires » constituent des approches alternatives de modélisation très intéressantes pour la science des matériaux et le transport en milieu poreux. Les perspectives mentionnées dans les sections 3.6 et 4.5, ainsi que d'autres applications potentielles issues du domaine de la physique de la matière condensée ou encore sur l'analyse des schémas LB, pourront faire l'objet de simulations approfondies en collaboration avec les équipes expérimentales et théoriques intéressées par ces sujets.

Annexe A

Méthode de l'état adjoint pour l'expérience DI du site du Mont-Terri

L'expérience DI (Diffusion Inerte) du Mont-Terri a été menée sous la responsabilité de l'ANDRA pour suivre la diffusion de deux traceurs chimiques non réactifs dans l'argile à Opalinus. Afin de caractériser le comportement diffusif de la roche, des mesures de concentration en fonction de la distance r ont été mesurées à la fin de l'expérience (après une année) en complément du suivi de la concentration dans la chambre d'injection (voir les Fig. 13 et 14 de la référence [P10]). Les pics de concentration qui apparaissent sur la courbe d'évolution de la chambre d'injection correspondent à plusieurs injections de traceur. Dans cette annexe, la méthode de l'état adjoint est illustrée sur cette expérience.

Problème direct

L'expérience DI du Mont-Terri est modélisée en considérant l'équation de la diffusion en tenant compte de la décroissance radioactive λ et exprimée en coordonnées cylindriques :

$$\omega(r) \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D(r) \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \lambda \omega(r) C = 0 \quad (\text{A.1})$$

pour $r \in]r_1, r_2[$ muni de la condition initiale nulle $C(r, 0) = 0 \forall r \in]r_1, r_2[$ et avec des conditions aux limites :

$$C(r_1, t) = C(r_1, t_0) + \alpha D(r_1) \int_{t_0}^t \frac{\partial C}{\partial r}(r_1, s) ds \quad (\text{A.2})$$

en r_1 et $D(r_2) \partial_r C(r_2, t) = 0$ en r_2 . Dans l'Eq. (A.2) le terme $C(r_1, t_0)$ est la concentration injectée dans la chambre d'injection et le second terme est l'expression du flux de Fick qui diffuse dans le milieu poreux (exprimé en coordonnée radiale et intégré sur la surface d'injection). La porosité $\omega(r)$ et la diffusion $D(r)$ sont deux fonctions de la distance r . On résout le « problème direct » lorsqu'on cherche à déterminer l'évolution du champ de concentration $C(r, t)$ étant donnés la condition initiale, les conditions aux limites et les paramètres $\omega(r)$ et $D(r)$.

Problème inverse

Les paramètres de diffusion et de porosité sont difficilement accessibles expérimentalement contrairement aux valeurs de concentrations, c'est la raison pour laquelle on est amené à résoudre un « problème inverse ». Malgré l'existence de différents cadres théoriques, la résolution pratique du problème inverse se ramène à déterminer les paramètres $\omega(r)$

et $D(r)$ qui minimisent une fonctionnelle coût \mathcal{J} qui calcule l'écart quadratique entre les données calculées et les données observées. On se ramène donc à un problème d'optimisation dans lequel la définition de la fonctionnelle \mathcal{J} dépend des mesures disponibles.

Fonctionnelle à minimiser

Pour l'expérience DI, les données de concentration sont mesurées au cours du temps dans la chambre d'injection $\hat{C}(r_1, t_k)$, et elles sont mesurées le long de l'échantillon au temps final $\hat{C}(r_i, t_f)$. Les r_i sont les positions où sont effectuées les mesures au temps final t_f et I le nombre total de points de mesures spatiales. Les t_k sont les temps de mesures dans la chambre d'injection et K le nombre total de mesures temporelles. La fonctionnelle \mathcal{J} à minimiser s'écrit :

$$\mathcal{J} = \sum_{i=1}^I \mu_i^2 \left(C(r_i, t_f) - \hat{C}(r_i, t_f) \right)^2 + \sum_{k=1}^K \beta_k^2 \left(C(r_1, t_k) - \hat{C}(r_1, t_k) \right)^2 \quad (\text{A.3})$$

où les coefficients μ_i^2 et β_k^2 sont des poids strictement positifs attribués à chaque mesure et représentent le « degré de confiance » qu'on a en cette donnée. Plusieurs types d'approches permettent de minimiser \mathcal{J} mais pour résumer, deux catégories de méthodes existent. L'une nécessite la connaissance des dérivées de la fonctionnelle par rapport aux paramètres, encore appelés gradients de la fonctionnelle, et l'autre non. La méthode adjointe permet de calculer précisément les dérivées de la fonctionnelle \mathcal{J} .

Calcul des gradients de J par état adjoint

La méthode de l'état adjoint est basée sur la théorie du contrôle optimal et a été utilisée pour l'identification de paramètres dans [3]. Elle repose sur l'utilisation d'une dérivation analytique et peut, d'un certain point de vue, être comparée à la méthode des multiplicateurs de Lagrange. Elle n'est présentée ici que sous forme continue. Le problème direct discrétisé par différences finies et tous les calculs pour la déduction du système adjoint discret et des gradients discrets sont indiqués dans l'annexe 2 de [R16].

Problème adjoint. L'équation du problème direct peut être vue comme une contrainte d'égalité reliant la variable d'état (la concentration) aux paramètres (diffusion et porosité). On associe à cette contrainte, un multiplicateur de Lagrange $\psi(r, t)$, qui est une fonction de l'espace et du temps (et non un scalaire). On définit alors le lagrangien suivant :

$$\mathcal{L}(\omega, D, C, \psi) = J - \int_{r_1}^{r_2} \int_{t_0}^{t_f} \psi(r, t) \left[\omega(r) \frac{\partial C}{\partial t}(r, t) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rD(r) \frac{\partial C}{\partial r}(r, t) \right) + \lambda \omega(r) C(r, t) \right] r dr dt, \quad (\text{A.4})$$

expression dans laquelle on reconnaît la fonctionnelle J et l'EDP du problème direct. Un point-selle du lagrangien a pour premiers arguments (ω, D, C) la solution du problème d'optimisation et on calcule la variation totale du lagrangien \mathcal{L} par rapport à ω , D et C . Partant du principe que la variation de \mathcal{L} ne devrait être nulle qu'en présence de variations des paramètres ω et D , on définit la valeur du multiplicateur de lagrange $\psi(r, t)$ telle que l'ensemble des termes en δC s'annulent, c'est-à-dire comme solution du problème adjoint suivant (voir l'annexe de [R16] pour les détails des calculs) où le multiplicateur $\psi(r, t)$ est appelé l'état adjoint de la concentration $C(r, t)$:

$$-\omega \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(rD \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \lambda \omega \psi = 0 \quad (\text{A.5})$$

avec la condition finale :

$$\psi(r, t_f) = \sum_{i=1}^I \frac{2\mu_i^2}{\omega r} \left(C(r_i, t_f) - \hat{C}(r_i, t_f) \right) \delta(r - r_i) \quad (\text{A.6})$$

et les conditions aux limites :

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial \psi}{\partial t} + D \frac{\partial \psi}{\partial r} \Big|_{r_1} = - \sum_{k=1}^K \frac{2\beta_j^2}{r_1} \left(C(r_1, t_k) - \hat{C}(r_1, t_k) \right) \delta(t - t_k) \quad (\text{A.7})$$

en r_1 et $D \frac{\partial \psi}{\partial r} \Big|_{r_2} = 0$ en r_2 . La dénomination de l'état adjoint vient de ce que les opérateurs qui interviennent dans sa définition sont les adjoints des opérateurs de l'équation d'état : $-\partial_t$ comme adjoint de ∂_t , et l'opérateur aux dérivées partielles en r est le même car auto-adjoint. Ce nouveau problème présente la particularité d'être rétrograde en temps, c'est-à-dire que l'adjoint est donné à l'instant final (non initial) par l'Eq. (A.6) et il faut résoudre l'équation adjointe (A.5) du temps final au temps initial. Enfin, dans le problème adjoint, les écarts entre les concentrations calculées et observées interviennent dans la condition finale et dans une des deux conditions aux limites car les données sont recueillies sur la longueur de l'échantillon à l'instant final, et dans la chambre d'injection en r_1 . Si les données observées avaient été obtenues entre r_1 et r_2 pour tous les pas de temps, l'écart serait intervenu comme terme source dans l'équation adjointe comme c'est le cas dans la section 4.3.1.

Gradients de J . Une fois les problèmes direct et adjoint résolus pour obtenir respectivement $C(r, t)$ et $\psi(r, t)$, il est possible d'en déduire les gradients de la fonctionnelle J par rapport aux paramètres ω et D . Ces deux dérivées se déduisent « naturellement » en définissant le problème adjoint et s'écrivent :

$$\frac{\delta J}{\delta \omega} = \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \omega} = - \int_0^{t_f} \int_{r_1}^{r_2} \psi \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \lambda C \right) r dr dt \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{\delta J}{\delta D} = \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta D} = - \int_0^{t_f} \int_{r_1}^{r_2} \frac{\partial C}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial r} r dr dt \quad (\text{A.9})$$

si on considère que ω et D sont constants sur tout le domaine. Si les paramètres sont considérés constants par zones, les écritures restent similaires, l'intégrale en espace ne portant plus que sur la zone considérée. Enfin, si on traite les paramètres ω et D comme fonctions de r , l'expression des dérivées est du même type en supprimant l'intégrale en espace. La méthode de l'état adjoint présente un avantage considérable comparé à la méthode des différences finies dans le cas où le nombre de paramètres devient important (une dizaine, une centaine ou même plus). En effet, la méthode permet d'obtenir toutes les dérivées souhaitées en ne résolvant que deux problèmes : le problème direct pour obtenir $C(r, t)$ et le problème adjoint pour obtenir $\psi(r, t)$. Alors que la méthode des différences finies nécessite de résoudre autant de problèmes directs que de paramètres à optimiser (en incrémentant tour à tour chacun des paramètres) auxquels il faut ajouter la résolution du problème direct lui-même.

Annexe B

Développement de Chapman-Enskog pour la LBM fractionnaire

Avec la fonction à l'équilibre définie par les Eqs. (4.22a)-(4.22b), la LBE approche les solutions de l'Eq. (4.12) si $\alpha = 2$, aussi bien en considérant les collisions BGK que MRT. La possibilité d'avoir $\alpha < 2$ ne modifie que les dernières étapes des développements classiques de Chapman-Enskog. On rappelle que la méthode est basée sur les développements de Taylor de $|\mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t)\rangle$ combinés avec

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \quad \text{and} \quad \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \quad \text{for} \quad \mu = 1, \dots, d. \quad (\text{B.1})$$

et le développement $|\mathbf{f}\rangle = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k |\mathbf{f}^{(k)}\rangle$. On rappelle que la méthode regroupe tous les termes d'ordre ε^k , et donne plusieurs équations satisfaites par les premiers moments de $|\mathbf{f}^{(k)}\rangle$, et particulièrement $\langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle = C$. Plus précisément, on montre qu'avec $D = e^2 (\lambda - 1/2) \Delta x^2 / \Delta t$ et les Eqs. (4.21) impliquent que $\langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle$ est solution de l'Eq. (4.12) avec une erreur d'ordre $O(\varepsilon^2)$.

L'ordre ε^0 s'écrit $0 = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{M} [|\mathbf{f}^{eq}\rangle - |\mathbf{f}^{(0)}\rangle]$ et implique

$$|\mathbf{f}^{(0)}\rangle = |\mathbf{f}^{eq}\rangle \quad (\text{B.2})$$

car $\mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{M}$ est inversible avec BGK ou MRT. Les collisions préservent la masse totale de soluté ce qui implique que

$$\langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(k)} \rangle = 0 \quad \text{for} \quad k > 0. \quad (\text{B.3})$$

Si on suppose que $S_c = S\varepsilon^2$ pour le terme source, les ordres en ε et ε^2 donnent respectivement

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} |\mathbf{f}^{(0)}\rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} |e_\mu \mathbf{f}^{(0)}\rangle = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{M} |\mathbf{f}^{(1)}\rangle \quad (\text{B.4})$$

et

$$\begin{aligned} \Delta t \left[\frac{\partial}{\partial t_1} |\mathbf{f}^{(1)}\rangle + \frac{\partial}{\partial t_2} |\mathbf{f}^{(0)}\rangle \right] + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} |e_\mu \mathbf{f}^{(1)}\rangle + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} |\mathbf{f}^{(0)}\rangle \\ + \Delta t \Delta x \frac{\partial^2}{\partial t_1 \partial x'_\mu} |e_\mu \mathbf{f}^{(0)}\rangle + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x'_\mu \partial x'_\nu} |e_\mu e_\nu \mathbf{f}^{(0)}\rangle = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{M} |\mathbf{f}^{(2)}\rangle + \Delta t S |\mathbf{w}\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

expressions dans lesquelles $a_\mu b_\mu$ et $\partial b_\mu / \partial a_\mu$ représentent $\sum_{\mu=1}^d a_\mu b_\mu$ et $\sum_{\mu=1}^d \partial b_\mu / \partial a_\mu$ respectivement. L'Eq. (B.4) est équivalente à

$$-\mathbf{M} |\mathbf{f}^{(1)}\rangle = \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{M} \left[\Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} |\mathbf{f}^{(0)}\rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} |e_\mu \mathbf{f}^{(0)}\rangle \right]. \quad (\text{B.6})$$

qui détermine $|\mathbf{f}^{(1)}\rangle$ et donne (projection sur $|\mathbf{1}\rangle$) en considérant l'Eq. (B.3) :

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} \langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle = 0 \quad (\text{B.7})$$

En sommant les deux termes ε fois (B.7) et ε^2 fois la projection de (B.5) sur $|\mathbf{1}\rangle$ donne

$$\begin{aligned} \Delta t \left[\varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} \right] \langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \Delta x \varepsilon \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \Delta x \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(1)} \rangle \\ + \frac{\Delta x \Delta t}{2} \varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial x'_\mu \partial t_1} \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \frac{\Delta x^2}{2} \varepsilon^2 \frac{\partial^2}{\partial x'_\mu \partial x'_\nu} \langle e_\mu | e_\nu \mathbf{f}^{(0)} \rangle = \Delta t \varepsilon^2 S | \mathbf{w} \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

expression dans laquelle les deux premiers termes sont $\Delta t \partial_t \langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle$ et $\Delta t \nabla \cdot \mathbf{u} C$ avec une erreur d'ordre ε^2 . Alors, l'Eq. (B.4) donne une expression plus ou moins simple pour $|\mathbf{f}^{(1)}\rangle$ selon que l'on considère la collision BGK ou MRT.

Opérateur de collision BGK

L'opérateur de collision BGK suppose que $\mathbf{M} = \mathbf{I}$ et $\mathbf{\Lambda}^{-1} = \lambda \mathbf{I}$, et l'Eq. (B.4) devient

$$-|\mathbf{f}^{(1)}\rangle = \lambda \left[\Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} |\mathbf{f}^{(0)}\rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} |e_\mu \mathbf{f}^{(0)}\rangle \right], \quad (\text{B.9})$$

et par conséquent

$$-\langle e_\nu | \mathbf{f}^{(1)} \rangle = \lambda \left[\Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} \langle e_\nu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \langle e_\nu e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle \right]. \quad (\text{B.10})$$

En combinant la dernière équation avec les Eqs (B.1) et (B.8), cela donne

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle - \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \Delta x \Delta t \frac{\partial^2}{\partial t \partial x'_\mu} \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle - \left(\lambda - \frac{1}{2} \right) \Delta x^2 \frac{\partial^2}{\partial x'_\mu \partial x'_\nu} \langle e_\mu e_\nu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle = S_c \Delta t. \quad (\text{B.11})$$

En négligeant le troisième terme $(\lambda - 1/2) \Delta x \Delta t \partial_{tx'_\mu}^2 \langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle$ et en utilisant le moment d'ordre deux de l'Eq. (4.21) conduit à l'Eq. (4.12) à condition que $\overline{\overline{\mathbf{D}}} = D \overline{\overline{\mathbf{1d}}}$ et avec $D = e^2 (\lambda - 1/2) \Delta x^2 / \Delta t$.

Opérateur de collision MRT

Avec les matrices \mathbf{M} et $\mathbf{\Lambda}^{-1}$ de la collision MRT, l'Eq. (B.6) implique

$$-\langle e_\nu | \mathbf{f}^{(1)} \rangle = \lambda_{\nu\rho} \left[\Delta t \frac{\partial}{\partial t_1} \langle e_\rho | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \Delta x \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \langle e_\rho e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle \right], \quad (\text{B.12})$$

qui est très similaire à l'Eq. (B.10) si on pose $\overline{\overline{\lambda}}$ pour la matrice $d \times d$ d'élément $\lambda_{\mu\nu}$. En rappelant que les Eqs (B.3) et (B.1) dans l'Eq. (B.8) donne

$$\Delta t \left[\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{1} | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \nabla \cdot (C \mathbf{u}) \right] + \Delta t \Delta x \left(-\frac{\partial}{\partial t} \lambda_{\mu\rho} \frac{\partial}{\partial x'_\rho} \langle e_\rho | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial t \partial x'_\mu} \langle e_\rho | \mathbf{f}^{(0)} \rangle \right) \quad (\text{B.13})$$

$$+ \Delta x^2 \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x'_\mu \partial x'_\nu} \langle e_\mu e_\nu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle - \frac{\partial}{\partial x'_\mu} \lambda_{\mu\rho} \frac{\partial}{\partial x'_\nu} \langle e_\rho e_\nu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle \right] = S_c \Delta t, \quad (\text{B.14})$$

car $\langle e_\mu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle = u_\mu C \Delta t / \Delta x$ (i.e. le moment du premier ordre de (4.21)). En utilisant le moment du second ordre de l'Eq. (4.21), $\langle e_\rho e_\nu | \mathbf{f}^{(0)} \rangle = \delta_{\rho\nu} [p_\nu I_{x\nu+}^{2-\alpha_\nu} (g_\nu C) + (1 - p_\nu) I_{x\nu-}^{2-\alpha_\nu} (g_\nu C)]$ et en négligeant le second terme $\Delta t \Delta x (-\partial_t \lambda_{\mu\rho} \partial_{x'_\rho} \langle e_\rho | \mathbf{f}^{(0)} \rangle + \partial_{tx'_\mu}^2 \langle e_\rho | \mathbf{f}^{(0)} \rangle / 2)$, on retrouve l'Eq. (4.12) si $\overline{\overline{\lambda}}$ satisfait l'Eq. (4.26) :

$$\overline{\overline{\mathbf{D}}} = e^2 \left(\overline{\overline{\lambda}} - \frac{1}{2} \overline{\overline{\mathbf{1d}}} \right) \frac{\Delta x^2}{\Delta t}. \quad (\text{B.15})$$

La matrice $\overline{\overline{\lambda}}$ peut dépendre de \mathbf{x} pour tenir compte d'un tenseur $\overline{\overline{\mathbf{D}}}$ non uniforme en espace.

Annexe C

Liste des publications

Dans les références qui suivent, les noms des jeunes chercheurs et des stagiaires que j'ai encadrés sont précédés des symboles ** (post-doctorat) * (thèse) et ° (étudiants stagiaires).

C.1 Publications

Articles dans des Journaux à Comité de Lecture

- [P1] **CARTALADE A.**, A. YOUNSI and M.-C. NÉEL, Multiple-Relaxation-Time Lattice Boltzmann scheme for Fractional Advection-Diffusion Equation. *Computer Physics Communications*, 234, pp. 40–54. **2019**. doi:10.1016/j.cpc.2018.08.005
- [P2] **MARYSHEV B., **A. CARTALADE**, C. LATRILLE, M.-C. NÉEL, Identifying Space-Dependent Coefficients and the Order of Fractionality in Fractional Advection-Diffusion Equation. *Transport in Porous Media*, 116 (1), pp. 53–71. **2017**. doi:10.1007/s11242-016-0764-1
- [P3] **CARTALADE A.**, *YOUNSI A., M. PLAPP, Lattice Boltzmann simulations of 3D crystal growth : Numerical schemes for a phase-field model with anti-trapping current. *Computers & Mathematics with Applications*, 71 (9), pp. 1784–1798. **2016**. doi:10.1016/j.camwa.2016.02.029
- [P4] *YOUNSI A. and **A. CARTALADE**, On anisotropy function in crystal growth simulations using Lattice Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, 325, pp. 1–21. **2016**. doi:10.1016/j.jcp.2016.08.014
- [P5] **CARTALADE A.**, *YOUNSI A., É. RÉGNIER, S. SCHULLER, Simulations of phase-field models for crystal growth and phase separation. *Procedia Materials Science*, 7, pp. 72–78. **2014**. doi:10.1016/j.mspro.2014.10.010 (open access).
- [P6] **MARYSHEV B., **A. CARTALADE**, C. LATRILLE, M. JOELSON, M.-C. NÉEL, Adjoint state method for fractional diffusion : Parameter identification. *Computers & Mathematics with Applications*, 66 (5), pp. 630–638. **2013**. doi:10.1016/j.camwa.2013.02.022
- [P7] **ZOAIA A., C. LATRILLE, **A. CARTALADE**, Nonlinear random-walk approach to concentration-dependent contaminant transport in porous media. *Physical Review E*, 79 (4), 041125. **2009**. doi:10.1103/PhysRevE.79.041125
- [P8] **ZOAIA A., C. LATRILLE, A. BECCANTINI, **A. CARTALADE**, Spatial and temporal features of density-dependent contaminant transport : Experimental investigation and numerical modeling. *Journal of Contaminant Hydrology*, 109 (1-4), pp. 14–26. **2009**. doi:10.1016/j.jconhyd.2009.07.006
- [P9] NÉEL M.-C., M. JOELSON, **ZOAIA A., **A. CARTALADE**, Compétition entre transport et rétention de matière en milieu poreux, *Mechanics & Industry*, 10, pp. 217–221. **2009**. doi:10.1051/meca/2009050
- [P10] **CARTALADE A. et al.**, Application of Inverse Modeling Methods to Thermal and Diffusion Experiments at Mont Terri Rock Laboratory. *Physics and Chemistry of the Earth A/B/C*, 32 (1-7), pp. 491–506. **2007**. doi:10.1016/j.pce.2006.08.043

Colloques avec actes et comité de lecture

- [P11] ANGELI P.-E., M.-A. PUSCAS, G. FAUCHET, **A. CARTALADE**, FVCA8 benchmark for the Stokes and Navier-Stokes equations with the `TriO`CFD code – Benchmark session. Proceeding of the *Finite Volumes for Complex Applications VIII, Methods and theoretical aspects*, conference (**21 pages**), FVCA8, June 12-16, Université Lille 1. In “Springer Proceedings in Mathematics & Statistics” Book series, vol 199, pp. 181-202. 2017. doi:10.1007/978-3-319-57397-7_12
- [P12] **MARYSHEV B., **A. CARTALADE**, C. LATRILLE, M.-C. NÉEL, Accuracy and efficiency of adjoint state based parameter identification for fractional advection diffusion equation with space-dependent coefficient. Proceeding of *International Conference on Control, Decision and Information Technologies*, 6–8 April 2016 (CoDIT’16), pp. 134–139, (**6 pages**). 2016. Malta. Electronic ISBN : 978-1-5090-2188-8. doi:10.1109/CoDIT.2016.7593549
- [P13] *YOUNSI A., **A. CARTALADE**, M. QUINTARD, Lattice Boltzmann Simulations for Anisotropic Crystal Growth of a Binary Mixture. Proceeding of *The 15th International Heat Transfer Conference (IHTC-15)*, **9 pages**, 10-15 Aug. 2014, Kyoto, paper 9797, ISBN : 978-1-56700-421-2. doi:10.1615/IHTC15.cpm.009797
- [P14] OULOIN M., M.-C. NÉEL, M. JOELSON, **A. CARTALADE**, Inversion d’un modèle de dispersion avec effets de mémoire, Proceedings of 20ème Congrès Français de Mécanique (**6 pages**). Besançon, 29 août au 2 septembre 2011. Inist : <http://documents.irevues.inist.fr/handle/2042/46600>
- [P15] LATRILLE C., **A. CARTALADE**, New experimental device to study transport in unsaturated porous media, Proceedings of *The 13th International Conference on Water-Rock Interaction (WRI-13)*, pp. 299–302 (**4 pages**). Water-Rock Interaction – Birkle & Torres Alvarado (eds). Taylor & Francis Group, London. ISBN : 978-041560426-0. Google Book : [Link](#) p. 299 ; Abstract on Scopus : <http://www.scopus.com/inward>
- [P16] *CADALEN S., M. QUINTARD, and **A. CARTALADE**, Macro-pore model for Cesium transport in sandy-clayed porous media. Proceeding of *XVI International Conference on Computational Methods in Water Resources (CMWR-XVI)*, Copenhagen, Denmark, June. **8 pages**, In : P.J. Binning, P.K. Engesgaard, H.K. Dahle, G.F. Pinder and W.G. Gray (Editors). doi:10.4122/1.1000000630
- [P17] DEWONCK, S., M. DESCOSTES, V. BLIN, E. TEVISSSEN, J. RADWAN, C. POINSSOT, **A. CARTALADE**, P. BRISSET, AND D. COELHO, In situ diffusion experiments in Callovo-Oxfordian mudstone. Goldschmidt Conference in *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **70** (18), Supplement 1, p. A140. 2006. doi:10.1016/j.gca.2006.06.296

Colloque avec acte sans comité de lecture

- [P18] *CADALEN S., M. QUINTARD, AND **A. CARTALADE**, Micro-pore Model for Cesium Transport in Clayed Porous Media. Proceeding of *International Association for Hydro-Environment Engineering and Research (IAHR)*, **12 pages**, IAHR-GW2006 “Groundwater in Complex Environments”, Toulouse. PDF file from S. Cadalen’s thesis.

C.2 Rapports techniques CEA, documents collaboratifs & thèse

Rapports techniques – écrits en français (sauf ☉), avec vérifications internes

- ☉ [R1] **CARTALADE A.**, P. KESTENER, A. GENTY, S. KOKH, *GPU & CPU implementation with Kokkos library of Lattice Boltzmann methods for two-phase flows*. Rapport Technique DEN-DM2S-STMf-LMSF. À paraître 2019.
- [R2] **CARTALADE A.**, *Simulations comparatives d’un modèle d’écoulement moyenné pour traiter un milieu encombré*. Ref : DEN-DM2S-STMf-LMSF-RT/16-012/A. **19 pages**. 2016.
- [R3] °HELLAUDAIS V., *YOUNSI A. et **A. CARTALADE**, *Simulations de morphologies anisotropes 2D/3D de croissance cristalline par modèle à champ de phase : Harmoniques sphériques et cubiques de l’énergie interfaciale*. Ref : DEN-DM2S-STMf-LMSF-NT/15-003/A. **28 pages**. 2015.

- [R4] ^{*}YOUNSI A. et A. CARTALADE, *Comparaison de schémas de Boltzmann sur réseau pour la simulation d'une équation de transport avec paramètres variables et applications sur des problèmes de croissance cristalline*. Ref : DEN-DM2S-STMF-LATF-NT/14-033/A. **22 pages**. 2014.
- [R5] CARTALADE A., *Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline II : Modèle avec limite à interface fine d'une substance pure 3D*. Ref : DEN-DM2S-STMF-LATF-NT/13-008/A. **30 pages**. 2013.
- [R6] CARTALADE A. et É. RÉGNIER, *Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d'un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline I : Substance pure*. Ref : DEN-DM2S-STMF-LATF-RT/12-005/A. **28 pages**. 2012.
- [R7] CARTALADE A. et A. GENTY, *Diffusion effective d'un milieu poreux 3D : Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau*. Ref : DEN-DM2S-STMF-LATF-RT/12-016/A. **22 pages**. 2012.
- [R8] CARTALADE A., *Résolution d'un modèle de transport de type double-porosité par méthode de Boltzmann sur réseau à multiple temps de relaxation et application sur le dispositif expérimental BEETI*. Ref : DEN-DM2S-STMF-LATF-RT/11-002/A. **36 pages**. 2011.
- [R9] CARTALADE A., *Approche LBM pour la Modélisation des Écoulements et du Transport en Milieux Poreux : Convection Naturelle et Équation de Darcy-Brinkman-Forchheimer*. Ref : DEN-DM2S-SFME-LSET-RT/09-004/A. **52 pages** (2 Notes Techniques). 2009.
- [R10] CARTALADE A., C. LATRILLE, ^oLAPASSET G., D. CHAMBELLAN et ^{*}CADALEN S., *Dispositif expérimental BEETI : Démarche d'identification d'une loi de Dispersivité, Interprétation des mesures du dichromatique X, et conception d'un système d'étalonnage*. Ref : DEN-DM2S-SFME-MTMS-RT/07-018/A. **79 pages** (4 Notes Techniques). 2007.
- [R11] ^oHARICH R., A. CARTALADE, ^{*}CADALEN S. et C. ARDOIS, *Marche Aléatoire à Temps Continus pour la Modélisation du Transfert de Masse en Milieu Poreux Insaturé : Théorie Simulations Comparatives et Application sur Mesures Expérimentales*. Ref : DEN-DM2S-SFME-MTMS-RT/07-002/A. **23 pages**. 2007.
- [R12] CARTALADE A., ^{*}CADALEN S., ^oLEBAS F., A. GENTY, J. TOURNEBIZE, *Modélisation des Écoulements et du Transport de Soluté en Milieux Poreux Insaturés I : Dispersion, Colonnes et Nudging*. Ref : DEN-DM2S-SFME-MTMS-RT/06-002/A. **66 pages** (5 Notes Techniques). 2006.
- [R13] CARTALADE A. *Modélisation directe 3D de l'expérience DI-A*. Ref : DEN-DM2S-SFME-MTMS-RT/04-001/A. **50 pages**. 2004.
- [R14] CLÉMENT F., ^oKHVOENKOVA N., A. CARTALADE, P. MONTARNAL, *Analyse de sensibilité et estimation de paramètres de transport pour une équation de diffusion, approche par état adjoint*, Inria Report n°5132, inria-00071451. HAL : <https://hal.inria.fr/inria-00071451>. **55 pages**. 2004.
- [R15] CARTALADE A., P. MONTARNAL, ^oCAVANNA B., J. BLUM, *Paramétrisation automatique des coefficients de transport d'un milieu poreux, approche par état adjoint*. Ref : DEN-DM2S-SFME-MTMS-RT/03-002/A. **85 pages**. 2003.
- [R16] CARTALADE A., P. MONTARNAL, ^oCAVANNA B., J. BLUM, *Estimation des paramètres de transport d'un milieu poreux, approche par état adjoint*. Ref : DM2S-SFME-MTMS, RT/02-018/A. **56 pages**. 2002 (Rapport étendu [R15]).

Implication dans des documents collaboratifs

« Propositions de projets (CEA et ANR) »

- [R17] BURBEAU A., A. CARTALADE, P. OMNÈS, M.-A. PUSCAS, *Plan de développement du code TrioCFD. Version 1*. Ref. DEN/DANS/DM2S/STMF/LMSF/NT/16-014/A. **57 pages**. 2016.
- [R18] RIBET I., et 14 collaborateurs, *Projet SIVIT : programme de simulation de la vitrification sur 2010–2020*. Ref. DEN/MAR/DTCD/RT/2010/03. **76 pages (Diffusion restreinte)**. 2010.
- ⊙ [R19] NÉEL M.-C., M. JOELSON, A. CARTALADE, C. LATRILLE, M. FLEURY, D. BAUER, ANR – TRAM project (*Anomalous Transport in Porous Media*). Program SYSCOMM **50 pages**. 2009.

« Rapports de synthèse (CEA et PSI) »

- [R20] CARTALADE A., P. THOUVENOT, F. VAN DORPE, C. BEUCAIRE, *Transfert en zone non saturée en eau : document de synthèse des activités de la DEN dans le cadre du projet MRIMP*. Ref : DEN-DM2S-SFME-MTMS-RT/06-013/A. **97 pages**. 2006.
- ⊙ [R21] VERSIN P., and 15 contributors, *Long-term Diffusion Experiment (DI-A), Diffusion of HTO, I⁻, ²²Na⁺ and Cs⁺, Field activities, data and modelling*. Technical Report 2003-02, Paul Scherrer Institute (PSI). **195 pages**. 2006.

Thèse de doctorat

- [T1] A. CARTALADE, *Modélisation des Écoulements dans les Aquifères Fracturés, Développement d'un Modèle Multi-Continua (Problèmes Direct et Inverse) et Application au Site du CEA/Cadarache*. Thèse, Université Montpellier II. doi:10.13140/RG.2.2.12906.52164 ; HAL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-01359286>, **209 pages**. 2002.

C.3 Présentations orales et posters cités dans le texte

Présentations orales citées dans le texte

- [O1] MARYSHEV B., C. LATRILLE, A. CARTALADE, M.-C. NÉEL, Adjoint state based data inversion for a fractional advection diffusion equation with non-uniform coefficients. InterPore Presentation, Rotherdam. 8-11 May **2017**.
- [O2] CARTALADE A., S. SCHULLER et M.-E. PASQUINI, *Modèle « H » pour la simulation de la démixtion dans les verres et les écoulements diphasiques*. Présentation au Groupe de Travail DNS. CEA/Saclay. 5 nov **2014**.
- [O3] CARTALADE A., A. YOUNSI, E. RÉGNIER AND S. SCHULLER, *Simulations of crystal growth and phase separation. An introduction to phase-field models*. Presentation of paper [P5]. SUMGLASS summer school. Nîmes, site du pont du Gard. Tuesday 24th, session 3, 10 :40am. 24 sept **2013**.
- [O4] CARTALADE A., *Avancement de l'Activité Modélisation de l'Auto-Creuset (Thématique AUDRIC)*. Presentation of unpublished work on non-newtonian flow simulated by LBM. CEA/Marcoule. Org. I. RIBET (chef de projet SIVIT), CEA-Marcoule. 4 nov **2010**.
- [O5] CARTALADE A., Presentation of paper [P10]. *Clays in Natural & Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement*. 2nd International Meeting, March 16, Tours, France. **2005**.

Posters cités dans le texte

- [PT1] KESTENER P., A. CARTALADE, A. GENTY, S. KOKH, Multi-architecture Implementation and Optimizations of Lattice Boltzmann Algorithms. Poster of Annual Fluid Mechanics workshop, Institut Henri Poincaré, Paris. 29-30 January **2019**. doi:10.13140/RG.2.2.12476.90241
- [PT2] *YOUNSI A., A. CARTALADE, M. PLAPP, *Lattice Boltzmann simulations of hydrodynamics effects on crystal growth of binary mixture. Best poster award* at the « Third International Symposium on Phase-Field Method – PFM2014 », presented by A. YOUNSI, State College, Pennsylvania, USA. **2014**. doi:10.13140/RG.2.2.11548.54404.
- [PT3] NÉEL M.-C., M. FLEURY, A. CARTALADE (Coordinateurs), *Transport Anormal en Milieu Poreux. PDF Rencontres du numérique ; Simulation et Calcul Haute Performance, ANR-09-SYSC-015, 17 et 18 avril. 2013*.
- [PT4] °RISCHETTE R., A. CARTALADE, G. LODS, *Modélisation inverse de l'état initial d'un système aquifère : approche par Back and Forth Nudging*. Poster présenté au GdR MOMAS. 14 nov. **2007**. 10.13140/RG.2.2.16528.46086

Acronymes

CAL3F CALibration Flow for Fractured Formation.

MPI Message Passing Interface.

SILABE3D SIMulations by LAttice Boltzmann Equation 3D.

ADE Advection-Diffusion Equation.

AMR Automatic Mesh Refinement.

ANDRA Agence Nationale pour la gestion des Déchets Radioactifs.

ANR Agence Nationale de la Recherche.

BEETI Banc Expérimental pour l'Etude du Transport Insaturé.

BGK Bhatnagar-Gross-Krook (opérateur de collision LBM).

CAC modèle Conservatif de Allen-Cahn.

CALPHAD CALculation of PHase Diagram.

CCRT Centre de Calcul Recherche et Technologie.

CEA Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives.

CFD Computational Fluid Dynamics.

CH modèle de Cahn-Hilliard.

COSTO projet COLis en STOCKage.

CPU Central Processing Unit.

CTRW Continuous Times Random Walks.

DAM Direction des Applications Militaires.

DD Dérivées Directionnelles (méthode numérique).

DE2D Département pour l'Enrichissement, le Démantèlement et les Déchets.

Den Direction de l'Energie Nucléaire.

DI expérience de Diffusion Inerte.

DM2S Département de Modélisation des Systèmes et Structures.

DPC Département de Physico-Chimie.

DRF Direction de la Recherche Fondamentale.

DRT Direction de la Recherche Technologique.

DSFD International conference on Discrete Simulation of Fluid Dynamics.

EDF Electricité de France.

EDP Equation aux Dérivées Partielles.

FD Finite difference (méthode numérique).

GdR Groupement de Recherche.

GENCI Grand Equipement National de Calcul Intensif.

GPU Graphics Processing Unit.

HPC High Performance Computing.

IDRIS Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique.

IFPEN Institut Français du Pétrole et des Energies Nouvelles.

IMFT Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse.

INRIA Institut National de Recherche en Informatique et Automatique.

IRSN Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire.

IRSTEA Institut national de Recherche en Sciences et Technologies pour l'Environnement et l'Agriculture.

l.u. lattice unit.

LBE Lattice Boltzmann Equation.

LBM Lattice Boltzmann Method.

LSET Laboratoire de Simulation des Ecoulements et du Transport.

MAVL projet Moyenne Activité et Vie Longue.

MDLS Maison De La Simulation.

MEB Microscope Electronique à Balayage.

MIM Modèle eau Immobile eau Mobile.

MLUPS Million Lattice Updates Per Second.

MOMAS MOdélisation MATHématique pour le Stockage.

MRIMP projet Maîtrise des Risques et IMPacts.

MRISQ projet Maîtrise des RISques.

MRT Multiple-Relaxation-Times (opérateur de collision LBM).

NS Navier-Stokes.

ORANO anciennement AREVA NC.

PFC Phase-Field Crystals.

PSI Paul Scherrer Institut.

RMN Résonance Magnétique Nucléaire.

RW Random Walks.

SITHY projet Simulation de la Thermo-HYdraulique.

SIVIT projet SIMulation de la VITrification.

STMF Service de Thermo-hydraulique et Mécanique des Fluides.

STOEN projet STOCKage et ENTreposage.

TGCC Très Grand Centre de Calcul du CEA.

TRAM projet TRansport Anormal en Milieux poreux.

TRT Two-Relaxation-Times (opérateur de collision LBM).

VDF Volumes-Différences Finies (méthode numérique).

Bibliographie

- [1] E. Studer, D. Abdo, S. Benteboula, G. Bernard-Michel, N. Coulon, F. Dabbene, S. Kudriakov, J.-P. Magnaud, O. Norvez, R. Tomassian, J.-L. Widloecher, A. Beccantini, S. Gounand, J. Brinster, A. Bentaib, S. Guieu, N. Mechtoua, Sûreté des réacteurs : la connaissance du risque hydrogène enrichie de 20 ans de R&D, RGN (1) (2018) 48–53. doi: [10.1051/rgn/20181048](https://doi.org/10.1051/rgn/20181048).
- [2] M. C. Nguyen, M. Medale, O. Asserin, S. Gounand, P. Gilles, Sensivity to welding positions in GTA welding with a 3D multiphysics numerical model, Numerical Heat Transfer, Part A : Applications 71 (3) (2017) 233–249. doi: [10.1080/10407782.2016.1264747](https://doi.org/10.1080/10407782.2016.1264747).
- [3] G. Chavent, Identification of functional parameters in partial differential equations, The American Society of Mechanical Engineers, Austin, Texas, USA, 1974.
- [4] J. Nocedal, S. Wright, Numerical Optimization, Springer-Verlag, Berlin, New York, 1999. doi: [10.1007/978-0-387-40065-5](https://doi.org/10.1007/978-0-387-40065-5).
- [5] R. Byrd, P. Lu, J. Nocedal, C. Zhu, A limited memory algorithm for bound constrained optimization, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing 16 (1995) 1190–1208. doi: [10.1137/0916069](https://doi.org/10.1137/0916069).
- [6] H. B. Ameer, G. Chavent, J. Jaffré, Refinement and coarsening indicators for adaptive parametrization : application to the estimation of hydraulic transmissivities, Inverse Problems 18 (3) (2002) 775–794. doi: [10.1088/0266-5611/18/3/317](https://doi.org/10.1088/0266-5611/18/3/317).
- [7] Code CEA Cast3M, <http://www-cast3m.cea.fr/>.
- [8] D. Auroux, J. Blum, Back and forth nudging algorithm for data assimilation problems, Comptes Rendus Mathematique 340 (12) (2005) 873 – 878. doi: [10.1016/j.crma.2005.05.006](https://doi.org/10.1016/j.crma.2005.05.006).
- [9] Code CEA TrioCFD, <http://www-trio-u.cea.fr>.
- [10] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, E. Viggen, The Lattice Boltzmann Method. Principles and Practice, Springer, 2017. doi: [10.1007/978-3-319-44649-3](https://doi.org/10.1007/978-3-319-44649-3).
- [11] H. Huang, M. Sukop, X.-Y. Lu, Multiphase Lattice Boltzmann Methods. Theory and Application, Wiley & Sons, 2015.
- [12] Z. Guo, C. Shu, Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering, World Scientific, 2013. doi: [10.1142/8806](https://doi.org/10.1142/8806).
- [13] S. Succi, The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond, Oxford Science Publication, 2001.
- [14] S. Chen, G. Doolen, Lattice Boltzmann Method for fluid flows, Annual Reviews of Fluid Mechanics 30 (1998) pp. 329–364. doi: [10.1146/annurev.fluid.30.1.329](https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.30.1.329).
- [15] Q. Li, K. Luo, Q. Kang, Y. He, Q. Chen, Q. Liu, Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer, Progress in Energy and Combustion Science 52 (2016) 62 – 105. doi: [10.1016/j.pecs.2015.10.001](https://doi.org/10.1016/j.pecs.2015.10.001).
- [16] F. Dubois, Une introduction au schéma de Boltzmann sur réseau, Esaim : Proceedings 18 (2007) pp. 181–215. doi: [10.1051/proc:071815](https://doi.org/10.1051/proc:071815).
- [17] S. Dellacherie, Construction and Analysis of Lattice Boltzmann Methods Applied to a 1D Convection-Diffusion Equation, Acta Applicandae Mathematicae 131 (1) (2014) pp. 69–140. doi: [10.1007/s10440-013-9850-3](https://doi.org/10.1007/s10440-013-9850-3).
- [18] N. Provatas, K. Elder, Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering, Wiley-VCH, 2010.

- [19] I. Singer-Loginova, H. M. Singer, The phase field technique for modeling multiphase materials, *Reports on Progress in Physics* 71 (2008) 106501. doi:10.1088/0034-4885/71/10/106501.
- [20] I. Steinbach, Phase-field models in materials science, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 17 (2009) pp. 1–31. doi:10.1088/0965-0393/17/7/073001.
- [21] D. Anderson, G. McFadden, A. Wheeler, Diffuse-interface methods in fluid mechanics, *Annual Reviews of Fluid Mechanics* 30 (1998) pp. 139–165. doi:10.1146/annurev.fluid.30.1.139.
- [22] G. Demange, L. Lunéville, V. Pontikis, D. Simeone, Prediction of irradiation induced microstructures using a multiscale method coupling atomistic and phase field modeling : Application to the AgCu model alloy, *Journal of Applied Physics* 121 (12) (2017) 125108. doi:10.1063/1.4978964.
- [23] C. Cardon, R. L. Tellier, M. Plapp, Modelling of liquid phase segregation in the Uranium–Oxygen binary system, *Calphad* 52 (2016) 47 – 56. doi:10.1016/j.calphad.2015.10.005.
- [24] G. Gibert, B. Prabel, A. Gravouil, C. Jacquemoud, A 3d automatic mesh refinement x-fem approach for fatigue crack propagation, *Finite Elements in Analysis and Design* 157 (2019) 21 – 37. doi:10.1016/j.finel.2019.01.008.
- [25] T. Abe, Derivation of the Lattice Boltzmann Method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann equation, *Journal of Computational Physics* 131 (1997) pp. 241–246. doi:10.1006/jcph.1996.5595.
- [26] X. He, L.-S. Luo, Theory of the lattice Boltzmann method : From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation, *Physical Review E* 56 (6) (1997) pp. 6811–6817. doi:10.1103/PhysRevE.56.6811.
- [27] P. Bhatnagar, E. Gross, M. Krook, A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems, *Physical Review* 94 (3) (1954) pp. 511–25. doi:10.1103/PhysRev.94.511.
- [28] F. Higuera, J. Jiménez, Boltzmann Approach to Lattice Gas Simulations, *Europhysics Letters (EPL)* 9 (7) (1989) 663–668. doi:10.1209/0295-5075/9/7/009.
- [29] F. Higuera, S. Succi, R. Benzi, Lattice Gas Dynamics with Enhanced Collisions, *Europhysics Letters (EPL)* 9 (4) (1989) 345–349. doi:10.1209/0295-5075/9/4/008.
- [30] Y. H. Qian, D. d’Humières, P. Lallemand, Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation, *Europhysics Letters* 17 (6) (1992) pp. 479–484. doi:10.1209/0295-5075/17/6/001.
- [31] F. Dubois, Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme, *Computers & Mathematics with Applications* 55 (7) (2008) 1441 – 1449, *mesoscopic Methods in Engineering and Science*. doi:10.1016/j.camwa.2007.08.003.
- [32] U. Ghia, U. Ghia, T. Shin, High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, *Journal of Computational Physics* 48 (1982) pp. 387–411. doi:10.1016/0021-9991(82)90058-4.
- [33] Q. Zou, X. He, On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model, *Physics of Fluids* 9 (6) (1997) 1591–1598. doi:10.1063/1.869307.
- [34] I. Ginzburg, Equilibrium-type and link-type lattice Boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation, *Advances in Water Resources* 28 (2005) pp. 1171–1195. doi:10.1016/j.advwatres.2005.03.004.
- [35] D. D’Humières, Generalized Lattice-Boltzmann Equations, pp. 450–458, *prog. Astronaut. Aeronaut.* 59. doi:10.2514/5.9781600866319.0450.0458.
- [36] D. d’Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, L.-S. Luo, Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* 360 (2002) pp. 437–451. doi:10.1098/rsta.2001.0955.
- [37] H. Yoshida, M. Nagaoka, Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for the convection and anisotropic diffusion equation, *Journal of Computational Physics* 229 (2010) pp. 7774–7795. doi:10.1016/j.jcp.2010.06.037.
- [38] I. V. Karlin, A. N. Gorban, S. Succi, V. Boffi, Maximum Entropy Principle for Lattice Kinetic Equations, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 6–9. doi:10.1103/PhysRevLett.81.6.
- [39] S. Ansumali, I. V. Karlin, H. C. Öttinger, Minimal entropic kinetic models for hydrodynamics, *EPL (Europhysics Letters)* 63 (6) (2003) 798. doi:10.1209/epl/i2003-00496-6.

- [40] J. Latt, B. Chopard, Lattice Boltzmann method with regularized pre-collision distribution functions, *Mathematics and Computers in Simulation* 72 (2) (2006) 165 – 168. doi:10.1016/j.matcom.2006.05.017.
- [41] E. Ezzatneshan, Comparative study of the lattice Boltzmann collision models for simulation of incompressible fluid flows, *Mathematics and Computers in Simulation* 156 (2019) 158 – 177. doi:10.1016/j.matcom.2018.07.013.
- [42] T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, N. Konishi, A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences, *Journal of Computational Physics* 198 (2) (2004) 628 – 644. doi:10.1016/j.jcp.2004.01.019.
- [43] Y. Q. Zu, S. He, Phase-field-based lattice Boltzmann model for incompressible binary fluid systems with density and viscosity contrasts, *Phys. Rev. E* 87 (2013) 043301. doi:10.1103/PhysRevE.87.043301.
- [44] A. J. Chorin, A numerical method for solving incompressible viscous flow problems, *Journal of Computational Physics* 2 (1) (1967) 12 – 26. doi:10.1016/0021-9991(67)90037-X.
- [45] X. He, L.-S. Luo, Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier–Stokes equation, *Journal of Statistical Physics* 88 (3) (1997) 927–944. doi:10.1023/B:JOSS.0000015179.12689.e4.
- [46] P. Lallemand, F. Dubois, Comparison of simulations of convective flows, *Communications in Computational Physics* 17 (5) (2015) 1169–1184. doi:10.4208/cicp.2014.m400.
- [47] G. Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, The Oxford engineering science series, Clarendon Press, 1994.
- [48] X. Shan, H. Chen, Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Phys. Rev. E* 47 (1993) 1815–1819. doi:10.1103/PhysRevE.47.1815.
- [49] X. Shan, H. Chen, Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation, *Phys. Rev. E* 49 (1994) 2941–2948. doi:10.1103/PhysRevE.49.2941.
- [50] G. De Vahl Davis, Natural convection of air in a square cavity : A bench mark numerical solution, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 3 (3) (1983) 249–264. doi:10.1002/flid.1650030305.
- [51] Z. Guo, T. Zhao, Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media, *Physical Review E* 66 (2002) 036304. doi:10.1103/PhysRevE.66.036304.
- [52] S. Whitaker, *The Method of Volume Averaging. Theory and Applications of Transport in Porous Media* 13, Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [53] A. Beccantini, E. Studer, S. Gounand, J.-P. Magnaud, T. Kloczko, C. Corre, S. Kudriakov, Numerical simulations of a transient injection flow at low Mach number regime, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 76 (5) (2008) 662–696. doi:10.1002/nme.2331.
- [54] M. Elmo, O. Cioni, Low mach number model for compressible flows and application to htr, *Nuclear Engineering and Design* 222 (2) (2003) 117 – 124, hTR-2002 1st international topical meeting on High Temperature reactor technology. doi:10.1016/S0029-5493(03)00014-1.
- [55] H. Safari, M. Krafczyk, M. Geier, A Lattice Boltzmann model for thermal compressible flows at low Mach numbers beyond the Boussinesq approximation, *Computers & Fluids* doi:10.1016/j.compfluid.2018.04.016.
- [56] M. Krafczyk, J. Tölke, L.-S. Luo, Large-Eddy Simulations with a Multiple-Relaxation-Times LBE model, *International Journal of Modern Physics B* 17 (01n02) (2003) 33–39. doi:10.1142/S0217979203017059.
- [57] O. Malaspinas, P. Sagaut, Wall model for large-eddy simulation based on the lattice Boltzmann method, *Journal of Computational Physics* 275 (2014) 25 – 40. doi:10.1016/j.jcp.2014.06.020.
- [58] C. Flint, G. Vahala, A large eddy lattice Boltzmann simulation of magnetohydrodynamic turbulence, *Physics Letters A* 382 (6) (2018) 405 – 411. doi:10.1016/j.physleta.2017.12.016.
- [59] M. Han, R. Ooka, H. Kikumoto, Lattice Boltzmann method-based large-eddy simulation of indoor isothermal airflow, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 130 (2019) 700 – 709. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.10.137.
- [60] M. Weickert, G. Teike, O. Schmidt, M. Sommerfeld, Investigation of the LES WALE turbulence model within the lattice Boltzmann framework, *Computers & Mathematics with Applications* 59 (7) (2010) 2200 – 2214, mesoscopic Methods in Engineering and Science. doi:10.1016/j.camwa.2009.08.060.

- [61] S. Succi, G. Amati, R. Benzi, Challenges in lattice Boltzmann computing, *Journal of Statistical Physics* 81 (1) (1995) 5–16. doi:10.1007/BF02179964.
- [62] O. Filippova, S. Succi, F. Mazzocco, C. Arrighetti, G. Bella, D. Hänel, Multiscale Lattice Boltzmann Schemes with Turbulence Modeling, *Journal of Computational Physics* 170 (2) (2001) 812 – 829. doi:10.1006/jcph.2001.6764.
- [63] A. Gagnoud, Modélisation des installations de fusion en creuset froid pour l’élaboration en continu ou la lévitation, Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble (1986).
- [64] D. Saumabère, Modélisation numérique magnéto-thermique avec prise en compte du transfert radiatif dans les procédés d’élaboration des verres par induction en creuset froid, Ph.D. thesis, Institut National Polytechnique de Grenoble (1994).
- [65] L. Jacoutot, Modélisation numérique de phénomènes couplés dans des bains de verre brassés mécaniquement et élaborés en creuset froid inductif, Ph.D. thesis, INPG (2006).
- [66] E. Sauvage, Modélisation numérique thermo-hydrodynamique et inductive d’une fonte verrière élaborée en creuset froid inductif, Thèse INPG, Université de Grenoble (2009).
- [67] M. L. da Silva, Modélisation de la vidange d’une fonte verrière chauffée par induction, Institut National Polytechnique de Grenoble, Université de Grenoble (2014).
- [68] G. Barba Rossa, Modélisation multiphysique de l’élaboration de verre en creuset froid, Ph.D. thesis, Communauté Université Grenoble Alpes (2017).
- [69] I. Ribet, et al., Projet SIVIT. note d’orientation de la simulation de la vitrification sur 2010-2020, Tech. Rep. NT/2010/03, CEA–Marcoule, DEN, MAR, DTCD (2010).
- [70] O. Delattre, Cristallisation de fontes verrières d’intérêt nucléaire en présence d’un gradient thermique : application aux auto-creusets produits en creuset froid, Ph.D. thesis, Université d’Orléans (2014).
- [71] X. Orlhac, étude de la stabilité thermique du verre nucléaire. modélisation de son évolution à long terme, Thèse cea-r-5895, Université Montpellier II (1999).
- [72] J. Renaud, Cinétiques de dissolution des cristaux dans les silicates fondus – contexte des verres nucléaires, Thèse CEA-UMII, Université Montpellier II (2017).
- [73] N. Chouard, Structure, stabilité thermique et résistance sous irradiation externe de verres aluminoborosilicatés riches en terres rares et en molybdène, Thèse CEA-UPMC, Université Pierre et Marie Curie (2011).
- [74] I. Ribet, Plan de développement SIVIT 2013-2020, Tech. Rep. NT/2014 DR-01, CEA–Marcoule, DEN, MAR, DTCD, DIR (2013).
- [75] A. Brent, V. Voller, K. Reid, Enthalpy-porosity technique for modeling convection-diffusion phase change : Application to the melting of a pure metal, *Numerical Heat Transfer* 13 (3) (1988) 297–318. doi:10.1080/10407788808913615.
- [76] W.-S. Jiaung, J.-R. Ho, C.-P. Kuo, Lattice Boltzmann method for the heat conduction problem with phase change, *Numerical Heat Transfer* 39 (2) (2001) pp. 167–187. doi:10.1080/10407790150503495.
- [77] M. Özisik, *Heat conduction*, Wiley, 1980.
- [78] D. Chatterjee, S. Chakraborty, A hybrid lattice Boltzmann model for solid-liquid phase transition in presence of fluid flow, *Physics Letters A* 351 (2006) pp. 359–367. doi:10.1016/j.physleta.2005.11.014.
- [79] C. Huber, A. Parmigiani, B. Chopard, M. Manga, O. Bachmann, Lattice Boltzmann model for melting with natural convection, *International Journal of Heat and Fluid Flow* 29 (5) (2008) 1469 – 1480. doi:10.1016/j.ijheatfluidflow.2008.05.002.
- [80] W. J. Boettinger, J. A. Warren, C. Beckermann, A. Karma, Phase-field Simulation of Solidification, *Annual Review of Materials Research* 32 (2002) pp. 163–194. doi:10.1146/annurev.matsci.32.101901.155803.
- [81] H. Emmerich, *The Diffuse Interface Approach in Materials Science. Thermodynamic Concepts and Applications of Phase-Field Models*, Vol. m 73, Springer-Verlag, 2003. doi:10.1007/3-540-36409-9.
- [82] G. Caginalp, Stefan and hele-shaw type models as asymptotic limits of the phase-field equations, *Physical Review A* 39 (1989) 5887–5896. doi:10.1103/PhysRevA.39.5887.

- [83] R. F. Almgren, Second-order phase field asymptotics for unequal conductivities, *Siam Journal on Applied Mathematics* 59 (6) (1999) pp. 2086–2107. doi:10.1137/S0036139997330027.
- [84] S.-L. Wang, R. F. Sekerda, A. A. Wheeler, B. T. Murray, S. R. Coriell, R. J. Braun, G. B. McFadden, Thermodynamically-consistent phase-field models for solidification, *Physica D* 69 (1993) pp. 189–200. doi:10.1016/0167-2789(93)90189-8.
- [85] A. A. Wheeler, B. T. Murray, R. J. Schaefer, Computation of dendrites using phase field model, *Physica D* 66 (1993) pp. 243–262. doi:10.1016/0167-2789(93)90242-S.
- [86] A. Karma, W.-J. Rappel, Phase-field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics, *Physical Review E* 53 (4) (1996) R3017–R3020. doi:10.1103/PhysRevE.53.R3017.
- [87] A. Karma, W.-J. Rappel, Quantitative phase-field modeling of dendritic growth in two and three dimensions, *Physical Review E* 57 (4) (1998) pp. 4323–4349. doi:10.1103/PhysRevE.57.4323.
- [88] C. Beckermann, H.-J. Diepers, I. Steinbach, A. Karma, X. Tong, Modeling melt convection in phase-field simulations of solidification, *Journal of Computational Physics* 154 (2) (1999) 468 – 496. doi:10.1006/jcph.1999.6323.
- [89] C. C. Chen, Y. L. Tsai, C. W. Lan, Adaptive phase field simulation of dendritic crystal growth in a forced flow : 2d vs 3d morphologies, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 52 (2009) pp. 1158–1166. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2008.09.014.
- [90] A. Younsi, Simulations par méthode de Boltzmann sur réseau d’un modèle à champ de phase pour les problèmes de croissance cristalline III : solidification d’un mélange binaire dilué, Tech. Rep. LATF/NT/13-033/A, CEA–Saclay, DEN, DM2S, STMF, LATF (2013).
- [91] B. Echebarria, R. Folch, A. Karma, M. Plapp, Quantitative phase-field model of alloy solidification, *Physical Review E* 70 (061604) (2004) pp. 1–22. doi:10.1103/PhysRevE.70.061604.
- [92] J. C. Ramirez, C. Beckermann, A. Karma, H.-J. Diepers, Phase-field modeling of binary alloy solidification with coupled heat and solute diffusion, *Physical Review E* 69 (051607) (2004) 1–16. doi:10.1103/PhysRevE.69.051607.
- [93] A. Younsi, Simulations des effets des écoulements sur la croissance cristalline d’un mélange binaire. approche par méthode de boltzmann sur réseau, Ph.D. thesis, Thèse CEA–Ecole Polytechnique, <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01221833/document> (2015).
- [94] J. Hoyt, M. Asta, A. Karma, Atomistic and continuum modeling of dendritic solidification, *Materials Science and Engineering : R : Reports* 41 (6) (2003) pp. 121–163. doi:10.1016/S0927-796X(03)00036-6.
- [95] T. Haxhimali, A. Karma, F. Gonzales, M. Rappaz, Orientation selection in dendritic evolution, *Nature Materials* 5 (2006) pp. 660–664. doi:10.1038/nmat1693.
- [96] M. Plapp, Unified derivation of phase-field models for alloy solidification from a grand-potential functional, *Physical Review E* 84 (031601) (2011) 1–15. doi:10.1103/PhysRevE.84.031601.
- [97] A. Karma, Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification, *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001) 115701. doi:10.1103/PhysRevLett.87.115701.
- [98] E. A. Brener, G. Boussinot, Kinetic cross coupling between nonconserved and conserved fields in phase field models, *Phys. Rev. E* 86 (2012) 060601. doi:10.1103/PhysRevE.86.060601.
- [99] A. Fang, Y. Mi, Recovering thermodynamic consistency of the antitrapping model : A variational phase-field formulation for alloy solidification, *Phys. Rev. E* 87 (2013) 012402. doi:10.1103/PhysRevE.87.012402.
- [100] S. Walsh, M. Saar, Macroscale lattice-Boltzmann methods for low Peclet number solute and heat transport in heterogeneous porous media, *Water Resources Research* 46 (W07517) (2010) 1–15. doi:10.1029/2009WR007895.
- [101] M. Plapp, A. Karma, Multiscale finite-difference-diffusion-monte-carlo method for simulating dendritic solidification, *Journal of Computational Physics* 165 (2000) pp. 592–619. doi:10.1006/jcph.2000.6634.
- [102] J. Bragard, A. Karma, Y. H. Lee, M. Plapp, Linking phase-field and atomistic simulations to model dendritic solidification in highly undercooled melts, *Interface Science* 10 (2002) pp. 121–136. doi:10.1023/A:1015815928191.

- [103] T. Lee, P. F. Fischer, Eliminating parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for non ideal gases, *Physical Review E* 74 (2006) 046709. doi:10.1103/PhysRevE.74.046709.
- [104] T. Lee, Effects of incompressibility on the elimination of parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for binary fluids, *Computers and Mathematics with Applications* 58 (2009) pp. 987–994. doi:10.1016/j.camwa.2009.02.017.
- [105] T. Lee, L. Liu, Lattice Boltzmann simulations of micron-scale drop impact on dry surfaces, *Journal of Computational Physics* 229 (2010) 8045–8063. doi:10.1016/j.jcp.2010.07.007.
- [106] J. Renaud, étude de faisabilité du suivi de la dissolution de cristaux dans un verre par drx en température, Tech. Rep. NT/2014-14, CEA–Marcoule, DEN, MAR, DTCD, SECM (2014).
- [107] W. Fehlnner, S. Vosko, A product representation for cubic harmonics and special directions for the determination of the fermi surface and related properties, *Canadian Journal of Physics* 54 (1976) pp. 2159–2169. doi:10.1139/p76-256.
- [108] F. Podmaniczky, G. Tóth, T. Pusztai, L. Gránásy, Free energy of the bcc–liquid interface and the wulff shape as predicted by the phase-field crystal model, *Journal of Crystal Growth* 385 (2014) pp. 148–153. doi:10.1016/j.jcrysgro.2013.01.036.
- [109] J. Dantzig, P. D. Napoli, J. Friedli, M. Rappaz, Dendritic growth morphologies in al-zn alloys–part ii : Phase-field computations, *Metallurgical and Materials Transactions A* 44A (12) (2013) pp. 5532–5543. doi:10.1007/s11661-013-1911-8.
- [110] D. Medvedev, K. Kassner, Lattice boltzmann scheme for crystal growth in external flows, *Phys. Rev. E* 72 (2005) 056703. doi:10.1103/PhysRevE.72.056703.
- [111] D. Sun, M. Zhu, S. Pan, C. Yang, D. Raabe, Lattice boltzmann modeling of dendritic growth in forced and natural convection, *Computers & Mathematics with Applications* 61 (12) (2011) 3585 – 3592, *mesoscopic Methods for Engineering and Science – Proceedings of ICMES-09*. doi:10.1016/j.camwa.2010.11.001.
- [112] M. Do-Quang, G. Amberg, Simulation of free dendritic crystal growth in a gravity environment, *Journal of Computational Physics* 227 (3) (2008) 1772 – 1789. doi:10.1016/j.jcp.2007.09.025.
- [113] D. Medvedev, F. Varnik, I. Steinbach, Simulating mobile dendrites in a flow, *Procedia Computer Science* 18 (2013) 2512 – 2520, *2013 International Conference on Computational Science*. doi:10.1016/j.procs.2013.05.431.
- [114] R. Rojas, T. Takaki, M. Ohno, A phase-field-lattice boltzmann method for modeling motion and growth of a dendrite for binary alloy solidification in the presence of melt convection, *Journal of Computational Physics* 298 (2015) 29 – 40. doi:doi.org/10.1016/j.jcp.2015.05.045.
- [115] K. R. Elder, M. Grant, Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals, *Phys. Rev. E* 70 (2004) 051605. doi:10.1103/PhysRevE.70.051605.
- [116] K. R. Elder, N. Provatas, J. Berry, P. Stefanovic, M. Grant, Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 064107. doi:10.1103/PhysRevB.75.064107.
- [117] H. Emmerich, H. Löwen, R. Wittkowski, T. Gruhn, G. I. Tóth, G. Tegze, L. Gránásy, Phase-field-crystal models for condensed matter dynamics on atomic length and diffusive time scales : an overview, *Advances in Physics* 61 (6) (2012) 665–743. doi:10.1080/00018732.2012.737555.
- [118] Y. Wei, C. Yang, J. Huang, Parallel energy-stable phase field crystal simulations based on domain decomposition methods, *Computer Physics Communications* 234 (2019) 26 – 39. doi:10.1016/j.cpc.2018.08.006.
- [119] H. Otomo, B. M. Boghosian, F. Dubois, Two complementary lattice-Boltzmann-based analyses for nonlinear systems, *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 486 (2017) 1000 – 1011. doi:10.1016/j.physa.2017.06.010.
- [120] H. Otomo, B. M. Boghosian, F. Dubois, Efficient lattice Boltzmann models for the Kuramoto–Sivashinsky equation, *Computers & Fluids* 172 (2018) 683 – 688. doi:10.1016/j.compfluid.2018.01.036.
- [121] L. Richards, Capillary conduction of liquids through porous mediums, *Physics* 1 (1931) pp. 318–333. doi:10.1063/1.1745010.
- [122] Y. Mualem, A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media, *Water Resources Research* 12 (3) (1976) 513–522. doi:10.1029/WR012i003p00513.

- [123] M. van Genuchten, A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, *Soil Science Society of America Journal* 44 (5) (1980) 492–498. doi:10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x.
- [124] T. Vogel, M. van Genuchten, M. Cislerova, Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions, *Advances in Water Resources* 24 (2) (2000) 133 – 144. doi:10.1016/S0309-1708(00)00037-3.
- [125] I. Ginzburg, J.-P. Carlier, C. Kao, Lattice Boltzmann approach to Richards' equation, in : C. T. Miller, M. W. Farthing, W. G. Gray, G. F. Pinder (Eds.), *Computational Methods in Water Resources : Volume 1*, Vol. 55 of *Developments in Water Science*, Elsevier, 2004, pp. 583 – 595, archive Inria https://www.rocq.inria.fr/pomdapi/Archives/Estime/DYNAS/PDF/ig_cmwr_2004.pdf. doi:10.1016/S0167-5648(04)80083-2.
- [126] A. Wissocq, Etude du transport réactif de sr et cs dans un sédiment grésio-argileux carbonaté du site de cadarache, Thèse CEA-UEVE, Université d'Évry-Val-d'Essonne.
- [127] C. Caubit, H. Bertin, G. Hamon, Three-phase saturation measurement during gravity drainage and tertiary waterflood : improvement of dual energy gamma-ray attenuation technique, in : *Proceeding of the International Symposium of the Society of Core Analysts held in Abu Dhabi, UAE, 5-9 October, 2004*.
- [128] D. Gharbi, H. Bertin, A. OMARI, Use of gamma ray attenuation technique to study colloid deposition in porous media, *Experiments in Fluids* 37 (5) (2004) 665–672. doi:10.1007/s00348-004-0853-8.
- [129] J. Bear, A. Verruijt, *Modeling Groundwater Flow Pollution*, D. Reidel Publishing Compagny, 1987.
- [130] I. Y. Padilla, T.-C. J. Yeh, M. H. Conklin, The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media, *Water Resources Research* 35 (11) (1999) 3303–3313. doi:10.1029/1999WR900171.
- [131] G. Nützmann, S. Maciejewski, K. Joswig, Estimation of water saturation dependence of dispersion in unsaturated porous media : experiments and modelling analysis, *Advances in Water Resources* 25 (5) (2002) 565 – 576. doi:10.1016/S0309-1708(02)00018-0.
- [132] A. Cortis, B. Berkowitz, Anomalous transport in Classical Soil and Sand Columns, *Soil Science Society of America Journal* 68 (2004) 1539–1548. doi:10.2136/sssaj2004.1539.
- [133] M. Bromly, C. Hinz, Non-fickian transport in homogeneous unsaturated repacked sand, *Water Resources Research* 40 (W07402). doi:10.1029/2003WR002579.
- [134] K. Coats, B. Smith, Dead-end pore volume and dispersion in porous media, *Society of Petroleum Engineers Journal* 4 (1) (1964) pp. 73–84. doi:10.2118/647-PA.
- [135] M. van Genuchten, P. Wierenga, Mass transfer studies in sorbing porous media i. analytical solutions, *Soil Sci Soc Am J* 40 (1976) pp. 473–80.
- [136] J.-P. Gaudet, H. Jegat, G. Vachaud, P. Wierenga, Solute transfer with exchange between mobile and stagnant water through unsaturated sand, *Soil Science Society of America Journal* 41 (1977) 665–671.
- [137] S. Cadalen, Transport d'un polluant dans des sables argileux : écoulement réactif en milieu poreux saturé ou non-saturé en eau., Ph.D. thesis, Thèse CEA-INP Toulouse, <http://ethesis.inp-toulouse.fr/archive/00000962/01/cadalen.pdf> (2015).
- [138] N. Krepsysheva, L. D. Pietro, M.-C. Néel, Fractional diffusion and reflective boundary condition, *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications* 368 (2) (2006) 355 – 361. doi:10.1016/j.physa.2005.11.046.
- [139] B. Duplantier, Le mouvement brownien, "divers et ondoyant", *Séminaire Poincaré* 1 (2005) 155 – 212, english version : <https://arxiv.org/abs/0705.1951v1>.
- [140] F. Delay, P. Ackerer, C. Danquigny, Simulating solute transport in porous or fractured formations using random walk particle tracking, *Vadose Zone Journal* 4 (2) (2005) pp. 360–379. doi:10.2136/vzj2004.0125.
- [141] B. Hughes, *Random Walks and Random Environments*, Vol. 1, Clarendon Press, 1995.
- [142] S. Borak, W. Härdle, R. Weron, Stable distributions, Tech. Rep. SFB 649 Discussion Paper 2005-008, Humboldt-Universität zu Berlin (2005).

- [143] E. W. Montroll, G. H. Weiss, Random Walks on Lattices. II, *Journal of Mathematical Physics* 6 (2) (1965) 167–181. doi:10.1063/1.1704269.
- [144] H. Scher, M. Lax, Stochastic Transport in a Disordered Solid. I. Theory, *Phys. Rev. B* 7 (1973) 4491–4502. doi:10.1103/PhysRevB.7.4491.
- [145] H. Scher, M. Lax, Stochastic Transport in a Disordered Solid. II. Impurity Conduction, *Phys. Rev. B* 7 (1973) 4502–4519. doi:10.1103/PhysRevB.7.4502.
- [146] B. Berkowitz, H. Scher, On Characterization of Anomalous Dispersion in Porous and Fractured Media, *Water Resources Research* 31 (6) (1995) 1461–1466. doi:10.1029/95WR00483.
- [147] B. Berkowitz, H. Scher, The Role of Probabilistic Approaches to Transport Theory in Heterogeneous Media, *Transport in Porous Media* 42 (1) (2001) 241–263. doi:10.1023/A:1006785018970.
- [148] A. Cortis, C. Gallo, H. Scher, B. Berkowitz, Numerical simulation of non-Fickian transport in geological formations with multiple-scale heterogeneities, *Water Resources Research* 40 (2004) W04209. doi:10.1029/2003WR002750.
- [149] R. Schumer, D. A. Benson, M. M. Meerschaert, B. Baeumer, Fractal mobile/immobile solute transport, *Water Resources Research* 39 (10). doi:10.1029/2003WR002141.
- [150] D. A. Benson, M. M. Meerschaert, A simple and efficient random walk solution of multi-rate mobile/immobile mass transport equations, *Advances in Water Resources* 32 (4) (2009) 532 – 539. doi:10.1016/j.advwatres.2009.01.002.
- [151] R. Haggerty, S. A. McKenna, L. C. Meigs, On the late-time behavior of tracer test breakthrough curves, *Water Resources Research* 36 (12) (2000) 3467–3479. doi:10.1029/2000WR900214.
- [152] W. R. Young, Arrested shear dispersion and other models of anomalous diffusion, *Journal of Fluid Mechanics* 193 (1988) 129–149. doi:10.1017/S0022112088002083.
- [153] S. G. Samko, A. A. Kilbas, O. I. Marichev, *Fractional integrals and derivatives : theory and applications*, Gordon and Breach, New York, 1993.
- [154] K. Diethelm, N. Ford, A. Freed, Y. Luchko, Algorithms for the fractional calculus : A selection of numerical methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 194 (6–8) (2005) 743–773. doi:10.1016/j.cma.2004.06.006.
- [155] N.-Z. Sun, *Inverse Problems in Groundwater Modeling, Theory and Applications of Transport in Porous Media*, Springer Netherlands. doi:10.1007/978-94-017-1970-4.
- [156] G. Chavent, *Nonlinear Least Squares for Inverse Problems, Scientific Computation*, Springer Netherlands. doi:10.1007/978-90-481-2785-6.
- [157] V. Guillon, M. Fleury, D. Bauer, M. C. Neel, Superdispersion in homogeneous unsaturated porous media using nmr propagators, *Phys. Rev. E* 87 (2013) 043007. doi:10.1103/PhysRevE.87.043007.
- [158] M.-C. Néel, D. Bauer, M. Fleury, Model to interpret pulsed-field-gradient nmr data including memory and superdispersion effects, *Phys. Rev. E* 89 (2014) 062121. doi:10.1103/PhysRevE.89.062121.
- [159] D. Benson, R. Schumer, M. Meerschaert, S. Wheatcraft, Fractional dispersion, lévy motion, and the made tracer tests, *Transport in Porous Media* 42 (1) (2001) 211–240. doi:10.1023/A:1006733002131.
- [160] J. Kelly, D. Bolster, M. Meerschaert, J. Drummond, A. Packmann, Fracfit : A robust parameter estimation tool for fractional calculus models, *Water Resources Research* 53 (2016WR019748) (2017) 2559–2567. doi:10.1002/20016WR019748.
- [161] Z. Yong, D. Benson, M. Meerschaert, H.-P. Scheffler, On using random walks to solve the space-fractional advection-dispersion equations, *Journal of Statistical Physics* 123 (1) (2006) 89–110. doi:10.1007/s10955-006-9042-x.
- [162] M. Meerschaert, A. Sikorskii, *Stochastic models for fractional calculus*, Vol. 43 of *Studies in Mathematics*, De Gruyter, Berlin, Boston, 2012.
- [163] J. Zhou, P. Haygarth, P. J. A. Withers, C. Macleod, P. Falloon, K. J. Beven, M. Ockenden, K. Forber, M. Hollaway, R. Evans, A. Collins, K. Hiscock, C. Wearing, R. Kahana, M. V. Velez, Lattice Boltzmann method for the fractional advection-diffusion equation, *Phys. Rev. E* 93 (2016) 043310. doi:10.1103/PhysRevE.93.043310.

- [164] P. Lallemand, L.-S. Luo, Theory of the lattice Boltzmann method : Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability, *Physical Review E* 61 (6) (2000) pp. 6546–6562. doi:10.1103/PhysRevE.61.6546.
- [165] J. Zhang, G. Yan, Lattice Boltzmann method for the fractional sub-diffusion equation, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 80 (8) (2016) 490–507. doi:10.1002/flid.4089.
- [166] F. Wang, X. Zhang, X. Shen, J. Sun, A lattice Boltzmann model for 2D fractional advection-dispersion equation : Theory and application, *Journal of Hydrology* 564 (2018) 246 – 255. doi:10.1016/j.jhydrol.2018.06.083.
- [167] J. F. Kelly, H. Sankaranarayanan, M. M. Meerschaert, Boundary conditions for two-sided fractional diffusion, *Journal of Computational Physics* 376 (2019) 1089 – 1107. doi:10.1016/j.jcp.2018.10.010.
- [168] M. Oostrom, Y. Mehmani, P. Romero-Gomez, Y. Tang, H. Liu, H. Yoon, Q. Kang, V. Joekar-Niasar, M. T. Balhoff, T. Dewers, G. D. Tartakovsky, E. A. Leist, N. J. Hess, W. A. Perkins, C. L. Rakowski, M. C. Richmond, J. A. Serkowski, C. J. Werth, A. J. Valocchi, T. W. Wietsma, C. Zhang, Pore-scale and continuum simulations of solute transport micromodel benchmark experiments, *Computational Geosciences* 20 (4) (2016) 857–879. doi:10.1007/s10596-014-9424-0.
- [169] C. Pan, L.-S. Luo, C. T. Miller, An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation, *Computers & Fluids* 35 (8) (2006) 898 – 909, proceedings of the First International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science. doi:10.1016/j.compfluid.2005.03.008.
- [170] V. Pot, S. Peth, O. Monga, L. Vogel, A. Genty, P. Garnier, L. Vieublé-Gonod, M. Ogurreck, F. Beckmann, P. Baveye, Three-dimensional distribution of water and air in soil pores : Comparison of two-phase two-relaxation-times lattice-Boltzmann and morphological model outputs with synchrotron x-ray computed tomography data, *Advances in Water Resources* 84 (2015) 87 – 102. doi:10.1016/j.advwatres.2015.08.006.
- [171] A. Genty, V. Pot, Numerical Calculation of Effective Diffusion in Unsaturated Porous Media by the TRT Lattice Boltzmann Method, *Transport in Porous Media* 105 (2) (2014) 391–410. doi:10.1007/s11242-014-0374-8.
- [172] A. Genty, S. Gueddani, M. Dymitrowska, Computation of Saturation Dependence of Effective Diffusion Coefficient in Unsaturated Argillite Micro-fracture by Lattice Boltzmann Method, *Transport in Porous Media* 117 (1) (2017) 149–168. doi:10.1007/s11242-017-0826-z.
- [173] M. Tekitek, M. Bouzidi, F. Dubois, P. Lallemand, Adjoint lattice Boltzmann equation for parameter identification, *Computers & Fluids* 35 (8) (2006) 805 – 813, proceedings of the First International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science. doi:10.1016/j.compfluid.2005.07.015.
- [174] S. Schuller, Processus de démixtion dans les verres, in : *Du verre au cristal : Nucléation, croissance et démixtion, De la recherche aux applications*, EDP Sciences, 2013, Ch. 4, pp. 77–106, sous la direction de Daniel R. Neuville, Laurent Cormier, Daniel Caurant et Lionel Montagne.
- [175] D. Bouttes, E. Gouillart, D. Dalmas, D. Vandembroucq, In situ observation of coarsening in a phase-separated glass, *AIP Conference Proceedings* 1518 (1) (2013) 487–494. doi:10.1063/1.4794622.
- [176] B. R. Wheaton, A. G. Clare, Evaluation of phase separation in glasses with the use of atomic force microscopy, *Journal of Non-Crystalline Solids* 353 (52) (2007) 4767 – 4778. doi:10.1016/j.jnoncrysol.2007.06.073.
- [177] H. Lukas, S. Fries, B. Sundman, *Computational Thermodynamics : the Calphad Method*, Cambridge University Press, 2007.
- [178] Calphad web page, <http://www.calphad.org/>.
- [179] S. Bordier, Modélisation thermodynamique des phases insolubles dans les verres nucléaires. application à la vitrification du molybdène et des produits de fission platinoides, Ph.D. thesis, Université de Marseille (2015).
- [180] S. Mimouni, A. Foissac, J. Lavieville, Cfd modelling of wall steam condensation by a two-phase flow approach, *Nuclear Engineering and Design* 241 (11) (2011) 4445 – 4455, 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13). doi:10.1016/j.nucengdes.2010.09.020.
- [181] S. O. Unverdi, G. Tryggvason, A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows, *Journal of Computational Physics* 100 (1) (1992) 25 – 37. doi:10.1016/0021-9991(92)90307-K.

- [182] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, Y.-J. Jan, A front-tracking method for the computations of multiphase flow, *Journal of Computational Physics* 169 (2) (2001) 708 – 759. doi:10.1006/jcph.2001.6726.
- [183] G. Bois, Direct numerical simulation of a turbulent bubbly flow in a vertical channel : Towards an improved second-order reynolds stress model, *Nuclear Engineering and Design* 321 (2017) 92 – 103, multi-scale multi-physics analysis of reactor transients in the NURES SAFE project. doi:10.1016/j.nucengdes.2017.01.023.
- [184] P. Lallemand, L.-S. Luo, Y. Peng, A lattice Boltzmann front-tracking method for interface dynamics with surface tension in two dimensions, *Journal of Computational Physics* 226 (2) (2007) 1367 – 1384. doi:10.1016/j.jcp.2007.05.021.
- [185] A. K. Gunstensen, D. H. Rothman, S. Zaleski, G. Zanetti, Lattice Boltzmann model of immiscible fluids, *Phys. Rev. A* 43 (1991) 4320–4327. doi:10.1103/PhysRevA.43.4320.
- [186] S. Leclaire, M. Reggio, J.-Y. Trépanier, Numerical evaluation of two recoloring operators for an immiscible two-phase flow lattice Boltzmann model, *Applied Mathematical Modelling* 36 (5) (2012) 2237 – 2252. doi:10.1016/j.apm.2011.08.027.
- [187] J. W. Cahn, J. E. Hilliard, Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *The Journal of Chemical Physics* 28 (2) (1958) 258–267. doi:10.1063/1.1744102.
- [188] D. Jasnow, J. Viñals, Coarse-grained description of thermo-capillary flow, *Physics of Fluids* 8 (3) (1996) 660–669. doi:10.1063/1.868851.
- [189] D. Jacqmin, Calculation of Two-Phase Navier-Stokes Flows Using Phase-Field Modeling, *Journal of Computational Physics* 155 (1999) pp. 96–127. doi:10.1006/jcph.1999.6332.
- [190] P. Yue, J. J. Feng, C. Liu, J. Shen, Diffuse-interface simulations of drop coalescence and retraction in viscoelastic fluids, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics* 129 (3) (2005) 163 – 176. doi:10.1016/j.jnnfm.2005.07.002.
- [191] V. Kendon, M. Cates, I. Pagonabarraga, J.-C. Desplat, P. Bladon, Inertial effects in three-dimensional spinodal decomposition of a symmetric binary fluid mixture : a lattice Boltzmann study, *Journal of Fluid Mechanics* 440 (2001) pp. 147–203. doi:10.1017/S0022112001004682.
- [192] H. Zheng, C. Shu, Y. Chew, A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio, *Journal of Computational Physics* 218 (2006) pp. 353–371. doi:10.1016/j.jcp.2006.02.015.
- [193] H. Safari, M. H. Rahimian, M. Krafczyk, Extended lattice Boltzmann method for numerical simulation of thermal phase change in two-phase fluid flow, *Phys. Rev. E* 88 (2013) 013304. doi:10.1103/PhysRevE.88.013304.
- [194] H. Safari, M. H. Rahimian, M. Krafczyk, Consistent simulation of droplet evaporation based on the phase-field multiphase lattice Boltzmann method, *Phys. Rev. E* 90 (2014) 033305. doi:10.1103/PhysRevE.90.033305.
- [195] Y. Sun, C. Beckermann, Sharp interface tracking using the phase-field equation, *Journal of Computational Physics* 220 (2) (2007) 626 – 653. doi:10.1016/j.jcp.2006.05.025.
- [196] P.-H. Chiu, Y.-T. Lin, A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows, *Journal of Computational Physics* 230 (1) (2011) 185 – 204. doi:10.1016/j.jcp.2010.09.021.
- [197] M. Geier, A. Fakhari, T. Lee, Conservative phase-field lattice Boltzmann model for interface tracking equation, *Phys. Rev. E* 91 (2015) 063309. doi:10.1103/PhysRevE.91.063309.
- [198] A. Fakhari, D. Bolster, L.-S. Luo, A weighted multiple-relaxation-time lattice Boltzmann method for multiphase flows and its application to partial coalescence cascades, *Journal of Computational Physics* 341 (2017) 22 – 43. doi:10.1016/j.jcp.2017.03.062.
- [199] T. Mitchell, C. Leonardi, A. Fakhari, Development of a three-dimensional phase-field lattice Boltzmann method for the study of immiscible fluids at high density ratios, *International Journal of Multiphase Flow* 107 (2018) 1 – 15. doi:10.1016/j.ijmultiphaseflow.2018.05.004.
- [200] D. Lee, J. Kim, Comparison study of the conservative Allen–Cahn and the Cahn–Hilliard equations, *Mathematics and Computers in Simulation* 119 (2016) 35 – 56. doi:10.1016/j.matcom.2015.08.018.

- [201] H. L. Wang, Z. H. Chai, B. C. Shi, H. Liang, Comparative study of the lattice Boltzmann models for allen-cahn and cahn-hilliard equations, *Phys. Rev. E* 94 (2016) 033304. doi:[10.1103/PhysRevE.94.033304](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.033304).
- [202] T. Lee, C.-L. Lin, A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio, *Journal of Computational Physics* 206 (2005) pp. 16–47. doi:[10.1016/j.jcp.2004.12.001](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.12.001).
- [203] A. Fakhari, M. H. Rahimian, Phase-field modeling by the method of lattice Boltzmann equations, *Phys. Rev. E* 81 (2010) 036707. doi:[10.1103/PhysRevE.81.036707](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.036707).
- [204] J. Huang, C. Shu, Y. Chew, Mobility-dependent bifurcations in capillarity-driven two-phase fluid systems by using a lattice Boltzmann phase-field model, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 60 (2009) pp. 203–225. doi:[10.1002/flid.1885](https://doi.org/10.1002/flid.1885).
- [205] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, J. Delhay, The Second Gradient Method for the Direct Numerical Simulation of Liquid–Vapor Flows with Phase Change, *Journal of Computational Physics* 169 (2) (2001) 624 – 651. doi:[10.1006/jcph.2000.6692](https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6692).
- [206] D. Chiappini, G. Bella, S. Succi, S. Ubertini, Applications of finite-difference lattice Boltzmann method to breakup and coalescence in multiphase flows, *International Journal of Modern Physics C* 20 (11) (2009) 1803–1816. doi:[10.1142/S0129183109014746](https://doi.org/10.1142/S0129183109014746).
- [207] R. Haghani Hassan Abadi, A. Fakhari, M. H. Rahimian, Numerical simulation of three-component multiphase flows at high density and viscosity ratios using lattice Boltzmann methods, *Phys. Rev. E* 97 (2018) 033312. doi:[10.1103/PhysRevE.97.033312](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.033312).
- [208] J. Kim, A continuous surface tension force formulation for diffuse-interface models, *Journal of Computational Physics* 204 (2) (2005) 784 – 804. doi:[doi:doi.org/10.1016/j.jcp.2004.10.032](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2004.10.032).
- [209] J. Chao, R. Mei, R. Singh, W. Shyy, A filter-based, mass-conserving lattice Boltzmann method for immiscible multiphase flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 66 (5) (2011) 622–647. doi:[10.1002/flid.2276](https://doi.org/10.1002/flid.2276).
- [210] X. He, R. Zhang, S. Chen, G. D. Doolen, On the three-dimensional Rayleigh–Taylor instability, *Physics of Fluids* 11 (5) (1999) 1143–1152. doi:[10.1063/1.869984](https://doi.org/10.1063/1.869984).
- [211] X. He, X. Shan, G. D. Doolen, Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases, *Phys. Rev. E* 57 (1998) R13–R16. doi:[10.1103/PhysRevE.57.R13](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.R13).
- [212] S. T. Zalesak, Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, *Journal of Computational Physics* 31 (3) (1979) 335 – 362. doi:[10.1016/0021-9991\(79\)90051-2](https://doi.org/10.1016/0021-9991(79)90051-2).
- [213] C. Semprebon, T. Krüger, H. Kusumaatmaja, Ternary free-energy lattice Boltzmann model with tunable surface tensions and contact angles, *Phys. Rev. E* 93 (2016) 033305. doi:[10.1103/PhysRevE.93.033305](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.033305).
- [214] H. Liang, B. C. Shi, Z. H. Chai, Lattice Boltzmann modeling of three-phase incompressible flows, *Phys. Rev. E* 93 (2016) 013308. doi:[10.1103/PhysRevE.93.013308](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.93.013308).
- [215] F. Boyer, C. Lapuerta, Study of a three component Cahn-Hilliard flow model, *ESAIM : M2AN* 40 (4) (2006) 653–687. doi:[10.1051/m2an:2006028](https://doi.org/10.1051/m2an:2006028).
- [216] F. Boyer, C. Lapuerta, S. Minjeaud, B. Piar, M. Quintard, Cahn–Hilliard/Navier–Stokes model for the Simulation of Three-Phase Flows, *Transport in Porous Media* 82 (3) (2010) 463–483. doi:[10.1007/s11242-009-9408-z](https://doi.org/10.1007/s11242-009-9408-z).
- [217] S. Leclaire, M. Reggio, J.-Y. Trépanier, Progress and investigation on lattice Boltzmann modeling of multiple immiscible fluids or components with variable density and viscosity ratios, *Journal of Computational Physics* 246 (2013) 318 – 342. doi:[10.1016/j.jcp.2013.03.039](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2013.03.039).
- [218] Y. Fu, S. Zhao, L. Bai, Y. Jin, Y. Cheng, Numerical study of double emulsion formation in microchannels by a ternary lattice boltzmann method, *Chemical Engineering Science* 146 (2016) 126 – 134. doi:[10.1016/j.ces.2016.02.036](https://doi.org/10.1016/j.ces.2016.02.036).
- [219] B. Wei, H. Huang, J. Hou, M. C. Sukop, Study on the meniscus-induced motion of droplets and bubbles by a three-phase Lattice Boltzmann model, *Chemical Engineering Science* 176 (2018) 35 – 49. doi:[10.1016/j.ces.2017.10.025](https://doi.org/10.1016/j.ces.2017.10.025).
- [220] Modélisation et simulation de la démixtion dans les verres. proposition de sujet de thèse CEA SL-DEN-19-0014, [Lien internet](#).

- [221] A. Vansteene, J.-P. Jasmin, G. Cote, C. Mariet, Segmented Microflows as a Tool for Optimization of Mass Transfer in Liquid–Liquid Extraction : Application at the Extraction of Europium(III) by a Malonamide, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 57 (34) (2018) 11572–11582. doi:10.1021/acs.iecr.8b02079.
- [222] A. Vansteene, J.-P. Jasmin, S. Cavadias, C. Mariet, G. Cote, Towards chip prototyping : a model for droplet formation at both T and X-junctions in dripping regime, *Microfluidics and Nanofluidics* 22 (61) (2018) 1 – 14. doi:10.1007/s10404-018-2080-2.
- [223] Y. Calzavara, C. Joussot-Dubien, H.-A. Turc, E. Fauvel, S. Sarrade, A new reactor concept for hydrothermal oxidation, *The Journal of Supercritical Fluids* 31 (2) (2004) 195 – 206. doi:10.1016/j.supflu.2003.11.001.
- [224] G. Lemoine, étude expérimentale et numérique d'écoulements réactifs en conditions hydrothermales : mélanges de fluides et précipitation de sels, Ph.D. thesis, Thèse CEA–Université de Lorraine (2017).
- [225] A. Leybros, A. Roubaud, P. Guichardon, O. Boutin, Supercritical water oxidation of ion exchange resins in a stirred reactor : Numerical modelling, *Chemical Engineering Science* 69 (1) (2012) 170 – 180. doi:10.1016/j.ces.2011.10.016.
- [226] D. Sharma, Modélisation numérique des fluides fortement compressibles proches du point critique, Ph.D. thesis, Thèse Université de Bordeaux (2018).
- [227] P. Yuan, L. Schaefer, Equations of state in a lattice Boltzmann model, *Physics of Fluids* 18 (4) (2006) 042101. doi:10.1063/1.2187070.
- [228] Site internet du Calcul Haute Performance du CEA, <http://www-hpc.cea.fr/index.htm>.
- [229] Supercalculateur Jean-Zay, <http://www.idris.fr/annonces/annonce-jean-zay.html>.
- [230] W. Li, X. Wei, A. Kaufman, Implementing lattice Boltzmann computation on graphics hardware, *The Visual Computer* 19 (7) (2003) 444–456. doi:10.1007/s00371-003-0210-6.
- [231] J. Tölke, Implementation of a lattice Boltzmann kernel using the Compute Unified Device Architecture developed by nVIDIA, *Computing and Visualization in Science* 13 (1) (2008) 29. doi:10.1007/s00791-008-0120-2.
- [232] F. Kuznik, C. Obrecht, G. Rusaouen, J.-J. Roux, LBM based flow simulation using GPU computing processor, *Computers & Mathematics with Applications* 59 (7) (2010) 2380 – 2392. doi:10.1016/j.camwa.2009.08.052.
- [233] S. B. H. Hassine, M. Dymitrowska, V. Pot, A. Genty, Gas Migration in Highly Water-Saturated Opalinus Clay Microfractures Using a Two-Phase TRT LBM, *Transport in Porous Media* 116 (3) (2017) 975–1003. doi:10.1007/s11242-016-0809-5.
- [234] C. Obrecht, F. Kuznik, B. Tourancheau, J.-J. Roux, Multi-GPU implementation of the lattice Boltzmann method, *Computers & Mathematics with Applications* 65 (2) (2013) 252 – 261, special Issue on Mesoscopic Methods in Engineering and Science (ICMMES-2010, Edmonton, Canada). doi:10.1016/j.camwa.2011.02.020.
- [235] H. C. Edwards, C. R. Trott, D. Sunderland, Kokkos : Enabling manycore performance portability through polymorphic memory access patterns, *Journal of Parallel and Distributed Computing* 74 (12) (2014) 3202 – 3216. doi:10.1016/j.jpdc.2014.07.003.
- [236] J. Eichstädt, M. Green, M. Turner, J. Peiró, D. Moxey, Accelerating high-order mesh optimisation with an architecture-independent programming model, *Computer Physics Communications* 229 (2018) 36 – 53. doi:10.1016/j.cpc.2018.03.025.
- [237] E. Calore, A. Gabbana, S. F. Schifano, R. Tripiccione, Early Experience on Using Knights Landing Processors for Lattice Boltzmann Applications, in : R. Wyrzykowski, J. Dongarra, E. Deelman, K. Karczewski (Eds.), *Parallel Processing and Applied Mathematics*, Springer International Publishing, Cham, 2018, pp. 519–530. doi:10.1007/978-3-319-78024-5_45.
- [238] J. S. Rowlinson, Translation of J. D. van der Waals' "The thermodynamik theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density", *Journal of Statistical Physics* 20 (2) (1979) 200–244. doi:10.1007/BF01011513.
- [239] X. Li, P. Cheng, Lattice Boltzmann simulations for transition from dropwise to filmwise condensation on hydrophobic surfaces with hydrophilic spots, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 110 (2017) 710 – 722. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.03.033.

- [240] M. Li, C. Huber, Y. Mu, W. Tao, Lattice Boltzmann simulation of condensation in the presence of noncondensable gas, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 109 (2017) 1004 – 1013. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.02.046.
- [241] X. He, S. Chen, R. Zhang, A lattice boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of rayleigh–taylor instability, *Journal of Computational Physics* 152 (2) (1999) 642 – 663. doi:doi.org/10.1006/jcph.1999.6257.
- [242] R. Saxena, G. T. Caneba, Studies of spinodal decomposition in a ternary polymer-solvent-nonsolvent system, *Polymer Engineering & Science* 42 (5) (2002) 1019–1031. doi:10.1002/pen.11009.
- [243] C. Introïni, Interaction entre un fluide à haute température et un béton : contribution à la modélisation des échanges de masse et de chaleur, Ph.D. thesis, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse – CEA (2010).
- [244] P. Hagan, D. Cohen, Stratified layer formation in particle suspensions, *Physica D : Nonlinear Phenomena* 17 (1) (1985) 54 – 62. doi:10.1016/0167-2789(85)90133-2.
- [245] A. Gupta, M. Sbragaglia, A lattice Boltzmann study of the effects of viscoelasticity on droplet formation in microfluidic cross-junctions, *The European Physical Journal E* 39 (1) (2016) 2. doi:10.1140/epje/i2016-16002-1.
- [246] A. Montessori, M. Lauricella, M. L. Rocca, S. Succi, E. Stolovicki, R. Ziblat, D. Weitz, Regularized lattice Boltzmann multicomponent models for low capillary and Reynolds microfluidics flows, *Computers & Fluids* 167 (2018) 33 – 39. doi:10.1016/j.compfluid.2018.02.029.
- [247] S. Popinet, Numerical Models of Surface Tension, *Annual Review of Fluid Mechanics* 50 (1) (2018) 49–75. doi:10.1146/annurev-fluid-122316-045034.
- [248] C. Panwisawas, Y. Sovani, M. Anderson, R. Turner, N. Palumbo, B. Saunders, I. Choquet, J. Brooks, H. Basoalto, A Multi-Scale Multi-Physics Approach to Modelling of Additive Manufacturing in Nickel-Based Superalloys, John Wiley & Sons, Ltd, 2016, pp. 1021–1030. doi:10.1002/9781119075646.ch108.
- [249] Y. Lee, W. Zhang, Modeling of heat transfer, fluid flow and solidification microstructure of nickel-base superalloy fabricated by laser powder bed fusion, *Additive Manufacturing* 12 (2016) 178 – 188, special Issue on Modeling & Simulation for Additive Manufacturing. doi:10.1016/j.addma.2016.05.003.
- [250] Q. Chen, G. Guillemot, C.-A. Gandin, M. Bellet, Three-dimensional finite element thermomechanical modeling of additive manufacturing by selective laser melting for ceramic materials, *Additive Manufacturing* 16 (2017) 124 – 137. doi:10.1016/j.addma.2017.02.005.
- [251] G. R. Lázaro, I. Pagonabarraga, A. Hernández-Machado, Phase-field theories for mathematical modeling of biological membranes, *Chemistry and Physics of Lipids* 185 (2015) 46 – 60, membrane mechanochemistry : From the molecular to the cellular scale. doi:10.1016/j.chemphyslip.2014.08.001.
- [252] D. Jamet, C. Misbah, Thermodynamically consistent picture of the phase-field model of vesicles : Elimination of the surface tension, *Physical Review E* 78 (041903) (2008) pp. 1–12. doi:10.1103/PhysRevE.78.041903.
- [253] T. Biben, A. Farutin, C. Misbah, Three-dimensional vesicles under shear flow : Numerical study of dynamics and phase diagram, *Phys. Rev. E* 83 (2011) 031921. doi:10.1103/PhysRevE.83.031921.
- [254] J. Tölke, S. Freudiger, M. Krafczyk, An adaptive scheme using hierarchical grids for lattice Boltzmann multi-phase flow simulations, *Computers & Fluids* 35 (8) (2006) 820 – 830, proceedings of the First International Conference for Mesoscopic Methods in Engineering and Science. doi:10.1016/j.compfluid.2005.08.010.
- [255] M. Rohde, D. Kandhai, J. J. Derksen, H. E. A. van den Akker, A generic, mass conservative local grid refinement technique for lattice-Boltzmann schemes, *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 51 (4) (2006) 439–468. doi:10.1002/flid.1140.
- [256] D. Lagrava, O. Malaspinas, J. Latt, B. Chopard, Advances in multi-domain lattice Boltzmann grid refinement, *Journal of Computational Physics* 231 (14) (2012) 4808 – 4822. doi:10.1016/j.jcp.2012.03.015.
- [257] W. Hassan, M. Picasso, An anisotropic adaptive finite element algorithm for transonic viscous flows around a wing, *Computers & Fluids* 111 (2015) 33 – 45. doi:10.1016/j.compfluid.2015.01.002.

- [258] M. Picasso, An adaptive algorithm for the Stokes problem using continuous, piecewise linear stabilized finite elements and meshes with high aspect ratio, *Applied Numerical Mathematics* 54 (3) (2005) 470 – 490, selected papers from the 16th Chemnitz Finite Element Symposium 2003. doi:10.1016/j.apnum.2004.09.014.
- [259] F. Druil, A. Fikl, P. Kestener, S. Kokh, A. Larat, V. Le Chenadec, M. Massot, Experimenting with the p4est library for AMR simulations of two-phase flows, *ESAIM : Proc.* 53 (2016) 232–247. doi:10.1051/proc/201653014.
- [260] Site internet Pablo, <http://optimad.github.io/bitpit/>.
- [261] B. Servan-Camas, F. T.-C. Tsai, Lattice Boltzmann method with two relaxation times for advection–diffusion equation : Third order analysis and stability analysis, *Advances in Water Resources* 31 (8) (2008) 1113 – 1126. doi:10.1016/j.advwatres.2008.05.001.